

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

І. М. Пазуха, І. Ю. Проценко, І. В. Чешко

**ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВКОВИХ
МАТЕРІАЛІВ МІКРО-
І НАНОЕЛЕКТРОНІКИ**

Навчальний посібник

У двох частинах

Частина 1

За загальною редакцією І. Ю. Проценка

Рекомендовано вченою радою Сумського державного університету



Суми
Сумський державний університет
2014

УДК 667.637(075.8)

ББК 34.663.4я73

П12

Рецензенти:

В. М. Береснев – доктор технічних наук, професор Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна;

Ю. М. Лопаткін – доктор фізико-математичних наук, професор Сумського державного університету

*Рекомендовано вченою радою Сумського державного університету
як навчальний посібник*

(протокол № 2 від 26 вересня 2013 р.)

Пазуха І. М.

П12 Фізичні властивості плівкових матеріалів мікро- і наноелектроніки : навчальний посібник : у 2 ч. / І. М. Пазуха, І. Ю. Проценко, І. В. Чешко ; за заг. ред. проф. І. Ю. Проценка. – Суми : Сумський державний університет, 2014. – Ч. 1. – 230 с.

Посібник містить матеріал перекладу з англійської мови з коментарями та доповненнями вибраних розділів монографії «Розмірні ефекти в тонких плівках» відомих французьких вчених К. Тельє і А. Тоссе та додатки у вигляді перекладених українською мовою відомих праць із теми «Електрофізичні властивості тонких плівок».

Навчальний посібник призначений для студентів вищих навчальних закладів денної і заочної форм навчання в галузі «Електроніка».

УДК 667.637(075.8)

ББК 34.663.4я73

© Пазуха І. М., Проценко І. Ю., Чешко І. В., 2014

© Сумський державний університет, 2014

THIN FILMS SCIENCE AND TECHNOLOGY

Advisory Editor: G. Siddall

C. R. TELLIER

Universite de Besancon, France

A. J. TOSSER

Universite de Nancy, France

ELSEVIEVER SCINNTIFIC PUBLISHING COMPANY

Amsterdam – Oxford – New York

1982

ELECTRICAL CONDUCTANCE AND TCR OF DOUBLE-LAYER FILMS

R. Dimmich

Institute of Physics, Technical University of Wroclaw, Poland

Thin Solid Films

1988

EFFECT OF ELASTIC STRAIN ON THE ELECTRICAL RESISTANCE OF METALS

G. C. Kuczynsky

University of Notre Dame, USA

Physical Review

1954

STRAIN COEFFICIENTS OF ELECTRICAL RESISTANCE OF DOUBLE-LAYER THIN METALLIC FILMS

F. Khater, M. El-Hiti

Department of Physics, Faculty of Science, Tanta University,

Egypt

phys. stat. sol. (A)

1988

TEMPERATURE COEFFICIENT OF THE STRAIN
COEFFICIENT OF ELECTRICAL RESISTIVITY OF
DOUBLE-LAYER THIN METALLIC FILMS

F. Khater, M. El-Hiti

Tanta University, Egypt

phys. stat. sol. (A)

1988

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОПЕРЕНОСА ТОНКИХ
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕТАЛЛОВ

И. Е. Проценко

Сумский государственный университет, Украина

Известия вузов. Физика

1988

РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ В ТОНКИХ ПЛІВКАХ

К. Р. Тельє

Університет Безансон, Франція

А. Дж. Тоссе

Університет Нансі, Франція

(Вибрані розділи з книги Size Effect in Thin Films)

ЕЛЕКТРИЧНА ПРОВІДНІСТЬ І ТЕМПЕРАТУРНИЙ КОЕФІЦІЄНТ ОПОРУ ДВОШАРОВИХ ПЛІВОК

Р. Дімміх

Інститут фізики, Технічний університет Вроцлава, Польща

ВПЛИВ ПРУЖНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ НА ЕЛЕКТРИЧНИЙ ОПІР МЕТАЛІВ

Р. Худзинський

Університет Нотр-Дам, США

КОЕФІЦІЄНТ ТЕНЗОЧУТЛИВОСТІ ДВОШАРОВИХ МЕТАЛЕВИХ ПЛІВОК

А. Катера, Ф. Ель-Гіті

Факультет природничих наук, Університет Танта, Єгипет

РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРІВ ЕЛЕКТРОПЕРЕНЕСЕННЯ ТОНКИХ ПОЛІКРИСТАЛІЧНИХ ПЛІВОК МЕТАЛІВ

І. Ю. Проценко

Сумський державний університет, Україна

Переклад з англійської мови І. М. Пазухи, І. Ю. Проценка та І. В. Чешко; за загальною редакцією І. Ю. Проценка

ЗМІСТ

С.

Частина 1

Передмова редактора перекладу	12
Розділ 1 Розмірні ефекти в електропровідності	15
Вступ	15
1.1 Кінетичне рівняння Больцмана.....	15
1.1.1 Провідність масивних зразків у моделі вільних електронів	15
1.1.2 Рівняння Больцмана для електротранспорту (підхід Котті)	18
1.1.3 Види електронного розсіювання.....	22
1.2 Моделі розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях	23
1.2.1 Модель Фукса-Зондгеймера для металевих плівок	23
1.2.1.1 Теоретичний аналіз Фукса-Зондгеймера	23
1.2.1.2 Плівки, що мають нехарактерні властивості	29
1.2.2 Альтернативні класичні моделі для металевих плівок	32
1.2.2.1 Модель Чамберса та її доповнення.....	32
1.2.2.2 Модель Котті	38
1.2.3 Моделі для двошарових систем	43
1.2.4 Софістичні моделі	61
1.2.5 Урахування шорсткості поверхні	72
1.2.6 Експериментальне визначення параметрів електроперенесення в рамках моделі Фукса-Зондгеймера.....	87
1.3 Теоретичні моделі електропровідності металевих плівок	94
1.3.1 Розсіювання електронів на межах зерен	94
1.3.1.1 Теоретичні основи моделі Маядаса-Шацкеса для питомої провідності	94
1.3.1.2 Модель ефективної довжини вільного пробігу	104

1.3.1.3	Модель ефективного часу релаксації	105
1.3.2	Спрощення моделі Маядаса-Шацкеса.....	109
1.3.2.1	Модель Котті	113
1.3.2.2	Лінеаризоване співвідношення для питомого опору полікристалічної плівки.....	117
1.3.2.3	Лінеаризоване співвідношення для питомого опору монокристалічної плівки	120
1.3.3	Одновимірні статистичні моделі	126
1.3.3.1	Математичний опис зерномежового розсіювання електронів	126
1.3.3.2	Питомий опір, пов'язаний із зерномежовим розсіюванням	128
1.3.3.3	Порівняння з моделлю Маядаса-Шацкеса. Коментарі до моделі Варкуша.....	130
1.3.4	Двовимірні модель провідності монокристалічної металевої плівки.....	133
1.3.4.1	Розсіювання електронів у монокристалічних плівках	133
1.3.4.2	Розмірний ефект у провідності монокристалічної плівки	136
1.3.4.3	Лінеаризоване співвідношення для провідності	138
1.3.4.4	Порівняння з моделями Маядаса-Шацкеса і Варкуша.....	141
1.3.4.5	Порівняння з експериментом	144
1.3.5	Тривимірні модель провідності полікристалічної металевої плівки	148
1.3.5.1	Розсіювання електронів у полікристалічних плівках	149
1.3.5.2	Розмірний ефект у провідності тонких плівок ..	151
1.3.5.3	Лінеаризоване співвідношення провідності ...	154
1.3.5.4	Порівняння з моделлю Маядаса-Шацкеса	156
1.3.5.5	Порівняння з експериментом	157

1.3.5.6	Ізотропне зерномежове розсіювання електронів.....	161
1.3.6	Методика розрахунку термічного коефіцієнта опору металевих плівок	163
1.3.6.1	Стандартний підхід	163
1.3.6.2	Основне співвідношення для ТКО	165
1.3.6.3	ТКО у випадку поверхневого розсіювання електронів.....	166
1.3.6.4	Урахування зерномежового розсіювання електронів у співвідношенні для ТКО	171
1.3.7	Розмірний ефект у ТКО полікристалічної металевій плівці	176
1.3.7.1	Співвідношення Маядаса-Шацкеса і похідні лінеаризованих рівнянь.....	176
1.3.7.2	Ефективні моделі Фукса-Зондгеймера і часу релаксації для ТКО.....	180
1.3.7.3	Одно- і тривимірні моделі ТКО.....	183
1.3.7.4	Модель ізотропного зерномежового розсіювання для ТКО	187
1.3.7.5	Порівняння з експериментом	188
1.3.8	Розмірний ефект ТКО у монокристалічній металевій плівці.....	192
1.3.8.1	Співвідношення Маядаса-Шацкеса і похідні лінеаризованих рівнянь.....	192
1.3.8.2	Модель фективної СДВП для ТКО.....	193
1.3.8.3	Двовимірні моделі ТКО.....	194
1.3.8.4	Визначення параметрів електроперенесення ..	197
1.3.8.5	Порівняння з експериментом; вплив домішок і дефектів	198
1.3.9	Вплив макронапружень і матеріалу підкладки на величину ТКО	202
1.3.9.1	Вплив термічних макронапружень	202
1.3.9.2	Вплив матеріалу підкладки	204

1.3.10 Розмірні ефекти у питомому опорі й ТКО металевих плівок	209
1.3.10.1 Граничні випадки правила Маттіссена	209
1.3.10.2 Відхилення від правила Маттіссена для полікристалічної плівки	212
1.3.10.3 Відхилення від правила Маттіссена для монокристалічної плівки	215
1.3.10.4 Вплив домішок та дефектів	216
Примітки	219
Список літератури до розділу 1	220

Частина 2

Розділ 2 Розмірні ефекти у гальваномагнітних

властивостях плівок	12
2.1 Теоретичні основи.....	12
2.1.1 Транспортне рівняння Больцмана	12
2.1.2 Ефект Холла, рухливість носіїв, магнітоопір....	13
2.2 Вплив поверхневого розсіювання електронів	16
2.2.1 Розв'язання рівняння Больцмана: поперечне магнітне поле	17
2.2.2 Розв'язання рівняння Больцмана: паралельне магнітне поле	26
2.2.3 Коефіцієнт Холла R_H	28
2.2.3.1 Модель Фукса-Зондгеймера і модель Котті для коефіцієнта Холла	28
2.2.3.2 Кореляція між коефіцієнтом Холла, питомим опором і ТКО	33
2.2.3.3 Порівняння з експериментом.....	35
2.2.4 Магнітоопір	39
2.2.4.1 Поперечний магнітоопір	39
2.2.4.2 Поздовжній магнітоопір.....	42
2.2.5 Софістичні моделі для гальваномагнітних ефектів	47
2.3 Вплив поверхневого і зерномежового розсіювання електронів	56

2.3.1	Граничні випадки моделі Маядаса-Шацкеса	56
2.3.2	Розмірний ефект поздовжнього магнітоопору..	57
2.3.3	Розмірний ефект поперечних гальвано- магнітних коефіцієнтів.....	61
2.3.4	Кореляція розмірних ефектів у електро- провідності і гальваномагнітних властивостях	68
2.4	Ефект Холла в тонких феромагнітних плівках	70
	Список літератури до розділу 2	76
Розділ 3 Розмірні ефекти у механічних і електромеханічних властивостях		80
3.1	Попередні зауваження	80
3.2	Явище тензочутливості	80
3.2.1	Теоретичні основи	80
3.2.1.1	Коефіцієнти Пуассона для тонкої металевої плівки	80
3.2.1.2	Механічна деформація плівки на підкладці ...	82
3.2.1.3	Механічна деформація плівки без підкладки.	84
3.2.1.4	Коефіцієнт тензочутливості	85
3.2.2	Зміна електричних параметрів у процесі деформації	87
3.2.2.1	Коефіцієнт тензочутливості об'ємної провідності	87
3.2.2.2	Коефіцієнт тензочутливості при врахуванні розсіювання електронів на зовнішніх і внутрішніх поверхнях	96
3.2.3	Коефіцієнт тензочутливості полікристалічних і монокристалічних металевих плівок.....	97
3.2.3.1	Теоретичне визначення коефіцієнтів тензочутливості полікристалічних і монокристалічних плівок.....	100
3.2.3.2	Кореляція між розмірними ефектами коефіцієнта тензочутливості і ТКО	116
3.2.3.3	Температурний коефіцієнт коефіцієнта тензочутливості	120

3.2.3.4 Порівняння з експериментом.....	121
3.2.4 Термічні та механічні макронапруження	123
Список літератури до розділу 3	129
Пояснення символів.....	133
Пояснення індексів	137
Одиниці вимірювання.....	138
Додаток А	
Електрична провідність і температурний коефіцієнт опору двошарових плівок (переклад статті Dimmich R. Electrical conductance and TCR of double-layer films // Thin Solid Films. – 1988. – V.158, № 1. –P.13–24)	139
Додаток Б	
Вплив пружної деформації на електричний опір металів (переклад статті Kuczynsky G.C. Effect of elastic strain on the electrical resistance of metals // Phys. Rev. – 1954. – V. 94, № 1. – P. 61 – 64).....	158
Додаток В	
Коефіцієнт тензочутливості двошарових металевих плівок (переклад статті Khater F., El-Hiti M. Strain coefficients of electrical resistance of double-layer thin metallic films // phys. stat. sol. (A). – 1988. – V. 108, № 2. – P. 241 - 249).....	172
Додаток Г	
Температурний коефіцієнт коефіцієнта тензочутливості двошарових металевих плівок (переклад статті Khater F., El-Hiti M. Temperature coefficient of the strain coefficient of electrical resistivity of double-layer thin metallic films // phys. stat. sol. (A). – 1988. – V. 109, № 2. – P. 517 – 523)..	188
Додаток Д	
Розрахунок параметрів електроперенесення тонких полікристалічних плівок металів (переклад статті Проценко И. Е. Расчет параметров электропереноса тонких поликристаллических пленок металлов // Известие вузов. Физика – 1988. – № 6. – С. 42–47)	202

Передмова редактора перекладу

Навчальний посібник, підготовлений авторським колективом кафедри прикладної фізики Сумського державного університету, містить у собі основні розділи (за винятком тих, що присвячені термоелектронним явищам та напівпровідниковим плівкам) монографії відомих французьких вчених К. Тельє (Університет Бесансон) і А. Тоссе (Університет Нансі) [1] (переклад з англійської мови) та додатки у вигляді перекладених на українську мову таких праць:

- праці І. Ю. Проценка щодо апробації теоретичних моделей К. Тельє, А. Тоссе і К. Пішар для термічного коефіцієнта опору одношарових плівок [2];
- класичної праці Р. Дімміха про термічний коефіцієнт опору двошарових плівок [3];
- праць Р. Худзинського та Ф. Катера і М. Ель-Гіті щодо тензоефекту в одно- та двошарових металевих плівках, що вже стали класичними [4–8].

Хоча поява посібника відбувається із великим запізненням, виконана робота не стає від цього менш корисною і необхідною. Нагальна потреба у посібнику такого змісту продиктована кількома обставинами.

По-перше, на даному етапі університетської освіти стає неможливим викладання курсів «Фізичні властивості плівкових матеріалів», «Основи мікро- і наноелектроніки», «Теоретичні методи дослідження властивостей плівок» і т. п. без вивчення теорії розмірних ефектів у електрофізичних, магніторезистивних, електромеханічних, гальваноманітних властивостей плівкових матеріалів. У світовій літературі немає іншого прикладу, де такою самою мірою, як у праці [1], глибоко, логічно, на високому методичному рівні були подані вище класичні теорії в рамках концепції про дифузійний механізм розсіювання

електронів провідності. Відмітимо, що інша концепція – балістичного перенесення заряду [9] – покладена в основу найсучаснішого розділу електроніки – спінтроніки, фізичні основи якої закладені у праці А. Ферта і П. Грюнберга (див., наприклад, [10; 11]).

По-друге, монографія [1] практично не доступна студентам як з точки зору іноземного видання, так і сприйняття англійського тексту. Останнє зауваження такою самою мірою стосується праць [2–8].

І, насамкінець, праці [4; 5], як і монографія [1], мають фундаментальний характер, оскільки у них були закладені фізичні основи тензорезистивного ефекту.

Навчальний посібник розрахований на студентів, які спеціалізуються у галузі знань «Електроніка». Він також буде корисним аспірантам, викладачам і науковим співробітникам, які вивчають фізичні властивості плівкових матеріалів мікро- і наноелектроніки.

Книгу підготували канд. фіз.-мат. наук Пазуха І. М. і канд. фіз.-мат. наук Чешко І. В. (переклад з англійської мови) та д-р фіз.-мат. наук, проф. Проценко І. Ю. (переклад і наукове редагування перекладів).

Велику допомогу в оформленні рукопису посібника надали асп. Кондрахова Д. М. та інженер Наконечна І. І.

Список літератури

1. Tellier C. R., Tosser A. J. Size effects in thin films – A. – O. – N-Y: Elsevier, 1982. – 310 p.
2. Проценко И. Е. Известие вузов. Физика - 1988. – № 6. – С. 42 – 47.
3. Dimmich R. Thin Solid Films. – 1988. – V.158, № 1. – P. 13 – 24.
4. Kuczynsky G. C. Phys. Rev. – 1954. – V. 94, № 1. – P. 61 – 64.

5. Meiksin Z. H., Hudzinski R.A.A. J.Appl. Phys. – 1967. – V. 38, № 11. – P. 4490 – 4494.
6. Khater F., El-Hiti M. Phys. Stat. Sol. (A). – 1988. – V. 108, № 1. – P. 241 – 249.
7. Khater F., El-Hiti M. Phys. Stat. Sol. (A). – 1988. – V. 109, № 2. – P. 517 – 523.
8. El-Hiti M. A., Ahmed M. A. J. Mater Science. – 1990. V. 25. – P. 567 – 570.
9. Бігун Р. І., Стасюк З. В., Куніцький Ю. А. Наносист., наномат., нанотехнол. – 2010. – Т. 8, 32. – С. 339 – 388.
10. Fert A., Grunberg P., Barthelemy A. et all. J. Magn. Magn. Mater. – 1995. – V. 140-144. – P. 1 – 8.
11. Grunberg P. Acta Mater. – 2000. – V. 48. – P. 239 – 251.

РОЗДІЛ 1

РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ В ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ

Вступ

Цей розділ присвячений розмірним ефектам в електропровідності тонких металевих плівок, включаючи геометричні обмеження фонові середньої довжини вільного пробігу електронів (СДВП). Моделі для електричної провідності в полі- і монокристалічних плівках базуються на теоретичному розгляді, який узагальнюється в підрозділі 1.1.

1.1 Кінетичне рівняння Больцмана

1.1.1 Провідність масивних зразків згідно з моделлю вільних електронів

На початку минулого століття Друде сформулював постулат про газ вільних електронів для пояснення властивостей металевих провідників; теорія Друде-Лоренца-Зомерфельда (ДЛЗ) стала класичною і широко цитується в літературі [1; 2]. У цьому підрозділі акцентується увага на основних положеннях теорії ДЛЗ:

а) швидкість електронів \vec{v} пов'язана із хвильовим вектором \vec{K} таким рівнянням:

$$\vec{v} = \hbar m^{-1} \vec{K}, \quad (1.1)$$

де \hbar – стала Планка; m – маса електрона;

б) число вільних електронів (концентрація) n на одиницю об'єму, що виражається співвідношенням

$$n = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{mv_F}{h} \right)^3, \quad (1.2)$$

де v_F – швидкість електрона на поверхні Фермі;

в) питома провідність об'ємного (масивного) зразка σ_0 пов'язана із числом n рівнянням

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau_0}{m}, \quad (1.3)$$

де e – заряд електрона і $\tau_0 = v_F/\lambda_0$ (λ_0 – середня довжина вільного пробігу електронів у масивних зразках (в об'ємі полікристалічного зразка)), тобто

$$\lambda_0 = v_F \cdot \tau_0. \quad (1.4)$$

Час релаксації (τ), згідно з [1], пов'язаний із імовірністю P того, що протягом часу t електрон не розсіюється, і описується рівнянням

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{P}{\tau}.$$

Таким чином, ми повинні констатувати те, що час релаксації τ повинен залежати від енергії електрона ε ; залежність подана в [3], де розглядаються ефекти ізотропного розсіювання на домішках, «заморожених» дефектах при допущенні, що вони розподілені рівномірно всередині плівки.

Теоретичні дослідження [1; 3; 4] вказують на те, що залежність від енергії може бути описана у загальному випадку рівнянням

$$\bar{\nu}(\varepsilon) = \tau_b \cdot \varepsilon^q, \quad (1.5)$$

де τ_b не залежить від ε і q – величина, що залежить від механізму розсіювання: величина $q = -1/2$ відповідає

розсіюванню електронів у решітці, а $q=3/2$ – на іонізованих домішках [3].

При означенні концентрації електронів n (формула 1.2) необхідно враховувати, що квантово-механічний аналіз енергетичних станів у кристалічному твердому тілі показує, що електрони, які розміщуються в неповністю заповнених енергетичних зонах, роблять внесок в електричний струм. Таким чином, ефективна концентрація вільних електронів n залежить від конфігурації енергетичних зон, але змінюється в незначною мірою при нормальних температурах. Крім того, в рамках квантово-механічної теорії хвильовий пакет електрона, що визначається хвильовим вектором \vec{K} (ми говоримо, що електрон знаходиться в \vec{K} – стані), рухається в електростатичному полі \vec{E} з груповою швидкістю

$$\vec{v}_K = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{K})}{\partial \vec{K}} \quad (1.6)$$

і прискоренням

$$\frac{\partial \vec{v}_K}{\partial t} = -\frac{e\vec{E}}{m^*}, \quad (1.7)$$

де m^* – ефективна маса електрона, яка в загальному випадку визначається тензорним співвідношенням

$$\frac{1}{m^*_{ij}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{K})}{\partial K_i \partial K_j}. \quad (1.8)$$

Ефективна маса є скалярною величиною у випадку кристалів з кубічною симетрією і, тим більше, у випадку простої моделі вільних електронів [1]. Ми доходимо висновку, що проста теорія ДЛЗ буде правильною у разі,

якщо електрон розглядається як вільна частинка з ефективною масою m^* .

Ми потім зробимо висновок, що ця теорія добре відповідає лише одновалентним металам. Однак, якщо ми не маємо справи з анізотропними ефектами в провідності, теорія ДЛЗ може успішно застосовуватися; кращим аргументом для підтвердження цієї точки зору є результати, які випливають із теорії провідності металів.

1.1.2 Рівняння Больцмана для електротранспорту (підхід Котті)

Для визначення часу релаксації (τ_0) і СДВП (λ_0) в масивних зразках зручно описати електронну систему функцією розподілу F , що визначається числом електронів у \vec{K} станах, які лежать у інтервалі $d\vec{K}$, тобто

$$dN(\vec{K}) = \frac{1}{4\pi^3} F_K(\vec{r}) d\vec{K} d\vec{r}. \quad (1.9)$$

За відсутності різних збурень функція розподілу $F_K(\vec{r})$ відповідає функції розподілу Фермі $F^o(\varepsilon_F)$; за наявності збурень можна зробити висновок, що досить мале поле збурення спричиняє ефекти, які можна подати в першому наближенні збурень рівноважним розподілом.

Спостерігаються три механізми внесків у часову зміну функції розподілу [1; 2]:

1. Зовнішні поля. Електричні й магнітні поля, \vec{E} і \vec{B} відповідно, вносять зміну в вектор \vec{K} з швидкістю

$$\frac{\partial \vec{K}}{\partial t} = -\frac{e}{K} (\vec{E} + \vec{v}_K \wedge \vec{B}). \quad (1.10)$$

2. Дифузія. Якщо функція розподілу змінюється від точки до точки, то швидкість її зміни у часі визначається співвідношенням

$$\left. \frac{\partial F_K(\vec{r})}{\partial t} \right|_{diff} = -v_K \frac{\partial F_K(\vec{r})}{\partial \vec{r}}. \quad (1.11)$$

Якщо дифузія відбувається лише завдяки рівномірному градієнту температур ∇T , то її вплив на функцію розподілу визначається співвідношенням (1.12):

$$v_K \frac{\partial F_K(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \approx v_K \frac{\partial F^0}{\partial T} \nabla T. \quad (1.12)$$

3. Зіткнення. Зіткнення електронів із фононами або недосконаlostями кристалічної решітки описується доданком зіткнень

$$\left. \frac{\partial F_K(\vec{r})}{\partial t} \right|_{coll}.$$

У рівноважному стані виконується умова $\frac{\partial F}{\partial t} = 0$, так що

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_{diff} + \left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_{fields} + \left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_{coll} = 0. \quad (1.13)$$

У простому випадку оператор зіткнень може бути поданий через час релаксації $\tau(\vec{K})$ таким чином:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_{coll} = -\frac{F - F^0}{\tau(K)}. \quad (1.14)$$

Якщо розглянути випадок металів, у яких енергетична зона має стандартну форму, то

$$\varepsilon(\vec{K}) = K^2 \hbar^2 / 2m^*. \quad (1.15)$$

У той час, коли магнітне поле відсутнє, рівняння Больцмана має такий вигляд:

$$e\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{v}} F_K(\vec{r}) - m^* \vec{v}_K \cdot \nabla_{\vec{r}} F_K(\vec{r}) = \frac{m^*}{\tau} (F_K(\vec{r}) - F^0). \quad (1.16)$$

Якщо скористатися загальним розв'язком $F_K(\vec{r})$ рівняння (1.16), то густина струму \vec{J} дорівнює

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v}_K F_K(\vec{r}) d\vec{K}. \quad (1.17)$$

Загальний розв'язок рівняння Больцмана містить у собі

$$F_{\vec{K}}(\vec{r}) = F^0 + F^1(\vec{K}, \vec{r}), \quad (1.18)$$

де $F^1(\vec{K}, \vec{r})$ мале відхилення від рівноважного розподілу у зовнішньому полі та градієнті температур. Тоді співвідношення (1.14) перепишеться так :

$$-\frac{1}{\tau} F^1(\vec{K}, \vec{r}) = \frac{\partial F}{\partial t} \Big|_{coll}. \quad (1.19)$$

Підставляючи (1.18) і (1.19) у рівняння (1.16), отримаємо співвідношення, в яке входять напруженість електричного поля і градієнт температури

$$e\vec{E} \nabla_{\vec{v}} F^0 - m^* \vec{v}_K \cdot \nabla T \frac{\partial F^0}{\partial T} = \frac{m^*}{\tau} \cdot F^1(\vec{K}, \vec{r}) + m^* \vec{v}_K \nabla_{\vec{r}} F^1(\vec{K}, \vec{r}). \quad (1.20)$$

В ізотермічних умовах рівняння (1.20) перетвориться до вигляду

$$\frac{1}{\tau} \cdot F^1(\vec{K}, \vec{r}) + \vec{v}_K \nabla_{\vec{r}} F^1(\vec{K}, \vec{r}) = \frac{e\vec{E}}{m^*} \nabla_{\vec{v}} F^0. \quad (1.21)$$

Оскільки проходження струму не рівноважний процес, то його густина визначається співвідношенням

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v}_K F^1(\vec{K}, \vec{r}) d\vec{K}, \quad (1.22)$$

де F^1 – розв’язок співвідношення (1.21), що задовольняє граничні умови з урахуванням геометрії плівки або геометричної залежності явищ розсіювання.

Припустимо зараз, що ми можемо в наближенні незалежності від крайових ефектів розрахувати результуючий час релаксації $\tau_i(\vec{K}, \vec{r})$, що описує комбінований ефект фонового і залежного від координати (позиції) розсіювання, як допустив Котті [5]. Зрозуміло, що F^1 з рівноважного розподілу має вигляд

$$F^1(\vec{K}, \vec{r}) = \frac{e\vec{E}}{m^*} \tau_i(\vec{K}, \vec{r}) \nabla_{\vec{v}} F^0, \quad (1.23)$$

тобто

$$F^1(\vec{K}, \vec{r}) = e\vec{E}\vec{v}_K \tau_i(\vec{K}, \vec{r}) \frac{\partial F^0}{\partial \varepsilon(\vec{K})}, \quad (1.24)$$

якщо зразок знаходиться в електростатичному полі.

1.1.3 Види електронного розсіювання

Тонка металева плівка може бути недосконалою і мати велику кількість джерел розсіювання електронів. Однак у

нашій роботі вивчаються розмірні ефекти і ми розглядаємо такі ідеалізовані джерела розсіювання.

1. Зовнішні поверхні металевих плівок. Згідно з якісними уявленнями електропровідність пропорційна СДВП λ_0 і згідно з прогнозом акту поверхневого розсіювання не відбувається, якщо товщина має величину у декілька СДВП. Феноменологічний параметр p був уведений в [6] і описує усереднений ефект розсіювання на жорсткостях поверхні плівки.

2. Межі зерен. Фізичні моделі для зерномежової поверхні були спрощені для опису електронного транспорту простими рівняннями. Багато авторів [7 – 11] дійшло висновку, що межі зерен можуть бути подані як розсіювальні площини; можна також говорити про «шорсткість» таких площин, і були введені поняття коефіцієнта розсіювання R [7] і коефіцієнта проходження r [8; 11]. Відмітимо, що зерномежове розсіювання буде ефективним, якщо середня відстань D_g між площинами, які розсіюють електрони, буде меншою за величину СДВП. Із практичних міркувань ми не будемо розрізняти полікристалічні й монокристалічні плівки. Полікристалічні плівки мають дрібнодисперсну структуру із середнім розміром D_g , який не залежить від товщини плівки; межі зерен можна подати трьома площинами, які паралельні площинам розсіювання [10]. У монокристалічних плівках розміри зерен D_g дорівнюють або більші за товщину плівки; у цьому разі у моделі використовуються лише розсіювальні площини [11].

1.2 Моделі розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях

Геометричні обмеження середньої довжини вільного пробігу (СДВП) електронів зовнішніми поверхнями були

вивчені для моновалентних металевих плівок у рамках моделі вільних електронів. У зв'язку зі складнощами отримання тонкопліткових матеріалів перші дослідження проводилися при дуже низьких температурах [12]. Прогрес у розвитку техніки для одержання тонких плівок дозволив отримувати структурносуцільні зразки при кімнатних температурах. Таким чином, на сьогодні велика кількість праць присвячена подібним експериментам (див. підпункти 1.3.2.5, 1.3.4.5, 1.3.7.5). Успіхи подібних експериментів пов'язані з тим фактом, що була потреба визначити СДВП електронів та коефіцієнт поверхневого розсіювання електронів у рамках розмірного ефекту в електропровідності. Деякі праці були присвячені вивченню процесів поверхневого розсіювання до та після термовідпалювання з метою виявлення, чи відбувається зменшення величини питомого опору у процесі відпалювання внаслідок заліковування дефектів кристалічної будови чи внаслідок збільшення коефіцієнта дзеркального відбиття від поверхні. Більшість із цих праць, досі, інтерпретується в рамках більш ранніх теоретичних робіт, присвячених впливу товщини на величину провідності, розроблених Фуксом [13] та Зондгеймером [14] (модель Фукса-Зондгеймера).

1.2.1 Модель Фукса-Зондгеймера (ФЗ)

1.2.1.1 Теоретичний аналіз

Геометрія ФЗ зображена на рис. 1.1 і може бути узагальнена таким чином: якщо подати

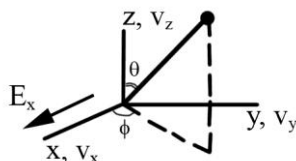
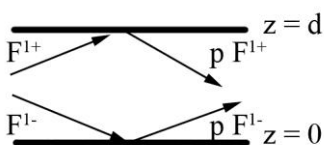


Рисунок 1.1 – Геометрія моделі Фукса-Зондгеймера

розв'язок цієї задачі у вигляді одновимірної функції, то вона може бути записана таким чином

$$F(\vec{v}, \vec{x}) = F^0 + F^1(\vec{v}, z), \quad (1.25)$$

де функція відхилення $F^1(\vec{v}, z)$ залежить лише від зміни у просторі координати z . Для електричного поля E_x , прикладеного у напрямку осі x , рівняння Больцмана (1.21) матиме вигляд

$$\frac{F^1}{\tau_0} + v_z \cdot \frac{\partial F^1}{\partial z} = \frac{eE_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x}, \quad (1.26)$$

якщо знехтувати залежністю E_x від F^1 . Загальний розв'язок рівняння (1.26) має вигляд

$$F^1(\vec{v}, z) = \frac{e\tau_0 E}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 + F(\vec{v}) \exp\left[-\frac{z}{\tau_0 v_z}\right] \right\}, \quad (1.27)$$

де ефективна маса m^* вважається скалярною величиною, як і в моделі вільних електронів, але не обов'язково дорівнює масі електрона. Час релаксації τ_0 відповідає процесам розсіювання у монокристалі та враховує всі механізми розсіювання, що відбуваються в об'ємі зразка. Оскільки величина τ_0 не залежить від просторових координат, то модель Фукса-Зондгеймера може бути застосовна лише для плівок, у яких будь-який процес розсіювання електронів вкладається у час релаксації, наприклад, розсіювання на точкових дефектах або домішках не залежить від їх розміщення в об'ємі. Ця функція також допускає ізотропність відповідної довжини вільного пробігу електронів λ_0 . З цієї точки зору ми сподівалися, що функція $F^1(\vec{v}, z)$ буде відома і може бути

визначена з граничних умов розсіювання на зовнішніх поверхнях.

Найпростіші граничні умови можна визначити, припустивши, що електрони від зовнішніх поверхонь відбиваються лише дифузно. Таким чином, відбиті електрони не роблять внесок у загальну величину електричного струму. У цьому разі функція розподілу електронів, що відбилися від зовнішніх поверхонь, не повинна залежати від напрямку, тобто

$$\text{при } z = 0 \quad F^1(\vec{v}, z = 0) = 0, \quad v_z > 0; \quad (1.28)$$

$$\text{при } z = d \quad F^1(\vec{v}, z = d) = 0, \quad v_z < 0. \quad (1.29)$$

Таким чином, можна отримати функцію розподілу F^{1+} для електронів при $v_z > 0$ та F^{1-} для електронів при $v_z < 0$:

$$F^{1+}(\vec{v}, z) = \frac{e\tau_0 E}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \exp\left\{-\frac{z}{\tau_0 v_z}\right\}\right\}, \quad v_z > 0, \quad (1.30)$$

$$F^{1-}(\vec{v}, z) = \frac{e\tau_0 E}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \exp\left\{\frac{d-z}{\tau_0 v_z}\right\}\right\}, \quad v_z < 0. \quad (1.31)$$

Розрахунок густини струму $J(z)$ за товщиною d є класичним і чітко визначений у праці Зондгеймера [14], починаючи з формули

$$J(z) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \iiint v_x F^1 dv_x dv_y dv_z. \quad (1.32)$$

Інтегрування відбувається у полярних координатах (v, θ, φ) (див. рис. 1.1), використовуючи співвідношення, подане у працях [1; 14], отримане при розв'язанні функції Тейлора для $F(v)$:

$$-\int_0^{\infty} F(v) \frac{\partial F^0}{\partial v} dv = F(\bar{v}), \quad (1.33)$$

що справедливе для виродженого електронного газу.

Для визначення загальної питомої електропровідності інтегрування (1.32) проводиться вздовж осі z :

$$\sigma = \frac{1}{E_x d} \int_0^d J(z) dz. \quad (1.34)$$

Електропровідність плівки σ_f згідно з [14] буде визначатися так :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_o} = 1 - \frac{3}{8k} + \frac{3}{2k} \int_1^{\infty} \left(\frac{1}{\dot{t}^3} - \frac{1}{\dot{t}^5} \right) \exp(-k \dot{t}) d\dot{t} = 1 - A(k, p), \quad (1.35)$$

де \dot{t} – змінна інтегрування, яку беруть еквівалентною до $(\cos)^{-1}$, σ_o – електропровідність монокристалу, k – зведена товщина, що дорівнює відношенню товщини плівки до довжини середнього пробігу електронів λ_0 :

$$k = d \cdot \lambda_0^{-1}. \quad (1.36)$$

Граничні випадки [14] співвідношення (1.35) для товстих плівок відповідно

$$\frac{\sigma_o}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_o} = 1 + \frac{3}{8k}, \quad k \gg 1 \quad (1.37)$$

та дуже тонких плівок відповідно

$$\frac{\sigma_o}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_o} = \frac{4}{3k \ln \frac{1}{k}}, \quad k \ll 1, \quad (1.38)$$

де ρ_f та ρ_o – питомі опори плівки та масивного

монокристалу.

Коефіцієнт поверхневого розсіювання p дорівнює кількості електронів, що відбилися від поверхні під довільним кутом θ до нормалі поверхні зі швидкістю v_z , до загальної кількості електронів, які потрапили на поверхню. Необхідно зауважити, що згідно з моделлю Фукса-Зондгеймера величина коефіцієнта p не залежить від напрямку підльоту електронів до поверхні. Відмітимо, що при дифузному відбитті електрон втрачає енергію і величину імпульсу, в той час як при дзеркальному відбитті він лише змінює напрямок руху.

Тепер розглянемо, як описуються функції F^{1+} для електронів при $v_z > 0$ та F^{1-} для електронів при $v_z < 0$. Необхідно прирівняти функцію розподілу електронів, що залишили поверхню, та суму функцій розподілу дзеркально і дифузно відбитих електронів. Тому при $z = 0$

$$F^0 + F^{1+}(v_z, z = 0) = p \left[F^0 + F^{1-}(-v_z, z = 0) \right] + (1-p)F^0, v_z > 0,$$

(1.39)

й аналогічно при $z = d$

$$F^0 + F^{1-}(-v_z, z = d) = p \left[F^0 + F^{1+}(+v_z, z = d) \right] + (1-p)F^0, v_z > 0, \quad (1.40)$$

і при цьому напрям розсіювання електронів не залежить від напрямку швидкості електронів.

Функція $F(\vec{v})$ (співвідн. (1.27)) може бути визначена з даного граничного співвідношенням та результуючої функції розподілу, поданої в [14]:

$$F^{1+}(\vec{v}, z) = \frac{e\tau_0 E}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \frac{1-p}{1-p \exp(-d/\tau_0 v_z)} \exp\left(-\frac{z}{\tau_0 v_z}\right) \right\},$$

$$v_z > 0 \quad (1.41)$$

$$F^{1-}(\vec{v}, z) = \frac{e\tau_0 E}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \frac{1-p}{1-p \exp(-d/\tau_0 v_z)} \exp \frac{d-z}{\tau_0 v_z} \right\},$$

$$v_z < 0. \quad (1.42)$$

Розрахунок густини струму $J(z)$ після інтегрування за z дає вираз

$$\begin{aligned} \sigma_f = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{3}{2k} \int_1^\infty \left(\frac{1}{t^{\cdot 3}} - \frac{1}{t^{\cdot 5}} \right) \frac{1 - \exp(-kt)}{1 - p \exp(-kt)} dt \right\} = \\ = \sigma_0 [1 - A(k, p)]. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Необхідно зауважити, що співвідношення (1.43) – це скорочений вираз співвідношення (1.35) у разі, якщо коефіцієнт дзеркального відбиття p більше нуля. Крім того, коли процес відбиття електронів від зовнішніх поверхонь стає дзеркальним ($p = 1$), співвідношення (1.43) вказує на те, що питомий опір плівки буде зменшуватися до питомого опору монокристала, як і очікувалося. Співвідношення (1.43) у граничних випадках, що порівнюються з експериментальними даними [14], можна записати так:

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{3}{8k} (1-p), \quad k \gg 1, \quad (1.44)$$

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_0} = \frac{4}{3} \frac{1-p}{1+p} \frac{1}{k \ln \frac{1}{k}}, \quad k \ll 1. \quad (1.45)$$

На рис. 1.2 зображена теоретична залежність відношення ρ_f/ρ_0 від зведеної товщини k при різних

значеннях коефіцієнта дзеркального відбиття p .

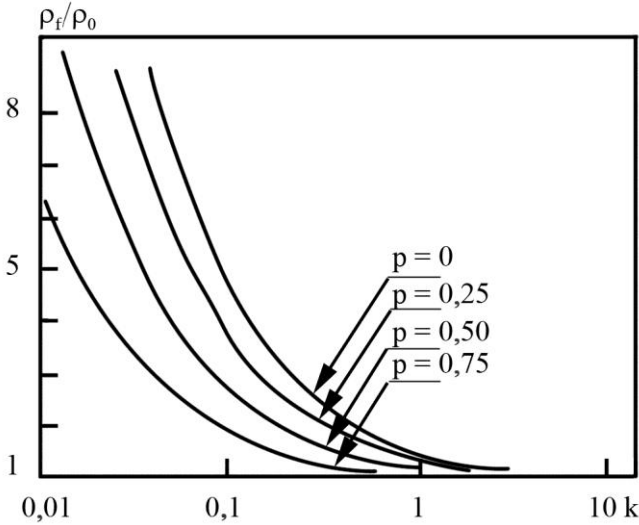


Рисунок 1.2 – Теоретичні залежності зміни питомого опору ρ_f/ρ_0 від зведеної товщини k при різних значення коефіцієнта дзеркального відбиття електронів

1.2.1.2 Плівки, що мають нехарактерні властивості

Модель ФЗ базується на припущенні того, що статистичні властивості верхньої та нижньої поверхонь плівки можуть бути описані одним і тим самим параметром p . Однак, як було показано експериментально [15] на прикладі плівок золота, процеси розсіювання на поверхнях змінюються незалежно. Лукас у праці [16] припустив, що провідність плівки характеризується двома параметрами розсіювання на поверхні: p при $z = 0$ і q при $z = d$. Функція розподілу електронів може бути подана у загальному випадку у вигляді співвідношення (1.27). Функція $F(\vec{v})$ визначається для двох граничних випадків: $z = 0$ і $z = d$. Із цією метою були визначені такі функції [16]:

$$F^{1+} = \frac{eE\tau_0}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 + L^+(\vec{v}) \exp\left(-\frac{z}{\tau_0 v_z}\right) \right\}, v_z > 0 \quad (1.46)$$

$$F^{1-} = \frac{eE\tau_0}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 + H^-(\vec{v}) \exp\frac{d-z}{\tau_0 v_z} \right\}, v_z < 0 \quad (1.47)$$

відповідно до результатів, отриманих у попередньому пункті. Тут L^+ , H^- – функції q і p .

Функція розподілу при $z = 0$ має вигляд

$$F^0 + F^{1+}(v_z, z = 0) = p \left[F^0 + F^{1-}(-v_z, z = 0) \right] + (1-p)F^0, v_z > 0. \quad (1.48)$$

Аналогічно для випадку, коли $z = d$, можна записати вираз

$$F^0 + F^{1-}(-v_z, z = d) = q \left[F^0 + F^{1+}(-v_z, z = d) \right] + (1-q)F^0, v_z < 0. \quad (1.49)$$

Після деяких математичних перетворень співвідношень (1.48) і (1.49) можна отримати

$$L^+(\vec{v}) = -\frac{1-p+p(1-q)\exp[-d/\tau_0 v_z]}{1-pq\exp[-2d/\tau_0 v_z]}, v_z > 0, \quad (1.50)$$

$$H^-(\vec{v}) = -\frac{1-q+q(1-p)\exp[d/\tau_0 v_z]}{1-pq\exp[2d/\tau_0 v_z]}, v_z < 0. \quad (1.51)$$

Підстановка співвідношень (1.50) і (1.51) відповідно в (1.46) і (1.47) та розрахунок густини струму згідно з вихідними співвідношеннями (1.32) і (1.34) дозволяє одержати відношення питомих провідностей плівки та монокристала σ_f/σ_0 :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{4k} \cdot \int_1^{\infty} \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5} \right) \frac{1 - \exp(-k \dot{t})}{1 - pq \exp(-2k \dot{t})} \times \\ \times \left[2 - p - q + (p + q - 2pq) \exp(-k \dot{t}) \right] d\dot{t}. \quad (1.52)$$

Для товстих плівок відношення ρ_f / ρ_0 має вигляд

$$\rho_f / \rho_0 \approx 1 + \frac{3}{8k} \left[1 - \frac{p+q}{2} \right], \quad k \gg 1, \quad (1.53)$$

а для дуже тонких плівок

$$\rho_f / \rho_0 \approx \frac{4}{3} \frac{1 - pq}{(1+p)(1+q)k \ln \frac{1}{k}}, \quad k \ll 1. \quad (1.54)$$

Порівнявши граничні випадки для відношення питомого опору при різній імовірності коефіцієнтів дзеркального відбиття p і q із граничними випадками для відношення питомого опору при $p = q$ (1.44, 1.45), Юретчке [17] припустив, що плівки, які характеризуються коефіцієнтами p і q , можуть бути описані єдиним коефіцієнтом дзеркального відбиття p_{eff} , що змінюється в межах

$$\frac{p+q}{2} - \frac{[(p-q)/2]^2}{1+(p+q)/2} \leq p_{eff} \leq \frac{p+q}{2}. \quad (1.55)$$

У результаті було показано, що коефіцієнт p_{eff} залежить від товщини зразків і збільшується при її зменшенні. Необхідно зазначити, що цей результат суперечить результатам, отриманим на основі моделі Котті [5], яка стверджує, що середня ймовірність розсіювання p_{eff} для плівок, які характеризуються різними коефіцієнтами

відбиття від зовнішньої та внутрішньої поверхонь, не залежить від товщини.

1.2.2 Альтернативні класичні моделі для металевих плівок

1.2.2.1 Модель Чамберса та її доповнення

Чамберс [18] для визначення розмірної залежності питомого опору використав прості кінетичні аргументи, а не кінетичне рівняння Больцмана, як у моделі Фукса-Зондгеймера.

Розглянемо точку O в металі й електрон, що проходить через дану точку в напрямку OP , де P – точка на поверхні металу. Чамберс вводить функцію густини dP/dL^\bullet довжини вільного пробігу:

$$dP = \frac{1}{\lambda_0} \exp\left[-L^\bullet/\lambda_0\right] dL^\bullet, \quad (1.56)$$

де dL^\bullet – шлях, що проходить електрон.

Якщо частина електронів розсіюється від поверхні дифузно ($p = 0$), то всі електрони, що потрапили в точку P , – дифузно розсіяні й не роблять внесок у загальну величину струму. Середня відстань, яку проходять електрони від O до точки P , позначається як $OP = L_1$,

$$\lambda^* = \int_0^{L_1} \frac{L^\bullet}{\lambda_0} \exp\left[-L^\bullet/\lambda_0\right] dL^\bullet + L_1 \int_{L_1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_0} \exp\left[-L^\bullet/\lambda_0\right] dL^\bullet, \quad (1.57)$$

тобто

$$\lambda^* = \lambda_0 \left[1 - \exp\left(-L_1/\lambda_0\right) \right]. \quad (1.58)$$

Для електронів, що рухаються у протилежному

напрямку, середній шлях, який вони проходять без зіткнень до досягнення точки O , також може бути розрахований на основі попереднього рівняння.

Швидкість дрейфу (Δv_x), яку набуває електрон при прикладенні зовнішнього електричного поля E_x у напрямку x , унаслідок зміни енергії:

$$\Delta v_x = \frac{eE_x \lambda^*}{m^* v} = \frac{eE_x \tau_0}{m^*} \left[1 - \exp\left(-L_1 / \lambda_0\right) \right]. \quad (1.59)$$

Допускаючи, що рівноважний розподіл електронів $F^0(\vec{v}, \vec{r}) = F^0(|\vec{v}|)$, то відхилення розподілу електронів F^1 , які рухаються у напрямку вектора \vec{OP} , визначається як

$$F^1(L_1) = \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \Delta v_x = \frac{eE_x \tau_0}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left[1 - \exp\left(-L_1 / \lambda_0\right) \right]. \quad (1.60)$$

Загальний струм дрейфу електронів, які перетинають точку O , може бути визначений за співвідношенням

$$J(0) = -e \int_0^\infty v^2 dv \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta v_x F^1(L_1), \quad (1.61)$$

де θ – кут між напрямом вектора \vec{OP} та віссю x ($v_x = \cos \theta$), ϕ – азимутальний кут навколо осі x . Загальна електропровідність тонкої плівки може бути визначена шляхом інтегрування рівняння (1.61) за площею поперечного перерізу S , тобто

$$\begin{aligned} \sigma_f = & \frac{2e^2 m^* \tau_0}{h^3} \int_0^\infty v^3 \frac{\partial F^0}{\partial v} dv \int_{(S)} \frac{dS}{S} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \times \\ & \times \sin \theta \cos^2 \theta \left[1 - \exp\left(-L_1 / \lambda_0\right) \right]. \end{aligned} \quad (1.62)$$

Для розрахунків електропровідності, L_1 визначається через геометричні параметри. Потрібно зауважити, що рівняння (1.60) еквівалентне рівнянню

$$F^1(\vec{r} - \vec{r}_0) = \frac{eE_x \tau_0}{m^*} \left[1 - \exp \left\{ -\left| \vec{r} - \vec{r}_0 \right| / \lambda_0 \right\} \right], \quad (1.63)$$

де $\vec{r} - \vec{r}_0$ – вектор, паралельний швидкості електрона \vec{v} , $\vec{r} = \vec{r}_0$ в точці на поверхні півки. Рівняння (1.63) – частинний розв’язок рівняння Больцмана

$$\vec{v} \cdot \text{grad}_x F^1 = \frac{eE_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} - \frac{F^1}{\tau_0}. \quad (1.64)$$

У найбільш загальному випадку при частковому дзеркальному відбитті електронів від поверхні необхідно розглядати електрони, які декілька разів дзеркально відбилися від поверхні і які пройшли шлях \vec{PP}' між двома зіткненнями (вектор \vec{PP}' , паралельний вектору \vec{OP} , проходить крізь точку O і перетинає поверхні півки в точках P і P'). Позначимо для зручності відстань $PP' = L_2$. Тоді результуюче співвідношення для довжини вільного пробігу електронів матиме вигляд

$$\begin{aligned} \lambda = & \frac{1}{\lambda_0} \int_0^{L_1} L \exp \left[-L / \lambda_0 \right] dL + (1-p) \frac{L_1}{\lambda_0} \int_{L_1}^{\infty} \exp \left[-L / \lambda_0 \right] dL + \\ & + \frac{p}{\lambda_0} \int_{L_1}^{L_1+L_2} L \exp \left[-L / \lambda_0 \right] dL + \\ & + p(1-p) \frac{L_1+L_2}{\lambda_0} \int_{L_1+L_2}^{\infty} \exp \left[-L / \lambda_0 \right] dL + \dots, \end{aligned} \quad (1.65)$$

$$\text{тобто } \lambda = \lambda_0 \left\{ 1 - \frac{(1-p) \exp\left[-L_1/\lambda_0\right]}{1-p \exp\left[-L_2/\lambda_0\right]} \right\}. \quad (1.66)$$

Таким чином, питома провідність плівки дорівнює

$$\sigma_f = \frac{2e^2 m^{*2} \tau_0}{h^3} \int_0^\infty v^3 \frac{\partial F^o}{\partial v} dv \int \frac{dS}{S} \int_0^{2\pi} d\phi \times \\ \times \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta \left\{ 1 - \frac{(1-p) \exp\left[-OP/\lambda_0\right]}{1-p \exp\left[-PP'/\lambda_0\right]} \right\}. \quad (1.67)$$

При $p = 0$ співвідношення (1.67) перетворюється до вигляду (1.62).

Автори праці [19] запропонували модель, згідно з якою СДВП електронів у металевій плівці може бути визначена, як і в моделі Чамберса, за допомогою експоненціальної функції ймовірності. Модель подана на рис. 1.3. у ній густина ймовірності визначається як

$$\frac{dP}{dL^*} = \frac{1}{\lambda_0^*} \exp\left[-\frac{L^*}{\lambda_0^*}\right]. \quad (1.69)$$

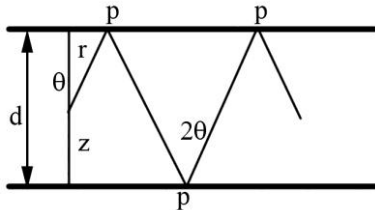


Рисунок 1.3 – Модель Рахмана і Ахмеда [19]

У співвідношенні (1.68) перший доданок описує внесок ізотропно розсіяних електронів в об'ємі перед

досягненням поверхні, другий доданок – внесок електронів, які пройшли відстань, більшу ніж r , і розсіялися дифузно на поверхні плівки. Крім того, співвідношення (1.69) досить подібне до співвідношення Чамберса (1.56). Необхідно також зауважити, що Рахман і Ахмед припустили, що середня швидкість електронів \bar{v} визначається як

$$\bar{v} = \frac{3}{4} v_F, \quad (1.70)$$

де v_F – швидкість на поверхні Фермі, хоча жоден фізичний аргумент не підтверджує дане припущення.

Нове значення λ_0^* для довжини вільного пробігу визначається як

$$\lambda_0^* = \frac{3}{4} \lambda_0. \quad (1.71)$$

Це співвідношення може бути отримане з роботи Томсона [20], в якій наведений вираз для питомої провідності σ тонких плівок:

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{2}{2\lambda_0} \left[2n \frac{\lambda_0}{d} + \frac{3}{2} \right], \quad k < 1. \quad (1.72)$$

При $k = 1$ рівняння (1.72) перетворюється до вигляду рівняння (1.71). Після підстановки рівняння (1.68) воно набуває вигляду

$$\lambda^* = \lambda_0^* + (1-p) \lambda_0^* \exp\left(-\frac{x}{\lambda_0^*}\right) \times \sum_{n=0}^{\infty} p^n \exp\left[-nd/\lambda_0^* |\cos\theta|\right], \quad (1.73)$$

де відстань r визначається як

$$r = \frac{(d-z)}{\cos \theta} \quad \text{при } v_z > 0, 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2},$$

$$r = \frac{-z}{\cos \theta} \quad \text{при } v_z > 0, \frac{\pi}{2} < \theta \leq \pi. \quad (1.74)$$

Здається, що автори [19] для отримання λ_f проінтегрували рівняння (1.73) за трьома координатами θ , ϕ і z відповідно до виразу

$$\lambda_f = \frac{1}{t} \int_0^t dz \int_0^\pi \lambda^* \sin \theta d\theta. \quad (1.75)$$

Фізичний зміст співвідношення (1.75) не зрозумілий, оскільки автори припускають, що питома провідність плівки пропорційна λ_f . Це грубе наближення, оскільки величина λ_f не може у загальному вигляді робити внесок як залежна лише від кута θ .

Таким чином, поданий метод розрахунку результуючої довжини вільного пробігу електронів Рахмана та Ахмеда помітно відрізняється від структури інших моделей, розроблених авторами: Чамберсом [18], Фуксом і Зондгеймером [13, 14] або Котті [5]. У цих моделях використовується або рівняння Больцмана, або відхилення функції розподілу електронів при визначенні провідності плівки. Враховуючи, що наближення Рахмана та Ахмеда подібне до припущень, що покладені в основу моделі Котті, можна говорити про те, що і модель Котті є помилковою. Це буде показано у наступному розділі.

1.2.2.2 Модель Котті

Модель Котті [5] цікава тим, що вона є зручним і простим методом визначення густини ймовірності функції вільного пробігу. Крім того, вона може бути поширена і на інші додаткові механізми розсіювання, наприклад

зерномежове розсіювання [8; 10; 11]. В основу моделі Котті покладені такі припущення:

1. Суцільні металеві плівки мають гладкі паралельні поверхні, тому модель ФЗ може бути застосована у разі, якщо коефіцієнт дзеркальності r близький до 1.

2. Використовується модель квазівільних електронів, тобто ефективна маса – скалярна величина.

3. Об'ємне і поверхневе розсіювання відбуваються незалежно; розсіювання в об'ємі описується об'ємною довжиною вільного пробігу, яка не залежать ні від положення електрона в об'ємі зразка, ні від напрямку руху електронів.

Припущення (2) і (3) також лежать в основі моделі ФЗ; припущення (1) може бути змінене таким чином, щоб збільшити область застосовності моделі Котті (див. рівняння 1.85). Оригінальна праця Котті [5] була побудована відповідно до вищенаведених припущень. Нова модель для плівок отримала назву "модель шару". Згідно з цією моделлю плівка замінюється на масивний матеріал, поверхні розсіювання в якому подані у вигляді паралельних шарів розсіювання, що знаходяться на відстані d один від одного. Схематичне зображення даної моделі подане на рис.1.4 для електронів, що наближаються до верхньої поверхні під кутом θ .

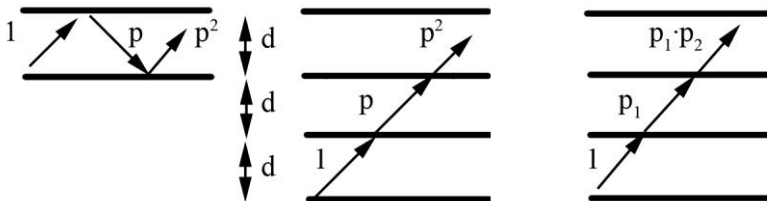


Рисунок 1.4 – Модель Котті [5]

Беручи до уваги той факт, що дифузно розсіяні

електрони на межі поділу шарів не роблять внесок у загальну величину струму, то кількість електронів, які не змінюють провідність, зменшуватиметься у залежності від величини коефіцієнта p у процесі перетину шару. Згідно з припущенням (1) імовірність того, що електрон проходить відстань L без розсіювання на зовнішніх поверхнях, визначається як

$$P^{L^{|\cos\theta|/d}} = \exp \left\{ - \frac{\left| \cos\theta \ln \left(\frac{1}{p} \right) \right|}{d} L \right\}. \quad (1.76)$$

Таким чином, довжина вільного пробігу, пов'язана з розсіюванням на площинах, становить приблизно

$$\lambda_s(\theta) = \frac{d}{|\cos\theta| \ln \left(\frac{1}{p} \right)}. \quad (1.77)$$

При $(1-p) \ll 1$ рівняння (1.77) перетворюється до вигляду

$$\lambda_s(\theta) = \frac{d}{|\cos\theta|(1-p)}. \quad (1.78)$$

За припущення (3) розраховується загальна довжина вільного пробігу $\lambda_t(\theta)$, яка враховує процеси розсіювання, що відбуваються як в об'ємі, так і на зовнішніх поверхнях:

$$\frac{1}{\lambda_t(\theta)} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda_s(\theta)} = \frac{1}{\lambda_0} \left[1 + \frac{(1-p)\lambda_0}{d} |\cos\theta| \right]. \quad (1.79)$$

Беручи до уваги загальне лінійне рівняння Больцмана для квазівільних електронів

$$\frac{e\vec{E}}{m^*} \text{grad}_{\vec{v}} \cdot F_{K^0}(\vec{r}) = \frac{1}{\tau_t(\theta)} F^1(\vec{K}, \vec{r}) + \vec{v}_K \cdot \text{grad}_{\vec{r}} F^1(\vec{K}, \vec{r}), \quad (1.80)$$

в окремому випадку, коли електричне поле \vec{E} прикладене у напрямку осі x і коли відхилення F^1 від функції розподілу F^0 не залежить від позиції, як це було запропоновано у рівнянні (1.79), отримуємо

$$\frac{eE_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} = \frac{F^1}{\tau_t(\theta)} = v \frac{F^1}{\lambda_t(\theta)}. \quad (1.81)$$

Густину струму можна розрахувати за допомогою загального рівняння (1.32). У полярних координатах (v, θ, ϕ) у \vec{v} -просторі при $v_z = v \cos \theta$ густина струму визначається як

$$J = -\frac{2e^2}{m^*} \left(\frac{m^*}{h} \right) \lambda_0 E_x \times \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi \int_0^\infty v^2 \frac{\partial F^0}{\partial v} dv \int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta d\theta}{1 + \frac{\lambda_0}{d} (1-p) |\cos \theta|}. \quad (1.82)$$

Виконуючи інтегрування за ϕ і v , відношення питомих провідностей плівки і монокристала можна оцінити як

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{3}{4} \int_0^\pi d\theta \frac{\sin^3 \theta}{1 + \frac{\lambda_0}{d} (1-p) |\cos \theta|}, \quad (1.83)$$

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = C(\mu) = \frac{3}{2} \mu \left\{ \mu - \frac{1}{2} + (1 - \mu^2) \ln \left(1 + \frac{1}{\mu} \right) \right\}$$

при $\mu = \frac{d}{\lambda_0 (1-p)} = \frac{d}{1-p}, \quad (1-p) \square 1 \quad (1.84)$

Табличні значення σ_f / σ_0 , отримані на основі рівнянь

(1.83) і (1.84), дозволяють здійснити порівняльний аналіз моделей Котті та ФЗ (рівняння 1.43) і зробити такі висновки: модель Котті добре узгоджується з моделлю ФЗ; відхилення становить менше ніж 8 % при $k > 0,02$ і $p > 0,75$ [21]. Однак потрібно зазначити, що використання

$$\mu^* = k \left\{ \ln \frac{1}{p} \right\}^{-1} \quad (1.85)$$

замість рівняння (1.84) призводить до більш задовільних результатів при $p > 0,5$ і $k > 0,01$ (табл. 1.1).

Крім того, модель Котті може бути легко розширена для більш загального випадку, коли зовнішні поверхні характеризуються різними параметрами дзеркальності p . Якщо зовнішня та внутрішня поверхні плівки описуються двома різними параметрами дзеркальності p_1 і p_2 , які задовольняють попереднє припущення (1), то розподіл електронів буде аналогічний тому випадку, коли поверхні плівки характеризуються ефективним коефіцієнтом розсіювання p_{eff} :

$$p_{eff} \approx (p_1 p_2)^{1/2} \quad (1.86)$$

Таблиця 1.1 – Порівняльний аналіз моделей Котті та ФЗ*

k	Модель ФЗ		Модель Котті (співвідн. 1.84)		Модель Котті (співвідн. 1.84)	
	$p=0,75$	$p=0,50$	$p = 0,75$	$p = 0,50$	$p = 0,75$	$p = 0,50$
0,01	6,5149	11,820	5,9677	9,6609	6,5589	12,127
0,02	4,1603	7,1839	3,8473	5,9677	4,1882	7,4536
0,04	2,7992	4,5350	2,6201	3,8473	2,8178	4,7028
0,10	1,8341	2,6681	1,7501	2,3473	1,8461	2,7637
0,20	1,4532	1,9250	1,4078	1,7501	1,4623	1,9911
0,40	1,2389	1,4974	1,2162	1,4078	1,2463	1,5452

1	1,0980	1,2061	1,0904	1,1754	1,1035	1,2380
2	1,0487	1,1013	1,0460	1,0904	1,0528	1,1238
4	1,0239	1,0491	1,0230	1,0460	1,0267	1,0633

*Величина σ_f/σ_0 розраховувалася на основі співвідношень (1.43) (модель ФЗ) і (1.83 – 1.85) (модель Котті)

Цікава дискусія про залежність коефіцієнта дзеркальності від кута падіння здійснена Котті [5]. Він вважає, що оскільки поверхня містить дефекти і має шорсткості на відміну від приповерхневих шарів, що мають більш високий ступінь досконалості, то електрони, що потрапляють на поверхню під кутом 90° , будуть розсіюватися дифузно, а електрони, що потрапляють на поверхню під кутом до нормалі, будуть розсіюватися дзеркально.

Коефіцієнт дзеркальності p , таким чином, має кутову залежність. Провідність плівки при цьому виражається співвідношенням

$$\sigma_f = \int_0^{\pi} d\theta \frac{\sin^3 \theta}{1 + \frac{\lambda_0}{d} [1 - p(\theta)] |\cos \theta|}, \quad (1.87)$$

яке показує, що основний внесок у величину струму роблять електрони, які розсіяні під кутом θ , близьким до $\pi/2$.

Необхідно також зазначити, що кілька років потому Халперном [22] було отримано аналогічний результат. Застосований ним теоретичний підхід з метою одержання виразу для середньої довжини вільного пробігу електронів майже не відрізняється від запропонованого Котті й тому не обговорюються в цьому розділі. Більш детально модель Халперна та її аналіз, зроблений Котті, подані в праці [23].

1.2.3 Моделі для двошарових систем

Для пояснення причини збільшення опору у відпалених дзеркальних плівках золота при нанесенні на її поверхню додаткового металевого шару, Лукас [24, 25] запропонував модель для двошарової плівки, в основу якої була покладена модель ФЗ. Схематичне зображення двошарової плівки у моделі Лукаса, зовнішні поверхні якої характеризуються різними коефіцієнтами дзеркальності, подано на рис. 5.

Тут σ_{01} і σ_{02} – відповідно питомі провідності першого ($0 < z < d_1$) і другого ($d_1 < z < d_1 + d_2$) шарів, що визначаються як

$$\sigma_{0i} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2 \lambda_i^2}{h^3} (m^* v_f), \quad i = 1, 2. \quad (1.88)$$

Припускається, що розсіювання в об'ємі відбувається дифузно і що виконуються вимоги для застосування моделі квазівільних електронів. Коефіцієнти p і q відповідають коефіцієнтам дзеркальності при розсіюванні на відповідних поверхнях $z = 0$ і $z = d_1 + d_2$.

Під час розроблення моделі для двошарової системи Лукас вважає, що на межі поділу шарів не виникають інші механізми розсіювання.

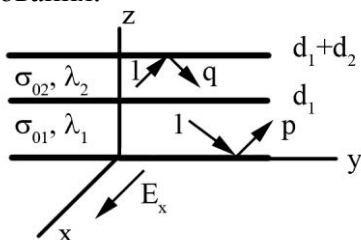


Рисунок 1.5 – Геометрія двошарової плівки [24]

Як і в моделі ФЗ, Лукас вважає, що функція розподілу

електронів $F(\vec{v}, \vec{x})$ залежить лише від координати z .
Таким чином,

$$F_{1,2}(\vec{v}, \vec{r}) = F^0 + F_{1,2}^1(\vec{v}, z), \quad (1.89)$$

де індекси 1 і 2 відносять до фізичних параметрів першого і другого шарів відповідно.

Отже,

$$F_1 = F^0 + F_1^1(\vec{v}, z) \quad \text{при } 0 < z < d_1,$$

$$F_2 = F^0 + F_2^1(\vec{v}, z) \quad \text{при } d_1 < z < d_1 + d_2.$$

Рівняння Больцмана в даному випадку, згідно з [24], може бути записане у вигляді

$$\frac{\partial F_{1,2}^1}{\partial z} + \frac{1}{\tau_{1,2}} \cdot \frac{\partial F_{1,2}^1}{v_z} = \frac{eE_x}{m^* v_z} \frac{\partial F^0}{\partial v_x}, \quad (1.90)$$

де $\tau_{1,2}$ – час релаксації в кожному із шарів. Загальний розв'язок цього рівняння можна записати у вигляді

$$F_{1,2}^1(\vec{v}, z) = \frac{\tau_{1,2} e E_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 + F_{1,2}(\vec{v}) \exp\left(-\frac{z}{\tau_{1,2} \cdot v_z}\right) \right\}. \quad (1.91)$$

Функція $F_{1,2}(\vec{v}, \vec{x})$ може бути визначена, використовуючи граничні умови при $z = 0$ і $z = d_1 + d_2$:

$$F_{1,2}^{1+}(\vec{v}, z) = F_{1,2}^1(v_x, v_y, v_z, z), \quad v_z > 0, \quad (1.92)$$

$$F_{1,2}^{1-}(\vec{v}, z) = F_{1,2}^1(v_x, v_y, -v_z, d_1 + d_2 - z), \quad v_z < 0. \quad (1.93)$$

Таким чином, співвідношення (1.91) може бути записане у вигляді

$$F_{1,2}^{1+}(\vec{v}, z) = \frac{\tau_{1,2} e E_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left[1 + L_{1,2}^+(\vec{v}) \cdot \exp\left(\frac{-z}{\tau_{1,2} - v_z}\right) \right], v_z > 0 \quad (1.94)$$

$$\text{i} \quad F_{1,2}^{1-}(\vec{v}, z) = \frac{\tau_{1,2} e E_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left[1 + H_{1,2}^+(\vec{v}) \cdot \exp\left(\frac{d_1 + d_2 - z}{\tau_{1,2} - v_z}\right) \right], v_z < 0. \quad (1.95)$$

Вважаючи, що кількість електронів, що відбилися від поверхні $z = d_1 + d_2$, буде дорівнювати сумі дзеркально і дифузно відбитих електронів $(1 - q)F^0$, функція розподілу електронів матиме вигляд

$$\begin{aligned} & F^0 + F_2^{1-}(v_z, z = d_1 + d_2) = \\ & = q \left[F^0 + F_2^{1+}(-v_z, z = d_1 + d_2) \right] + (1 - q)F^0, v_z < 0. \end{aligned} \quad (1.96)$$

Аналогічно при $z = 0$

$$\begin{aligned} & F^0 + F_1^{1+}(v_z, z = 0) = \\ & = p \left[F^0 + F_1^{1+}(-v_z, z = 0) \right] + (1 - p)F^0, v_z > 0. \end{aligned} \quad (1.97)$$

На межі поділу шарів $z = d$ за відсутності додаткових механізмів розсіювання

$$F_1^{1-}(v_z, z = d_1) = F_2^{1-}(v_z, z = d_1), v_z < 0, \quad (1.98)$$

$$F_1^{1+}(v_z, z = d_1) = F_2^{1+}(v_z, z = d_1), v_z > 0. \quad (1.99)$$

Розв'язок рівняння (1.96) дає

$$H_2^-(v_z) = q - 1 + qL_2^+(-v_z) \exp\left(-\frac{d_1 + d_2}{\tau_2 v_z}\right), v_z < 0, \quad (1.100)$$

$$H_2^-(-v_z) = q - 1 + qL_2^+(v_z) \exp\left(-\frac{d_1 + d_2}{\tau_2 v_z}\right), v_z > 0. \quad (1.101)$$

у той час як розв'язок рівняння (1.97) дає

$$L_1^+(\nu_z) = p - 1 + p H_1^-(\nu_z) \exp\left(-\frac{d_1 + d_2}{\tau_1 \nu_z}\right), \nu_z > 0. \quad (1.102)$$

Підставивши у рівняння (1.98), можна визначити

$$\begin{aligned} \tau_1 - \tau_2 + \tau_1 \exp\left(-\frac{d_2}{\tau_1 \nu_z}\right) H_1^-(\nu_z) &= \\ &= \tau_2 \exp\left(\frac{d_e}{\tau_2 \nu_z}\right) H_2^-(\nu_z), \nu_z < 0, \end{aligned} \quad (1.103)$$

що може бути переписане у вигляді

$$\begin{aligned} \tau_1 - \tau_2 + \tau_1 \exp\left(-\frac{d_2}{\tau_1 \nu_z}\right) H_1^-(\nu_z) &= \\ &= \tau_2 \exp\left(-\frac{d_2}{\tau_2 \nu_z}\right) H_2^-(\nu_z), \nu_z > 0. \end{aligned} \quad (1.104)$$

Підставивши у рівняння (1.99), можна визначити

$$\begin{aligned} \tau_1 - \tau_2 + \tau_1 \exp\left(-\frac{d_1}{\tau_1 \nu_z}\right) L_1^+(\nu_z) &= \\ &= \tau_2 \exp\left(-\frac{d_1}{\tau_2 \nu_z}\right) L_2^+(\nu_z), \nu_z > 0. \end{aligned} \quad (1.105)$$

Із рівнянь (1.101), (1.102), (1.104), (1.105) можна визначити відомі функції H_1 , H_2 , L_1 і L_2 та підставити їх у (1.94) і (1.95), що дасть можливість розрахувати функції розподілу електронів $F_1^1(\vec{\nu}, z)$ і $F_2^1(\vec{\nu}, z)$:

$$F_1^{1+}(\vec{v}, z) = \frac{\tau_1 e E_x}{m^*} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \left[\frac{\exp\left\{-\frac{z}{\tau_1 v_z}\right\}}{1 - pq \exp\left\{-\frac{2d_1}{\tau_1 v_z} - \frac{2d_2}{\tau_2 v_z}\right\}} \right] \times \right. \\ \left. \times \left[(1-p) + \frac{\tau_2}{\tau_1} p(1-q) \exp\left\{-\frac{d_1}{\tau_1 v_z} - \frac{d_2}{\tau_2 v_z}\right\} + \right. \right. \\ \left. \left. + p \exp\left(-\frac{d_1}{\tau_1 v_z}\right) \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_1}\right) \left(1 - q \exp\left(-\frac{2d_2}{\tau_2 v_z}\right)\right) \right] \right\}. \quad (1.106)$$

Розраховуючи густину струму $J(z)$ на основі співвідношення (1.32) і відзначаючи, що питома провідність $\sigma_{f_{1,2}}$ визначається як

$$\sigma_{f_{1,2}} = \frac{1}{E_x d_{1,2}} \int J(z) dz, \quad (1.107)$$

відношення середньої питомої провідності двошарової плівки до питомої провідності монокристалу для першого шару може бути виражена так:

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = \frac{d_1}{d_1 + d_2} \frac{\sigma_{f_1}}{\sigma_{01}} + \frac{d_2}{d_1 + d_2} \frac{\sigma_{f_2}}{\sigma_{01}}. \quad (1.108)$$

Після проведення математичних перетворень отримуємо

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = \frac{d_1}{d_1 + d_2} \left\{ 1 - \frac{3\lambda_1}{4d_1} \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin^3 \theta (1-A) [1 - pqA^2 C^2]^{-1} \times \right.$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[(1-p)(1+qAC^2) + (1+pA) \left\{ \frac{\tau_2(1-q)C +}{\tau_1} \right. \right. \\
& \left. \left. + \left[1 - \frac{\tau_2}{\tau_1} \right] (1-qC^2) \right\} d\theta \right] + \\
& + \frac{d_2}{d_1+d_2} \frac{\tau_2}{\tau_1} \left\{ 1 - \frac{3\lambda_2}{4d_2} \int_0^{\pi/2} \cos\theta \sin^3\theta (1-C) [1-pqA^2C^2] \times \right. \\
& \left. \times \left[(1-q)(1+pA^2c) + (1+qC) \left[\frac{\tau_1(1-p)A +}{\tau_2} \right. \right. \right. \\
& \left. \left. + \left[1 - \frac{\tau_1}{\tau_2} \right] (1-pA^2) \right] \right] d\theta \right\}, \quad (1.109)
\end{aligned}$$

де

$$A = \exp\left(-\frac{d_1}{\lambda_1 \cos\theta}\right), C = \exp\left(-\frac{d_2}{\lambda_2 \cos\theta}\right). \quad (1.110)$$

Чопра і Рандлетт [26] обговорили фізичну інтерпретацію Лукаса, згідно з якою спостерігається збільшення питомого опору відпалених плівок Au при подальшому нанесенні металевої плівки. Вони припускають, що причиною цього може бути поява додаткового механізму розсіювання електронів, який пов'язаний зі зміною електричного характеру поверхні базового шару після нанесення матеріалу покриття. Як і в своїх експериментальних працях, ці автори зауважили, що нанесення покриття з того самого матеріалу, що й базовий шар, викликає лише незначну зміну опору. Авторами праці [26] було також показано, що ефект, описаний Лукасом, спостерігається лише у несучільних металевих плівках. Однак потрібно зазначити, що експериментальні дані про розмірні ефекти у питомому опорі для плівок срібла, які наведені Берманом і Юретчке [27]

узгоджуються з аналізом, проведеним Лукасом. Берман і Юретчке провели дослідження температурної залежності питомого опору для плівок срібла, що складаються з відпаленого базового шару, товщиною 300–400 Å і шару покриття товщиною 15–30 Å. Результат свідчить, що аномальне збільшення питомого опору викликане нанесенням тонкого невідпаленого верхнього шару.

Безак та ін. [28] також запропонували своє власне трактування моделі Лукаса для двошарових плівкових систем. Узагальнення стосується таких пунктів:

1. Два шари системи різних металів мають відмінні фізичні параметри, такі як ефективна маса, швидкість на поверхні Фермі та густина електронів, а також час релаксації. Тут необхідно зазначити, що теоретичний аналіз стосується геометричної задачі і кінцевий результат є відношення провідностей у вигляді співвідношення (1.108). Ця процедура призводить до подальшої модифікації аналізу, проведеного Лукасом:

– граничні умови (1.98) і (1.99) повинні бути переписані у вигляді

$$\tau_1 \nu_{F_1} \left[1 + L_1^+ \exp \left(-\frac{d_1}{\tau_1 \nu_z} \right) \right] = \tau_2 \nu_{F_2} \left[1 + L_2^+ \exp \left(-\frac{d_1}{\tau_2 \nu_z} \right) \right]$$

і

$$\tau_1 \nu_{F_1} \left[1 + H_1^+ \exp \left(-\frac{d_2}{\tau_1 \nu_z} \right) \right] = \tau_2 \nu_{F_2} \left[1 + H_2^+ \exp \left(-\frac{d_2}{\tau_2 \nu_z} \right) \right];$$

– другий доданок у рівнянні (1.108) має вигляд

$$\frac{\sigma_{f_2}}{\sigma_{01}} = \frac{\sigma_{f_2}}{\sigma_{02}} \cdot \frac{n_2}{n_1} \cdot \frac{m_1^*}{m_2^*} \cdot \frac{\tau_{20}}{\tau_{10}},$$

де відношення σ_{f_2}/σ_{02} описує розмірний ефект у другому шарі.

2. Межа поділу між шарами не ідеально гладка, тому потенціальна енергія електронів, що переходять із шару 1 в 2, на інтерфейсі змінюється покровоко (рис. 6); імовірність дифузного розсіяння на інтерфейсі стає відмінною від нуля.

3. Поверхневе розсіювання описується двома коефіцієнтами p (для відбиття) і Q (для заломлення). Коефіцієнт Q не дорівнює нулю тільки на інтерфейсі.

Геометрія цієї моделі подана на рис. 1.6, де для зручності стрілками вказано напрям потоку електронів за аналогією з процесами оптичного відбиття і заломлення.

Безак та ін. припустили, що форма поверхонь й інтерфейса може бути описана такою просторовою функцією :

$$z = L_2(x, y) + d_2, z = L_1(x, y) - d_1, z = L_3(x/y), \quad (1.111)$$

де $\langle L_j(x, y) \rangle = 0$.

Відповідні шорсткості цих поверхонь визначаються як

$$\bar{L}_1^2 = \langle L_1^2(x, y) \rangle, \bar{L}_2^2 = \langle L_2^2(x, y) \rangle, \bar{L}_3^2 = \langle L_3^2(x, y) \rangle, \quad (1.112)$$

де індекси 1, 2, 3 належать до нижньої ($z = -d_1$), верхньої ($z = d_2$) поверхонь та інтерфейса ($z = 0$) відповідно; функція L_j у подальшому інтерпретується як функція Гауса.

Узагальнимо деякі результати, подані у пункті 1.2.5 (розділ 1), і розглянемо їх без наведення точних теоретичних викладок, врахувавши, що коефіцієнти дзеркальності p_{10} і p_{20} визначаються на основі формули Займана-Софера [1; 29]:

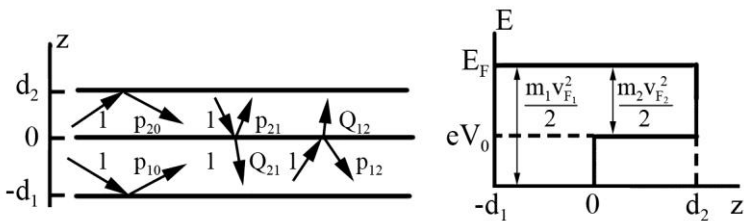


Рисунок 1.6 – Геометрія моделі Безака та ін. [28]

$$P_{j0} = \exp \left\{ - \left(2 \frac{\bar{L}_t^2}{k} m_j^* v_{jF}^* \right)^2 \cos^2 \theta_j^i \right\}, j = 1, 2 \quad (1.112)$$

де θ_j^i – кут відбиття електронів від зовнішніх поверхонь.

Якщо V_0 – величина кроку потенціального бар'єра на межі поділу шарів ($z = 0$) (рис. 6), то закон збереження енергії можна записати так :

$$\frac{1}{2} m_1^* v_{F1}^2 = \frac{1}{2} m_2^* v_{F2}^2 + eV_0. \quad (1.113)$$

Безак та ін. за аналогією з оптикою припустили, що електрони провідності, які проходять через потенціальний бар'єр, повинні задовольняти закон оптичного заломлення

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{m_2^* v_{F2}}{m_1^* v_{F1}}, \quad (1.114)$$

що відбувається лише при кутах падіння менше критичного кута

$$\theta_{1\max} = \arcsin \frac{m_2^* v_{F2}}{m_1^* v_{F1}}. \quad (1.115)$$

Для цих кутів коефіцієнт відбиття R_θ на потенціальному бар'єрі інтерфейса менше одиниці. Ймовірність того, що

електрон відіб'ється від інтерфейса, можна згідно з [28] записати так:

$$p_{12} = R_g \cdot \exp \left\{ - \left(2 \frac{\bar{L}_3^2}{k} m_1^* v_{F1} \right)^2 \cos^2 \theta_1 \right\}, \quad (1.116)$$

де R_g визначається згідно з класичним квантово-механічним співвідношенням

$$p_{21} = R_g \cdot \exp \left\{ - \left(2 \frac{\bar{L}_3^2}{K} m_2^* v_{F2} \right)^2 \cos^2 \theta_2 \right\}, \quad (1.117)$$

де R_B подано у вигляді класичного квантово-механічного співвідношення

$$R_g = \left[\frac{m_1^* v_{1F} \cos \theta_1 - m_2^* v_{2F} \cos \theta_2}{m_1^* v_{1F} \cos \theta_1 + m_2^* v_{2F} \cos \theta_2} \right]^2. \quad (1.118)$$

Тому R_g можна розглядати як імовірність того, що електрон відбивається від потенціального бар'єра, і рівняння (1.116) і (1.117) справедливі тільки в тому разі, якщо вони відбиваються від потенціального бар'єра і шорсткого інтерфейса незалежно.

Враховуючи, що на інтерфейсі $z = 0$,

$$4\pi \bar{L}_3^2 \left(\frac{\cos \theta_1}{l_1} - \frac{\cos \theta_2}{l_2} \right) = \frac{2\bar{L}_3^2}{K} \cdot (m_1^* v_{1F} \cos \theta_1 - m_2^* v_{2F} \cos \theta_2), \quad (1.119)$$

де l_i – довжина плоскої хвилі, пов'язаної з електронами, що рухаються в i -му шарі, то коефіцієнт проходження Q буде визначатися так:

$$Q = (1 - R_B) \exp \left\{ \left(\frac{\bar{L}_3^2}{K} \right)^2 \cdot (m_1^* v_{1F} \cos \theta_1 - m_2^* v_{2F} \cos \theta_2)^2 \right\}. \quad (1.120)$$

Процедура, наведена далі, подібна до процедури ФЗ.

Рівняння Больцмана має загальний розв'язок

$$F_j^1(\vec{v}, z) = \frac{\tau_j e E_x}{m_j^*} \frac{\partial F_j^0}{\partial v_{x_j}} \left[1 + F_j(\vec{v}) \exp\left(-\frac{z}{\tau_j v_{z_j}}\right) \right], j=1, 2. \quad (1.121)$$

Граничні умови на зовнішніх поверхнях $z = -d_1$ і $z = d_2$ відповідно до моделі Лукаса [24]:

$$F_1^1(v_z, z = -d_1) = p_{10}, \quad F_1^{1-}(-v_z, z = -d_1), \quad v_z > 0, \quad (1.122)$$

$$F_2^{1-}(-v_z, z = d_2) = p_{20}, \quad F_2^{1+}(+v_z, z = d_2), \quad v_z > 0.$$

Однак граничні умови на інтерфейсі $z = 0$ не відповідають тим, що були запропоновані Лукасом (див. пункт 1.2.3), оскільки розсіювання електронів відбувається на інтерфейсі. Безак та ін. вирішили проблему шляхом розрахунку розподілу електронів, що рухаються у напрямі до зовнішньої поверхні після відбиття або проходження інтерфейса $z = 0$.

Наприклад, розподіл електронів, що рухаються у напрямі до поверхні $z = -d_1$, беруть таким, що дорівнює сумі розподілів електронів, що пройшли та відбитих. Це дає змогу записати таке співвідношення

$$F_1^0 + F_1^{1-}(v_z, z = 0) = p_{21} \left[F_1^0 + F_1^{1+}(-v_z, z = 0) \right] +$$

$$+ Q \left[F_2^0 + F_2^{1-}(v_z, z = 0) \right], \quad v_z < 0. \quad (1.123)$$

Оскільки електрони що надходять на інтерфейс, можуть або відбитися з імовірністю p_{21} , або пройти з імовірністю Q , то рівняння рівноваги має вигляд

$$F_1^0 = p_{21} F_1^0 + Q F_2^0, \quad (1.124)$$

а отже, рівняння (1.123) зводиться до

$$F_1^0(v_z, z=0) = p_{21} [F_1^{1+}(-v_z, z=0)] + QF_2^{1-}(v_z, z=0), \quad v_z < 0. \quad (1.125)$$

Аналогічно для електронів, що рухаються у напрямі до поверхні $z = d_2$ після проходження інтерфейса $z = 0$, маємо

$$F_2^{1+}(v_z, z=0) = p_{21} [F_2^{1-}(-v_z, z=0)] + QF_1^{1+}(v_z, z=0), \quad v_z > 0. \quad (1.126)$$

Безак та ін. вирішили подати рівняння Больцмана у такому вигляді:

$$\begin{aligned} |v_{zj}| \cdot \frac{\partial F_j^{1+}}{\partial z} + \frac{F_j^{1+}}{\tau_j} &= eE_x v_{xj} \frac{\partial F_j^0}{\partial \varepsilon_j}, \quad j=1,2, \\ |v_{zj}| \cdot \frac{\partial F_j^{1-}}{\partial z} + \frac{F_j^{1-}}{\tau_j} &= -eE_x v_{xj} \frac{\partial F_j^0}{\partial \varepsilon_j}. \end{aligned} \quad (1.127)$$

Співвідношення (1.127) еквівалентне загальному співвідношенню (1.90), що було використане Лукасом [24]. Після об'єднання рівнянь (1.123) і (1.127) ми отримаємо розв'язок рівняння Больцмана у вигляді

$$F_1^{1-}(\vec{v}, z) = C_1^{*-} \exp\left(\frac{z}{\tau_1 |v_{z1}|}\right) + eE_x v_{x1} \tau_1 \frac{\partial F_1^0}{\partial \varepsilon_1}, \quad (1.128)$$

$$F_1^{1+}(\vec{v}, z) = C_1^{*+} \exp\left(\frac{-z}{\tau_1 |v_{z1}|}\right) + eE_x v_{x1} \tau_1 \frac{\partial F_1^0}{\partial \varepsilon_1} \quad (1.129)$$

при

$$\begin{aligned} C_1^{*-} &= -eE_x \frac{\partial F_1^0}{\partial \varepsilon_1} D^{*-1} (v_{x1} \tau_1 [1 - p_{12} + A^* p_{12} (1 - p_{10}) - \\ &\quad - C^{*2} p_{20} [p_{21} (1 - p_{12}) + Q^2] A^* C^{*2} p_{20} \times \\ &\quad \times (Q^2 - p_{12} p_{21}) (1 - p_{10})] + v_{x2} \tau_2 Q [C^{*2} p_{20} + C^* (1 - p_{10}) - 1]) \end{aligned} \quad (1.130)$$

$$C_1^{\bullet+} = A^{*2} p_{10} C_1^{\bullet-} - e E_x v_{x1} \tau_1 \frac{\partial F_1^o}{\partial \varepsilon_1} A^* (1 - p_{10}), \quad (1.131)$$

$$A^* = \exp(-d_1 / (\tau_1 |v_{z1}|)), \quad (1.132)$$

$$D^{\bullet} = 1 - A^{*2} p_{10} p_{12} - C^{*2} p_{20} p_{21} + \\ + A^{*2} B^{*2} p_{20} p_{21} (p_{12} p_{21} - Q^2). \quad (1.133)$$

При $p_{10} = p$, $p_{20} = q$, $p_{12} = 1$ і $Q = 0$ рівняння (1.128) і (1.129) зводяться до функції $F^1(\vec{v}, z)$, отриманої в рамках моделі Лукаса [24].

Середня густина струму може бути визначена як

$$J_x = \frac{1}{d_1 + d_2} (J_{x1} + J_{x2}). \quad (1.134)$$

Відповідно до стандартної процедури

$$J_{x1} = -2e \left(\frac{m_1^*}{h} \right)^3 \int v_{x1} d^3 v \int_{-d_1}^0 dz \{ F_1^{1+}(\vec{v}, z) + F_1^{1-}(\vec{v}, z) \}, \quad (1.135)$$

$$J_{x2} = -2 \left(\frac{m_2^*}{h} \right)^3 \int v_{x2} d^3 v \int_0^{d_2} dz \{ F_2^{1+}(\vec{v}, z) + F_2^{1-}(\vec{v}, z) \}. \quad (1.136)$$

Відношення питомої провідності плівки до питомої провідності монокристала першого шару можна записати у вигляді

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = 1 - \frac{d_2}{d_1 + d_2} (1 - x) - \frac{3\lambda_2}{4d_1 + d_2} \int_1^\infty du_1 \left(\frac{1}{u_1^3} - \frac{1}{u_1^5} \right) \times \\ \times [1 - A] [1 - p_{10} + D^{-1} (1 + A p_{10}) (x_1 + X Q y_1) - \\ - \frac{3\lambda_2}{4d_1 + d_2} \int_1^\infty du_2 \left(\frac{1}{u_2^3} - \frac{1}{u_2^5} \right) (1 - C) \times \\ \times [1 - p_{20} + D^{-1} \cdot (1 + C p_{20}) (x_2 + X Q y_2)] \quad (1.137)$$

де

$$u_j = [\cos \theta_j]^{-1}, \quad j=1,2, \quad (1.138)$$

$$X = \frac{\lambda_2 m_2^* v_{F2}}{\lambda_1 m_1^* v_{F1}}, \quad (1.139)$$

$$x_1 = 1 - p_{12} + A p_{12} (1 - p_{10}) - C_2 p_{20} [p_{21} (1 - p_{21}) + Q^2] + AC^2 p_{20} (1 - p_{10}) (Q^2 - p_{12} p_{21}), \quad (1.140)$$

$$y_1 = C^2 p_{20} - C(1 - p_{20}) - 1 \quad (1.141)$$

і, як і в моделі Лукаса,

$$A = \exp \left\{ -\frac{d_1}{\lambda_1 \cos \theta_1} \right\}, \quad C = B \exp \left\{ -\frac{d_2}{\lambda_2 \cos \theta_2} \right\}. \quad (1.142)$$

Аналогічні вирази для x_2 і y_2 можна отримати, виходячи із зазначених вище функцій x_1 і y_1 , замінивши A на C , p_{12} на p_{21} , а p_{10} на p_{20} .

Безак та ін. у своїй праці подали деякі числові результати для двошарових систем Au/Au , припускаючи, що електрони від нижньої поверхні відбиваються дзеркально ($p_{10} = 1$), а від верхньої – дифузно ($p_{20} = 0$). Отримані результати можна узагальнити таким чином:

1) існує різниця між питомою провідністю одношарової плівки Au і двошарової системи Au/Au однакової загальної товщини;

2) ця різниця збільшується при збільшенні співвідношення товщин d_2/d_1 . Цей факт, на перший погляд, можна легко пояснити з точки зору збільшення впливу другого шару на транспортні властивості двошарової системи;

3) зміна провідності плівки при зміні шорсткості інтерфейса \bar{L}_3^2 залишається незначною (менше ніж на 5 %

при зміні \bar{L}_3^2 від 5 до 0,1) порівняно зі зміною провідності плівки при зміні товщини другого шару на 25 % (при зміні d_2/d_1 від 1 до 0,02).

Бергман у праці [30] запропонував процедуру, відмінну від методу Чамберса для розроблення теорії розмірного ефекту двошарових металевих систем, які складаються із напівнескінченного металу F, покритого плівкою металу M ($0 < z < d$) (рис. 1.7).

Однак можна вказати деякі фізичні заперечення до процедури, яка була використана для розрахунку розподілу електронів, що рухаються у напрямі до поверхні $z = d_2$. Розподіл визначається шляхом накладення потоку електронів, що рухаються по поверхні $z = 0$, і тих, які рухаються у напрямку до поверхні $z = -d_1$ після відбиття від інтерфейсу при $z = 0$. Однак при цьому передбачається, що на інтерфейсі $z = 0$ виникає потенціальний бар'єр. Таким чином, із рівняння (1.113) отримуємо $v_{F_1} > v_{F_2}$ – для першого потоку електронів і $v_{F_1} < v_{F_2}$ – для другого потоку. Крім того, ніякої симетрії в рівняннях між кутом падіння θ_1 , якому відповідає кут заломлення θ_2 , та кутом падіння θ_2 і кутом θ_1 , який уже не буде кутом заломлення.

Ці характеристики показують, що швидкості Фермі і величини кутів (на яких базуються розрахунки) повинні розглядатися як середні значення, при цьому ступінь точності невідомий. Отже, наведена вище теоретична модель дає лише наближений опис процесів розсіювання в двошарових плівках, що не було взято до уваги Безаком та ін.

Модель Бергмана вимагає таких припущень:

- електрони у моделі квазівільних електронів та електрони провідності характеризуються однаковим імпульсом Фермі;
- спостерігається дифузне розсіювання електронів на

верхній поверхні металу М;

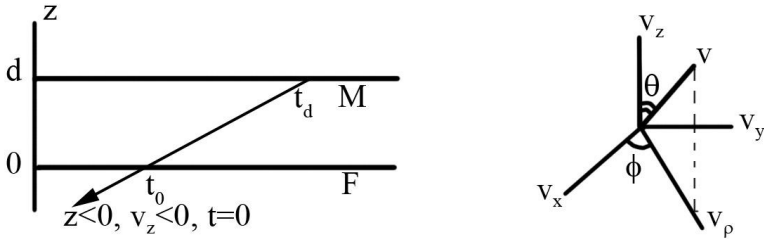


Рисунок 1.7 – Гометрія моделі Бергмана [30]

- хвилі електронів провідності гасяться, коли вони перетинають інтерфейс $z = 0$ у будь-якому напрямі; фактор R враховує структурні дефекти, які могли б існувати на межі поділу двох шарів.

Модель Бергмана відрізняється від попередньої моделі тим, що вона виходить із лінійного кінетичного рівняння Чамберса для визначення результуючої довжини вільного пробігу, пов'язаної з кожним шаром, а не за допомогою рівняння Больцмана.

Згідно з моделлю Чамберса [31] вектор СДВП $\vec{\lambda}$ у момент часу $t = 0$ визначається як

$$\vec{\lambda} = \int_{-\infty}^0 \langle \vec{v}(t) \rangle dt, \quad (1.143)$$

де середня швидкість за час t відповідає швидкості потоку електронів у момент часу $t = 0$:

$$\langle \vec{v}(t) \rangle = \vec{v}(t) \exp\left(-\int_t^0 \frac{dt'}{\tau(t')}\right). \quad (1.144)$$

Час релаксації $\tau(t)$ для електронів провідності в момент часу t позначається τ_M для металу М і τ_F для металу F. Важливо відзначити, що $\vec{v}(t)$ це швидкість

електронів, які за час τ не зазнали зіткнень. Фізичні параметри, що використовуються під час проведення цього математичного аналізу, докладно були наведені у праці [31].

Згідно з рис. 1.7 електрони задовольняють умову $t_0 = -d / |v_z^M| - |z| / |v_z^F|$ (де індекси М, F відносяться до металів М і F відповідно).

На цьому етапі потрібно зазначити, що Бергман розробив свою модель з метою подальшого вивчення впливу магнітного поля, прикладеного перпендикулярно до площини плівки, на провідність металевої двошарової системи. При розрахунку розмірного ефекту для провідності (а не питомої провідності) необхідно врахувати x і y компоненти вектора довжини вільного пробігу (тобто вектора швидкості електрона). У найбільш загальному випадку швидкість $\vec{v}(t)$, яку набувають електрони провідності під дією електричного поля, визначається як

$$v^*(t) = v_x(t) + jv_y(t) = v_\rho e^{jd} \quad (1.145)$$

при (див. рис. 1.7)

$$v_\rho = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2} = \sin\theta \quad (1.146)$$

та

$$\tan\alpha = v_y / v_x = \tan\phi. \quad (1.147)$$

Враховуючи, що за час t_0 електрони провідності набули швидкість

$$rv_\rho^M \exp\left(j\alpha + \frac{t_0}{\tau_F}\right), \quad (1.148)$$

можна визначити $\langle v^*(t) \rangle = \langle v_x(t) \rangle + j \langle v_y(t) \rangle$, тобто

$$\langle v^*(t) \rangle = \begin{cases} rv_\rho^M \exp \left\{ j\alpha + \frac{t_0}{\tau_F} + \frac{t-t_0}{\tau_M} \right\}, t_d < t < t_0, \\ v_\rho^F \exp \left\{ j\alpha + \frac{t}{\tau_F} \right\}, t_0 < t < 0. \end{cases} \quad (1.149)$$

Складові x і y вектора СДВП $\bar{\lambda}$ можуть бути розраховані як $\lambda^* = \lambda_x + j\lambda_y$, тобто

$$\begin{aligned} \lambda^*(z < 0, v_z < 0) &= \int_{t_0}^0 v_\rho^F \exp \left\{ j\alpha + \frac{t}{\tau_F} \right\} dt + \\ &+ r \int_{td}^{t_0} rv_\rho^M \exp \left\{ j\alpha + \frac{t_0}{\tau_F} + \frac{t-t_0}{\tau_M} \right\} dt = \\ &= l_F^* \left\{ 1 - \exp \left\{ -\frac{|z|}{\tau_F |v_z^F|} \right\} \right\} + \\ &+ rl_M^* \exp \left\{ -\frac{|z|}{\tau_F |v_z^F|} \right\} \left\{ 1 - \exp \left\{ -\frac{d}{\tau_M |v_z^M|} \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (1.150)$$

де

$$l_{F,M}^* = v_{F,M}^* \tau_{F,M} = v_\rho^{F,M} \tau_{F,M} e^{jd}. \quad (1.151)$$

Виконавши подібні дії, отримуємо для трьох інших випадків:

$$\lambda^*(z < 0, v_z < 0) = l_F^*, \quad (1.152)$$

$$\begin{aligned} \lambda^*(z < 0, v_z < 0) &= \\ &= l_F^* \left[1 - \exp \left(\frac{-z}{\tau_M v_z^{rM}} \right) \right] + rl_F^* \exp \left(\frac{-z}{\tau_M v_z^{rM}} \right), \end{aligned} \quad (1.153)$$

$$\lambda^*(z < 0, v_z < 0) = l_M^* \left[1 - \exp \left(\frac{-(d-z)}{\tau_M v_z^{rM}} \right) \right]. \quad (1.154)$$

Провідність σ_\square знаходиться шляхом інтегрування за

поверхнею Фермі від М до F і за координатою z . Наприклад, для металу М маємо

$$\sigma_{\square}^M = \sigma_{\square xy}^M + j\sigma_{\square xy}^M = \frac{e^2}{4\pi^3 K} \int_0^d dz \int_M \lambda^* \sin \theta \cos \phi dS_F \quad (1.155)$$

де dS_F – елемент поверхні Фермі.

Як і у попередніх дослідженнях, інтегрування виконується шляхом введення змінної інтегрування $u = [\cos \theta]^{-1}$.

Згідно з Бергманом у [31] провідність півки F при нанесенні на неї металеві півки М (рис. 1.7) має вигляд

$$\sigma_{\square} = \frac{e^2}{12\pi^3 K} S_F^M \left\{ \lambda_M d - \lambda_M^2 F\left(\frac{d}{\lambda_M}\right) + \frac{1}{2} r \lambda_M \lambda_F F\left(\frac{d}{\lambda_M}\right) \right\} + \frac{e^2}{12\pi^3 K} S_F^F \left\{ \frac{1}{2} r \lambda_M \lambda_F F\left(\frac{d}{\lambda_M}\right) \right\}, \quad (1.156)$$

де $F(S)$ можна порівняти з функцією ФЗ:

$$F(S) = \frac{3}{2} \int_1^{\infty} \left(\frac{1}{u^3} - \frac{1}{u^5} \right) \left[1 - \exp\left(-\frac{S}{u}\right) \right] du.$$

Доданок $\lambda_M d - \lambda_M^2 F(d/\lambda_M)$ відповідає результату, що передбачений теорією ФЗ. Як вказує Бергман, третій доданок описує зміну провідності, пов'язану з електронами провідності, що пройшли через інтерфейс у напрямку від F до М, у той час як четвертий доданок враховує зміну провідності за рахунок електронів провідності, які пройшли через інтерфейс у напрямку від М до F.

1.2.4 Софістичні моделі

Модель ФЗ базується на на таких припущеннях:

1. Поверхня Фермі сферична (як і у моделі квазівільних електронів), тому час релаксації, як і довжину вільного пробігу, можна вважати сталою константою.
2. Коефіцієнт дзеркальності p залежить від енергії електронів і кута підльоту електронів до поверхні.
3. Рівняння Больцмана для випадку, коли враховується тільки параметр p , дозволяє описати процес поверхневого розсіювання. Проте це припущення не враховує інші види поверхневого розсіювання й особливо ті, які, як показав Грін [32; 33], пов'язані із розсіюванням на нерівностях поверхні кристала.

Деякі автори запропонували ряд софістичних моделей для вирішення проблеми поверхневого розсіювання для випадку, коли жодне з наведених вище припущень не виконується. Саме Гам і Матіс [34] розглядають випадок, коли поверхня Фермі сфероїдна, в той час як Прайс [35] і пізніше Парротт [36] розглядають питання про еліпсоїдну поверхню Фермі. У цьому підпункті подані основні положення досліджень Парротта, оскільки вони поширюються на зазначені вище праці.

В основі даних моделей лежить, як правило, складне рівняння, яке дає можливість легко інтерпретувати експериментальні дані. Цей підпункт обмежується поданням основних положень даних теоретичних робіт і коротким обговоренням нових формулювань.

Підхід Парротта базується на еліпсоїдній поверхні Фермі, яка може бути визначена як

$$\varepsilon_p = \frac{k^2}{2m} \vec{k} \cdot \alpha_p \cdot \vec{k}, \quad (1.157)$$

де α_p – еквівалентне відношенню ефективної маси.

Межа поверхні згідно з [36] може бути описана як

$$\vec{u} \cdot \vec{r} = \pm d / 2, \quad (1.158)$$

де \vec{r} – вектор положення, а \vec{i} одиничний вектор, перпендикулярний до межі поверхні.

Рівняння Больцмана подане у вигляді співвідношення (1.21), де нерівноважний параметр F^{-1} визначається із рівняння відхилення (1.18).

Оригінальність моделі Паротта полягає в тому, що від деформує поверхню Фермі шляхом перетворення її до сфери і в той же час об'єм фазового простору залишається сталим при деформації. З цією метою Паротт вводить параметр A_p у вигляді

$$\dot{a}_p = \dot{A}_p \cdot \dot{A}_p. \quad (1.159)$$

Таким чином поверхня Фермі трансформується до сферичної поверхні

$$\varepsilon_p = \frac{k^2}{2m} (\vec{k}_p)^2 \text{ при } \vec{k}_p = \dot{A}_p \cdot \vec{k}. \quad (1.160)$$

Електричне поле \vec{E} , швидкість \vec{v} та вектор положення \vec{r} у стандартному просторі замінюються відповідно до перетворення

$$\vec{E}_p = \dot{A}_p \cdot \vec{E}, \quad (1.161)$$

$$\vec{v}_p = \dot{A}_p^{-1} \cdot \vec{v}, \quad (1.162)$$

$$\vec{r}_p = \dot{A}_p^{-1} \cdot \vec{r}. \quad (1.163)$$

Перетворення полягає у тому, що межі поверхонь задовольняють планарність, і у разі, якщо \vec{i} – одиничний вектор, перпендикулярний до поверхні, що деформується, маємо

$$\vec{i}' \cdot \vec{r}_p = \pm d' / 2 \quad (1.164)$$

при
$$d' = d / (\bar{u} \dot{\alpha}_p \bar{u})^{1/2} = d / \dot{\alpha}_{zz} \quad (1.165)$$

для стандартної геометрії вимірювань.

Перетворення стандартного рівняння Больцмана у систему координат (\bar{v}_p, \bar{r}_p) шляхом заміни електричного поля \vec{E} , швидкості \bar{v} і вектора положення \bar{r} відповідно на вектори деформації \vec{E}_p , \bar{v}_p , \bar{r}_p у рівнянні (1.80). Подібна дія необхідна для того, що виразити граничні умови у деформованих координатах (співвідношення 1.39, 1.40). Особливу увагу необхідно приділити при заміні товщини d на товщину d' . Після деяких математичних перетворень можна показати, що у деформованих координатах (\bar{v}_p, \bar{r}_p) питома провідність набуває форми

$$\sigma_1 \square + (\sigma_z - \sigma_1) \bar{u}' \cdot \bar{u}', \quad (1.166)$$

де σ_1 і σ_z виводять із zdeформованого рівняння Больцмана, в той час як експериментальні координати (\bar{r}, \bar{K}) питомої провідності можуть бути визначені із співвідношення

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{[\det \dot{\alpha}]^{1/2}} \left\{ \sigma_{1ij} \dot{\alpha}_{ij} + (\sigma_z - \sigma_1) \frac{\dot{\alpha}_{iz} \dot{\alpha}_{zj}}{\dot{\alpha}_{zz}} \right\}. \quad (1.167)$$

Величина σ_1 , яка є функцією деформованої координати положення r_{pz} , подібна до звичайного співвідношення ФЗ

$$\sigma_1(r_{pz}) = -2e^2 \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int_{u_z > 0} \frac{\partial F^0}{\partial \varepsilon} v_p^2 \times \left\{ \frac{(1-p) \exp\left(-\frac{d'}{2\tau v_{pz}}\right) \cosh\left(\frac{y_3}{\tau v_{pz}}\right)}{1 - p \exp\left(-\frac{d'}{2\tau v_{pz}}\right)} \right\} dv_p, \quad (1.168)$$

у той час як функція відхилення можна записати як

$$F_1 = -\vec{v}_p \cdot \vec{X} \frac{\partial F^0}{\partial \varepsilon}$$

Граничні умови для σ_z можна визначити із

$$\sigma_z(y_3) = -2e^2 \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int_{u_z > 0} \tau \frac{\partial F^0}{\partial \varepsilon} v_{pz}^2 \times \left\{ \frac{(1+p) \exp\left(-\frac{d'}{2\tau v_{pz}}\right) \cosh\left(\frac{y_z}{\tau v_{pz}}\right)}{1 + p \exp\left(-\frac{d'}{2\tau v_{pz}}\right)} \right\} dv_p. \quad (1.169)$$

Середнє значення можна подати як

$$\sigma_1 = \sigma_0 \left[1 - \frac{3}{2k_z} \int_0^{\pi/2} \frac{(1-p) \{1 - \exp(-k_z / \cos \theta)\}}{1 + p \exp(-k_z / \cos \theta)} \right] \sin^3 \theta \cos \theta d\theta \quad (1.170)$$

і

$$\sigma_2 = \sigma_0 \left[1 - \frac{3}{k_z} \int_0^{\pi/2} \frac{(1+p) \{1 - \exp(-k_z / \cos \theta)\}}{1 + p \exp(-k_z / \cos \theta)} \right] \cos^3 \theta \sin \theta d\theta. \quad (1.171)$$

Звідси, вважає Паротт, довжина вільного пробігу електронів у деформованих координатах є константою і залишається незмінною, тобто

$$k_z = \frac{d'}{\lambda_0} = \frac{d}{\lambda_0} \left(\frac{u}{2 \dot{a}_{zz} \varepsilon_F} \right)^{1/2}, \quad (1.172)$$

де θ – кут між векторами \vec{v}_p і \vec{u}' у деформованих координатах.

На перший погляд здається, що розглядаючи довжину вільного пробігу λ_0 як сталу в деформованих координатах – це надспрощення, яке так само вагоме, як припущення ізотропності довжини вільного пробігу електронів у моделі ФЗ. Співвідношення (1.172) визначає, що різниця між деформаційним зменшенням товщини k_z і стандартною зведеною товщиною k повністю зумовлена різницею між параметрами d' і d .

Наступний етап аналізу Паротта полягає у тому, що коефіцієнт дзеркальності p подається у вигляді функції деформованого коефіцієнта $\cos\theta$. Не важливо, що величина p істотно залежить від зміни хвильового вектора $\delta\vec{K}' = \vec{K}' - \vec{K}$ електрона при його дзеркальному відбитті від поверхні. Припускаючи, що розсіювання є пружним, Паротт показав, що

$$\delta K = \frac{2m v_z}{\dot{\alpha}_{zz} K}. \quad (1.173)$$

Для електронів на поверхні Фермі

$$\delta K = \cos\theta \left(\frac{8m\varepsilon_F}{\dot{\alpha}_{zz} K^2} \right). \quad (1.174)$$

Використовуючи найпростіше означення залежності p від δK , тобто при $p = 1$ δK менше, ніж K_0 ($\cos\theta > \cos\theta_0$), при $p = 0$ δK більше ніж K_0 ($\cos\theta < \cos\theta_0$), виконується інтегрування по θ . Використовуючи програмне забезпечення, Парротт провів порівняння теоретичних розрахунків на основі даної моделі з теорією ФЗ, припускаючи, що для великих товщин $(1 - \cos^2 \theta_0)^2 = 1 - p$, де p набуває значення коефіцієнта дзеркальності у моделі ФЗ. Порівняльний аналіз показав, що питома провідність плівок не зменшується безперервно з товщиною плівки (як і в моделі ФЗ), але прямує до граничного значення. Крім того, для металу з еліпсоїдною поверхнею Фермі питома провідність буде зменшуватися навіть у випадку повного дзеркального відбиття, тобто

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_0}{\left[\det \dot{\alpha}\right]^{1/2}} \left\{ \dot{\alpha}_{ij} - \frac{\dot{\alpha}_{i3} \dot{\alpha}_{3j}}{\dot{\alpha}_{zz}} \frac{6}{k_z} \times \right. \quad (1.175)$$

$$\left. \times \int \tan h\left(\frac{k_z}{2 \cos \theta}\right) \cos^3 \theta \sin \theta d\theta \right\}, \cos \theta = 1,$$

що добре узгоджується з результатами Прайса [35].

Необхідно зазначити, що при повному дзеркальному розсіюванні Парротт для зручності прийняв, що $\cos\theta_0 = 1$. Це гарантує те, що незалежно від методу розрахунку ($p = \text{const}$, виконується умова $p = 1$ при $\cos\theta < \cos\theta_0$), співвідношення для питомої провідності σ_{ij} зводиться до (1.175). Більше того, умова $\cos\theta \approx 1$ означає, що у zdeформованих координатах практично всі електрони падають нормально на поверхню.

Парротт, як правило, приймає, за аналогією до відбиття світла від поверхні розсіювання, що $2\pi/K_0$ – величина

подібна до шорсткості поверхні. Порівняння його теорії з експериментальними даними проводилося при шорсткості поверхні, близькій до 5000 Å для напівпровідників, для яких можна було б очікувати величину $\cos\theta_0$, близьку до одиниці. Для визначення коефіцієнта дзеркальності у металевих плівках модель Парротта вимагає того, щоб величина шорсткості поверхні залишалася меншою 5 Å. Тоді ймовірність дзеркального відбиття суттєво зменшується для металевих плівок, що суперечить деяким експериментальним результатам, які свідчать про дзеркальне відбиття від поверхні металевих плівок.

Чдгаонкар і Тіллу [37] порівняли свої експериментальні дані з теоретичними розрахунками на основі моделей ФЗ [6], Лукаса [16] і Соффера [29] (див. підпункт 1.2.5, де для останньої моделі відсутня кореляція між шорсткостями зовнішніх поверхонь, яка передбачається Чдгаонкаром і Тіллу) та з кутовою залежністю Парротта, згідно з якою явний вигляд кутової залежності коефіцієнта дзеркальності може бути поданий як

$$p(\theta) = \exp\left\{-\frac{\pi \cos\theta_0}{2 \cos\theta}\right\}. \quad (1.176)$$

Іншими словами, якщо співвідношення (1.176) набуває мінімальне значення, то коефіцієнт дзеркальності дорівнює 0,2 замість 0. Проте жодні теоретичні викладки не підтверджують правильність цього співвідношення.

Грін [32, 33] отримав граничні умови для електронів, відбитих від поверхні, які відрізняються від відомих граничних умов в рамках моделі ФЗ. Перед тим, як стисло описати модель Гріна, нагадаємо, що Грін використав індекси «-» і «+» для частинок, що наближаються і залишають поверхню відповідно; згідно з цими позначеннями кутові координати для електрона, що залишає поверхню, мають вигляд (θ_+, ϕ_+) . Для того щоб

виразити граничні умови процесу поверхневого розсіювання, Грін виходить із таких положень [32]:

1. Електрони, що підлітають до поверхні у напрямі (θ_-, ϕ_-) , залишають її без зміни напрямку $(d\theta_+, d\phi_+)$ з імовірністю $P(-/+)$ $d\theta_+ d\phi_+$.

2. Необхідно виразити закон збереження електронного потоку, враховуючи, що за одиницю часу $v \cdot \cos\theta \cdot F(\theta_+, \phi_+)$ електрони залишають поверхню у напрямі (θ_+, ϕ_+) , тобто

$$\cos\theta_+ F(\theta_+, \phi_+) = \int_{-1}^0 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi (-\cos\theta_- F(\theta_-, \phi_-)) \cdot P\left(\frac{-}{+}\right). \quad (1.177)$$

3. Імовірність $P(-/+)$ може бути зрозуміла як імовірність розсіювання $P(-/+)$ і імовірність P_0 , пов'язана з кінетичним розсіюванням, яка, згідно з Гріном [32], є імовірністю того, що електрони залишають поверхню у напрямі (θ_+, ϕ_+) відбившись від «напрямку зображення», що визначається як $(-\cos\theta_+, \phi_+)$. Кінетичне розсіювання – це ймовірність дзеркального відбиття, фізичний зміст якого відповідає коефіцієнту дзеркальності p , визначеному в рамках моделі ФЗ.

Порівнюючи граничні умови моделі ФЗ з поданими новими граничними умовами, Грін отримав співвідношення [32]

$$p(\theta_+, \phi_-) = \left[1 + F^o P_S^*\right]^{-1} \times \left[1 - (1 - P_0) \left\langle 1 - \cos \Delta\phi \left(\frac{1 - \cos^2 \theta_-}{1 - \cos^2 \theta}\right)^{1/2} \right\rangle\right] \quad (1.178)$$

при

$$\Delta\phi = \phi_- + \phi_+, \quad (1.179)$$

$$P_S^*(\theta_+, \phi_+) = \int_{-1}^0 d(\cos\theta_-) \int_0^{2\pi} d\phi_- \left\{ -\frac{\cos\theta_-}{\cos\theta_+} P_S\left(\frac{-}{+}\right) \right\}, \quad (1.180)$$

яке показує, що різниця виникає за рахунок доданка $(1 - \cos \Delta \phi (\dots))$.

Грін та О'Донал [33] застосували цю модель для випадку розсіювання електронів провідності на N локалізованих поверхневих зарядах. Проблема в даному випадку полягає у визначенні диференціальної ймовірності розсіювання PS. Для спрощення буде подано лише узагальнення, зроблене цими авторами для одержання співвідношення (більш детально метод описаний у праці Гріна та О'Доннелла [33]).

1. Кристалічна поверхня може бути подана у вигляді нескінченно високого плоского потенціального бар'єра.

2. Потенціал поверхневого заряду може бути визначений через кулонівську форму потенціалу, тобто

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{\bar{\epsilon}_0 r} \exp(-q_0 r), \quad (1.181)$$

де $\bar{\epsilon}_0$ можна розглядати як діелектричну константу.

Квантові розрахунки значно ускладнюють вираз для ймовірності PS. Обмежуючи свій аналіз статистикою невідродженого електронного газу, автори показали, що коефіцієнт дзеркальності p і кінетична дзеркальність P_0 пов'язані з ймовірністю PS у чіткій інтегральній формі. У випадках нормального падіння пучка та при його ковзанні на поверхні коефіцієнти p і P_0 набирають вигляду

$$P_0 \Big|_{\cos \theta_+ \rightarrow 1} \approx 1 - N a^{\cdot 2} s \left[\frac{2}{a^{\cdot 2} (2 + a^{\cdot 2})} - \frac{1}{1 + a^{\cdot 2}} \ln \frac{2 + a^{\cdot 2}}{a^{\cdot 2}} \right], \quad (1.182)$$

$$p \Big|_{\cos \theta_+ \rightarrow 1} \approx 1 - N \dot{\alpha}^2 \dot{s} \left[\frac{-4 - 3\dot{\alpha}^2}{(1 + \dot{\alpha}^2)(2 + \dot{\alpha}^2)} + \right. \quad (1.183)$$

$$\left. + \frac{3}{2} - \frac{\frac{1}{2} + \dot{\alpha}^2}{(1 + \dot{\alpha}^2)} \right] \ln \frac{2 + \dot{\alpha}^2}{\dot{\alpha}^2},$$

$$p \Big|_{\cos \theta_+ \rightarrow 0} \approx 1 - N \dot{\alpha}^2 \dot{s} \cos \theta_+ \left[\frac{4}{3} \dot{\alpha}^4 (2 + \dot{\alpha}^2)^2 \right], \quad (1.184)$$

$$p \Big|_{\cos \theta_+ \rightarrow 0} \approx 1 - N \dot{\alpha}^2 \dot{s} \cos \theta_+ \left[\frac{\frac{8}{3} \dot{\alpha}^2 + 6\dot{\alpha}^4}{\dot{\alpha}^2 (2 + \dot{\alpha}^2)^2} - \ln \frac{2 + \dot{\alpha}^2}{\dot{\alpha}^2} \right] \quad (1.185)$$

при $\dot{\alpha}^2 = q_0^2 / 2K^2$ (1.186)

та $\dot{\alpha}^2 \dot{s} = 2\pi \left[m e^2 / K^2 K^2 \bar{\varepsilon}_0 \right]^2$. (1.187)

Згідно даних формул для напівпровідників, для яких $\dot{\alpha}^2 \ll 1$ кутова залежність коефіцієнтів p і P_0 така, що коефіцієнт p залишається набагато ближче до одиниці, ніж коефіцієнт P_0 .

1.2.5 Урахування шорсткості поверхні

У попередньому пункті були подані декілька моделей, що базуються на кутовій залежності коефіцієнта дзеркальності. У моделях Паротта [38], як і в праці

Брандлі та Котті [38], сталий коефіцієнт дзеркальності із моделі ФЗ був замінений на коефіцієнт дзеркальності p , що дорівнює одиниці, якщо коли кут відбиття більший, за критичний кут θ_0 , і дорівнює нулю, якщо кут відбиття менший за критичний кут θ_0 . Крім того, необхідно мати на увазі, що модель Парротта не повністю присвячена вивченню впливу структури поверхні на дзеркальність, а більше вивченню ефекту впливу несферичної поверхні Фермі на величину питомої провідності плівки. Введення критичного кута θ_0 , пов'язаного з деформаційними у просторі координатами, було здійснене Парротом довільним чином, а не на основі теоретичних досліджень шорсткості поверхні. Цей пункт присвячений більш простим і більш фізичним моделям, що враховують шорсткість поверхні плівки, розроблені Займаном [1], Соффером [29] і Намбою [39]. Найпростіша модель для визначення впливу геометричної шорсткості поверхні на питому провідність плівки запропонував Намба [29].

На відміну від формулювань Займана і Соффера, які базуються на оптичних параметрах, у моделі Намби задається лише геометрична форма поверхні й не враховується теоретичне означення коефіцієнта дзеркальності p .

Беручи до уваги, що форма поверхні визначається поперечним перерізом тонкої плівки (рис. 1.8), Намба [39] розрахував питомий опір у тонких плівках, урахувавши, що незначні нерівності на поверхні будуть характеризуватися зміною коефіцієнта дзеркальності ФЗ, тоді як значні нерівності поверхні визначатимуться як локальні зміни товщини плівки.

Намба припустив, що товщина плівки може бути подана як

$$d(r) = \bar{d} + d' \sin k_N x \quad (1.188)$$

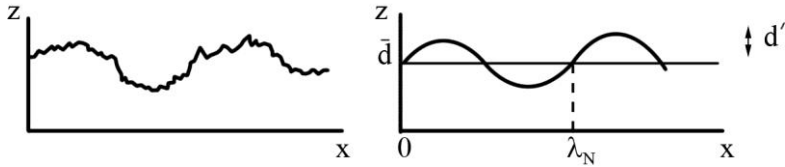


Рисунок 1.8 – Геометрична модель поперечного перерізу плівки, запропонована Намбою у [39]: а – профіль плівки, б – спрощена модель

при
$$k_N = 2\pi/\lambda_N, \quad (1.189)$$

де λ_N – довжина нерівності поверхні (рис. 1.8); нехтуючи розмірним ефектом, опір плівки R_s залежно від довжини λ_N можна подати як

$$R_s = \int_0^{\lambda_N} \frac{\rho(d)}{d(x)w} dx, \quad (1.190)$$

де w – ширина плівки. Середню величину питомого опору $\bar{\rho}$ може бути знайдено із співвідношення

$$R_s = \frac{\bar{\rho}\lambda_N}{wd}. \quad (1.191)$$

Звідси

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{d}}{l} \int_0^l \rho \left\{ \frac{\bar{d} + d' \sin k_N x}{\bar{d} + d' \sin k_N x} \right\} dx. \quad (1.192)$$

Необхідно пам'ятати, що згідно з Лукасом [16] відношення питомого опору масивних зразків до питомого опору плівки товщиною d визначається співвідношенням (1.52), де коефіцієнт відбиття електронів від зовнішніх поверхонь змінюється. У такому разі середня величина питомого опору, подана у вигляді (1.185), може бути

визначена простою підстановкою у співвідношення (1.52) товщини плівки у вигляді (1.188). Тоді отримуємо

$$\frac{\bar{\rho}}{\rho_0} = \frac{\bar{k}}{\lambda_N \rho_0} \int_0^{\ell} \frac{dx}{\bar{k} + \frac{d'}{\lambda_0} \sin k_N x} \left\{ 1 - \frac{3}{4k} \int_0^1 \left(\frac{1}{u^3} - \frac{1}{u^5} \right) \times \right. \quad (1.193)$$

$$\left. \times \frac{1 - \exp(-ku)}{1 - pq \exp(-2ku)} [2 - p - q + (p + q - 2pq) \exp(-ku)] du \right\}^{-1}$$

при $k = \lambda_0^{-1} \cdot [\bar{d} + d' \sin k_N x],$ (1.194)

$$\bar{k} = \lambda_0^{-1} \cdot \bar{d}. \quad (1.195)$$

Чисельна оцінка на основі рівняння (1.193) містить у собі використання додаткового програмного забезпечення. Інтегрування для випадку повного дифузного розсіяння для різних співвідношень між величинами шорсткості й СДВП d' / λ_0 показало, що при зменшенні шорсткості \bar{d} відношення $\bar{\rho} / \rho_0$ швидше прямує до нескінченності, ніж передбачено у моделі ФЗ. Крім того, у випадку частково дзеркального розсіяння електронів на зовнішніх поверхнях відношення $\bar{\rho} / \rho_0$ також прямує до нескінченності при зменшеній зведеній товщині $\bar{k} \approx d' / \lambda_0$, що не залежить від величини коефіцієнта дзеркальності p . Такий результат не є несподіваним, оскільки величина d' / λ_0 дорівнює або більша за величину \bar{d} / λ_0 для випадку несучільної плівки. Таким чином, залишається відкритим питання, чи можна використовувати модель ФЗ у даному випадку.

У цьому підпункті аналізуються моделі, в яких, за аналогією з оптикою, розглядається можливість одержання математично точного виразу для коефіцієнта дзеркальності p . Це той випадок моделі Займана [1], що базується на оптичних параметрах. Автор вважає, що

оскільки площина, у якій поширюється хвиля довжиною λ_c , пов'язана з носієм, то відбита хвиля буде поширюватися по поверхні із випередження або із затримкою за фазою залежно від висоти $z(x)$ поверхні вздовж напрямку x . Якщо взяти середню площину відліку (рис. 1.9), то різниця фаз падаючих хвиль визначатиметься як

$$\phi(x) = 4\pi z(x) / \lambda_c. \quad (1.196)$$

Дифракційна картина при нормальному падінні плоскої хвилі характеризується структурою поверхні плівки й особливо автокореляційної функції поверхні, яка визначає різницю фаз двох хвиль, відбитих у точках, що лежать на відстані x одна від одної. Якщо припустити, що ймовірність розподілу висоти нерівностей $P(z)$ матиме гаусівський характер, то

$$P(z) = \frac{1}{(2\pi \overline{z^2})^{1/2}} \exp\left\{-\frac{z^2}{2\overline{z^2}}\right\}, \quad (1.197)$$

де $\overline{z^2}$ – середньоквадратичне відхилення за висотою z від опорної площини (у подальшому будемо називати $\overline{z^2}$ шорсткістю поверхні) і характеризує дисперсію ϕ як

$$\langle \overline{\phi^2} \rangle = \frac{16\pi^2}{\lambda_c^2} \overline{z^2}. \quad (1.198)$$

Припускаючи також, що функція автокореляції поверхні $P(z)$ є гаусівською

$$r_z(x) = \exp(-x^2 / x_0^2), \quad (1.199)$$

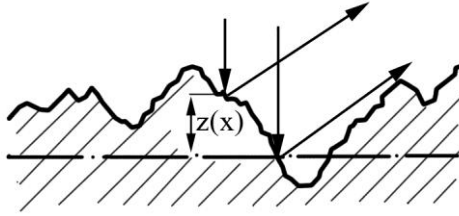


Рисунок 1.9 – Модель урахування шорсткості поверхні Займана [1] автокореляції поверхні, що визначає різницю двох фаз падаючих хвиль

де довжина автокореляції x_0 – це міра поверхневого рельєфу.

Розрахунок у цих умовах кутового спектра потужності хвиль, відбитих під кутом δ , визначається як

$$|P(\theta_r)|^2 \propto \int dx r_z(x) \exp\left(-2\pi j \sin \theta_r \frac{x}{\lambda_c}\right), \quad (1.200)$$

що перетворюється до виду

$$|P(\theta_r)|^2 \propto \exp(-\pi\bar{\phi}^2) \delta(\sin \theta_r) + 1(1 - \exp(-\pi\bar{\phi}^2)) \cdot \frac{x_0}{\lambda_c \sqrt{\pi\bar{\phi}^2}} \cdot \exp\left(-\frac{x_0^2}{\lambda_c^2 \bar{\phi}^2} (\sin \theta_r)^2\right), \quad (1.201)$$

де, у першому наближенні до коефіцієнта дзеркальності застосовується δ – розподіл Дірака. Отже, дифузійна складова кутового спектру потужності розсіювання електронів визначається як

$$P_{diff}(\theta_r) \propto \exp\left(-\frac{x_0^2}{16\pi^2 z^2} \sin^2 \theta_r\right). \quad (1.202)$$

Таким чином, коефіцієнт дзеркальності може бути визначений як

$$p = \exp(-\pi\phi^{-2}) = \exp\left(-\frac{16\pi^3 \bar{z}^2}{\lambda_c^2}\right). \quad (1.203)$$

Для малих значень λ_c , по відношенню до величини шорсткості, відбиття буде, по суті, дифузним. Більше того, при $\lambda_c^2 \approx \bar{z}^2$ коефіцієнт дзеркальності – це функція, що досить швидко змінюється згідно з одним з висновків моделі Парротта.

Модель Соффера [29] є розширенням моделі Займана. Зокрема, містить у собі більш загальні випадки падіння носіїв струму під кутом до поверхні й зміну функції автокореляції поверхні для того, щоб узяти до уваги деякі істотні фізичні вимоги, такі як збереження загального потоку після відбиття у даній частині поверхні. За цих умов припущення моделі Соффера зводяться до такого:

1. Спектр майже монохроматичний із середньою довжиною хвилі λ_c ; це дозволяє використовувати наближення дальнього поля, справедливе для металевих плівок.

2. Зміни у спектрі потужності розсіювання можна віднести лише до шорсткості поверхні.

Соффер [29] застосував найпростішу поверхневу модель. Як і в моделі Займана, висота z має гаусівську ймовірність розподілу (1.197), у той час як функція автокореляції поверхні вважається двовимірною функцією, тобто

$$r_z(x_1, x_2) = \exp\left\{-\frac{(x_1^2 + x_2^2)}{x_0^2}\right\}. \quad (1.204)$$

Визначивши напрями векторів падаючої і відбитої хвиль відповідно як $\Omega_i = (\theta_i, \phi_i)$ і $\Omega_r = (\theta_r, \phi_r)$ (рис. 1.10),

маємо для середнього квадрата амплітуди розсіяної хвилі вигляд:

$$\langle |p(\Omega_i, \Omega_r)| \rangle^2 \square \int dx_1 \int dx_2 r_f(x_1, x_2) \exp[-j(a_s x_1 + b_s x_2)], \quad (1.205)$$

де

$$a_s(\Omega_i, \Omega_r) = 2\pi(\sin\theta_i \cos\phi_i - \sin\theta_r \cos\phi_r) \lambda_c^{-1}, \quad (1.206)$$

$$b_s(\Omega_i, \Omega_r) = 2\pi(\sin\theta_i \cos\phi_i - \sin\theta_r \cos\phi_r) \lambda_c^{-1}. \quad (1.207)$$

У рівнянні (1.205) r_f – функція автокореляції для амплітуди розсіяної хвилі в точці $(x, y, z_3 = \cos\theta_s + \cos\theta_r)$, яка, з точки зору аналізу Займана [1], пов'язана з функцією автокореляції (1.204) співвідношенням

$$r_f(x_1, x_2) = \exp\left\{-\left(\frac{2\pi x_0}{\lambda_c} z_3\right)^2 [1 - r_z(x_1, x_2)]\right\}. \quad (1.208)$$

Після деяких математичних перетворень отримуємо

$$\begin{aligned} &\langle |p(\Omega_i, \Omega_r)| \rangle^2 \square 4\pi^2 \left\{ \exp(-z_3^2 \bar{\phi}^2) \delta(a_s) \delta(b_s) + \right. \\ &\left. + \frac{x_0^2}{4\pi} \exp(-z_3^2 \bar{\phi}^2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2\bar{\phi}^2)^n}{n! n} \exp\left[-\left(\frac{x_0^2}{4n}\right)(a_s^2 + b_s^2)\right] \right\}, \quad (1.209) \end{aligned}$$

де

$$\phi(x, y) = 2\pi z(x, y) \lambda_c^{-1}. \quad (1.210)$$

Рівняння (1.210) може бути переписане у вигляді

$$\langle |p(\Omega_i, \Omega_r)| \rangle^2 \square 4\pi^2 \left[\begin{array}{c} p(\theta_i, \theta_r) \delta(a_s) \delta(b_s) + \\ + P_{diff}(\Omega_i, \Omega_r) \end{array} \right], \quad (1.211)$$

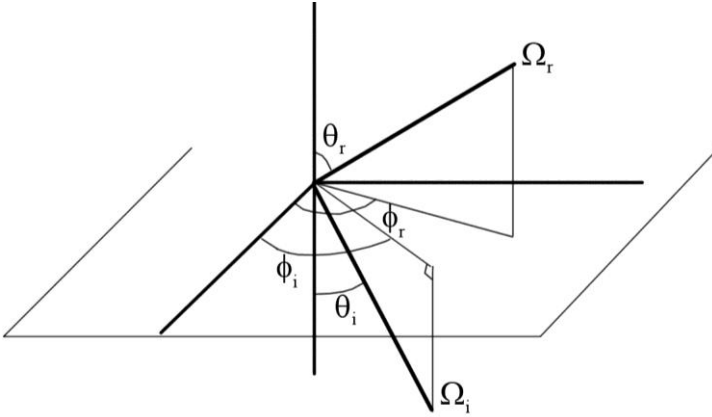


Рисунок 1.10 – Геометрія моделі Соффера

де ми визначаємо дифузну складову $P_{diff}(\Omega_i, \Omega_r)$ потужності розсіювання і $p(\theta_i, \theta_r)$ як коефіцієнт дзеркальності, який визначаємо як

$$p(\theta_i, \theta_r) = \exp(-z_3^2 \bar{\phi}^2). \quad (1.212)$$

Другий етап аналізу Соффера пов'язаний з фізичною вимогою збереження потоку, який може дозволити визначити коефіцієнти пропорційності у рівняннях (1.208) і (1.209), а саме величину загального потоку, що виходить з даної точки поверхні $|P|^2$, повинна дорівнювати потоку з густиною $|P_i|^2$ у тій самій точці, тобто

$$\int d\Omega'_i |p_i(\Omega_i, \Omega'_i)|^2 = \int d\Omega_i |p(\Omega_i, \Omega_r)|^2, \quad (1.213)$$

де Ω'_i – тілесний кут $\Omega_i \equiv (\theta_i, \phi'_i)$.

Необхідно зауважити, що для падаючого потоку

$$|p_i(\Omega_i, \Omega'_i)|^2 = \delta(\omega_1) \delta(\omega_2), \quad (1.214)$$

де ω_1 і ω_2 – визначені відповідно з $\omega_1 \equiv a_s(\Omega_i, \Omega'_i)$ і $\omega_2 \equiv b_s(\Omega_i, \Omega'_i)$.

Труднощі виникають під час отримання співвідношення для збереження потоку, коли передбачається, що середня густина потоку (рівняння (1.209)) пропорційна енергетичній густині потоку, оскільки гіпотетичне збереження потоку і кутової залежності коефіцієнта дзеркальності може бути перевірене одночасно у разі відсутності кореляції ($x_0 = 0$). Тому Соффер [29] вирішив проблему збереження потоку шляхом множення тільки дифузної частини рівняння (1.211) на коефіцієнт пропорційності $B(\Omega_i)$:

$$|p_i(\Omega_i, \Omega'_i)|^2 = p(\theta_i, \theta) \delta(a_s) \delta(b_s) + B(\Omega_i) P_{diff}(\Omega_i, \Omega_r). \quad (1.215)$$

Тоді отримуємо вираз для збереження потоку у вигляді

$$B(\Omega_i) = \varepsilon(\Omega_i) \frac{[1 - p_s(\theta_i)]}{P_{diff}(\Omega_i)}, \quad (1.216)$$

де

$$\varepsilon(\Omega_i) = \int d\Omega \delta(a_s) \delta(b_s) = \left(\frac{\lambda_c}{2\pi} \right) \sec \theta_i, \quad (1.217)$$

$$p_s(\theta_i) = p(\theta_i, \theta_i) = \exp(-4 \langle \phi^2 \rangle \cos^2 \theta_i), \quad (1.218)$$

$$P_{diff}(\Omega_i) = \int d\Omega P_{diff}(\Omega_i, \Omega). \quad (1.219)$$

Для застосування моделі у граничних випадках для внеску електронів у функцію розподілу Соффера необхідно використовувати більш загальні граничні умови:

$$F_1^+(\vec{v}, z) = \int d\Omega_i P(\Omega_i, \Omega_r) F_1^-(\vec{v}, z), \quad (1.220)$$

де ймовірність проходження за одиницю тілесного кута від Ω_i до Ω_r взята як

$$P(\Omega_i, \Omega_r) = \frac{1}{\varepsilon(\Omega_i)} \left\{ \frac{p(\theta_i, \theta) \delta(a_s) \delta(a_s) + \varepsilon(\Omega_i) \times}{\times \left[\frac{1 - p_s(\theta_i)}{P_{diff}(\Omega_i, \Omega_r)} \right]} \right\}. \quad (1.121)$$

Ця гранична умова дає лише деякі відносно прості розв'язки в деяких простих випадках:

1. Випадок відсутності кореляції, який призводить до виникнення розмірного ефекту питомого опору подібно до співвідношення ФЗ, крім того, що сталий параметр ФЗ, p , замінюється на

$$p_s(\cos \theta_i) = \exp \left\{ - \left(\frac{4\pi x_0}{\lambda_c} \right)^2 \cos^2 \theta_i \right\}. \quad (1.122)$$

Зауважимо, що коефіцієнт дзеркальності визначався Соффером для випадку, який відрізнявся від отриманого Зиманом (співвідношення (1.196)) на множник π .

2. Випадок нескінченної кореляції ($x_c \rightarrow \infty$), для якого розмірний ефект питомого опору плівки не проявляється.

Крім того, ми відзначаємо, що для збільшення розміру кореляції кінцева модель Софера передбачає, що дифузна частина прямує до піку більш різко порівняно із дзеркальною складовою, на відміну від припущення ФЗ про ізотропність. Таким чином, після розсіювання на зовнішній поверхні навіть дифузна частина робить свій внесок у загальну величину струму.

Відзначимо також, що за відсутності кореляції рівняння (1.222) узгоджується з деякими теоретичними прогнозами моделі Паротта, а саме $p_s(\theta)$ швидко змінюється від 1 до 0, якщо шорсткість прямує до x_0 , і потім перевищує довжину хвилі де Бройля λ_c .

Морага і Вілче [40] запропонували модель «шарів», присвячену вивченню неоднорідних тонких металевих плівок. Аргументи, висунуті цими авторами, полягають у

тому, що час релаксації у забруднених плівках сильно залежатиме від локальної концентрації дефектів, а тому буде змінюватися лише залежно від товщини (тобто залежати від z -компоненти). Можна узагальнити деякі моменти їхніх досліджень:

1. Спочатку зауважимо, що для оцінки провідності плівки інтегрування відомих функцій ФЗ (див., наприклад, рівняння 1.32 і 1.34) може бути здійснена за z перед інтегруванням за полярними координатам (v , θ , ϕ). Морага і Вілче припустили, що для тонких плівок, що описуються одним часом релаксації τ , питома електропровідність може бути записана як

$$\sigma_f = -\frac{2e^2}{m} \left(\frac{m}{h}\right)^3 \iiint \tau v_x \frac{\delta F^0}{\delta v_x} \bar{f}_M(v_z) d^3v, \quad (1.223)$$

де $\bar{f}_M(v_z)$ – середнє значення функції $f_M(v_z, z)$,

$$\bar{f}_M(v_z) = \frac{1}{d} \int_0^d f_M(v_z, z) dz, \quad (1.224)$$

яка виводиться з відхилення F^1 розподілу електронів

$$F^1 = \frac{\tau e E}{m} \frac{\delta F^0}{\delta v_x} f_M(v_z, z). \quad (1.125)$$

Оцінка рівняння (1.223) за припущення сферичної поверхні Фермі дозволяє знайти питому провідність у подібному до відомого відношення ФЗ вигляді.

2. Звідси Морага і Вілче [40] стверджують, що час релаксації τ є лише функцією від p . Ураховуючи рівняння Больцмана

$$v_z \cdot \frac{\delta F^1}{\delta z} + \frac{F^1}{\tau(z)} = \frac{eE}{m} \frac{\delta F^0}{\delta v_x} \quad (1.226)$$

і після розкладання у ряд Лагранжа інтегрування дає

$$F^1 = \frac{eE}{m} \frac{\delta F^0}{\delta v_x} \cdot \dot{g}_M \quad (1.227)$$

при

$$\dot{g}_M = \bar{\tau} \left\{ \exp \left(-\frac{d \cdot A_M(z)}{\bar{v}_z} \right) \right\} \left\{ (C_M(z, v_z) + B_M(v_z)) \right\}, \quad (1.228)$$

де $\bar{\tau}$ – просторовий середній час релаксації :

$$\bar{\tau} = \frac{1}{d} \cdot \int_0^d \tau(z) dz, \quad (1.229)$$

$$A_M(z) = \frac{\bar{\tau}}{d} \int_0^z \frac{dz'}{\tau(z')}, \quad (1.230)$$

$$C_M(z, v_z) = \frac{1}{\bar{v}_z} \int_0^z \exp \left(-\frac{d \cdot A_M(z')}{\bar{v}_z} \right) dz'. \quad (1.231)$$

Функція $B_M(v_z)$ у рівнянні (1.228) визначає граничні умови у вигляді

$$B_M(v_z) = p \cdot B_M(v_z), \quad v_z > 0 \text{ на межі поділу } z = 0 \quad (1.232)$$

або

$$\begin{aligned} & \left\{ B_M(v_z) + C_M(v_z, z=d) \right\} \exp \left(-\frac{d \cdot A_M(z)}{\bar{v}_z} \right) = \\ & = p \left\{ \left\{ B_M(-v_z) + C_M(-v_z, z=d) \right\} \exp \left(-\frac{d \cdot A_M(z)}{\bar{v}_z} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (1.233)$$

$v_z < 0$ на межі поділу $z = d$.

Можна показати, що

$$B_M(v_z) = -p \frac{C_M(-v_z) \varepsilon' - p C_M(-v_z) \varepsilon'^{-1}}{\varepsilon' - p^2 \varepsilon'^{-1}}, \quad v_z > 0, \quad (1.234)$$

$$B_M(v_z) = -p \frac{C_M(-v_z) \varepsilon'^{-1} - p C_M(-v_z) \varepsilon'}{\varepsilon'^{-1} - p^2 \varepsilon'}, \quad v_z < 0, \quad (1.235)$$

де для зручності $\exp\{d \cdot A_M(z) / \bar{\tau} v_z\}$ і $C_M(v_z, z = d)$ позначені ε і $C_M(v_z)$ відповідно.

Як і на першому кроці розроблення співвідношення для питомої провідності потрібно ввести просторове усереднення функції g_M . Об'єднання рівнянь (1.228) і (1.229) дає

$$\dot{g}_M = \bar{\tau} (1 - v_z \cdot d^{-1} \cdot h_M(v_z)) \quad (1.236)$$

при
$$h_M(v_z) = \frac{1}{\tau} \int_0^d \tau(z) \frac{\delta g_M}{\delta z} dz. \quad (1.237)$$

Таким чином, питома провідність дорівнює

$$\sigma(d) = -\frac{2e^2}{m} \left(\frac{m}{h}\right)^3 \iiint \bar{\tau} v_x \frac{\delta F^o}{\delta v_x} \left(1 - \frac{v_z}{d} h_M\right) d^3 v. \quad (1.238)$$

3. Розглядаючи практичні проблеми, Морага і Вілче припустили, що локальний час релаксації можна апроксимувати функцією з кроком N (рис. 1.11). Для зручності вони ввели позначення

$$\dot{a}_i = \tau_i \sqrt{\tau}, \quad (1.239)$$

$$\dot{b}_i = (z_i - z_{i-1}) d^{-1} \quad (1.240)$$

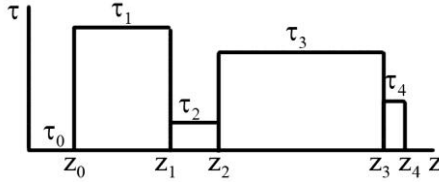


Рисунок 1.11 – Локальний час релаксації введений Морагою і Вілче [40]

й отримали, що середній час релаксації $\bar{\tau}$ і функція h_M визначаються як

$$\bar{\tau} = \sum_{i=0}^N \tau_i \dot{b}_i, \quad (1.241)$$

$$h_M = \sum_{i=1}^N g_i^* \Delta a_i^* \quad (1.242)$$

при
$$\dot{g}_i = \bar{\tau} \left[\exp \left\{ - \frac{dA_i}{\bar{\tau} v_z} \right\} \right] \cdot [C_i + B_i], \quad (1.243)$$

$$\Delta a_i^* = a_i^* + a_{i-1}^*. \quad (1.244)$$

Аналогічна дія проводиться Морагою і Вілче при розрахунку питомої провідності плівок:

$$A_0 = 0, A_i = A_{i-1} + B_i \cdot a_i^{-1}, \quad (1.245)$$

$$B_0 = 0, B_i = B_{i-1} + a_i^* \left[\exp \left(\frac{dA_i}{\bar{\tau} v_z} \right) - \exp \left(\frac{dA_{i-1}}{\bar{\tau} v_z} \right) \right].$$

Припускаючи, що поверхня Фермі має сферичну форму, розмірний ефект в електропровідності можна описати таким чином:

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{\bar{\tau}}{\bar{\tau}_0} \left\{ 1 - \frac{3}{4\lambda} F(\lambda, p) \right\}, \quad (1.246)$$

де середній час релаксації $\bar{\tau}_0$ у масивних зразках і СДВП λ визначається як

$$\lambda = \bar{\tau} \cdot \nu_F. \quad (1.247)$$

Функція F знаходиться як складна функція:

$$F(\lambda, p) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \Delta a_i^* \Delta a_j^* \left\{ G(\lambda |A_j - A_i|) - pG\{\lambda(A_j + A_i)\} \right\} + \sum_{k=0}^{\infty} (-p)^k \left\{ G\{\lambda(H_{ki} - A_j)\} - pG\{\lambda(H_{ki} + A_j)\} \right\}, \quad (1.248)$$

що містить у собі комбінацію експоненціальних інтегралів:

$$G\left(\overset{*}{a}\right) = \int_1^{\infty} e^{-\beta \overset{*}{a}} \left(\beta^{\dot{-}3} - \beta^{\dot{-}5} \right) d\beta, \quad (1.249)$$

де величина H_{jk} , пов'язана з функцією A_i як

$$H_{jk} = jA + A_k = (j+1)A - A_k \quad (1.250)$$

і показує складність оцінки питомої провідності плівки при порівнянні теоретичних розрахунків з експериментальними даними.

Необхідно зазначити, що модель Мораги і Вілче є узагальненням моделі Лукаса [15]. Потрібно мати на увазі, що модель Лукаса, а також модель Безака та ін. [28] потребують описання граничних умов на межі поділу двох шарів, у той час як модель Морага і Вілче цього формулювання не вимагає. Швидше за все, ніякої інформації про граничні умови на інтерфейсі за локальним часом релаксації τ_i немає. Таким чином, модель Морага і Вілче повинна використовуватися з обережністю за відсутності фізичних параметрів.

1.2.6 Експериментальне визначення параметрів електроперенесення в рамках моделі Фукса-Зондгеймера

Багато експериментальних досліджень [7; 41 – 60], присвячених вивченню питомого опору металевих плівок, були апробовані в рамках моделі ФЗ. Деякі дані узгоджуються з моделлю ФЗ, тоді як результати праць [7; 41; 43; 49; 51; 56] показали значну відмінність, що може бути пов'язана з істотним внеском зерномежевого розсіювання або розсіювання на домішках. У цьому підпункті представлено огляд експериментальних результатів, які узгоджуються з моделлю ФЗ.

Однак, перед тим як подати дані експериментальні роботи, потрібно зауважити наступне: якщо внесок товщини не залежить від домішок, меж зерен або інших структурних дефектів, то процес розсіювання повністю визначається розсіюванням на зовнішніх поверхнях плівки. Тому варто очікувати, що питомий опір плівок буде пов'язаний з питомим опором нескінченно товстих плівок співвідношенням

$$\rho_f = \rho_\infty \left[1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{d} \lambda_\infty \right], \quad d \cdot \lambda_\infty^{-1} \gg 1, \quad (1.251)$$

де λ_∞ – СДВП, що описує одночасно розсіювання в об'ємі плівки, на дефектах і домішках. Припускаючи, що модель вільних електронів виконується, можна записати (це передбачено у пункті 1.3.10 та деякими експериментальними результатами, поданими у працях [54; 61]):

$$\rho_\infty \lambda_\infty \approx \rho_o \lambda_o, \quad (1.252)$$

що приводить до

$$\rho_f = \rho_\infty + \frac{1-p}{d} \rho_o \lambda_o \quad (1.253)$$

при $\rho_\infty = \rho_o + \rho_{def} + \rho_{imp} \cdot \quad (1.254)$

Індекси “*def*” і “*imp*” описують внесок дефектів і домішок відповідно. Другий доданок рівняння (1.253) описує внесок поверхневого розсіювання носіїв струму у питомий опір плівок. Таким чином, рівняння (1.253) еквівалентне правилу Маттіссена.

Для простої інтерпретації даних у цьому пункті буде зручніше розглядати лише дані для металевих плівок, які узгоджуються з питомим опором нескінченно товстих плівок. Навіть у цьому разі потрібно мати на увазі, що розмірний ефект виникає лише в наслідок поверхневого розсіювання.

Загалом порівняння експериментальних результатів з теоретичними розрахунками на основі моделі ФЗ полягає у порівнянні даних із граничними випадками (1.44) і (1.45). Розглянемо випадок $k \gg 1$:

$$\rho_f = \rho_o + \frac{3}{8} \frac{\lambda_o}{d} \rho_o (1-p). \quad (1.255)$$

Отже експериментальна розмірна залежність питомого опору перебудовується у напрямних координатах $\rho_f d$ від d . Кут нахилу даної прямої дозволяє визначити величину питомого опору нескінченно товстої плівки ρ_o , а точка перетину з віссю ординат - $3\rho_o \lambda_o (1-p)/8$. Жодних висновків не було зроблено стосовно такого типу дефектів, як межа зерен. Крім того немає можливості визначити окремо величини λ_o і $(1-p)$. Альтернативна процедура полягає у виборі значення, що відповідає фізичній умові $\rho_o \lambda_o \approx \text{const}$ для λ_o при визначенні коефіцієнта дзеркальності p . Деякі автори [133] порівнювали свої результати з моделлю ФЗ шляхом перебудови розмірної залежності питомого опору

у координати ρ_f від d^{-1} . Необхідно зауважити, ця дана процедура дозволяє отримати експериментальне значення питомого опору нескінченно товстої плівки шляхом визначення точки перетину графіка ρ_f від d^{-1} з віссю ординат. Оскільки визначенні фізичних параметрів із точки, що відсікає вісь ординат, вносить більшу похибку ніж при визначення через кут нахилу прямої, то це призводить до того, що у першому наближенні зручніше аналізувати розмірний ефект питомого опору для плівок, враховуючи, що питомий опір є функцією товщини плівки.

Зауважимо також, що для відносно товстих плівок альтернативний вираз для питомого опору має вигляд

$$\frac{\rho_0}{\rho_f} \approx 1 - \frac{3}{8} \frac{1-p}{d} \lambda_0, \frac{d}{\lambda_0} \gg 1. \quad (1.256)$$

Борражо і Херас [62] показали, що межі застосування співвідношення (1.256) значно менші, ніж для співвідношення (1.255). Ефективність співвідношення (1.256) обґрунтована при $k \gg 0,2$, в той час як значення, отримані на основі співвідношення (1.225), відхиляються від значення, отриманого з точного співвідношення (1.43) лише на 5 % при зменшенні товщини. У випадку повного дифузного відбиття формула (1.255) замінюється виразом

$$\rho_f \approx \rho_0 \left[1 + 0,460 \lambda_0 d^{-1} \right] \quad (1.257)$$

Наскільки нам відомо, така апроксимація не була використана Молаю і Херасом [63], щоб вивчати зміну питомого опору.

На основі проведеного обговорення можна зробити висновок, що найбільш зручний метод обробки експериментальних даних полягає у використанні такого підходу:

1. Перебудувати експериментальну розмірну залежність у координатах $\rho_f d$ від d для знаходження величини питомого опору нескінченно товстої плівки.

2. Оцінка СДВП за законом $\rho_0 \lambda_0 \approx \text{const}$.

3. Визначення коефіцієнта дзеркальності з точки перетину графіка $\rho_f d$ від d з віссю ординат. Тут дуже важливо гарантувати систематичне підтвердження експериментального значення p при порівнянні експериментальної залежності ρ_f від d (або експериментальної залежності ρ_f / ρ_∞ від k) теоретичною кривою, побудованою на основі моделі ФЗ, і визначити співвідношення, пов'язане з різними значеннями коефіцієнта дзеркальності p (точне рівняння (1.43)).

Тому було показано, що лінійна залежність $\rho_f d$ від d не може бути зрозуміла в термінах двовимірної моделі для монокристалічних плівок, згідно з якою для заданого питомого опору передбачається більш широкий діапазон застосування лінійного співвідношення порівняно з моделлю ФЗ.

Тепер розглянемо, наприклад, розмірний ефект у питомому опорі для плівок золота, досліджений Фішером та ін. [41]. Величина питомого опору ρ_∞ , яка була знайдена за кутом нахилу залежності $\rho_f d$ від d (рис. 1.12), дорівнює $\rho_\infty \cong 2,8 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, що добре узгоджується з величиною ρ_∞ , яка була одержана із залежності ρ_f від d . Приймаючи $\rho_0 \lambda_0 \approx 9,27 \cdot 10^{-13}$ Ом·м² [41], отримуємо значення $p > 0,2$ із точки на осі ординат. Зноска на рис. 1.12 показує, що дані для тонких плівок золота узгоджуються із розрахунковими даним при умові частково дзеркального розсіюванням електронів.

Інтерес до порівняння експериментальної розмірної залежності з моделлю ФЗ стимулюється тим фактом, що

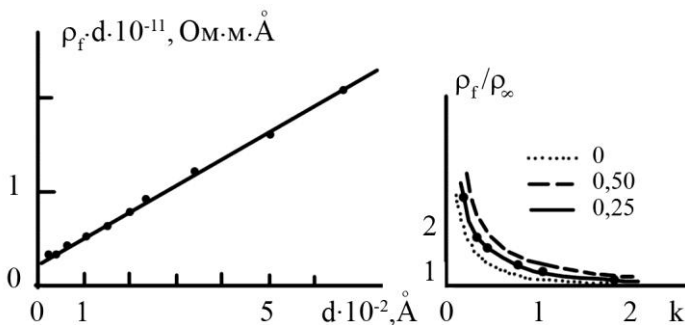


Рисунок 1.12 – Розмірна залежність для монокристалічних плівок золота (Фішер та ін. [57]). Теоретична залежність подана на зносі для різних значень коефіцієнта дзеркальності

подібні дослідження можуть бути використані при підтвердженні того, що питомий опір ρ_∞ – це стала величина при відповідній СДВП λ_∞ . Це дослідження частково важливе у випадку при вивченні розмірного ефекту при різних температурах, як це було зроблено у праці Баруа і Баруа [52] для плівок сурми. Використовуючи дані для питомого опору плівок, подані у табл. 1.1 [52] як функція товщини для плівок Sb, що осаджувалися при різних температурах, був побудований графік у координатах $\rho_f d$ від d (рис. 1.13), на основі якого показано, що точка перетину графіка з віссю ординат не залежить від температури вимірювання. Тобто для плівок Sb підтверджується правило $\rho_\infty \lambda_\infty \approx \rho_0 \lambda_0 \approx \text{const}$. Інша цікава робота з вивчення розмірного ефекту в питомому опорі тонких плівок, присвячена вивченню відношення $r_f = \rho_f(T = 77 \text{ K}) / \rho_f(T = 300 \text{ K})$ як функції товщини для плівок Ag, проведена Дуггалом і Нагпалом [47]. Оскільки розмірний ефект посилюється при низьких температурах, то він проявлятиметься і у діапазоні товщин 500 – 8000 Å для питомого опору. У даному випадку модель ФЗ можна

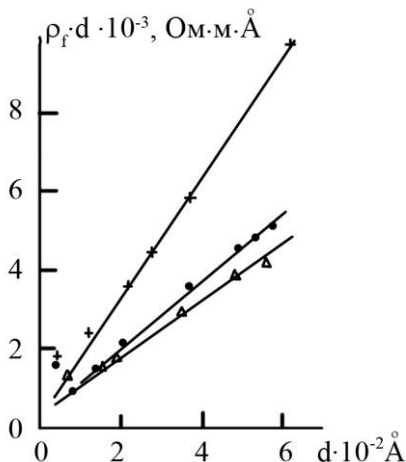


Рисунок 1.13 – Розмірна залежність питомого опору для плівок Sb, що осаджувалися при різних температурах, °C: 25 (+), 100 (•) та 150 (Δ) [52]

записати у вигляді

$$\rho_f(T) \approx \rho_\infty(T) \left[1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{d} \lambda_\infty(T) \right], \quad (1.258)$$

як при 300 K, так і при 77 K. Більше того, беручи до уваги той факт, що для даного діапазону товщин $\lambda_\infty(300\text{ K}) \times d^1 \ll \lambda_\infty(77\text{ K})d^1$ можна розрахувати

$$r_f = r_\infty \left\{ 1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{d} [\lambda_\infty(77\text{ K}) - \lambda_\infty(300\text{ K})] \right\}. \quad (1.259)$$

Підставляючи у це співвідношення дані для питомого опору плівок, легко визначити коефіцієнт дзеркальності p . Залежність, подана на рис. 1. 14, має такі особливості:

1) за кутом нахилу прямої було визначено величину $r_\infty = 5,99$, що добре узгоджується із відношенням для СДВП $\lambda(77\text{ K})/\lambda(300\text{ K}) \approx 5,96$ (при $\lambda(300\text{ K}) \approx 570\text{ \AA}$);

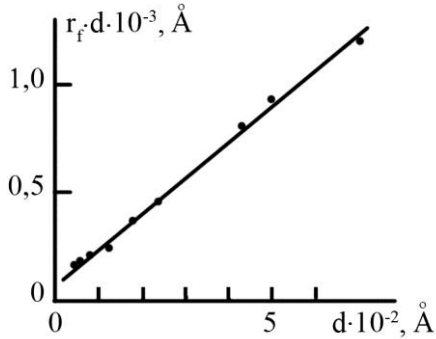


Рисунок 1.14 – Розмірна залежність відношення питомого опору $r_f = \rho_f(T = 77 \text{ K})/\rho_f(T = 300 \text{ K})$ [47]

2) визначивши точку перетину графіка з віссю ординат, було отримане значення коефіцієнта дзеркальності $p = 0,63$, що дозволяє нам зробити висновок про те, що умова часткового дзеркального відбиття виконується.

На противагу до результатів Дугала і Нагпала деякі вимірювання для тонких плівок, проведені при низьких температурах, не можуть бути успішно розраховані за співвідношенням (1.259). У деяких випадках питомий опір плівок узгоджується із наближеним рівнянням (1.258), хоча при температурах, менших за 10 К, питомий опір плівки можна визначити за співвідношенням (1.38). Не важливо, що зміна питомого опору при зміні товщини при низьких температурах відбувається значно більше, ніж при кімнатній температурі, можна очікувати, що відношення $r_f = \rho_f(T = 10 \text{ K})/\rho_f(T = 300 \text{ K})$ може бути розраховане на основі теоретичного співвідношення

$$r_f \approx \frac{4}{3} r_\infty \frac{1-p}{1+p} \frac{1}{k \ln \frac{1}{k}}, \quad k = d/\lambda (T < 10 \text{ K}). \quad (1.260)$$

Таким чином, графік у координатах $(r_f d)^{-1}$ від $\ln d$

представляє собою пряму лінію з нахилом $3(1+p) \cdot [4(1-p)r_\infty \lambda]$ і точкою перетину з віссю ординат, що дорівнює $\{3(1+p)\ln\lambda\} \cdot [4(1-p)\lambda_\infty]^{-1}$ і дозволяє розрахувати три фізичні параметри (p , λ , r_∞), причому кожен із цих параметрів може бути визначений окремо. На практиці питомий опір ρ_∞ при кімнатній температурі може бути легко визначений. Тоді зручно також прийняти, що величина $\rho_\infty \lambda_\infty$ є сталою при низьких температурах, для того щоб зробити висновки про величину p і λ при $T < 10$ К. Огляд отриманих при низьких температурах результатів був зроблений Чопрою [41] і Ларсоном [42].

1.3 Теоретичні моделі електропровідності металевих плівок

1.3.1 Розсіювання електронів на межах зерен

1.3.1.1 Теоретичні основи моделі провідності Маядаса-Шацкеса

Однією з перших моделей, що описує розмірний ефект у питомій провідності плівок, була модель, запропонована Маядасом і Шатцкесом (МШ) [7]. Згідно з цією моделлю відхилення від рівноваги функції розподілу носіїв струму F_1 відбувається як за рахунок фонового розсіяння, що визначається рівнянням (1.24), так і за рахунок розсіювання на межах зерен. Воно виражається інтегралом вигляду:

$$\int P_1(K, K') [F_1(K) - F_1(K')] dK, \quad (1.261)$$

де $P_1(K, K')$ – імовірність переходу після розсіювання із електронного стану K у стан K' на межах зерен.

У випадку нескінченно товстої плівки рівняння Больцмана для носіїв струму можна записати у вигляді

$$eE_x \nu_x \cdot \frac{\partial F_0(K)}{\partial \varepsilon} =$$

$$= \int P_1(K, K') [F_1(K) - F_1(K')] dK + \frac{1}{\tau_0} F_1(K) \quad (1.262)$$

з тими самими позначеннями, що і в пункті 1.1.2.

Імовірність $P_1(K, K')$ обчислюється з гамільтоніана вільного електрона, лише зі спрощення, що межі зерен перпендикулярні до напрямку електричного поля. Тому масив перпендикулярних меж зерен може бути поданий у вигляді гаусівського розподілу плоского розсіювання у напрямку електричного поля, яке може бути подане через потенціал Дірака:

$$V_x = S \cdot \delta(x - x_n), \quad (1.263)$$

де x_n – положення n -го джерела розсіювання уздовж осі x (рис. 1.15); $V(x)$ – зміна функції Гамільтона, а ймовірність $P_1(K, K')$ визначається як квадрат матричного елемента $\left| \langle K | V^*(x) | K' \rangle \right|^2$, усереднений з розподілу Гауса. Для зручності квадрат параметра S , який з'являється у квадраті матричного елемента, записується в такому вигляді [7]:

$$S^2 = \frac{K^3}{2} \cdot \nu \cdot K \cdot \frac{R_1}{1 - R_1}, \quad (1.264)$$

де R_1 – коефіцієнт відбиття електрона від межі зерна.

Розв'язок рівняння Больцмана має вигляд

$$F_1(K) = \tau_1^* eE_x \nu_x \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon}, \quad (1.265)$$

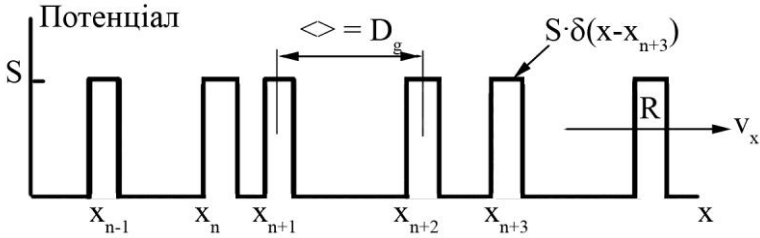


Рисунок. 1.15 – Геометрія моделі МШ

де час релаксації τ_1^* пов'язаний як із фоновим розсіюванням, так і з розсіюванням на межах зерен; згідно із [7] визначається так:

$$\frac{1}{\tau_1^*} = \frac{1}{\tau} + 2F_1'(|K_x|) \quad (1.266)$$

при

$$F_1'(|K_x|) = \frac{\alpha_1}{2\tau_0} \frac{K}{|K_x|} \times \frac{1 - \exp(-4K_x^2 s^2)}{1 + \exp(-4K_x^2 s^2) - 2 \exp(-K_x^2 s^2) \cos 2K_x D_g}, \quad (1.267)$$

$$\alpha_1 = \frac{\nu}{\nu_F} \lambda_0 D_g^{-1} R_1 (1 - R_1)^{-1},$$

де λ_0 – СДВП в об'ємі матеріалу і D_g – середній діаметр зерен (визначається як середня відстань між випадковими плоскими джерелами розсіювання), розподілених за законом Гауса, для яких s – стандартне відхилення. Крім того, передбачається, що співвідношення

$$K^2 s^2 \gg 1 \quad (1.269)$$

виконується і тоді, то загальний вираз для густини потоку J_{x1} [6; 7]

$$J_{x1} = -2e^2 \left[\frac{m}{h} \right]^3 \int \tau_1^* v_x^2 \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} E_x d^3 v \quad (1.270)$$

спрощується до вигляду

$$J_{x1} = -\frac{4\pi e^2}{m} \left[\frac{m}{h} \right]^3 \left[\frac{2}{m} \right]^{3/2} \times \quad (1.271)$$

$$\times E_x \int_0^\infty \tau_0 \varepsilon^{3/2} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \int_0^\pi \frac{\cos^2 \theta \sin \theta}{1 + |\cos \theta|^{-1}} d\theta.$$

Із загального співвідношення [64]

$$-\int_0^\infty f(\varepsilon) \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \approx f(\varepsilon_F) + \frac{1}{6} \frac{\pi k_B T^2}{\varepsilon_F} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} f(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}, \quad (1.272)$$

де k_B – стала Больцмана. Наближений вираз для J_{x1} згідно із [7] має вигляд:

$$J_x = \sigma_g E_x, \quad \frac{\pi k_B T}{\varepsilon_F} \ll 1 \quad (1.273)$$

при таких позначеннях:

$$\sigma_g = \sigma_0 \cdot f(\alpha), \quad (1.274)$$

$$f(\alpha) = 1 - \frac{3}{2} \alpha + 3\alpha^2 - 3\alpha^3 \ln \left(1 + \frac{1}{\alpha} \right), \quad (1.275)$$

$$\alpha = \lambda_0 D_g^{-1} R(1-R)^{-1}, \quad (1.276)$$

$$R(1-R)^{-1} = \frac{2m}{\hbar^3} \frac{S^2}{v_F K_F}. \quad (1.277)$$

Числові значення для $f(\alpha)$ наведені в табл. 1.2.

Для того щоб знайти повну питому провідність плівки, була використана модель ФЗ [13; 6]. Відмінність від Таблиця 1.2 – Величина функції МШ $f(\alpha)$ (співвідн. 1.275)

α	0,01	0,05	0,1	0,5	1	2	3	4	5	10
$f(\alpha)$	0,9853	0,9314	0,8728	0,5880	0,4206	0,2688	0,1978	0,1564	0,1294	0,0694

оригінального розрахунку полягає в тому, що робиться заміна ефективного часу релаксації τ_1^* , або його наближеного виразу τ^* , для τ_0 у рівнянні Больцмана й у граничних умовах (рівняння (1.30) і (1.31)). У разі, якщо $\frac{\pi VT}{\varepsilon_F} \ll 1$ і $K^2 s^2 \gg 1$, τ_1^* замінюється на τ^* , що має вигляд

$$\frac{1}{\tau^*} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{\alpha}{\tau_0} \frac{K_F}{|K_F|}. \quad (1.278)$$

Тоді, виходячи із рівняння для питомої провідності, отриманого в рамках моделі ФЗ [6] (рівняння (1.43)), вираз для питомої провідності півки σ_f можна записати як

$$\sigma_f = \sigma_g - \sigma_0 \cdot A(k, p, \alpha), \quad (1.279)$$

Де

$$A(k, p, \alpha) = \frac{6(1-p)}{\pi K} \times \int_0^{\pi/2} d\phi \int_1^\infty dt \frac{\cos^2 \phi}{H^2(\dot{t}, \phi)} \left\{ \frac{1 - \exp\{-k \dot{t} H(\dot{t}, \phi)\}}{1 - p \exp\{-k \dot{t} H(\dot{t}, \phi)\}} \right\} \left\{ \dot{t}^{-3} - \dot{t}^{-5} \right\}, \quad (1.280)$$

$$H(\dot{t}, \phi) = 1 + a (\cos \phi)^{-1} \left(1 - \dot{t}^{-2} \right)^{-1/2}, \quad (1.281)$$

де p – коефіцієнт дзеркальності; \dot{t} – змінна інтегрування; k – зведена товщина, тобто

$$k = d \cdot \lambda_0^{-1}. \quad (1.282)$$

як зазвичай пропонують вирази для питомої провідності плівки у випадку полі- та монокристалічної структури.

У разі полікристалічних плівок із середнім діаметром зерен D_g , який не залежить від товщини плівки, питомий опір плівки (по відношенню до питомого опору масивного монокристала) ρ_{fp}/ρ_0 згідно із [7] можна виразити таким співвідношенням:

$$\rho_{fp}/\rho_0 = [f(\alpha) - A(k, p, \alpha)]^{-1}, \quad (1.283)$$

де $f(\alpha)$, A , k , α визначаються за співвідношеннями (1.275), (1.280), (1.282) і (1.276) відповідно.

Альтернативний вираз може бути поданий у вигляді

$$\rho_{fp}/\rho_g = \left\{ 1 - [f(\alpha)]^{-1} A(k, p, \alpha) \right\}, \quad (1.284)$$

де ρ_g – опір нескінченно товстої полікристалічної плівки, тобто $\rho_g = \lim_{d \rightarrow \infty} \rho$.

У випадку монокристалічних плівок, середній розмір зерна яких діаметром D_g дорівнює (або більше) товщини плівки d , зменшення питомого опору плівки ρ_{fm}/ρ_0 , визначається згідно із [7] як

$$\rho_{fm}/\rho_0 = [f(\alpha) - A(k, p, \alpha)]^{-1}. \quad (1.285)$$

Числові значення ρ_{fp}/ρ_g і ρ_{fm}/ρ_0 протабульовані (табл. 1.3.1 і 1.3.2) за умови, що діаметр зерна монокристалічної плівки дорівнює товщині плівки.

Якщо діаметр, D_g , прямує до нескінченності, то ефект меж зерен зникає і α набуває граничне значення 0.

Таблиця 1.3.1 – Числові значення зміни питомого опору полікристалічних плівок ρ_{fp}/ρ_g згідно співвідн. (1.284) [84]

k	$\alpha = 0$	$\alpha = 0,25$	$\alpha = 0,5$	$\alpha = 1$	$\alpha = 10$	$p = 0$
1	2	3	4	5	6	7
0,01	26,483	20,637	17,218	12,233	3,7222	
0,02	15,332	12,049	10,127	7,8810	2,4422	
0,03	11,254	8,8992	7,5200	5,9055	1,9860	
0,04	9,0882	7,2229	6,1304	4,8506	1,7443	
0,05	7,7276	6,1685	5,2555	4,1855	1,5941	
0,06	6,7859	5,4382	4,6491	3,7242	1,4917	
0,07	6,0917	4,8994	4,2016	3,3837	1,4177	
0,08	5,5566	4,4839	3,8563	3,1209	1,3618	
0,09	5,1302	4,1527	3,5811	2,9115	1,3183	
0,1	4,7816	3,8819	3,3560	2,7402	1,2835	
0,2	3,0958	2,5721	2,2683	1,9254	1,1310	
0,4	2,1284	1,8244	1,6515	1,45554	1,0617	
0,6	1,7695	1,5509	1,4292	1,2944	1,0403	
0,8	1,5798	1,4087	1,3154	1,2142	1,0299	
1	1,4622	1,3220	1,2470	1,1671	1,0238	
2	1,2208	1,1500	1,1145	1,0780	1,0117	
4	1,1031	1,0704	1,0543	1,0375	1,0058	
10	1,0384	1,0270	1,0210	1,0146	1,0023	
k	$\alpha = 0$	$\alpha = 0,25$	$\alpha = 0,5$	$\alpha = 1$	$\alpha = 10$	$p = 0,25$
0,01	18,195	14,288	12,000	9,3267	2,8436	
0,02	10,760	8,5413	7,2414	5,7180	1,9982	
0,03	8,0187	6,4161	5,4770	4,3754	1,6843	
0,04	6,5548	5,2792	4,5320	3,6550	1,5182	
0,05	5,6317	4,5615	3,9349	3,1995	1,4150	
0,06	4,9909	4,0629	3,5199	2,8829	1,3448	
0,07	4,5174	3,6943	3,2130	2,6488	1,2939	
0,08	4,1516	3,4095	2,9759	2,4680	1,2555	

Продовження табл. 1.3.1

1	2	3	4	5	6	7
0,09	3,8597	3,1821	2,7866	2,3237	1,2255	

0,1	3,6206	2,9959	2,6317	2,2057	1,2015	
0,4	1,1889	1,5758	1,2557	1,3202	1,0455	
0,6	1,5398	1,3868	1,3024	1,2092	1,0299	
0,8	1,4081	1,2885	1,2238	1,1536	1,0222	
1	1,3265	1,2285	1,1764	1,1207	1,0177	
2	1,1585	1,1087	1,035	1,0574	1,0087	
4	1,0754	1,0518	1,0401	1,0279	1,0043	
10	1,0289	1,0201	1,0157	1,0109	1,0017	
<i>k</i>	$\alpha = 0$	$\alpha = 0,25$	$\alpha = 0,5$	$\alpha = 1$	$\alpha = 10$	$p = 0,50$
0,01	11,820	9,3753	7,9426	6,2637	2,1601	
0,02	7,1839	5,7791	4,9559	3,9895	1,6243	
0,03	5,4601	4,4383	3,8401	3,1378	1,4271	
0,04	4,5350	3,7178	3,2400	2,6795	1,3235	
0,05	3,9496	3,2617	2,8600	2,3894	1,2595	
0,06	3,5422	2,9442	2,5956	2,1878	1,2161	
0,07	3,2406	2,7092	2,4000	2,0387	1,1847	
0,08	3,0073	2,5275	2,2482	1,9237	1,1610	
0,09	2,8209	2,3824	2,1281	1,8321	1,1425	
0,1	2,6681	2,2635	2,0294	1,7572	1,1277	
0,2	1,9250	1,6878	1,5528	1,3983	1,0616	
0,4	1,4974	1,3610	1,2855	1,2011	1,0299	
0,6	1,3398	1,2429	1,1903	1,1325	1,0197	
0,8	1,2571	1,1818	1,1416	1,0981	1,0147	
1	1,2061	1,446	1,1123	1,0775	1,0117	
2	1,1013	1,0701	1,0542	1,0375	1,0058	
4	1,0491	1,0340	1,0264	1,0184	1,0029	
10	1,0191	1,0133	1,0104	1,0072	1,0011	
<i>k</i>	$\alpha = 0$	$\alpha = 0,25$	$\alpha = 0,5$	$\alpha = 1$	$\alpha = 10$	$p = 0,75$
0,01	6,5149	5,2639	4,5309	3,6704	1,5650	

Продовження табл. 1.3.1

1	2	3	4	5	6	7
---	---	---	---	---	---	---

0,02	4,160	3,430	3,003	2,504	1,2980	
0,03	3,2760	2,7412	2,4300	2,0663	1,2022	
0,04	2,7992	2,3699	2,12211	1,8314	1,1527	
0,05	2,4968	2,1347	1,9257	1,6833	1,2240	
0,06	2,2860	1,9712	1,7902	1,5809	1,1020	
0,08	2,0093	1,7571	1,6131	1,4477	1,0763	
0,09	1,9130	1,6828	1,5518	1,4018	1,0677	
0,1	1,8341	1,6221	1,5019	1,3645	1,0608	
0,2	1,4532	1,3315	1,2642	1,888	1,0299	
0,4	1,2389	1,1714	1,1351	1,0952	1,0147	
0,6	1,1620	1,1151	1,0902	1,06631	1,0097	
0,8	1,1224	1,0863	1,0674	1,0470	1,0073	
1	1,0980	1,0689	1,0537	1,0374	1,0058	
2	1,0487	1,0339	1,0264	1,0184	1,0029	
4	1,0239	1,0167	1,0130	1,0091	1,0014	
10	1,0094	1,006	1,0051	1,0036	1,0005	

Таблиця 1.3.2 – Числові значення зміни питомого опору монокристалічних плівок ρ_{fm}/ρ_0 згідно зі співвідн. (1.285) [116]

$p = 0$				
k	$R = 0,10$	$R = 0,22$	$R = 0,42$	$R = 0,62$
1	2	3	4	5
0,01	24,0700	81,0040	130,7323	257,4954
0,02	20,1572	41,0842	70,3962	129,2758
0,03	19,2322	27,7615	47,2602	86,4922
0,04	14,7706	21,1111	35,7139	65,1412
0,05	12,0376	17,1187	28,7844	52,3278
0,06	10,2924	14,4523	24,1581	43,7736
0,07	9,0092	12,5500	20,8589	37,6735

Продовження табл. 1.3.2

1	2	3	4	5
---	---	---	---	---

0,08	8,0442	11,1224	18,3841	33,0978
0,09	7,2906	10,0098	16,4563	29,5337
0,10	6,6870	9,1207	14,9164	26,6870
0,20	3,9367	5,1055	7,9302	13,8602
0,40	2,5127	3,0775	3,5070	7,4578
0,60	2,0106	2,3917	3,3459	5,3194
0,80	1,7652	2,0451	2,7638	4,2492
1,00	1,6107	1,8356	2,4137	3,6064
2,00	1,2972	1,4134	1,7108	2,3174
4,00	1,1430	1,2034	1,3574	1,6679
10,00	1,0554	1,0303	1,4410	1,2725
<i>p</i> = 0,5				
0,01	32,0003	57,0046	116,2411	236,6560
0,02	17,0153	29,0588	50,6565	118,8614
0,03	11,7423	19,7326	39,4419	79,5564
0,04	9,1070	15,0774	29,8525	59,9413
0,05	7,5226	12,2829	14,0975	48,1697
0,06	6,4629	10,4166	20,2553	40,3109
0,07	5,70565	9,0853	17,5153	34,7069
0,08	5,1364	8,0863	15,4599	30,5030
0,09	4,6819	7,30778	18,8588	27,2287
0,10	4,3361	6,6857	12,5799	24,6133
0,20	2,7176	3,8778	6,8190	12,8364
0,40	1,8846	2,4619	3,9330	6,9463
0,60	1,5970	1,9840	2,9687	4,9810
0,80	1,4516	1,7427	2,4844	3,9971
1,00	1,3522	1,5967	2,1928	3,406
2,00	2,18111	1,3011	1,6053	2,2194
4,00	1,0898	1,1513	1,3071	1,6199
10,00	1,0356	1,0607	1,1243	1,2536

Рівняння (1.285) перетворюється до вигляду

$$\rho_{jm} / \rho_0 \Big|_{\alpha=0} = [1 - A(k, p, 0)]^{-1} \quad (1.286)$$

Порівняння співвідношень (1.286) з (1.43), отриманим із моделі ФЗ (підпункт 1.2.1.1), дає співвідношення

$$A(k, p, \alpha)|_{\alpha=0} = A(k, p), \quad (1.287)$$

яке показує, що функція розмірного ефекту ФЗ $(1 - A(k, p))$ може бути отримана з функції розмірного ефекту МШ $f(\alpha) - A(k, p, \alpha)$.

1.3.1.2 Модель ефективної довжини вільного пробігу

Маядас і Шацкес [7] припустили, що «ефективна внутрішня довжина вільного пробігу» може бути визначена для полікристала, але ніяких теоретичних підстав не було запропоновано для підтвердження цієї фізичної точки зору, яка була реалізована авторами [65–68].

Теоретичне обґрунтування цього емпіричного припущення може бути здійснене при врахуванні того факту, що довжина вільного пробігу пов'язана із процесами електронного розсіювання, які відбуваються в об'ємі плівки, а не на зовнішніх поверхнях [69; 70]. Ця довжина вільного пробігу називається «ефективною» довжиною вільного пробігу і згідно із працею [69] визначається як

$$\lambda_g = \lambda_0 \cdot f(\alpha). \quad (1.288)$$

Рівняння Больцмана (співвідношення 1.16) набере вигляду

$$eE_x \nu_x \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} = \frac{F_1(K)}{\tau_0 \cdot f(\alpha)} + \nu_z \frac{\partial F_1(K)}{\partial z}. \quad (1.289)$$

Наведене вище рівняння відрізняється від отриманого в

рамках моделі ФЗ (рівняння (1.26)) тим, що замість τ_0 вводиться функція $\tau_0 f(\alpha)$. Отже, величина ρ_f/ρ_0 може виражатися співвідношенням, аналогічним до співвідношення (1.35), тобто

$$\rho_f / [\rho_0 \cdot f(\alpha)] = \left\{ 1 - A(k \cdot [f(\alpha)]^{-1}, p) \right\}, \quad (1.290)$$

де $[1 - A(k, p)]$ – стандартна ефективна функція, яка в рамках моделі визначається рівнянням (1.35). У випадку полікристалічних плівок, рівняння (1.290) матиме вигляд

$$\rho_{fp} / \rho_g = [1 - A(k_g, p)]^{-1}, \quad (1.291)$$

де
$$k_g = \frac{k}{f(\alpha)} \quad \text{і} \quad (1.292)$$

$$\rho_{fp} / \rho_0 = f(\alpha) \cdot [1 - A(k_g, p)]^{-1}. \quad (1.293)$$

У випадку плівок, що задовольняють умову монокристалічності, відношення ρ_f/ρ_0 змінюється з товщиною і співвідношення (1.290) перетворюється до вигляду

$$\rho_{fm} / \rho_0 = \left\{ f(\alpha) \cdot \left\{ 1 - A(k, [f(\alpha)]^{-1}, p) \right\} \right\} \quad (1.294)$$

Необхідно підкреслити, що ефективна СДВП у монокристалічних плівках залежить від товщини, але це не змінює сутності рівняння Больцмана [69]. Рівняння (1.291) можна назвати «ефективною моделлю ФЗ».

1.3.1.3 Модель ефективного часу релаксації

Можна також вважати, що час релаксації можна подати як ефекти розсіяння електронів на джерелах, відмінних від

межі зерен. Ефективний час релаксації (τ_{eff}) містить у собі процеси розсіювання як на поверхні, так і в об'ємі плівки. Оскільки лише ці види розсіювання описуються в рамках моделі ФЗ (підпункт 1.2.1), зрозуміло, що вираз для τ_{eff} можна легко отримати із виразу для питомої провідності в рамках моделі ФЗ.

Отже,

$$\tau_{eff} = \tau_0 [1 - A(k, p)], \quad (1.295)$$

де $1 - A(k, p)$ – визначається із співвідношення (1.35).

Альтернативний вираз отримуємо зі співвідношення (1.287) :

$$\tau_{eff} = \tau_0 \left[1 - A(k, p, \alpha) \Big|_{\alpha=0} \right]. \quad (1.296)$$

Для розрахунку загальної питомої провідності може бути використана процедура МШ (підпункт 1.3.1.1),² замінюючи τ_{eff} на τ_0 у першому доданку виразу для τ (співвідношення 1.278) і залишаючи другий доданок без змін.

Отримуємо нове значення для τ_{eff}^* замість τ_{eff} :

$$\frac{1}{\tau_{eff}^*} = \frac{1}{\tau_0 [1 - A(k, p)]} + \frac{\alpha}{\tau_0} \frac{K_F}{|K_{Fx}|}. \quad (1.297)$$

Тоді рівняння (1.279) матиме вигляд

$$\sigma_f = [1 - A(k, p)] \sigma_0 \cdot f(\alpha [1 - A(k, p)]). \quad (1.298)$$

Отже, вирази для питомої провідності полі- та монокристалічних плівок, згідно із [71; 72], мають вигляд

$$\rho_{fp} / \rho_0 = [1 - A(k, p)]^{-1} \left\{ f(\alpha [1 - A(k, p)]) \right\}^{-1}, \quad (1.299)$$

$$D_g = \text{const},$$

$$\rho_{pm} / \rho_0 = [1 - A(k, p)]^{-1} \left\{ f \left(\alpha [1 - A(k, p)] \right) \right\}^{-1}, \quad (1.300)$$

$$D_g \geq d.$$

Необхідно мати на увазі, що у співвідношенні (1.299) α не залежить від товщини, в той час як у рівнянні (1.300) залежить.

Числові значення були отримані на основі співвідношення (1.300). Вони дещо відрізняються від розрахунків, зроблених на основі моделі МШ (співвідношення 1.285) (табл. 1.4) [71].

Таблиця 1.4 – Тонкі монокристалічні плівки: величина ρ_f / ρ_0 задається рівняннями для випадку дифузного розсіювання від зовнішніх поверхонь плівки ($p = 0$)

k	$R = 0,10$		$R = 0,22$	
	(1.300)	(1.285)	(1.300)	(1.285)
1	2	3	4	5
0,01	41,9005	54,8700	64,8423	81,0040
0,02	23,1831	28,1572	34,7980	41,0842
0,04	13,0317	14,7706	18,8605	21,1111
0,06	9,4225	10,2924	13,3185	14,4523
0,08	7,5376	8,0442	10,4659	11,1224
0,10	6,3724	6,6870	8,7170	9,1207
0,20	4,0303	3,9367	5,2133	5,1055
0,40	2,5310	2,5127	3,1272	3,0775
0,60	2,0391	2,0186	2,4393	2,3917
0,80	1,7829	1,7652	2,0844	2,0451

Продовження табл. 1.4

1	2	3	4	5
1,00	1,4624	1,5107	1,8673	1,8356
2,00	1,3028	1,2972	1,4257	1,4134
4,00	1,1444	1,1430	1,2067	1,2034

6,00	1,0942	1,0936	1,1360	1,1347
8,00	1,0698	1,0696	1,1013	1,1006
10,00	1,0555	1,0554	1,0808	1,0803
	$R = 0,42$		$R = 0,62$	
0,01	24,0639	139,7323	245,1942	257,4954
0,02	64,4468	70,3962	125,5034	129,2758
0,04	33,7082	35,7139	64,0170	65,1412
0,06	23,2293	24,1581	43,4434	43,7736
0,08	17,0047	18,3841	33,0730	33,0978
0,10	14,6755	14,9164	26,8126	26,6870
0,20	8,2065	7,3882	14,2861	13,8682
0,40	4,6318	4,5070	7,6790	7,4578
0,60	3,4473	3,3459	5,4839	5,3194
0,80	2,8437	2,7638	4,3748	4,2492
1,00	2,4772	2,4137	3,7049	3,6064
2,00	1,7352	1,7108	2,3555	2,3174
4,00	1,3641	1,3574	1,6792	1,6679
6,00	1,2421	1,2391	1,4544	1,4492
8,00	1,1814	1,1798	1,3420	1,3390
10,00	1,1451	1,1441	1,2744	1,2725

Таблиця 1.5 – Тонкі плівки: величина ρ_f/ρ_0 задається рівняннями для випадку дзеркального розсіювання від зовнішніх поверхонь плівки ($p = 0,5$)

k	$R = 0,10$		$R = 0,22$	
	(1.300)	(1.285)	(1.300)	(1.285)
1	2	3	4	5
0,01	27,1537	32,8003	50,0748	57,0046

Продовження табл. 1.5

1	2	3	4	5
---	---	---	---	---

0,02	14,8837	17,0153	26,3670	29,0588
0,04	8,4082	9,1070	14,1644	15,0774
0,06	6,1314	6,4629	9,9810	10,4166
0,08	4,9575	5,1364	7,8484	8,0863
0,10	4,2325	4,3361	6,5495	6,6857
0,20	2,7148	2,7176	4,8821	3,8778
0,40	1,8967	1,8846	2,4870	2,4619
0,60	1,6079	1,5978	2,0047	1,9840
0,80	1,4591	1,4513	1,7587	1,7427
1,00	1,3683	1,3622	1,6093	1,5967
2,00	1,1896	1,1811	1,3047	1,3011
4,00	1,0903	1,0898	1,1526	1,1513
6,00	1,0531	1,0596	1,1016	1,1010
8,00	1,0446	1,0446	1,0761	1,0759
10,00	1,0356	1,0356	1,0609	1,0607
	$R = 0,42$		$R = 0,62$	
0,01	109,0969	116,2411	230,1133	236,6560
0,02	59,3451	58,6566	115,7219	118,9614
0,04	28,9403	29,8525	58,8594	59,9413
0,06	19,7834	20,2553	40,0203	40,3109
0,08	15,2473	15,4599	30,3863	30,5030
0,10	12,4727	12,5799	24,5863	24,6133
0,20	6,8535	6,8190	12,5799	12,8364
0,40	3,9817	3,9338	6,9851	6,9463
0,60	3,0066	2,9687	5,0368	4,9810
0,80	2,5138	2,4844	4,0402	3,9971
1,00	2,2160	2,1928	3,4401	3,4060
2,00	1,6143	1,6053	2,2261	2,2194
4,00	1,3098	1,3071	1,6209	1,6199
6,00	1,2075	1,2063	1,4197	1,4175
8,00	1,1561	1,1555	1,3166	1,3154
10,00	1,1253	1,1243	1,2545	1,2536

1.3.2 Спрощення моделі Маядаса-Шацкеса

Методика розрахунку, запропонована МШ, містить у

собі деякі неявні фізичні припущення, на яких зараз зосередимо увагу.

Передбачається, що розсіювання на площинах, паралельних напрямку прикладання електричного поля, повністю дзеркальне, оскільки воно не призводить до зміни струму. Також був зроблений висновок, що провідність плівки з товщиною розраховується через сумарну провідність плівок товщиною D_g , які мають ідеально гладкі поверхні. Це свідчить про те, що модель МШ насправді є моделлю для багаточислової структури [73] (рис. 1.16). Крім того, оскільки ніякі фізичні докази не можуть підтвердити можливість утворення площин розсіювання, то стає зрозумілим, що рівняння (1.274) дає вираз питомого опору для одновимірної межі поділу зерен, у той час як реальні процеси електронного розсіювання можуть відбуватися у трьох вимірах [74; 75]. Згідно з означенням (рівняння 1.276) величина D_g становить з поздовжній параметр, а так званий коефіцієнт відбиття електронів від межі зерна R набуває таких значень, що можуть бути використані при описанні три-або бівимірних явищ у рамках одновимірної моделі МШ. Таким чином, можна зробити висновок, що модель МШ є одновимірною моделлю (рис. 16).

При розрахунках процесів розсіювання на межі зерен, перпендикулярних до електричного поля, Маядас і Шацкес [7] використали математичний апарат, який зазвичай реалізується для вивчення ефекту лінійних дислокацій у напівпровідниках [77]. Тому передбачається, що межі зерен, перпендикулярні до електричного поля, можуть бути подані у вигляді безперервної лінії дислокації в межах полікрystalа (див. посилання 9 у праці [7]). Це

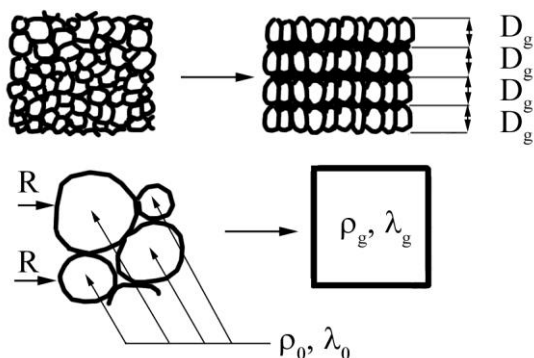


Рисунок. 1.16 – Структура і параметри полікристалічної плівки (ліворуч) і моделі плівки МШ (праворуч)

припущення здається сумнівним у випадку тонких полікристалічних плівок, оскільки число елементарних шарів невелике і ймовірність того, що межі зерен будь-якого шару можуть бути пов'язані із процесом формування лінії дислокації, здається фізично неможливим.

Отже, можливість застосування модель МШ для тонких полікристалічних плівок сумнівна.

Автори праці [7] (посилання 9) зазначають, що вибір напряму електричного поля при розрахунку величини зерномежового опору на величину не має значення і тому модель МШ може бути використана для опису питомої провідності полікристалічної або монокристалічної плівки, у якій площа поперечного перерізу зерна лежить у площині, паралельній поверхні плівки. Якщо зерна плівки не задовольняють цю умову, то порівняння експериментальних значень D_g (вимірювання проводиться методом електронної мікроскопії) і значень, отриманих зі співвідношення для провідності, може давати деяку різницю. Проте теоретичні розрахунки, проведені в рамках статистичної моделі для питомої провідності, описані в праці [74], показали, що той факт, що форма зерна

відмінна від кубічної, не може істотно впливати на величину питомої провідності.

Таким чином, можна зробити висновок, що модель МШ може бути застосована для опису провідності у полікристалічних і монокристалічних плівках, хоча деякі параметри провідності не можуть бути просто пов'язані з фізичними параметрами.

Якщо припустити, що процеси розсіювання електронів на межах зерен можуть бути описані ізотропною довжиною вільного пробігу, λ , то зменшення питомої провідності плівки по відношенню до питомої провідності нескінченно товстої полікристалічної плівки σ_g/σ_0 можна записати у такому вигляді [79]:

$$\sigma_g/\sigma_0 = [1 + \lambda_0 \lambda^{-1}]^{-1}, \quad (1.301)$$

що лише відображає той факт, що провідність обернено пропорційна загальній довжині вільного пробігу. Із наступного рівняння можна визначити параметр C_1 [79]:

$$\lambda_0 \lambda^{-1} = C_1 \alpha, \quad (1.302)$$

де α визначається з рівняння (1.276). Підстановка у рівняння (1.301) дає

$$\sigma_g/\sigma_0 = (1 + C_1 \alpha)^{-1} \quad (1.303)$$

для $C_1 = 1,34. \quad (1.304)$

Таким чином для значень α , що лежать у межах від 0,01 до 10, відхилення між функцією МШ (f) і гіперболічною апроксимацією f^* становить менше 4 % (табл. 1.5). Отже, співвідношення МШ може більш точно апроксимуватися гіперболічною функцією, заданою рівнянням (1.303).

Таблиця 1.5 – Порівняння між функцією МШ (f) і

гіперболічною апроксимацією f^* (співвідношення 1.303)

α	f^*	f
0,01	0,9868	0,985289
0,05	0,9372	0,931358
0,10	0,8818	0,872806
0,50	0,5888	0,588000
1,00	0,4273	0,420558
2,00	0,2717	0,268837
3,00	0,1992	0,197752
4,00	0,1572	0,156438
5,00	0,1299	0,129416
10,00	0,0694	0,069461

Цей результат не неочікуваний, оскільки розрахунки були виконані, припускаючи, що напрямок електричного поля не має значення.

Аналогічна гіперболічна функція була отримана у праці [80] в рамках ізотропної моделі, яка буде подана у підпункті 1.3.5.6.

1.3.2.1 Модель Котті

Оскільки модель Котті для провідності [5] дає альтернативну процедуру для визначення процесів електронного розсіяння на зовнішніх поверхнях плівки (див. підпункт 1.2.2.2), то процедура, застосована у підпункті 1.3.1.2 у рамках моделі ефективної СДВП, може також бути використана у моделі Котті як відправна точка. Зрозуміло, що у даному випадку відношення питомих провідностей σ_g/σ_0 повинне бути виражене як

$$\sigma_f/\sigma_0 = f(\alpha)C(\mu_g), \quad (1.305)$$

де $C(\mu_g)$ – «ефективна» функція Котті, отримана зі стандартної функції Котті $C(\mu)$ (див. підпункт 1.2.2.2) шляхом заміни параметра Котті μ (рівняння 1.84) на ефективний параметр Котті μ_g^* і визначається як

$$\mu_g = \mu^* / f(\alpha), \quad (1.306)$$

де μ^* – узагальнений параметр Котті (співвідношення 1.85).

Виходячи із загального вигляду параметра розмірного ефекту $A(k, p, \alpha)$ в рамках моделі МШ (рівняння 1.280), неважко зробити висновок, що при великих значеннях k цей параметр виражається співвідношенням

$$A(k, p, \alpha) \approx \frac{6(1-p)}{\pi k} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_1^\infty \frac{\cos^2 \phi, \alpha}{H^2(\dot{t}, \phi, \alpha)} \left(\frac{1}{\dot{t}^3} - \frac{1}{\dot{t}^5} \right) d\dot{t}, \quad (1.307)$$

де $H(\dot{t}, \phi, \alpha) = 1 + \frac{\alpha}{\cos \phi} \frac{\dot{t}}{\left(\dot{t}^2 - 1 \right)^{1/2}}$ визначається у

сферичних координатах згідно з рівнянням (1.281).

Скорочена форма $A(k, p, \alpha)$ може бути записана як

$$A(k, p, \alpha) \approx \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} m(\alpha), \quad k \gg 1. \quad (1.308)$$

Числові розрахунки [81] показали справедливість останнього рівняння для випадку полікристалічних плівок (табл. 1.6).

Альтернативна наближена форма для $A(k, p, \alpha)$ також може бути записана у вигляді

$$A(k, p, \alpha) \approx A(k, p, 0) \cdot m(\alpha), \quad k \gg 1 \quad (1.309)$$

оскільки було показано (підпункт 1.2.1.1), що величина

$\frac{3}{8} \frac{1-p}{k}$ є асимптотикою розмірної залежності функції $A(k, p)$ у рамках моделі ФЗ, що збігається з $A(k, p, 0)$ (див. підпункт 1.3.1.1).

У разі, якщо полікристалічні плівки мають великодисперсну структуру, тобто при $\alpha \ll 1$, наближений вираз для $m(\alpha)$ може бути отриманий шляхом підстановки:

$$H^2\left(\dot{t}, \phi, \alpha\right) \approx 1 + \frac{2}{\cos \phi} \frac{\dot{t}}{\left(\dot{t}^2 - 1\right)^{1/2}}, \quad \alpha \ll 1 \quad (1.310)$$

та

$$\int_1^{\infty} \frac{\dot{t}}{\left(\dot{t}^2 - 1\right)^{1/2}} d\dot{t} \left[\frac{1}{\dot{t}^3} - \frac{1}{\dot{t}^5} \right] = \frac{1}{3} \quad (1.311)$$

$$\text{Тоді } m(\alpha) \approx 1 - C_2 \alpha, \quad \alpha \ll 1 \quad (1.312)$$

$$\text{при } C_2 = 3,395. \quad (1.313)$$

Рівняння (1.308) справедливе також для визначення функції розмірного ефекту для товстих монокристалічних плівок, оскільки діаметр зерна становить величину, що найменше дорівнює товщині плівки, тобто $k \gg 1$.

Для дрібнодисперсних полікристалічних плівок наближений вираз для $m(\alpha)$ може бути розрахований як

$$m(\alpha) \approx \frac{1}{2\alpha^2}, \quad \alpha \gg 1. \quad (1.314)$$

Асимптотичні функції ФЗ були подані в попередньому пункті (рівняння (1.44) і (1.45)). Оскільки немає ніякої теоретичної межі для товщини при введенні ефективної Таблиця 1.6 – Порівняння між загальним виразом для розмірного ефекту питомого опору полікристалічної плівки (1.284) і наближеним виразом співвідношення

(1.307) у вигляді (1.308)

k	$k\rho_{\text{fp}}/\rho_g$	(1.284)		$k\rho_{\text{fp}}/\rho_g$	(1.308)	
		$\alpha=1$	$\alpha=0,5$		$\alpha=1$	$\alpha=0,5$
$p=0$	$\alpha=2$	$\alpha=1$	$\alpha=0,5$	$\alpha=2$	$\alpha=1$	$\alpha=0,5$
0,01	0,09412	0,1338	0,1767	0,118	0,175	0,238
0,04	0,1445	0,1939	0,2447	0,148	0,205	0,268
0,08	0,1938	0,2497	0,3085	0,188	0,245	0,308
0,10	0,2147	0,2740	0,3356	0,208	0,265	0,328
0,20	0,3163	0,3830	0,4536	0,308	0,365	0,428
0,30	0,4139	0,4839	0,5594	0,408	0,465	0,528
0,40	0,5110	0,5822	0,6600	0,508	0,565	0,628
0,50	0,6083	0,6795	0,7596	0,608	0,665	0,728
0,60	0,7060	0,7767	0,8575	0,708	0,765	0,828
0,70	0,8042	0,8739	0,9550	0,808	0,865	0,928
0,80	0,9027	0,9714	1,0520	0,908	0,965	1,30
0,90	1,0010	1,0690	1,1500	1,010	1,075	1,130
1,00	1,1000	1,1670	1,2470	1,110	1,165	1,230
2,00	2,0960	2,1560	2,2300	2,110	2,165	2,230
4,00	4,0940	4,1500	4,2170	4,110	4,165	4,230

довжини вільного пробігу λ_g (рівняння 1.288) у функцію ФЗ, то ефективні асимптотичні форми отримують з початкової асимптотики заміною k на k_g ($k_g = k/f(\alpha)$). Таким чином, на основі співвідношень (1.44) і (1.45) маємо

$$A(k_g, p) \approx A(k_g, p, 0) \approx \frac{3}{8} \frac{1-p}{k_g} \text{ при } k_g \gg 1, \quad (1.315)$$

$$1 - A(k_g, p) \approx 1 - A(k_g, p, 0) \approx \frac{4}{3} \frac{1-p}{1+p} \frac{1}{k_g} \frac{1}{0,4228 - \ln k_g} \quad (1.316)$$

при $k_g \ll 1$.

У граничних випадках при малих і великих значеннях α , функцію МШ $f(\alpha)$ (рівняння 1.275) можна подати наближеними виразами [7; 82]:

$$f(\alpha) \approx 1 - \frac{3}{2}\alpha + 3\alpha^2 \text{ при } \alpha \ll 1, \quad (1.317)$$

$$f(\alpha) \approx \frac{3}{4\alpha} - \frac{3}{5\alpha^2} \text{ при } \alpha \gg 1. \quad (1.318)$$

Їх легко отримати зі звичайних наближених функцій Котті [5], замінюючи μ_g (рівняння 1.300) на μ (рівняння 1.84) або μ^* (рівняння 1.85):

$$C(\mu_g) \approx -\frac{3}{2\mu_g} \ln \mu_g \text{ при } \mu_g \ll 1, \quad (1.319)$$

$$C(\mu_g) \approx 1 - \frac{3}{8\mu_g} \text{ при } \mu_g \gg 1. \quad (1.320)$$

1.3.2.2 Лінеаризоване співвідношення для питомого опору полікристалічної плівки

Спочатку розглянемо випадок для товстих плівок.

Підстановка рівняння (1.308) у загальний вираз для опору моделі МШ (рівняння 1.283) дає

$$\rho_f / \rho_0 \approx \{f(\alpha)\}^{-1} \left\{ 1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} \frac{m(\alpha)}{f(\alpha)} \right\}, \quad k \gg 1. \quad (1.321)$$

Питомий опір нескінченно товстої полікристалічної плівки позначається як ρ_g , і наведене вище рівняння зручно переписати таким чином:

$$\rho_f / \rho_0 \approx 1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} \frac{m(\alpha)}{f(\alpha)} \text{ при } k \gg 1. \quad (1.322)$$

У випадку великодисперсних зразків співвідношення (1.283) перетворюється до вигляду

$$\rho_f / \rho_g \approx 1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} \frac{m(\alpha)}{f(\alpha)} \left[1 - \left(C_2 - \frac{3}{2} \right) \alpha \right] \quad (1.323)$$

при $k \gg 1$, $\alpha \ll 1$, враховуючи співвідношення (1.312) і (1.317).

Спрощене рівняння має вигляд

$$\rho_f / \rho_g \approx 1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k}, \quad k \gg 1, \quad \alpha \ll 1. \quad (1.324)$$

Це просто асимптотичний вираз ФЗ (рівняння (1.44)), оскільки $\alpha \ll 1$ і розсіяння на межах зерен стає настільки малим, що ним можна знехтувати.

У випадку дрібнодисперсних зразків, тобто при $\alpha \gg 1$, співвідношення (1.322) перетворюється до вигляду

$$\rho_f / \rho_g \approx 1 + \frac{1-p}{4k} \quad \text{при } k \gg 1 \quad \alpha \gg 1. \quad (1.325)$$

Необхідно зазначити, що ефективна довжина вільного пробігу моделі (підпункт 1.3.1.2) приводить до аналогічних рівняннях шляхом підстановки рівняння (1.44) у рівняння (1.291):

$$\rho_f / \rho_g \approx 1 + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} f(\alpha), \quad \text{при } k \gg 1. \quad (1.326)$$

Зрозуміло, що це рівняння зводиться до (1.322), якщо

$$m(\alpha) = [f(\alpha)]^2. \quad (1.327)$$

Співвідношення (1.327) справедливе для двох граничних випадків: малих та великих значень параметра α .

При $\alpha \ll 1$

$$[f(\alpha)]^2 \approx 1 - 3\alpha. \quad (1.328)$$

Тоді, виходячи із рівняння (1.312), можна записати

$$m(\alpha) \approx 1 - 3,4\alpha \text{ при } \alpha \ll 1. \quad (1.329)$$

При $\alpha \gg 1$ $[f(\alpha)]^2 \approx \frac{9}{16\alpha^2},$ (1.330)

а із рівняння (1.314) отримуємо

$$m(\alpha) \approx \frac{1}{2\alpha^2}, \quad \alpha \gg 1. \quad (1.331)$$

Якщо припустити правильність співвідношення (1.327), то співвідношення (1.326) може бути переписане так:

$$\rho_f \approx \rho_g + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k_g} \rho_g \text{ при } k \gg 1 \quad (1.332)$$

або у вигляді

$$\rho_f \approx \rho_g + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} \rho_o, \quad k \gg 1. \quad (1.333)$$

Останнє співвідношення відповідає правилу Маттіссена [83]: загальний питомий опір ρ_f пов'язаний із процесами розсіювання електронів в об'ємі плівки, на межах зерен і на зовнішніх поверхнях плівки. Цьому приділятиметься особлива увага у підпункті 1.3.10.

Співвідношення (1.332) і (1.333) можна також отримати на основі ефективної моделі Котті (із співвідношення 1.83), навіть якщо стандартний параметр Котті (співвідношення 1.85) замінити на розширений параметр (рівняння 1.85).

Після цього був зроблений висновок, що зручною формою для наведеного питомого опору товстих плівок є

$$d \rho_f / \rho_g \approx d + \frac{3}{8}(1-p) \frac{\rho_o}{\rho_g} \lambda_o \text{ при } k > 1. \quad (1.334)$$

Для великодисперсних зразків наведене вище співвідношення перетворюється до вигляду

$$k \rho_f / \rho_g \approx k + \frac{3}{8}(1-p) \left(1 - \frac{3}{2}\alpha\right) \text{ при } k > 1 \text{ і } \alpha \ll 1. \quad (1.335)$$

Для більш широкого діапазону було отримане таке співвідношення [84]:

$$d \rho_f / \rho_g \approx d + (1-p) \lambda_o (C_3 + C_4 \alpha)^{-1} \quad (1.336)$$

при $k > 0,5$ і $\alpha > 0,5$, коли $C_3 = 2,76$ та $C_4 = 3,23$.

Для дуже тонких плівок альтернативний вираз для питомої провідності може бути подане таким співвідношенням:

$$\rho_f / \rho_g \approx \frac{4}{3} \frac{1-p}{1+p} \frac{f(\alpha)}{k} \left[0,4228 + \ln \frac{f(\alpha)^{-1}}{k} \right] \quad (1.337)$$

для $k \ll 1$.

За нашими даними, справедливість співвідношення (1.337) може бути перевірена на основі порівняння з даними, розрахованими в рамках моделі МШ, але тільки для випадку дифузного розсіювання від зовнішніх поверхонь плівки ($p = 0$) [85]. Відхилення становить менше 7 % при $k < 0,02$ і $\alpha < 2$.

1.3.2.3 Лінеаризоване співвідношення для питомого опору монокристалічної плівки

Співвідношення (1.334) справедливе лише при $k \gg 1$ і $\alpha \ll 1$, оскільки діаметр зерен плівок, що задовольняють умову моно кристалічності, одного порядку товщини.

Отже, ураховуючи, що діаметр плівки дорівнює товщині плівки.

$$\rho_{fm}/\rho_0 \approx f(\alpha) + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} m(\alpha) \quad \text{при } k \gg 1 \text{ і } \alpha \ll 1. \quad (1.338)$$

Беручи до уваги співвідношення (1.312) і (1.317), згідно з [86], можна записати

$$\rho_{fm}/\rho_0 \approx 1 + \frac{3}{8} \alpha + \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} \quad \text{при } k \gg 1. \quad (1.339)$$

У явному вигляді може бути записано як

$$d \rho_{fm}/\rho_0 \approx d + \frac{3}{2} \lambda_o \left[\frac{R}{1-R} + \frac{1-p}{4} \right] \quad \text{при } k \gg 1, \quad (1.340)$$

Числові розрахунки [87] показали, що співвідношення відхиляється менше ніж на 7 % від співвідношення МШ (1.279) при $k > 1$. При малих значеннях k необхідно використовувати більш складні моделі [87].

Для дуже тонких плівок навіть співвідношення (1.322) є справедливим, але параметр ρ_g для плівок, що задовольняють умову монокристалічності, повинен бути замінений на $\rho_0/f(\alpha)$:

$$\rho_{fm}/\rho_0 \approx \frac{4}{3} \frac{1-p}{1+p} \left[0,4228 + \ln \frac{3}{4\alpha k} \right]^{-1} \quad \text{для } k \ll 1. \quad (1.342)$$

Після публікації праці Маядаса і Щацкеса [7] авторами праць [7; 67; 73; 88 – 107], що стосуються електропровідності, були використані рівняння МШ або їх асимптотичне рівняння для інтерпретації експериментальних даних. Усі процедури, які використовуються для визначення електричних параметрів, можуть бути подані у вигляді загальної методики, наведеної нижче, опускаючи випадок для дуже тонких плівок.

Ми пропонуємо загальну процедуру визначення параметрів електроперенесення для випадків, коли структура плівки відома і коли вона не відома.

Оскільки рівняння (1.334) записане у загальному вигляді (незалежно від структури плівки), то перший графік (рис. 1.17) необхідно побудувати у координатах $d \cdot \rho_f$ від d для широкого діапазону товщин. Якщо в результаті отримуємо лінійну залежність, то можна зробити висновок про те, що електропровідність плівки можна описати в рамках моделі МШ. Такий висновок може бути зроблений тільки якщо розрахункові значення параметрів провідності мають фізичний зміст.

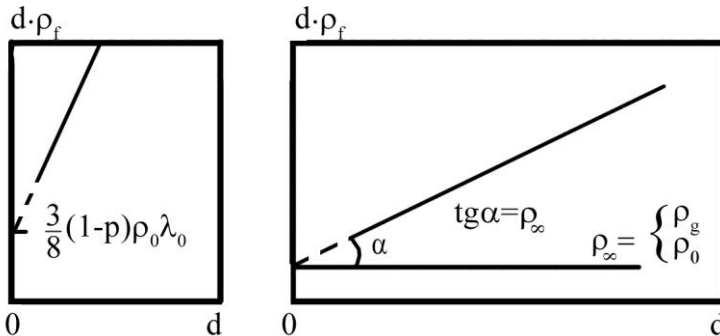


Рисунок 1.17 – Процедура для визначення параметрів електроперенесення в рамках моделі МШ

Величина ρ_g може бути знайдена за кутом нахилу прямої. При цьому можливі два випадки: ρ_g значно відрізняється від табличного значення для масивного питомого опору ρ_0 або відрізняється неістотно.

У першому випадку плівки матимуть полікристалічну структуру, якщо умови одержання можуть гарантувати, що структура однорідна і що впливом домішок можна знехтувати.

У першому випадку для полікристалічних плівок точка перетину залежності $\rho_f \cdot d$ від d з віссю ординат дозволяє

розрахувати величину $\frac{3}{8}(1-p)\rho_0\lambda_0$. Використовуючи табличні значення ρ_0 і λ_0 , можна розрахувати величину параметра p . Величину R можна розрахувати, використавши експериментальне значення ρ_g (співвідношення (1.274) і (1.276)) і табличну величину ρ_0 (табл. 1.7).

Величину параметрів p і R для полікристалічних плівок, отриманих таким методом, пов'язують із чітко визначеним структурним станом плівок. Це може бути структура або до старіння, або після, або на будь-якому етапі процесу старіння. Автори праць [31; 94; 104; 106; 108; 109] вважають, що процес відпалювання головним чином призводить до зміни шорсткості зовнішньої поверхні плівки або, згідно з [110], до зміни розміру зерна. Це питання буде розглянуте у наступних підпунктах 1.3.8 і 1.3.10.

Таблиця 1.7 – Числові значення σ_g/σ_0 згідно з моделлю МШ

$D_g \cdot \lambda_0^{-1}$	$R = 0,01$	$R = 0,02$	$R = 0,03$	$R = 0,04$	$R = 0,05$
0,1	0,3957	0,2279	0,1476	0,1005	0,06946
0,2	0,5630	0,3684	0,2557	0,1817	0,1294
0,3	0,6566	0,4645	0,3385	0,2489	0,1817
0,4	0,7167	0,5345	0,4042	0,3055	0,2279
0,5	0,7587	0,558	0,4576	0,3538	0,2688
0,6	0,7897	0,6303	0,5020	0,3857	0,3055
0,7	0,8136	0,5545	0,5395	0,4322	0,3385
0,8	0,8326	0,6928	0,5716	0,4645	0,3684
0,9	0,8481	0,7167	0,5995	0,4932	0,3957
1,0	0,8608	0,7371	0,6238	0,5189	0,4206
2,0	0,9244	0,8465	0,7651	0,6793	0,5880

У випадку монокристалічних плівок використовується співвідношення (1.340). Величина параметра

$\frac{3}{2} \left[\frac{R}{1-R} + \frac{1-p}{4} \right]$ розраховується за кутом нахилу лінійної

залежності $\rho_f d$ від d при використанні відомих значень ρ_0 і λ_0 . Параметри p і R не можуть бути визначені окремо.

Результати робіт різних авторів узагальнені в табл. 1.8.

Випадок дуже тонких плівок не буде розглянутий, оскільки експериментальні дослідження зазвичай проводяться при низьких температурах, при яких можуть спостерігатися нові ефекти (надпровідність тощо).

Крім того, всі експериментальні дані, які інтерпретувалися в рамках моделі МШ, також можуть бути описані в рамках три- або двовимірної моделі, про що йтиметься у пунктах 1.3.4 і 1.3.5.

Таблиця 1.8 – Параметри розсіювання електронів (узагальнення літературних даних для різних плівок)

Матеріал плівки	Температура осадження, °С	p	R	Літерат. джерело	При-мітки
1	2	3	4	5	6
Al	від 20 до 140 140	0	0,19	102	невідп.
		0	0,28	99	
		0,2	0,15	7	
			0,17		невідп. відп.
		0,13- 0,17 0,51	0,45 0,44	104, 107	
Mo	650		0,3	101	
	від 300 до 650		0,41–0,23	97	

Продовження табл. 1.8

1	2	3	4	5	6
---	---	---	---	---	---

Mo	< 200		0,29–0,33 0,44–0,61	100	відп. до 900° С невідп.
Co	$T_{\text{кім}}$ > 450	0 0	0,07 0,2 0–0,5	92 91 88	відп. при 150° С відп. відп.
Cu		0	0,28 0,24	102 7	
Au	-23		0,29– 0,33 0,94– 0,97 0,73– 0,82	96 94 94	невідп. відп.
Ag		0	0,25	102	
Ni		0	0,40	102	
Sn	-131		0,39– 0,48 0,29– 0,33 0,42	98 96 93	невідп. невідп.
In	$T_{\text{кім}}$	0	0,26	67	відп. при 90° С.
Zn		0,16– 0,35 0,5	0,53 0,52	104, 107	невідп. відп.

Також можна зазначити, що асимптотика (1.339) для питомого опору при значному зменшенні товщини має загальний вигляд, запропонований Вісманом [111] у термінах коефіцієнтів лінеаризації, які не пов'язані з фізичними параметрами.

1.3.3 Одновимірні статистичні моделі

1.3.3.1 Математичний опис зерномежового розсіювання електронів

Виходячи з того самого припущення, що й Маядас Шацкес [7] (процеси розсіювання електронів на межі зерен, паралельних електричному полю, не враховуються, а межі зерен, які перпендикулярні до електричного поля, зображуються у вигляді лінії дислокацій), автори праць [8; 112; 113] запропонували альтернативні моделі, що описують внесок процесу розсіювання на межі зерен у величину питомого опору.

Таким чином, для всіх наведених нижче моделей спільним є те, що, як і в моделі МШ, враховується внесок процесів розсіювання електронів на межах зерен, перпендикулярних до прикладеного електричного поля, у величину питомого опору полікристалічних або монокристалічних плівок. Також для всіх моделей спільним є те, що процес розсіювання на межі зерен описується коефіцієнтом проходження t , який дорівнює кількості електронів, що долають потенціальний бар'єр, який є межею зерна, зі збереженням хвильового вектора електронів \vec{K} . Решта електронів відбиваються дифузно у всіх напрямках від межі зерна і роблять свій внесок у величину рівноважного розподілу F^0 .

Тельє та ін. [113] запропонували статистичну модель меж зерен, згідно з якою ймовірність того, що електрони пройшли відстань L , не розсіявшись на межі зерна, визначається як P та залежить від числа N плоских меж зерен і коефіцієнта проходження t :

$$P = t^N = \exp \left\{ -N \ln \frac{1}{t} \right\}. \quad (1.343)$$

Якщо коефіцієнт проходження приблизно дорівнює одиниці, то електрони, що пройшли відстань L між двома зіткненнями, повинні були пройти через декілька меж зерен без процесів дифузного розсіювання. За цієї умови ймовірність може бути описана експоненціальною функцією СДВП, що пов'язана з процесами розсіювання на межах зерен:

$$P = \exp\{-L/\lambda\}. \quad (1.344)$$

Згідно з геометрією цієї моделі (рис. 1.18) шлях L може бути виражений як

$$L = \left(\sum_i D_i \right) (|\cos \delta|)^{-1}. \quad (1.345)$$

Зі статистичної точки зору

$$\sum_i D_i = ND_g. \quad (1.346)$$

Необхідно відзначити, що ця модель не враховує регулярності масиву меж зерен. Хоча й у випадку регулярного масиву внесок процесів розсіювання на межі зерна не дорівнює нулю. З іншого боку, при обговоренні статистичної моделі необхідно мати на увазі, що при експоненціальному підході (1.344) вона може бути використана за умови

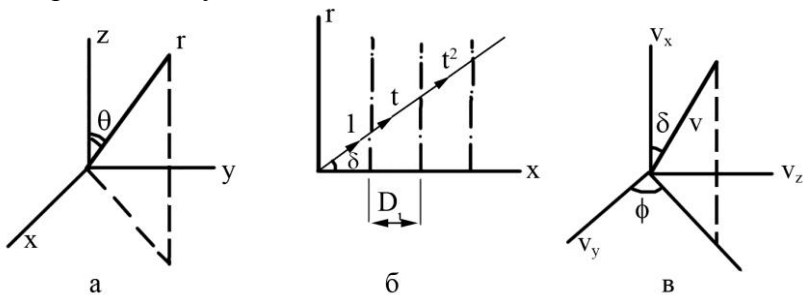


Рисунок 1.18 – Геометрія статистичної моделі

$$t > 0,3. \quad (1.347)$$

Об'єднавши рівняння (1.343) і (1.346), можна показати, що СДВП у плівці залежить від нормальної складової швидкості $v_x = v \cdot \cos \delta$

$$\lambda = D_g \left\{ |\cos \delta| \ln \frac{1}{t} \right\}^{-1}. \quad (1.348)$$

1.3.3.2 Питомий опір, пов'язаний із зерномезовим розсіюванням

Припускаючи справедливість правила Маттіссена, одинична довжина вільного пробігу може бути визначена для кожного з процесів розсіювання (в об'ємі плівки на фонах і дефектах та на межах зерен). Загальну величину СДВП можна записати як

$$\frac{1}{\lambda_g} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda}. \quad (1.349)$$

Альтернативна форма рівняння (1.349)

$$\lambda_g = \lambda_0 \left[1 + v^{-1} |\cos \delta| \right] \quad (1.350)$$

вводиться для зручного визначення параметра зерен v :

$$v = D_g \left\{ \lambda_0 \cdot \ln \frac{1}{t} \right\}^{-1}. \quad (1.351)$$

Рівняння Больцмана для геометрії, поданої на рис. 1.18, може бути записане у вигляді

$$\frac{eE}{m} \frac{\partial F^0}{\partial v_x} = \frac{F^1}{\tau_g} + v_x \frac{\partial F^1}{\partial x} \quad (1.352)$$

при $\tau_g \nu = \lambda_g$. Оскільки коефіцієнт проходження t передбачається близьким до одиниці, то згідно зі співвідношенням (1.350) імовірність розподілу не залежить від координати положення. Отже можна подати відхилення функції розподілу F^1 у вигляді

$$\lambda_g \frac{eE}{m} \frac{\partial F^0}{\partial \nu_x} = \nu F^1. \quad (1.353)$$

Розраховуючи густини струму на основі загального рівняння (1.32), після деяких математичних перетворень, отримуємо вираз для питомої провідності

$$\sigma_g = \frac{3}{2} \sigma_0 \int_0^\pi \frac{\cos^2 \delta \sin \delta}{1 + \nu^{-1} |\cos \delta|} d\delta \quad (1.354)$$

у полярних координатах (рис. 1.18 в). Виконавши інтегрування, отримуємо вираз для питомої провідності, пов'язаної з розсіюванням на межах зерен:

$$\sigma_g / \sigma_0 = \frac{3}{2} \nu - 3\nu^2 + 3\nu^3 \ln \left(1 + \frac{1}{\nu} \right). \quad (1.355)$$

1.3.3.3 Порівняння з моделлю Маядаса-Шацкеса. Коментарі до моделі Варкуша

У цьому підпункті проведено порівняння моделі МШ та моделі Варкуша, що враховує розсіювання електронів на межі зерен [8]. Графіки залежностей σ_g/σ_0 від $\nu-1$ (співвідношення 1.355) і σ_g/σ_0 від α (співвідношення 1.274) подані на рис. 1.19, показують, що в діапазоні $0,1 < \nu^{-1} < 10$ спостерігається стале відхилення, яке безпосередньо пов'язане з параметром зерна ν як

$$\alpha \propto v^{-1}. \quad (1.356)$$

Відхилення визначається коефіцієнтом, величина якого близька до 2 (з точністю до 5 %) і який може бути визначений із граничних випадків моделі МШ або співвідношення для статистичної моделі. Для дрібнодисперсних плівок граничний випадок співвідношення (1.355) має вигляд

$$\sigma_g/\sigma_0 \approx \frac{3}{2}v, \quad v \ll 1, \quad (1.357)$$

в той час як граничний випадок співвідношення МШ

$$\sigma_g/\sigma_0 \approx \frac{3}{4\alpha}, \quad \alpha \gg 1. \quad (1.358)$$

Для великодисперсних плівок співвідношення перетворюються до вигляду

$$\sigma_g/\sigma_0 \approx 1 - \frac{3}{4v}, \quad v \gg 1, \quad (1.359)$$

$$\sigma_g/\sigma_0 \approx 1 - \frac{3}{2}a, \quad \alpha \ll 1. \quad (1.360)$$

Таким чином, чітко бачимо, що для широкого діапазону

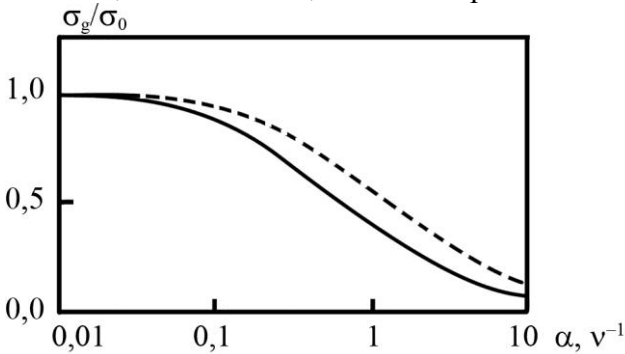


Рисунок 1.19 – Залежність σ_g/σ_0 від v^{-1} і α (сувільна лінія – розрахунок на основі моделі МШ, пунктирна лінія – на

основі статистичної моделі)

параметрів ν і α узгодження можна досягти при

$$\alpha \approx 0,5\nu^{-1}, \quad (1.361)$$

що добре узгоджується з характером зміни питомої провідності, поданої на рис. 1.19.

Коефіцієнт проходження t і експоненціальна функція P характеризують відстань між двома процесами зерномежового розсіювання (рис. 1.20), однак є деякі моменти у моделі Варкуша, які необхідно прокоментовані:

- для використання експоненціального закону (1.343) не має необхідності вважати, що всі зерна мають однаковий діаметр;

- геометрія моделі Варкуша дещо відрізняється від геометрії, використаної в моделі Тельє та ін. Згідно з рис. 1.20а Варкуш розрахував відстань L у площині zOu як

$$L = \frac{nD'}{|\sin \theta|}. \quad (1.362)$$

На основі вищезазначеного можна оцінити величину СДВП λ_g , пов'язану з межами зерен [113]:

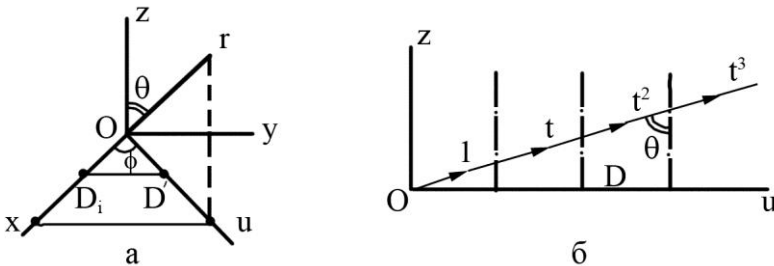


Рисунок 1.20 – Геометрії статистичної моделі (а) і моделі Варкуша в полярних координатах (r , θ , ϕ)

$$\lambda_g = \lambda_0 \left[1 + \frac{\lambda_0}{D'} |\sin \theta| \ln \frac{1}{t} \right]^{-1}. \quad (1.363)$$

Остаточний вираз для питомої провідності згідно з Варкушем має вигляд

$$\sigma_g = \frac{2\pi}{h^3} e^2 m^2 v_f^2 \lambda_0 \int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta}{1 + \frac{\lambda_0}{D'} \ln \frac{1}{t} |\sin \theta|} d\theta, \quad (1.364)$$

де відстань D визначається як проекція на вісь Ox середнього діаметра зерна D_g .

Разом з тим при переході до полярних координат (v, θ, ϕ) (див. рис. 1.20), очевидним стає той факт, що більш правильне геометричне трактування при визначенні СДВП пов'язане із впливом меж зерен на рух електронів провідності [9]:

$$\lambda = D_g \left[|\sin \theta| |\cos \phi| \ln \frac{1}{t} \right]^{-1} \quad (1.365)$$

при $D' = D_i |\cos \phi|$.

Тоді вираз для зміни питомої провідності можна записати у вигляді

$$\sigma_g / \sigma_0 = \frac{3}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\sin^3 \theta \cos^2 \phi}{1 + \frac{\lambda_0}{D_g} |\cos \phi| |\sin \theta| \ln \frac{1}{t}} d\theta d\phi. \quad (1.366)$$

Рівняння (1.366) досить важко проінтегрувати в полярних координатах, але, як було показано в попередньому пункті, більш зручно все ж таки використовувати координати (v, θ, ϕ) .

Рівняння, аналогічне рівнянню (1.364), може бути отримане при використанні двовимірної моделі провідності, яка детально буде описана у підпункті 1.3.4.2.

Згідно з цією моделі співвідношення для питомої провідності, пов'язаної із межами зерен, можна записати у вигляді

$$\sigma_g = \frac{3}{4} \sigma_0 \int_0^{\pi} \frac{\sin^3 \theta}{1 + \frac{\lambda_0}{D_g} \left(\ln \frac{1}{p} \right) \frac{4}{\pi} |\sin \theta|} d\theta, \quad (1.367)$$

який відповідає альтернативній формі співвідношення (1.378) для випадку повністю дзеркального розсіяння на зовнішніх поверхнях (це рівняння може бути легко виведене при використанні рівнянь 1.373 і 1.376).

Отже, співвідношення Варкуша (1.364) може бути пояснене як результат дії процесів розсіювання, які відбуваються при потраплянні електронів провідності на межі зерен, що становлять двовимірний, а не одновимірний масив площин розсіяння [114].

1.3.4 Двовимірна модель провідності для металевієї плівки, що задовольняє умову монокристалічності

1.3.4.1 Розсіювання електронів у плівках, що задовольняють умову монокристалічності

Двовимірна модель [11] була побудована шляхом введення простого фізичного параметра, який істотно відрізняється від запропонованого Маядасом і Шатцкесом [7]. Крім того, внесок у величину питомого опору роблять електрони, що розсіюються як від перпендикулярних, так і паралельних, до прикладеного електричного поля \vec{E}_x меж зерен. У подальшому процеси зерномежового розсіювання будуть розглядатися як два окремі процеси розсіювання від масивів плоских меж, із шорсткою поверхнею, перпендикулярних відповідно до осей x і y (див. рис. 1.21). Використовуючи експоненціальний закон для ймовірності (електрон пройде частину шляху l не будучи дифузно

розсіяним на межах зерен), тобто

$$P_x = \exp(-L/\lambda_x), \quad P_y = \exp(-L/\lambda_y), \quad (1.368)$$

результуюча ймовірність визначатиметься як

$$P = P_x \cdot P_y = \exp\left\{-L\left(\frac{1}{\lambda_x} + \frac{1}{\lambda_y}\right)\right\}, \quad (1.369)$$

де індекси x і y належать до меж зерен, перпендикулярно до осей x і y відповідно.

Будемо вважати, що зі статистичної точки зору існує частина t електронів провідності, які проходять дзеркально (тобто зі збереженням хвильового вектора \vec{K}) через потенціальний бар'єр, який становить межа зерен, тоді як інші розсіюються дифузно і не роблять внесок у величину струму. Повертаючись до аналізу, поданого у підпункті 1.3.3.1., можна зробити висновок, що результуюча ймовірність, згідно з [11], буде визначатися як

$$P = t^{N_x + N_y} \quad (1.370)$$

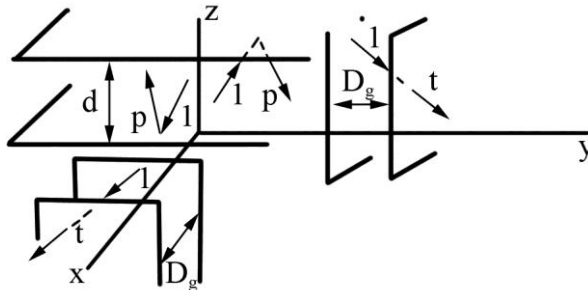


Рисунок 1.21 – Геометрія двовимірної моделі

і в полярних координатах

$$N_x = L \cdot D_g^{-1} |\cos \phi| |\sin \theta|, \quad (1.371)$$

$$N_y = L \cdot D_g^{-1} |\cos \phi| |\sin \theta|. \quad (1.372)$$

Таким чином за умови, що за одиничним часом релаксації можуть бути визначені всі механізми розсіювання (в об'ємі плівки на фонах і дефектах та на межах зерен), які роблять внесок у величину питомого опору незалежно один від одного, довжина вільного пробігу λ_g визначатиметься так:

$$\frac{1}{\lambda_g} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda_x} + \frac{1}{\lambda_y} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{D_g} \ln \frac{1}{t} \left\{ |\sin \theta| (|\cos \phi| + |\sin \phi|) \right\}. \quad (1.373)$$

З метою спрощення розрахунків було зроблено припущення, що межі зерен складаються із двох масивів, які мають однакову середню відстань D_g .

Процес розсіювання на зовнішніх поверхнях може бути описаний, як і в моделі Котті, таким виразом для довжини вільного пробігу [5] (див. пункт 1.1.2):

$$\lambda_s^{-1} = \lambda_0^{-1} \mu^{-1} |\cos \theta|. \quad (1.374)$$

Коефіцієнт μ визначається на основі відомого співвідношення (1.85) для коефіцієнта дзеркальності p (модель Ф3), який був уведений для того, щоб описати процеси розсіювання на зовнішніх поверхнях плівки.

Якщо припустити, що виконується правило (1.373), загальна СДВП задається як

$$\lambda(\theta) = \lambda_0 \left\{ 1 + C^2 \frac{\lambda_0 \ln \frac{1}{t}}{D_g} + |\cos \theta| \left[\frac{1}{\mu} - \frac{C \lambda_0 \ln \frac{1}{t}}{D_g} \right] \right\}^{-1}, \quad (1.375)$$

де $C = 4/\pi$.

Потрібно зазначити, що такий результат можна отримати лише при використанні наближеного співвідношення

$$|\sin \psi| + |\cos \psi| \approx C = 4/\pi. \quad (1.376)$$

Крім того, виявляється, що необхідно бути обережним при застосуванні двовимірної моделі, оскільки задовільні результати будуть отримані лише у разі, якщо коефіцієнт проходження $t \geq 0,3$.

1.3.4.2 Розмірний ефект у провідності плівок, що задовольняють умову монокристалічності

В основу аналізу розмірного ефекту у провідності монокристалічних плівок покладені рівняння Больцмана

$$F^1 = \frac{e}{m} E_x \tau(\theta) \frac{\partial F^0}{\partial v_x} \quad (1.377)$$

і співвідношення (1.32) для визначення густини струму J_x . Таким чином, співвідношення для питомої провідності плівки, що задовольняє умову монокристалічності, має вигляд

$$\sigma_{fm} = \frac{3}{4} \sigma_0 \int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta d\theta}{a_2 \cdot b_2 + b_2 |\cos \theta|}, \quad (1.378)$$

де

$$a_2 \cdot b_2 = 1 + C^2 v^{-1}, \quad (1.379)$$

$$b_2 = \mu^{-1} - C v^{-1} = \lambda_0 \left[d^{-1} \ln \frac{1}{p} = C D_g^{-1} \ln \frac{1}{t} \right], \quad (1.380)$$

а параметр зерен v визначається як

$$v = D_g \left[\lambda_0 \ln \frac{1}{t} \right]^{-1}. \quad (1.381)$$

Провівши інтегрування за θ , отримуємо

$$\sigma_{fm} / \sigma_0 = \frac{3}{2b_2} \left\{ a_2 - \frac{1}{2} + (1 - a_2^2) \cdot \ln(1 + a_2^{-1}) \right\}, \quad (1.382)$$

де σ_0 – питома провідність, пов'язана з процесами розсіювання електронів в об'ємі плівки на фононах і дефектах.

Беручи до уваги той факт, що середній діаметр зерна для плівки, що задовольняє умову монокристалічності, одного порядку або більший за товщину плівки d , питома провідність плівки, яка визначається за співвідношенням (1.382), у разі, якщо товщина плівки прямує до нескінченності, зводиться до питомої провідності, що описує процеси розсіювання в об'ємі плівки на фононах і дефектах. Крім того, рівняння (1.379) і (1.380) гарантують, що у випадку коли ефективність розсіювання електронів на межах зерен стає настільки малою, що нею можна знехтувати ($t \rightarrow 1$ та/або $D_g \rightarrow \infty$), визначення питомої провідності, узгоджується з моделлю Котті (співвідношення 1.83 і 1.85). Для ілюстрації цих особливостей розмірні залежності зміни питомої провідності наведені на рис. 1.22 для випадку, коли розмір зерна D_g дорівнює товщині плівки d .

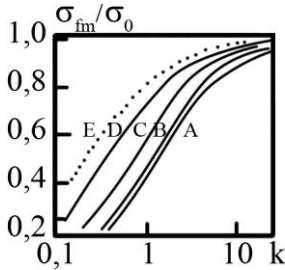


Рисунок 1.22 – Розмірна залежність зміни питомої провідності при $p = 0,5$ та $D_g = d$: $t = 0,9$ (графік А), $0,5$ (графік В), $0,7$ (графік D); графік Е – розрахунок на основі моделі Котті [81]

Повертаючись до випадку, коли $D_g = d$, співвідношення (1.382) перетворюється до вигляду

$$\sigma_{fm}/\sigma_0|_{k>1} \approx 1 - \frac{3}{8\mu} - \frac{1}{v} \left[C^2 - \frac{3}{8}C \right]. \quad (1.383)$$

1.3.4.3 Лінеаризоване співвідношення для провідності

Як показано в попередніх пунктах цього розділу, для порівняння експериментальних даних з розрахунковими зручно користуватися лінеаризованими виразами для питомої провідності плівки. У зазначеному пункті будуть подані лінеаризовані вирази для плівок, що задовольняють умову монокристалічності, діаметр зерна яких ідентичний товщині плівки або пропорційний їй. Для зручності розглянемо випадок $D_g = d$ [115]. Зазначивши, що аналогічний аналіз може бути проведений для випадку $D_g \sim d$. Оцінивши різницю $(k \cdot \rho_{fm} / \rho_0 - k)$ при різних значеннях коефіцієнтів розсіювання t і p , у роботі [115] було показано, що відношення питомого опору ρ_{fm}/ρ_0 може бути апроксимоване для заданих значень параметрів

розсіювання t_0 і p_0 таким виразом:

$$\rho_{fm} / \rho_0 \approx 1 + k^{-1} \cdot N(t_0, p_0) \quad (1.384)$$

з відхиленням менш ніж 5 % у широкому діапазоні зведеної товщини k ($k > 0,01$). Тут необхідно звернути увагу на той факт, що більша розбіжність виникає при використанні наближеного виразу

$$\sigma_{fm} / \sigma_0 \approx 1 - k^{-1} \cdot N(t_0, p_0) \quad (1.385)$$

замість (1.384).

Обираючи у подальшому значення коефіцієнтів t_0 і p_0 з урахуванням умов, які були раніше введені для двовимірної моделі (тобто t_0 і $p_0 > 0,3$), можна побудувати графік функції $N(t, p)$ відповідно у вигляді залежностей $N(t_0, p)$ від $\ln(1/p)$ та $N(t, p_0)$ від $\ln(1/t)$ (рис. 1.23). Оскільки функції розсіювання $N(t, p)$ можуть бути виражені за допомогою таких лінійних співвідношень:

$$N(t_0, p) = C_1 + C_2 \ln \frac{1}{p}, \quad (1.386)$$

$$N(t, p_0) = C_1^* + C_2^* \ln \frac{1}{t}, \quad (1.387)$$

де C_1, C_2, C_1^*, C_2^* константи.

Беручи до уваги той факт, що відмінність між константами C_2 і C_2^* при t_0 і p_0 незначна (рис. 1.23),

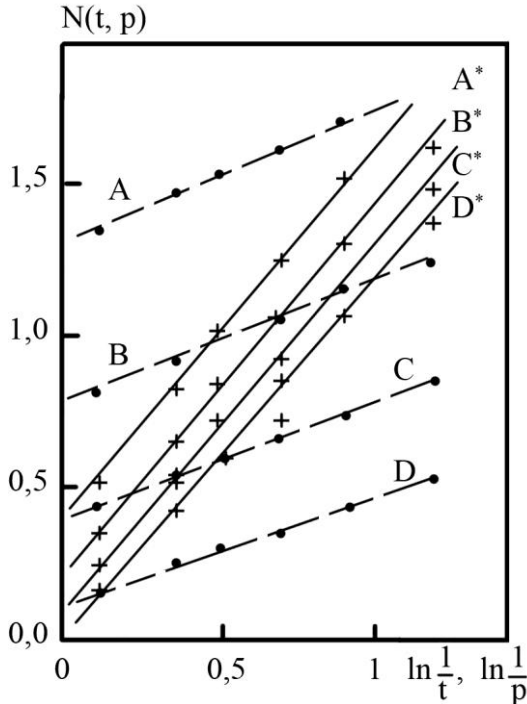


Рисунок 1.23 – Графіки залежності $N(t, p_0)$ від $\ln(1/t)$ (суцільні лінії) та $N(t_0, p)$ від $\ln(1/p)$ (пунктирні лінії) відповідно при $p_0 = 0,3$ (графік A^*), $0,5$ (графік B^*), $0,7$ (графік C^*) та $0,9$ (графік D^*); $t_0 = 0,3$ (графік A), $0,5$ (графік B), $0,7$ (графік C) та $0,9$ (графік D)

функція розсіювання може бути записана у вигляді

$$N(t, p) = C_2 \ln \frac{1}{p} + C_2^* \ln \frac{1}{t}. \quad (1.388)$$

Детальна оцінка величини констант C_2 і C_2^* зроблена в праці [115] дозволяє розширити діапазон застосування співвідношень (1.384) і (1.388):

$$C_2 = 0,36, \quad C_2^* = 1,144. \quad (1.389)$$

Порівняння табличних значень для питомого опору плівок, що задовольняють умову монокристалічності, з розрахунками на основі співвідношення (1.382) і наближеного рівняння

$$\rho_{fm} / \rho_0 = 1 + k^{-1} \left[0,36 \ln \frac{1}{p} + 1,144 \ln \frac{1}{t} \right] \text{ при } D_g = d \quad (1.390)$$

показало, що відхилення становить менше ніж 10 % при $k > 0,01$, $t > 0,3$ і $p > 0,3$ [115].

Відзначимо також, що співвідношення (1.390) узгоджується з емпіричним виразом для питомого опору плівок, що задовольняють умову монокристалічності, триманим Вісманом [111] на основі фізичних параметрів лінеаризації

$$\rho_f = \rho_0 \left[1 + \frac{3}{8}(1-p) \frac{\lambda_0}{d} + C_3 \frac{\lambda_0}{D_g} \right], \quad C_3 = \text{const.} \quad (1.391)$$

Однак це співвідношення не базується на теоретичному аналізі.

1.3.4.4 Порівняння з моделями Маядаса-Шацкеса і Варкуша

У праці Молі та Гераса [116] був проведений порівняльний аналіз розрахункових даних, отриманих на основі двовимірної моделі і моделі МШ для випадку плівок, які задовольняють умову монокристалічності. Для зручності порівняння результатів розрахунків величина параметра зерна v визначалася при використанні коефіцієнтів зерномежового розсіювання R , отриманих на основі розрахунків у рамках моделі МШ. При цьому співвідношення між коефіцієнтами v і α має вигляд

$$\alpha \approx v^{-1}, \quad (1.392)$$

де α – параметр розсіювання, визначений у рамках моделі МШ (співвідношення 1.276).

Якщо припустити, що $d = D_g$, то можна оцінити величину питомої провідності σ_{fm} на основі співвідношення (1.392) при зміні зведеної товщини k , що було зроблено у праці [116]. Результати, подані в табл. 1.9, показують, що відхилення становить менше 7 % в широкому діапазоні зміни величини k .

Варкуш [8; 112], використовуючи основні фізичні принципи моделі МШ, запропонував альтернативну модель для плівок, які задовольняють умову монокристалічності, враховуючи лише процеси розсіювання, що відбуваються на межах зерен, перпендикулярних до прикладеного електричного поля.

Однак, розрахунки мають більшу відповідність до «циліндричної» моделі зерен, описаної в працях [9; 114], а не одновимірної. Формулювання дещо складніше у порівнянні з наведеною вище двовимірною моделлю.

Таблиця 1.9 – Порівняння між співвідношеннями для питомої провідності σ_{fm}/σ_0 , розрахованими на основі моделі МШ ($p = 0,5$) та двовимірної моделі

k	Модель МШ			Двовимірна модель		
	$R = 0,1$	$R = 0,22$	$R = 0,42$	$R = 0,1$	$R = 0,22$	$R = 0,42$
0,01	0,0305	0,0175	0,0086	0,0284	0,0172	0,0091
0,04	0,1098	0,0663	0,0335	0,1037	0,0653	0,0355
0,10	0,2306	0,1496	0,795	0,2217	0,1486	0,0844
1	0,7341	0,6263	0,4560	0,7276	0,6336	0,4792
4	0,9176	0,8686	0,7651	0,9126	0,8732	0,7862
10	0,9656	0,9428	0,8894	0,9628	0,9450	0,9019

Тому для спрощення цієї моделі Варкуш та ін. [117] показали, що питомий опір плівки може бути описаний за допомогою функції, яка залежить від параметрів μ і ν :

$$L_x = D_g |\cos \phi|^{-1} |\sin \theta|^{-1}, \quad (1.393)$$

де $F(\mu)$ – відома функція Котті, $F^*(\nu)$ – зерномежова функція, яка не враховує процеси розсіювання на зовнішніх поверхнях плівки.

Необхідно зазначити, що співвідношення (1.393) не виводиться з точки зору фізичних міркувань і не узгоджується із попередньо передбаченим правилом Маттіссена, що ставить під сумнів правильність даної моделі. Порівняльний аналіз між наближеною і точним співвідношенням моделі Варкуша показав, що при зміні d/λ_0 і D_g/λ_0 у діапазоні від 0 до 0,1 відхилення значне, а в діапазоні від 0,1 до 1 для плівок, які задовольняють умові монокристалічності, відхилення становить приблизно 7%, у випадку коли розмір зерна у два рази більше ніж товщина плівки. Задовільні результати можуть бути отримані тільки при D_g/λ_0 і $d/\lambda_0 > 2$ [117]. Крім того, при зменшенні співвідношення між товщиною плівки і розміром зерна до 0,5 розрахунки на основі точного і наближеного співвідношень Варкуша значно відрізняються від теоретичних розрахунків, проведених на основі моделі МШ і двовимірної моделі. Виходячи з цих міркувань, можна зробити висновок, що діапазон застосування моделі Варкуша дуже обмежений.

1.3.4.5 Порівняння з експериментом

Експериментальні дослідження питомого опору плівок, які задовольняють умову монокристалічності, були детально описані в більш ранніх працях (див., наприклад, [7; 51; 53; 67; 88; 89; 91; 93; 99; 100; 111; 117 – 121]).

Оскільки кількість робіт досить значна, то в цьому підпункті, тому були вибрані типові праці [53; 88; 99; 121], в яких проведений порівняльний аналіз експериментальних даних з розрахунковими.

Згідно зі співвідношенням (1.390) для тонких і товстих плівок, що задовольняють умову монокристалічності, графік залежності $\rho_{fm} \cdot d$ від d становить пряму лінію з кутом нахилу, що дорівнює ρ_0 і відсікає на осі ординат відрізок, який дорівнює $\rho_0 \lambda_0 \cdot N(t, p)$. Таким чином, взявши за λ_0 величину з літератури¹⁾ можна легко визначити функцію $N(t, p)$. Проте необхідно зазначити, що на основі функції $N(t, p)$ неможливо легко отримати значення окремо для коефіцієнтів t і p . Однак для термовідпалених плівок доцільно очікувати, що коефіцієнт дзеркальності p буде близьким до 0,5. У разі, якщо немає простого зв'язку між величинами розміру зерна і товщиною плівки, то для аналізу необхідно мати розміри зерен, а для аналізу використовувати точне співвідношення (1.382) для того, щоб визначити величини коефіцієнтів t і p .

Маядасом та ін. [88] отримана розмірна залежність питомого опору ρ_{fm} для тонких плівок пермалою. Було показано, що середній розмір зерна термовідпалених плівок (вставка на рис. 1.24) при $d > 100 \text{ \AA}$ змінюється лінійно при зміні товщини плівки. Для обробки експериментальних даних була використана двовимірна модель. На рис. 1.24 подані теоретичні залежності,

1) Зрозуміло, що визначення λ_0 не менш складна задача, як і визначення t і p . Літературні дані для λ_0 , про які говорять автори, швидше за все, будуть відсутні або носити оцінний характер у рамках дифузного наближення (примітка редактора перекладу).

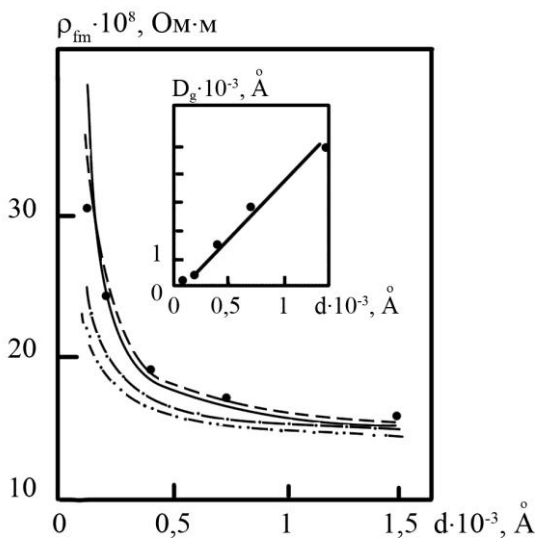


Рисунок 1.24 – Розмірна залежність питомого опору для відпалених плівок пермалюю [88] при $\lambda_0 = 225 \text{ \AA}$ і $\rho_0 = 14 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}\cdot\text{м}$: — $t = 0,6$ і $p = 0,3$; - - - $t = 0,8$ і $p = 0,2$; - · - · - ФЗ модель $p = 0$; · · · · ФЗ модель $p = 0,25$

побудовані при різних значеннях t і p . Отримано, що найбільше узгодження експериментальних і розрахункових даних при $p = 0,3$, $t = 0,6$ або при $p = 0,2$ і $t = 0,8$.

На практиці більшість тонких плівок, що задовольняють умову монокристалічності, мають розмір зерна однаковий з товщиною плівки. На основі експериментальних даних для питомого опору, отриманих у працях [99; 96; 111; 120; 121], які перебудовувалися в координатах $\rho_{fm} \cdot d$ від d , отримане значення функції $N(t,p)$ більше 0,5. Такий результат дозволяє описати розмірних ефект питомого опору в рамках двовимірної моделі. Це було зроблено у роботі [99] на прикладі плівок алюмінію. Оскільки величина питомого опору, визначеного експериментально, плівки нескінченної товстої плівки

алюмінію дорівнює $\rho_{\infty}=4,28 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, що кількісно узгоджується з табличними даними, то справедливим буде перебудувати ці дані в координатах $k \cdot \rho_{fm} / \rho_0$ від k (рис. 1.25). З точки перетину прямої лінії з віссю ординат отримане значення $N(t,p) = 1,1$. При мінімально можливому значенні коефіцієнта дзеркальності в рамках двовимірної моделі ($p = 0,3$) величина коефіцієнта проходження $t \approx 0,37$.

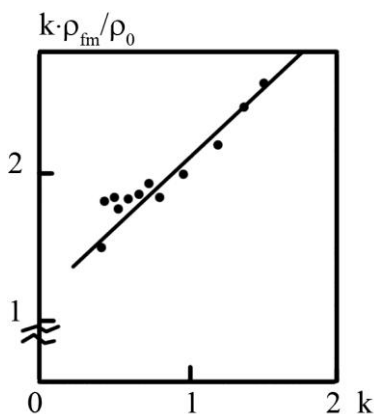


Рисунок 1.25 – Залежність $k \cdot \rho_{fm} / \rho_0$ від зведеної товщини k для плівок Al [99]

Ведлер і Чамбер дослідили розмірну залежність питомого для плівок Pd при різних температурах відпалювання [121]. Розглянемо результати досліджень терморезистивних властивостей після відпалювання до 400 К. Величина питомого опору $\rho_{\infty} = 11,5 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, отримана авторами праці [121], дуже близька до літературних даних ($10,03 \cdot 10^{-8}$ Ом·м). Графік залежності $k \cdot \rho_{fm} / \rho_0$ від k для термовідпалених до 400 К плівок Pd [121] знаходиться в узгодженні із співвідношенням (1.390) при $\lambda_0 = 110 \text{ \AA}$ (рис. 1.26). На основі графіка було визначено

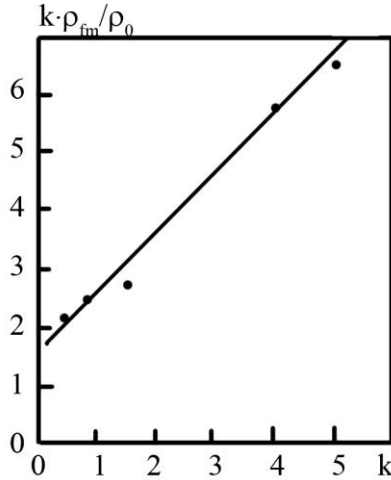


Рисунок 1.26 – Залежність $k \cdot \rho_{fm} / \rho_0$ від зведеної товщини k для плівок PI [121]

числове значення функції $N(t, p) = 1,6$.

У разі, якщо точка перетину лінійної залежності $\rho_{fm} \cdot d$ від d з віссю абсцис дає величину функції $N(t, p)$, меншу ніж 0,5, то розмірний ефект в електропровідності задовільно описується в рамках моделі ФЗ. Порівняння експериментальних даних з розрахунковими, отриманими на основі співвідношень моделі ФЗ або моделі Котті, дозволяють визначити величину параметра поверхневого розсіювання p . Величина коефіцієнта p , визначена таким чином, дещо менша від величини, отриманої при розрахунках в рамках двовимірної моделі. Цей висновок проілюстровано на прикладі експериментальних досліджень розмірної залежності питомої провідності для термовідпалених плівок Si, проведених у праці [53]. На рис. 1.27 подана залежність питомого опору від зведеної товщини ($\lambda_0 = 110 \text{ \AA}$) [53]. На вставці представлені теоретичні залежності, побудовані на основі двовимірної моделі при різних значеннях коефіцієнтів t і p

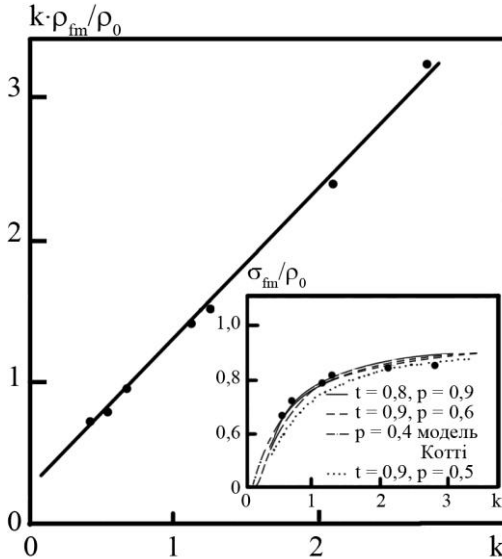


Рисунок 1.27 – Залежність $k \cdot \rho_{fm} / \rho_0$ від зведеної товщини k для термовідпалених плівок Cu [53]. На вставці показана теоретична залежність σ_{fm} / σ_0 від зведеної товщини k

та на основі моделі Котті при $p = 0,4$. Найбільше узгодження спостерігається при $t = 0,9$ і $p = 0,6$ або $t = 0,8$ і $p = 0,9$ (двовимірна модель) та при $t = 1$ і $p = 0,4$ (модель Котті). Однак жодного пояснення отриманим результатам не було зроблено.

1.3.5 Тривимірна модель провідності полікристалічної металевої плівки

Аналіз кристалічної структури плівок, отриманих у вакуумі при добре визначених умовах, показав, що у більшості випадків вони мають дрібнодисперсну структуру [96; 122 – 129]. Наприклад, плівки, отримані методами терморезистивного або високочастотного розпилення [96; 103; 106; 122; 123] або плівки, осадження яких

проводилося на холодну підкладку, мають у деяких випадках кристалічну структуру із середнім розміром зерна від 10 до 200 Å [96; 103; 106; 122; 123]. Отже, у цьому пункті буде проведено аналіз теоретичних моделей, присвячених вивченню розмірного ефекту в дрібнодисперсних плівках з урахуванням процесів розсіювання на межах зерен.

1.3.5.1 Розсіювання електронів у полікристалічних плівках

Як зазначалося раніше, структура тонких плівок, осаджених у вакуумі, складається у більшості випадків із масивів випадково орієнтованих полікристалів. Беручи до уваги цю особливість, була розроблена тривимірна модель [10], яка враховує, що межі зерен у полікристалічних металевих плівках мають бути подані у вигляді трьох масивів плоского типу із шорсткими поверхнями, орієнтованими перпендикулярно до осей x , y , z відповідно. Ці площини геометрично визначаються середньою міжплощинною відстанню D_g . У випадку полікристалічних плівок струм виникає внаслідок руху електронів через межу великої кількості зерен, тому СДВП електронів, пов'язану з зерном, можна статистично розрахувати шляхом визначення середнього діаметра D_g .

Повертаючись до попереднього аналізу, проведеного у підпунктах 1.3.3.1 і 1.3.4.1, можна легко показати, що в полярних координатах (r, θ, ϕ) відстані L_x , L_y і L_z (визначаються як відстань між двома послідовними точками вздовж траєкторії руху електронів і розташованими на межах зерен, перпендикулярних до осей x , y , z (див. рис. 1.28)) можна записати як

$$L_x = D_g |\cos \phi|^{-1} |\sin \theta|^{-1}, \quad (1.394)$$

$$L_y = D_g |\sin \phi|^{-1} |\sin \theta|^{-1}, \quad (1.395)$$

$$L_z = D_g |\cos \theta|^{-1}. \quad (1.396)$$

Для будь-якому напрямку кутів (θ , ϕ) вважається, що коефіцієнт t характеризує ту частину електронів, що пройшли крізь зерно, в той час як решта відбилася від неї. Якщо кількість електронів, які дифузно пройшли через межу поділу зерен до того, як вони будуть дзеркально відбиті, велика, то загальна ймовірність того, що електрон пройде шлях L без зіткнень, може бути записана у двох альтернативних формах:

$$P = t^{N_x + N_y + N_z}, \quad P = \exp\{-L\lambda^{-1}\}. \quad (1.397)$$

Оскільки електрон рухається під кутами (θ , ϕ) на відстані L_x , L_y і L_z між послідовними межами зерен, то коефіцієнти N_x , N_y і N_z можна подати у вигляді

$$N_i = L \cdot L_i^{-1} \quad i = x, y, z. \quad (1.398)$$

На основі проведеного аналізу можна записати, що величина СДВП, яка обмежується межами зерен, визначається як

$$\begin{aligned} \lambda^{-1} &= D_g^{-1} \ln \frac{1}{t} \{C |\sin \theta| + |\cos \theta|\} = \\ &= D_g^{-1} \ln \frac{1}{t} \{C^2 + (1-C) |\cos \theta|\}. \end{aligned} \quad (1.399)$$

Якщо розсіювання на зовнішніх поверхнях повністю дзеркальне, то необхідно враховувати лише два механізми розсіювання електронів: в об'ємі плівки на фонах і дефектах (характеризується величиною λ_0) та на межах зерен (характеризується величиною λ). За умови виконання правила Маттіссена загальну СДВП можна

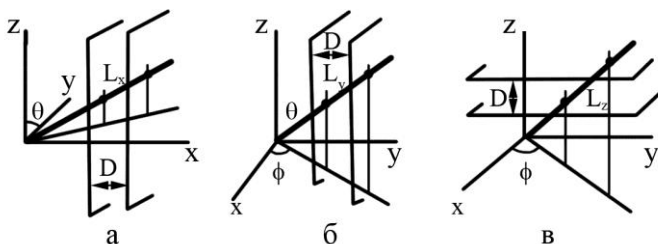


Рисунок 1.28 – Геометричне визначення відстаней L_x (а), L_y (б) та L_z (в)

позначити як λ_g , що визначається за співвідношенням

$$\frac{1}{\lambda_g} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{v} (C^2 + (1-C)|\cos \theta|). \quad (1.400)$$

Якщо розсіюванням на зовнішніх поверхнях плівки не можна знехтувати, то для визначення величини СДВП необхідно врахувати цей механізм, використавши співвідношення (1.374). Тоді загальна СДВП $\lambda(\theta)$ буде визначатися як

$$\frac{1}{\lambda(\theta)} = \frac{1}{\lambda_0} \left\{ 1 + \frac{C^2}{v} + |\cos \theta| \left(\frac{1-C}{v} + \frac{1}{\mu} \right) \right\}, \quad (1.401)$$

де коефіцієнти розсіювання v і μ визначаються за співвідношеннями (1.85) і (1.351) відповідно.

1.3.5.2 Розмірний ефект в електропровідності

У цьому підпункті будуть розглянуті плівки, для яких розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях не робить внесок у загальну величину питомого опору, тобто вони характеризуються середньою довжиною вільного пробігу λ_g . Виходячи із рівняння Больцмана для функції розподілу електронів, коли враховуються як розсіювання в об'ємі плівки на фонах і дефектах, так і на межах зерен, питома

провідність плівки при прикладенні зовнішнього електричного поля у напрямку осі x буде визначатися як

$$\sigma_g = \frac{3}{4\pi} \sigma_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \frac{\sin^3 \theta \cos^2 \phi}{1 + \lambda_0 \lambda_g^{-1}} d\theta. \quad (1.402)$$

Підставивши співвідношення (1.400) в (1.402) і позначивши для зручності $u = \cos \theta$, отримуємо

$$\sigma_g = \frac{3}{2} \sigma_0 \int_0^1 (1-u^2) \left[1 + \frac{C^2}{v} + \frac{1-C}{v} u \right]^{-1} du. \quad (1.403)$$

Провівши інтегрування за u , отримуємо

$$\sigma_g / \sigma_0 = G(v) = \frac{3}{2b_{3\infty}} \left\{ a_{3\infty} - \frac{1}{2} + (1 - a_{3\infty}^2) \ln(1 + a_{3\infty}^{-1}) \right\} \quad (1.404)$$

$$\text{при} \quad b_{3\infty} = (1-C) \cdot v^{-1}, \quad (1.405)$$

$$a_{3\infty} = (1 + C^2 v^{-1}) b_{3\infty}^{-1}. \quad (1.406)$$

Для двох граничних випадків: дуже великого і дуже малого значення коефіцієнта v , співвідношення (1.403) можна переписати у вигляді

$$\sigma_g / \sigma_0 \approx 1 - \frac{1}{v} \left[C^2 + \frac{3}{8}(1-C) \right] \text{ при } v \gg 1, \quad (1.407)$$

$$\sigma_g / \sigma_0 \approx \frac{3}{2} \frac{v}{1-C} \left\{ \frac{C^2}{1-C} - \frac{1}{2} + \left[1 - \frac{C^4}{(1-C)^2} \right] \ln \left(1 + \frac{1-C}{C^2} \right) \right\} \text{ при } v \ll 1. \quad (1.408)$$

У випадку повного або часткового дифузного розсіювання на зовнішніх поверхнях плівки, виконавши аналогічну процедуру, можна отримати таке співвідношення для провідності плівки:

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 = \frac{3}{2b_3} \left\{ a_3 - \frac{1}{2} + (1 - a_3^2) \ln(1 + a_3^{-1}) \right\} \quad (1.409)$$

при $b_3 = \mu^{-1} + \nu^{-1}(1 - C),$ (1.410)

$$a_3 = b_3^{-1} [1 + C^2 \nu^{-1}]. \quad (1.411)$$

У працях [130; 131] отриманий граничний випадок співвідношення (1.409) при великих значеннях a_3

$$\begin{aligned} \sigma_{fp} / \sigma_0 \approx \left(1 + \frac{C^2}{\nu} \right)^{-1} \left\{ 1 - \frac{3(1-C)}{8\nu} \left(1 + \frac{C^2}{\nu} \right)^{-1} \right\} - \\ - \frac{3}{8\mu} \left\{ 1 + \frac{C^2}{\nu} \right\}^{-2} \end{aligned}$$

при $a_3 \gg 1, \nu > 0,4$ і $\mu > 1.$ (1.412)

Комбінуючи співвідношення (1.412) з його граничною формою при великих μ , отримуємо

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 \approx 1 - \frac{3}{8\mu} \left[1 + \frac{C^2}{\nu} - \frac{3(1-C)}{8\nu} \right]^{-1} \text{ при } \nu > 0,4 \text{ і } \mu > 1. \quad (1.413)$$

Вводимо ефективний параметр μ_g , що визначається як $\mu_g = \mu(\sigma_g / \sigma_0)$, у співвідношення (1.413) й отримуємо

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 \approx 1 - \frac{3}{8\mu_g} \left(1 + \frac{3(1-C)}{4\nu} \right) \text{ при } \nu \gg 1 \text{ і } \mu \gg 1,$$

що також можна записати як

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 \approx 1 - \frac{3}{8\mu_g}, \text{ при } \nu \gg 1 \text{ і } \mu \gg 1. \quad (1.414)$$

Співвідношення (1.414) є основним співвідношенням ефективної моделі Котті (підпункт 1.3.2.3), але цей вираз

справедливий лише за умови асимптотичності, на відміну від виразу, отриманого раніше на основі моделі МШ.

На рис. 1.29 подано залежність σ_{fm}/σ_0 від зведеної товщини k при різних значеннях v . Ці залежності мають декілька особливостей:

- питома провідність плівки явно залежить від параметра зерен v і прямує до питомої провідності, визначеної в рамках моделі Котті, у разі, якщо внесок зерномежового розсіювання у загальну величину питомого опору стає незначним (великі зерна або коефіцієнт проходження близький до одиниці);

- виходячи із співвідношень (1.409) і (1.410), питома провідність плівки буде зменшуватися при збільшенні товщини до величини питомої провідності, що характеризується процесами розсіювання на межах зерен σ_g .

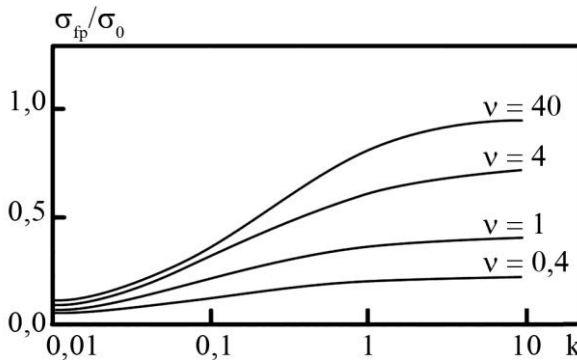


Рисунок 1.29 – Залежність σ_{fp}/σ_0 від зведеної товщини k при різних значеннях параметра зерен v і при $p = 0,5$

1.3.5.3 Лінеаризоване співвідношення провідності

Процедура лінеаризації співвідношення (1.413) подібна до аналогічних процедур, проведених у попередніх пунктах, тому в цьому підпункті будуть подані основні

результати. Оцінка величини ($\mu \cdot \rho_{fp} / \rho_g$ від μ) при різних значеннях параметра зерен v показала, що дана різниця є константою у разі, якщо v набагато більше μ ($\mu > 0,1$ [131]). Цей висновок дозволяє записати відношення питомого опору полікристалічної плівки ρ_{fp} до питомого опору нескінченно товстої полікристалічної плівки ρ_g як

$$\rho_{fp} / \rho_g \approx 1 + \frac{1}{k} \left\{ \ln \frac{1}{p} \right\} M(v), \quad (1.415)$$

де $M(v)$ – функція, що залежить від параметра зерен v .

На рис. 1.30 зображена залежність функції $M(v)^{-1}$ від v^{-1} , яка становить пряму лінію, що перетинає вісь ординат в точці, що дорівнює 3, а тангенс кута нахилу дорівнює 4,7, тобто

$$M(v) = [4,7v^{-1} + 3]^{-1}. \quad (1.416)$$

Потрібно зауважити, що різниця між точним значенням і тим, що розраховане на основі співвідношень (1.415) і (1.416), становить менше 8 % при $\mu > 0,1$ і $0,1 < v < 4$.

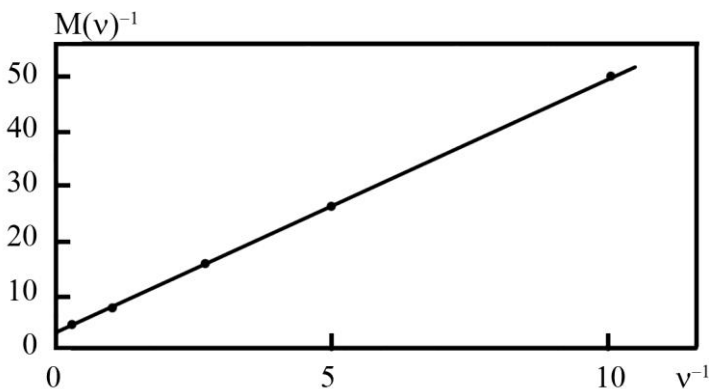


Рисунок 1.30 – Залежність $M(v)^{-1}$ від v^{-1}

1.3.5.4 Порівняння з моделлю Маядаса-Шацкеса

Оскільки межі застосування моделі ефективної СДВП були описані у підпункті 1.2.2.2, то порівняння тривимірної моделі з моделлю МШ легко здійснити у разі, якщо розсіювання на зовнішніх поверхнях плівки не враховується. Теоретичні значення функцій МШ $G(v)$ і $f(\alpha)$ подані на рис. 1.31.

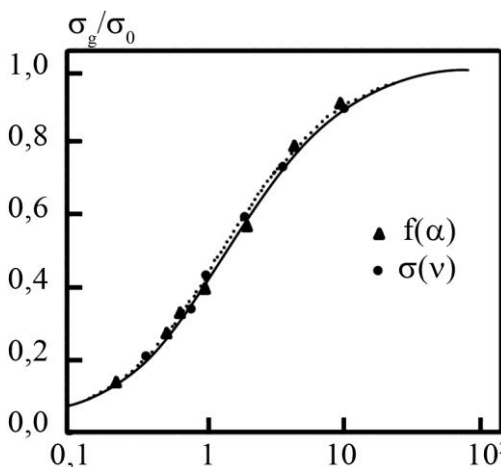


Рисунок 1.31 – Залежність питомої провідності σ_g/σ_0 від v і α^{-1} [10]

Графіки питомої провідності, отримані на основі розрахунків у рамках тривимірної моделі моделі МШ, мають однакову форму. Вони однакові у разі, якщо зерномежове розсіяння не досить ефективне ($v \gg 1$). Як наслідок можна отримати вирази для $G(v)$ і $f(\alpha)$ у граничних випадках:

$$G(v) \approx 1 - 1,518v^{-1}, \quad D_g/\lambda_0 \gg 1, \quad (1.417)$$

$$G(v) \approx 0,736v, \quad D_g/\lambda_0 \ll 1, \quad (1.418)$$

$$f(\alpha) = 1 - 1,5\alpha, \quad D_g/\lambda_0 \gg 1, \quad (1.419)$$

$$f(a) = 0,75\alpha^{-1}, D_g/\lambda_0 \ll 1. \quad (1.420)$$

Легко побачити, що кількісне узгодження спостерігається між величинами v і α^{-1} . На перший погляд, дана подібність є неочікуваною, оскільки тривимірна модель ураховує розсіювання на межах зерен у трьох площинах, у той час як модель МШ визначає питомий опір при розсіюванні на плоскій межі поділу. На даний час не має точного пояснення цієї особливості, проте деякий аналіз проведений у працях [75; 76; 78].

1.3.5.5 Порівняння з експериментом

На основі експериментальної залежності $\rho_{fp} \cdot d$ від d та використовуючи співвідношення (1.415) і (1.416), можна розрахувати параметри v і μ з достатньою точністю. Фактично питомий опір нескінченно товстої полікристалічної плівки, а отже і v , можна визначити за кутом нахилу прямої $\rho_{fp} \cdot d$ від d . На практиці це легше зробити, визначивши величину коефіцієнта дзеркальності p з точки перетину з віссю ординат, яка виражається як $(\lambda_0 \cdot \ln(1/p) \cdot M(v))$, оскільки відома лінійна залежність між $M(v)^{-1}$ і v^{-1} .

Порівняємо теоретичні розрахунки, проведені на основі тривимірної моделі, з експериментальними даними дослідження питомого опору для термовідпалених плівок Al і Zn, отриманих методом височастотного розпилення при кімнатній температурі [103; 106].

На рис. 1.32 подана залежність $d \cdot \rho_{fp}$ від d для плівок Al і Zn. Ці дані добре узгоджуються з теорією та укладаються на пряму лінію, як і очікувалося. За кутом нахилу були визначені коефіцієнти v і t (див. табл. 1.10), враховуючи, що середній розмір зерна для плівок Al дорівнює 150 Å, а для плівок Zn – 114 Å [130].

На рис. 1.33 наведено порівняння експериментальних даних, побудованих у координатах ρ_{fp}/ρ_g від k , з розрахунковими при різних значеннях коефіцієнта дзеркальності p , що вказує на часткове дзеркальне відбиття електронів від зовнішніх поверхонь, для плівок Al і Zn.

Корнелі та Алі [96] дослідили розмірну залежність питомого опору для плівок Au, отриманих методом діодного (серія зразків 1) і тріодного (серія зразків 2) високочастотного розпилення. Аналіз гістограми розподілу кристалічних зерен за розмірами показав, що середній розмір зерен не залежить від методу осадження і становить 100 Å. Також було встановлено, що середній розмір зерна менший за товщину плівки. На рис. 1.34 подана залежність $\rho_{fp} \cdot d$ від d для полікристалічних плівок Au товщиною $d > 50$ Å. Як бачимо з рисунка, теоретичні розрахунки на основі тривимірної моделі якісно узгоджуються з експериментальними результатами. Величина питомого опору для нескінченно товстої плівки і параметр зерна ν , визначені за кутом нахилу прямої, наведені у таблиці 1.10.

На рис. 1.34 праворуч подана залежність $k \cdot \rho_{fp}/\rho_g$ від k . Точка перетину графіка прямої лінії дає інформацію про величину коефіцієнта розсіювання від зовнішніх поверхонь плівки. Коефіцієнт дзеркальності $p = 0,6$ і $0,5$ для серії зразків 2 і 1 відповідно.

Оскільки Корнеллі та Алі зробили висновок, що для серії зразків 2 розсіювання є повністю дифузним, то дані були перебудовані в координатах ρ_{fp}/ρ_g від k для коректної апробації в рамках тривимірної моделі. Очевидно, що ця залежність описує випадок часткового дзеркального відбиття електронів від поверхні для плівок Au. Невідповідність залежностей, поданих на рис. 1.34 і 1.35, може бути пояснена

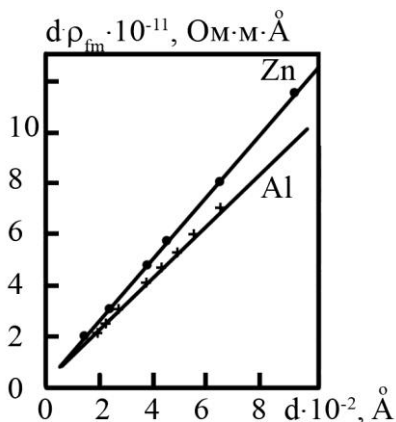


Рисунок 1.32 – Залежність $d \cdot \rho_{fm}$ від товщини d при кімнатній температурі для плівок Al і Zn [103; 106; 130]

Таблиця 1.10 – Розрахунки фізичних параметрів на основі тривимірної моделі

Al [103; 130]				Zn [106; 130]			
$\rho_0 = 14 \cdot 10^2,$ Ом·Å	ν	t	p	$\rho_0 = 14 \cdot 10^2,$ Ом·Å	ν	t	p
10,4	0,52	0,49	0,6	12,2	1,43	0,42	0,7
Au [96]							
серія 1				серія 2			
$\rho_0 = 14 \cdot 10^2,$ Ом·Å	ν	t	p	$\rho_0 = 14 \cdot 10^2,$ Ом·Å	ν	t	p
3,24	0,64	0,5	-	11,75	0,4	0,6	-

використанням моделі МШ і деякої невідповідності розрахунків складному співвідношенню МШ.

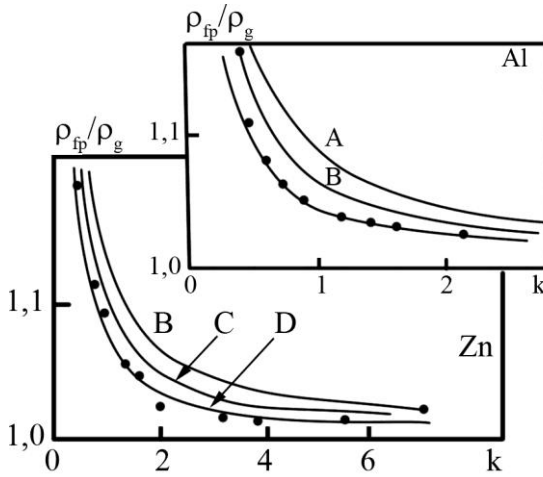


Рисунок 1.33 – Залежність ρ_{fp}/ρ_g від зведеної товщини k . А, В, С, D – теоретичні залежності, отримані при $p = 0,4; 0,6$ та $0,7$ відповідно при будь-якому значенні параметра ν

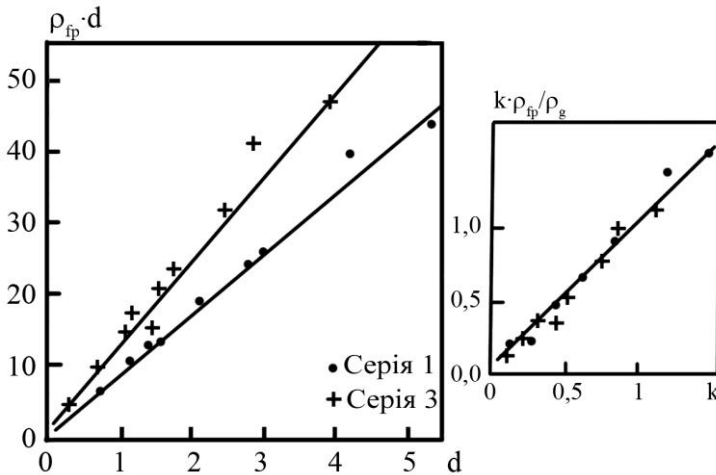


Рисунок 1.34 – Залежність $\rho_{fp} \cdot d$ від d для полікристалічних плівок Au [96]. Праворуч – залежність $k \cdot \rho_{fp}/\rho_g$ від k

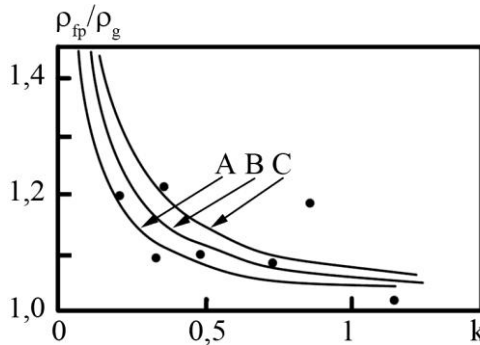


Рисунок 1.35 – Залежність ρ_{fp}/ρ_g від k для плівок Au [96].
Графіки А, В, С відповідають теоретичним розрахункам при $p = 0,6; 0,5$ і $0,4$ відповідно та $v = 0,4$

1.3.5.6 Ізотропне зерномежове розсіювання електронів

У випадку полікристалічних плівок (співвідношення 1.400 і 1.404) рекомендується проводити розрахунки, припускаючи, що виконується умова ізотропності зерномежового розсіювання.

Виходячи із цього, загальна СДВП описує процеси, що відбуваються в об'ємі плівки, на межах зерен і на зовнішніх поверхнях [80]:

$$\lambda^{-1}(\theta) = \lambda_0^{-1} + \lambda_i^{-1} + \lambda_s^{-1}, \quad (1.421)$$

де СДВП, пов'язана з зовнішніми поверхнями плівки, визначається за співвідношенням (1.374), а СДВП, пов'язана з ізотропним зерномежовим розсіюванням, визначається як

$$\lambda_i^{-1} = A \cdot D_g^{-1} \ln \frac{1}{t}, \quad (1.422)$$

де A – коефіцієнт ізотропного зерномежового розсіювання.

В основу методу розрахунків покладена методика, описана у підпункті 1.3.5.2, тобто методика використання рівняння Больцмана (1.377) та співвідношення для густини струму (1.32). Після деяких математичних операцій отримуємо

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 = \frac{3}{4} \int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta}{1 + A \lambda_0 D_g^{-1} \ln \frac{1}{t} + d^{-1} \lambda_0 \ln \frac{1}{p} |\cos \theta|} d\theta, \quad (1.423)$$

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 = \frac{3}{2\mu} \left(\alpha - \frac{1}{2} + (1 - \alpha^2) \ln(1 + \alpha^{-1}) \right) \quad (1.424)$$

при $\alpha = \mu^{-1} \left(1 + A D_g^{-1} \lambda_0 \ln \frac{1}{p} \right) = \mu^{-1} (1 + A v^{-1}), \quad (1.425)$

де коефіцієнт розсіювання на зовнішніх поверхнях μ визначається за співвідношенням (1.85).

Основне завдання полягає у визначенні ізотропного коефіцієнта A . З цієї точки зору необхідно повернутися до співвідношень (1.394)-(1.396) і зауважити, що СДВП у рамках тривимірної моделі визначається як

$$\lambda^{-1} = D_g^{-1} \ln \frac{1}{t} \left[|\cos \phi| \cdot |\sin \theta| + |\sin \phi| \cdot |\sin \theta| + |\cos \theta| \right], \quad (1.426)$$

У випадку ізотропного зерномежового розсіювання наближене значення A може бути розраховане, припустивши, що

$$|\cos \phi| = |\sin \phi| = |\sin \theta| = |\cos \theta| \approx \frac{2}{\pi}. \quad (1.427)$$

Співвідношення (1.426) можна записати у вигляді

$$\lambda^{-1} = D_g^{-1} \left(\ln \frac{1}{t} \right) \cdot \left[\frac{2}{\pi} \left(1 + \frac{4}{\pi} \right) \right]. \quad (1.428)$$

Порівнявши співвідношення (1.428) і (1.422), отримуємо

$$A \approx 1,45. \quad (1.429)$$

Повертаючись до наближеного співвідношення (1.417), потрібно зазначити, що отримані значення для питомої провідності (співвідношення 1.424) полікристалічних плівок добре узгоджуються з даними, розрахованими на основі тривимірної моделі (співвідношення 1.409). Відхилення становить менше ніж 5 % при $p > 0,5$ і $\alpha > 0,2$ (згідно з 1.425).

Необхідно також зауважити, що у випадку плівок нескінченної товщини або повного дзеркального відбиття співвідношення (1.424) перетворюється до вигляду

$$\sigma_{fp} / \sigma_0 \approx 1 - \frac{3}{8\alpha}, \quad \alpha \gg 1, \quad (1.430)$$

де питома провідність, пов'язана із зерномежовим розсіюванням, визначається за співвідношенням

$$\sigma_g / \sigma_0 = [1 + Av^{-1}]^{-1} \quad (1.431)$$

і добре узгоджується із наближеним виразом (1.407).

Таким чином, ізотропне зерномежове розсіювання є альтернативним і зручним механізмом для опису явищ перенесення, оскільки дозволяє на основі експериментальних даних визначити окремо коефіцієнти p і t .

1.3.6 Методика розрахунку термічного коефіцієнта опору металевих плівок

1.3.6.1 Стандартний підхід

Припущення для розрахунку термічного коефіцієнта опору повинні бути чітко визначені. По-перше, розрахунок не може бути проведений при не досить високих

температурах, оскільки електрон-фононну взаємодію можна буде не враховувати і розсіювання стає пропорційним середньоквадратичним тепловим коливанням решітки [132], а СДВП лінійно залежатиме від температури.

Також прийнято вважати, що в рамках зонної моделі металів кількість вільних електронів не залежатиме від температури. Тоді отримуємо

$$\rho_0 \lambda_0 = const. \quad (1.432)$$

Отже,

$$\frac{d\rho_o}{\rho_o} = -\frac{d\lambda_o}{\lambda_o}. \quad (1.433)$$

Із цієї точки зору в області високих температур термічний коефіцієнт питомого опору зручно визначати як і в праці [133]

$$\frac{1}{\rho_0(T_0)} \frac{d\rho_0}{dT} = \beta_0(T_0), \quad (1.434)$$

де за початкову температуру зазвичай беруть $T_0 = 273$ К.

У більш загальному випадку, коли розсіювання відбувається як на зовнішніх поверхнях, так і на межі зерен, питомий опір плівки залежить від товщини d і розміру зерна D_g :

$$\rho_f = \rho_0 \cdot f(d, D_g, \lambda_0). \quad (1.435)$$

У пунктах 3.6.3 – 3.8.4 розрахунки ТКО для плівок проводяться за умови, що матеріал підкладки не впливає на властивості плівок. Увага дослідників пов'язана з вивченням впливу температури на величини λ_0 , d і D_g , не враховуючи впливу температури на коефіцієнти розсіювання p , R і t . У деяких пунктах буде проаналізовано вплив температури на коефіцієнт дзеркальності p і

коефіцієнт проходження t . Деякі теоретичні аспекти проблеми математичного визначення ТКО плівок наведені у пункті 3.9.2. Однак потрібно зауважити, що складні математичні вирази не завжди зручні для графічного визначення параметрів електроперенесення.

У загальні теоретичні вирази, запропоновані в наступних пунктах вводяться коефіцієнти термічного розширення, що пов'язані із товщиною плівки (χ_d) або розміром зерна (χ_D). Однак у більшості експериментальних робіт (див., наприклад, [133]) величинами χ_d і χ_D нехтують, оскільки вони дуже малі по відношенню до β_0 .

1.3.6.2 Основне співвідношення для ТКО

Нехтуючи тепловим розширенням зерен і товщини плівки по відношенню до СДВП, співвідношення для питомої провідності плівки можна записати у вигляді

$$\sigma_f(T) = \sigma_0(T) \cdot F\{\lambda_0(T)\} \quad (1.436)$$

незалежно від виду механізмів розсіювання. На основі такого припущення в подальшому буде отримано вираз для ТКО тонких плівок.

За аналогією до співвідношення (1.434) для ТКО плівки можна записати вираз

$$\beta_g = \frac{1}{\rho_f} \cdot \frac{d\rho_f}{dT}. \quad (1.437)$$

Узявши похідну від співвідношення (1.436), отримуємо

$$\beta_f = \beta_0 \left\{ 1 + \frac{\lambda_0}{F(\lambda_0)} \frac{dF(\lambda_0)}{d\lambda_0} \right\}. \quad (1.438)$$

Співвідношення (1.438) становить загальний вираз для ТКО плівок, величина якого залежить лише від великих

коефіцієнтів теплового розширення. При практичному застосуванні даного співвідношення для зручності необхідно розділити внесок фонового й інших механізмів розсіювання з урахуванням розмірних параметрів. Наприклад, припустимо, якщо одночасно відбувається фонове розсіювання та розсіювання на межах зерен, то при диференціюванні функції отримуємо

$$\frac{dF}{d\lambda_0} = \frac{dG}{dv} \cdot \frac{dv}{d\lambda_c} = -\frac{v}{\lambda_0} \frac{dG}{dv}. \quad (1.439)$$

Підстановка співвідношення (1.439) в (1.438) дає

$$\beta_g \Big|_{3\text{-dim}} = \beta_0 \left[1 - \frac{v}{G(v)} \frac{dG(v)}{dv} \right], \quad (1.440)$$

де $G(v)$ – стандартна тривимірна функція, що визначається за співвідношенням (1.404).

1.3.6.3 ТКО у випадку поверхневого розсіювання електронів

Перш ніж провести аналіз теоретичних розрахунків, вважаємо за доцільне обґрунтувати припущення, що коефіцієнт дзеркальності p не залежить від температури. Справедливим потрібно вважати і той факт, що коефіцієнт дзеркальності p залежить від статистичних геометричних властивостей поверхні плівки, які не повинні залежати від температури.

Повертаючись до виразу для питомої провідності плівки, визначеної в рамках моделі ФЗ (співвідношення 1.35), можемо записати, що

$$\sigma_f / \sigma_0 = 1 - A[k], \quad k = d / \lambda_0. \quad (1.441)$$

Узявши логарифм, а потім продиференціювавши його,

отримуємо вираз

$$\frac{d \ln \sigma_f}{dT} - \frac{d \ln \sigma_0}{dT} = - \frac{k}{1 - A(k)} \frac{dA(k)}{dk} \frac{dk}{k dT} \quad (1.442)$$

при
$$\frac{dk}{k} = \frac{dd}{d} - \frac{d\lambda_0}{\lambda_0}. \quad (1.443)$$

Ураховуючи, що
$$\chi_d = - \frac{d \ln d}{dT}, \quad (1.444)$$

отримуємо вираз для ТКО у рамках моделі ФЗ:

$$\beta_f / \beta_0 = \left| 1 + \left[\frac{-A(k) + B(k)}{1 - A(k)} \right] \left[1 + \frac{X_d}{\beta_0} \right] \right|. \quad (1.445)$$

У випадку частково дзеркального розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях плівки функція $A(k)$ визначається так:

$$A(k) = \frac{3}{2k} (1-p) \int_1^\infty (u^{-3} - u^{-5}) \frac{1 - e^{-ku}}{1 - pe^{-ku}} du. \quad (1.446)$$

Провівши нескладні математичні перетворення, отримуємо вираз для $B(k)$:

$$B(k) = \frac{3}{2} (1-p)^2 \int_1^\infty (u^{-2} - u^{-4}) \frac{e^{-ku}}{[1 - pe^{-ku}]^2} du. \quad (1.447)$$

Для оцінка ТКО плівки у випадку повного дифузного розсіювання у співвідношеннях (1.446) і (1.447) необхідно взяти p таким що дорівнює нулю. Співвідношення (1.445) – (1.447) досить складні для проведення числової оцінки ТКО плівок, тому для спрощення аналізу зручно розглядати граничні випадки співвідношення (1.445). Для відносно товстих плівок вираз для ТКО можна записати у вигляді

$$\beta_f / \beta_0 \approx \left\{ 1 - \frac{3}{8} \frac{1-p}{k} \right\} \left[1 + \frac{\chi_d}{\beta_0} \right] \text{ при } k > 1, \quad (1.448)$$

який вказує на те, що графік залежності $\beta_f d$ від d становить пряму лінію, за кутом нахилу якої можна визначити величину $(\beta_0 + \chi_d)$, а враховуючи, що у більшості експериментальних робіт $\chi_d < 10^{-2} \beta_0$ [133], то можна визначити наближене значення β_0 . Точка перетину з віссю ординат відсікає відрізок

$$\frac{3}{8} \lambda_0 (1-p) (\beta_0 + \chi_d) \approx \frac{3}{8} \lambda_0 (1-p) \beta_0. \quad (1.449)$$

У випадку дуже тонких плівок співвідношення для ТКО можна записати у вигляді

$$\beta_f / \beta_0 \approx \left[\ln k^{-1} + 0,4228 \right]^{-1} \cdot \left[1 + \frac{\chi_d}{\beta_0} \right] \text{ при } k \ll 1. \quad (1.450)$$

Також може становити інтерес визначення ТКО плівок у рамках моделі Котті, оскільки співвідношення Котті більш прості для проведення числових розрахунків. Враховуючи, що $\mu \sim k$, у праці [134] був отриманий такий вираз для ТКО:

$$\beta_f / \beta_0 = 1 - \frac{G(\mu)}{C(\mu)} \cdot \left[1 + \frac{\chi_d}{\beta_0} \right], \quad (1.451)$$

де $C(\mu)$ – функція Котті, що визначається за співвідношенням (1.83):

$$G(\mu) = \frac{3}{2} \mu \left\{ 3\mu - \frac{3}{2} + (1 - 3\mu^2) \ln(1 + \mu^{-1}) \right\}. \quad (1.452)$$

Якщо товщина плівки набагато більша за СДВП, то співвідношення (1.452) зводиться до вигляду, аналогічного

співвідношенню (1.448), за винятком того, що $(1-p)$ замінюється на $\ln(1/p)$.

На рис. 1.36 подані теоретичні залежності β_f/β_0 від зведеної товщини k при різних значеннях коефіцієнта дзеркальності (для випадку, коли коефіцієнтом термічного розширення можна знехтувати). Залежності мають ряд особливостей:

- розмірний ефект зникає при великих товщинах;
- при фіксованій товщині ТКО збільшується при збільшенні величини коефіцієнта дзеркальності p .

Крім того, порівнюючи значення для ТКО зі значеннями для питомого опору, розрахованими в рамках моделі Котті (табл. 1.1, пункт 1.2.2), можна зробити висновок, що для даних коефіцієнтів дзеркальності розмірний ефект для питомого опору більш виражений, ніж для ТКО плівок.

Праця Саворніна [135] була однією з перших, в якій отримали експериментальне значення ТКО та проведене порівняння знайдених результатів із розрахунковими в рамках моделі ФЗ для випадку повного дифузного розсіяння. Необхідно зазначити, що значна кількість експериментальних даних для ТКО металевих плівок були інтерпретована в рамках моделі ФЗ (співвідношення 1.447). Кількість праць занадто велика, тож для отримання додаткової інформації про розмірний ефект ТКО можна звернутися до огляду праці [45]. На завершення цього питання теми наведемо деякі міркування з приводу застосування моделі Намби, що враховує вплив шорсткості поверхні [39]. Результати розрахунків ТКО в

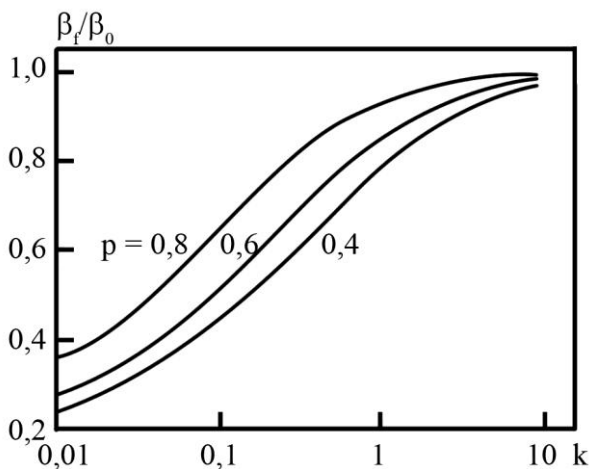


Рисунок 1.36 – Залежності β_f/β_0 від зведеної товщини k , отримані в рамках моделі Котті при різних значеннях коефіцієнта дзеркальності з урахуванням того, що коефіцієнтом термічного розширення можна знехтувати

рамках моделі Намбі узгоджуються з результатами, наведеними вище.

Повертаючись до співвідношення (1.191) і нехтуючи термічним коефіцієнтом лінійного розширення, очевидно, що тільки СДВП залежить від температури. Таким чином, можна записати, що

$$\rho^* = \rho \left[\frac{-}{d} + \frac{d'}{2} \sin k_N x \right]. \quad (1.453)$$

Це співвідношення було отримане при використанні функції ФЗ (див. співвідношення (1.192) – (1.194)). Тоді згідно з моделлю Намбі можна записати

$$\frac{d\rho_f}{dT} = \frac{\bar{d}}{l} \int_0^l \frac{1}{\bar{d} + \frac{d'}{2} \sin k_N x} \frac{d\rho}{dT} \left[\bar{d} + \frac{d'}{2} \sin k_N x \right]. \quad (1.454)$$

При цьому очевидно, що похідна ρ^* може бути визначена як

$$\frac{d\rho^*}{dT} = \rho^* \beta_0 \left\{ 1 + \frac{-A(k^*) + B(k^*)}{1 - A(k^*)} \right\} \quad (1.455)$$

при
$$k^* = \lambda_0^{-1} \left[\bar{d} + \frac{d'}{2} \sin k_N x \right]. \quad (1.456)$$

Відповідно до правила Маттіссена можна записати

$$\frac{d\rho^*}{dT} = \frac{d\rho_0}{dT}. \quad (1.457)$$

Згідно із даними, які будуть подані у пункті 1.3.10, можна відзначити, що співвідношення (1.457) добре узгоджується з експериментальними результатами при $k > 0,5$. У випадку дифузного розсіяння відхилення досягає 9 % при зменшенні величини k приблизно до 0,4. Однак результати, отримані при розрахунку на основі співвідношення Намби

$$\beta_f / \beta_0 \approx \frac{\rho_0}{\rho_f} \frac{1}{\left(1 - \frac{d'}{2\bar{d}} \right)^2}, \quad (1.458)$$

не слід сприймати надто серйозно для тонких плівок.

1.3.6.4 Урахування зерномежового розсіяння електронів у співвідношення для ТКО

При вивченні впливу зерномежового розсіяння на величину ТКО плівок необхідно враховувати, що

коефіцієнт термічного розширення діаметра зерна $\chi_d = d \ln D_g / dT$ змінюється при зміні товщини плівки. Крім того, правильно буде врахувати зміну коефіцієнтів розсіяння R та проходження t межі зерна МШ при зміні температури.

Коефіцієнт проходження t був уведений для того, щоб описати геометрію межі зерна. Таким чином, провівши аналогію між коефіцієнтом проходження межі зерна t і коефіцієнтом дзеркальності p (тобто між багатовимірною моделлю та моделлю Котті), можна сподіватися, що зміною коефіцієнта t при зміні температури можна знехтувати.

Якщо розглядати питання про вплив зерномежового розсіювання на величину ТКО, то вирішення даної проблеми виявляється досить складним. Теоретично було встановлено, що величина $R/(1-R)$ залежить від енергії Фермі η , отже, можна сподіватися, що і коефіцієнт R залежатиме від температури. Однак детальний аналіз впливу температури на коефіцієнт зерномежового розсіяння при вивченні ТКО, проведений у праці [136], показав, що таким впливом також можна знехтувати при сталій величині СДВП¹⁾.

Таким чином, однозначної відповіді, як змінюються коефіцієнти R і t немає, але для спрощення процедури врахування зерномежового розсіяння електронів у

1) У праці 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 переконливо показано, що врахування температурної залежності p і t призводить до кращого узгодження із експериментальними результатами моделі Р. Дімміха (додаток А) (примітка редактора перекладу). співвідношенні для ТКО, у подальшому будемо вважати,

що внесок температурних ефектів досить малий і ним можна знехтувати.

Повертаючись до тривимірної моделі, можна показати, що диференціювання співвідношення (1.404) дає

$$\frac{d\sigma_g}{\sigma_g} - \frac{d\sigma_0}{\sigma_0} = \frac{\nu}{G(\nu)} \frac{dG(\nu)}{d\nu} \frac{d\nu}{\nu} \quad (1.459)$$

при
$$\frac{dG(\nu)}{d\nu} = \frac{G(\nu)}{\nu} + \frac{3\nu}{2(1-C)^2} \cdot H(\nu) \quad (1.460)$$

та
$$H(\nu) = 2 - \alpha_{3\infty}^{-1} - 2\alpha_{3\infty} \ln(1 + \alpha_{3\infty}^{-1}). \quad (1.461)$$

Виходячи із означення коефіцієнта ν (співвідношення (1.461)) та враховуючи зміну параметрів D_g і λ_0 з температурою, можна записати такий вираз:

$$\frac{d\nu}{\nu} = \frac{dD_g}{D_g} - \frac{d\lambda_0}{\lambda_0}. \quad (1.462)$$

Підставивши співвідношення (1.462) в (1.459), а потім поділивши на величину dT , отримуємо

$$\beta_g / \beta_0 = -\frac{\chi_D}{\beta_0} - \frac{3\nu}{2(1-C)} \frac{H(\nu)}{G(\nu)} \left[1 + \frac{\nu}{1-C} \frac{\chi_D}{\beta_0} \right]. \quad (1.463)$$

Якщо впливом χ_D на ТКО можна знехтувати, то співвідношення (1.463) може бути записане у наближеному вигляді як

$$\beta_g / \beta_0 = -\frac{3}{2} \frac{\nu}{1-C} \frac{H(\nu)}{G(\nu)} \quad \text{при } \chi_D \ll \beta_0. \quad (1.464)$$

Співвідношення (1.464) справедливе за умови виконання нерівності

$$\frac{\chi_D}{\beta_o} \left[1 + \frac{3}{2} \left[\frac{\nu}{1-C} \right]^2 \cdot \frac{H(\nu)}{G(\nu)} \right] < 10^{-2}. \quad (1.465)$$

У разі, якщо ν збільшується в межах від 0,01 до 40, величина $\frac{3}{2} \left[\frac{\nu}{1-C} \right]^2 \cdot \frac{H(\nu)}{G(\nu)}$ збільшується з $2 \cdot 10^{-5}$ до 10, співвідношення (1.465) можна записати як

$$\chi_D \cdot \beta_o^{-1} < 10^{-2}. \quad (1.466)$$

Тоді, резонно сподіватися, що у разі, якщо величина χ_D одного порядку χ_d , 0, стан системи змінюватиметься. Це припущення має бути перевірене експериментальним шляхом.

Базуючись на цьому припущенні, теоретична залежність β_g/β_o від ν (рис. 1.37) слугує доказом для залежності ТКО, пов'язаного із зерномежовим розсіяння, від параметра зерна.

У працях [105; 137; 138] були запропоновані основні співвідношення для врахування зерномежового розсіяння при розрахунках ТКО. Аналіз співвідношення (1.277) показав, що

$$\frac{d \ln \alpha}{dT} = -\chi_D - \beta_o. \quad (1.467)$$

Таким чином, із рівняння (1.438) отримуємо

$$\beta_g/\beta_o = 1 + \frac{g(\alpha)}{f(\alpha)} \left[1 + \frac{\chi_D}{\beta_o} \right] \quad (1.468)$$

при

$$g(\alpha) = \alpha \frac{df(\alpha)}{d\alpha} = -\frac{3}{2}\alpha + 6\alpha^2 + \frac{3\alpha^3}{1+\alpha} - 9\alpha^3 \ln(1+\alpha^{-1}) \quad (1.469)$$

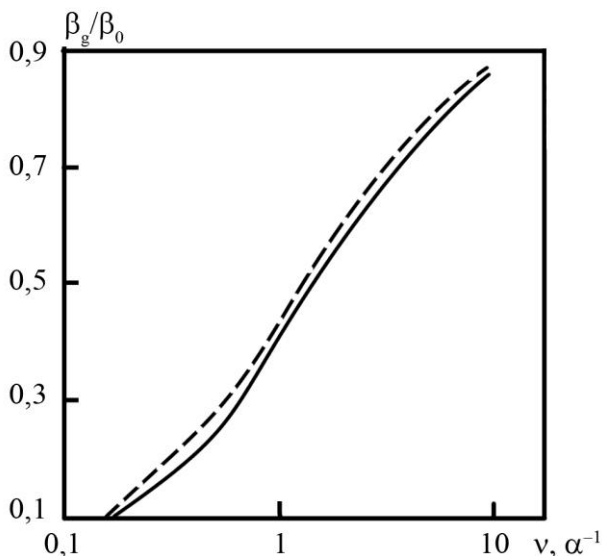


Рисунок 1.37 – Графік залежності β_g/β_0 від ν (суцільна лінія) та від α^{-1} (пунктирна лінія)

Якщо величина χ_D/β_0 незначна, то співвідношення (1.468) може бути записане у вигляді

$$\beta_g/\beta_0 = 1 + \frac{g(\alpha)}{f(\alpha)} \text{ при } \chi_D \ll \beta_0. \quad (1.470)$$

Теоретичні розрахунки β_g/β_0 при відповідних значеннях параметрів зерна α^{-1} проводилися на основі співвідношення (1.470) (рис. 1.37). Зауважимо, що для відносно великих ν величина ТКО, пов'язана з розсіюванням електронів на межах зерен, розрахована в рамках моделі МШ, розрахунковим даними на основі тривимірної моделі за аналогією з розрахунками для питомої провідності. Відхилення становить менше ніж 9 % при $\nu > 1$ і досягає 19 % при зменшенні величини ν до 0,1. Отже, співвідношення $\alpha^{-1} \approx \nu$ справедливе лише при $\nu > 1$. Обговорення різної поведінки ТКО при прогнозуванні в

рамках моделі МШ і тривимірної моделі, що враховують зерномежове розсіяння електронів подано у пункті 1.3.10.2.

Потрібно зауважити, що величина ТКО, обумовлена зерномежовим розсіянням електронів і визначається як ТКО нескінченно товстої плівки, тому в цьому пункті не розглядалася двовимірна модель, що описує особливості явища перенесення у монокристалічних плівках.

1.3.7 Розмірний ефект у ТКО полікристалічної металевої плівки

1.3.7.1 Співвідношення Маядаса-Шацкеса і похідні лінеаризованих рівнянь

Проаналізувавши рівняння (1.283), що виражає сумарну провідність плівкам з точки зору моделі МШ, можна зробити висновок, що при логарифмічному диференціюванні даного рівняння можна проаналізувати залежність похідної функції ($f(\alpha) - A(k, p, \alpha)$) за k і α , які залежать від СДВП.

При врахуванні цих похідних для випадку полікристалічних плівок, коли розмір зерна залишається незмінним при даній температурі, у праці [63] були отримані помилкові вирази.

Однак правильне трактування може бути досягнене саме при логарифмічному диференціюванні рівняння (1.283) [139]:

$$(\beta_f - \beta_0) dT = \frac{df - dA_{M,S}}{f - A_{M,S}}, \quad (1.471)$$

де для спрощення $A_{M,S} = A(k, p, \alpha)$ і

$$dA_{M.S} = \frac{\partial A_{M.S}}{\partial k} dk + \frac{\partial A_{M.S}}{\partial H} \cdot \frac{\partial H}{\partial \alpha} d\alpha, \quad (1.472)$$

де

$$d\alpha = \alpha \left\{ \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} - \frac{dD_g}{D_g} \right\}, \quad (1.473)$$

$$dk = k \left\{ \frac{dd}{d} - \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} \right\}, \quad (1.474)$$

припускаючи, що коефіцієнти термічного розширення для плівки та підкладки однакові, а також, що зміною коефіцієнта зерномежового розсіяння R при зміні температури можна знехтувати.

Подаючи функції $B_{M.S}$, $C_{M.S}$ і $D_{M.S}$, нормовані у праці [63], у вигляді

$$B_{M.S} = \frac{6}{\pi} (1-p)^2 \int_0^{\pi/2} d\phi \int_1^{\infty} \frac{\cos^2 \phi}{H^2(u, \phi)} \times \\ \times \left[\frac{1}{u^2} - \frac{1}{u^4} \right] \frac{\exp\{-kuH(u, \phi)\}}{[1 - p \exp\{-kuH(u, \phi)\}]^2} du, \quad (1.475)$$

$$C_{M.S} = \frac{12\alpha}{\pi k} (1-p) \int_0^{\pi/2} d\phi \int_1^{\infty} \frac{\cos \phi}{H^3(u, \phi)} \left[\frac{1}{u^2} - \frac{1}{u^4} \right] \times \\ \times \frac{1}{(u^2 - 1)^{1/2}} \frac{1 - \exp\{-kuH(u, \phi)\}}{1 - p \exp\{-kuH(u, \phi)\}} du, \quad (1.476)$$

$$D_{M.S} = \frac{6}{\pi} (1-p)^2 \int_0^{\pi/2} d\phi \int_1^{\infty} \frac{\cos^2 \phi}{H(u, \phi)} \times \\ \times \left[\frac{1}{u^2} - \frac{1}{u^4} \right] \frac{\exp\{-kuH(u, \phi)\}}{[1 - p \exp\{-kuH(u, \phi)\}]^2} du \quad (1.477)$$

співвідношення (1.471) перетворюється до вигляду

$$\beta_{f_p,m} - \beta_0 = [f(\alpha) - A_{M.S.}]^{-2} \left\{ (g(\alpha) - A_{M.S.} + B_{M.S.} + C_{M.S.}) \left[-\frac{d\lambda_0}{\lambda_0 dT} \right] + (g(\alpha) + B_{M.S.} + C_{M.S.} - D_{M.S.}) \frac{dD_g}{D_g dT} + [D_{M.S.} - A_{M.S.}] \frac{dd}{ddT} \right\}. \quad (1.478)$$

Якщо знехтувати термічним розширенням зерна та товщини плівки по відношенню до СДВП, отримуємо наближений вираз для ТКО полікристалічної плівки [139]:

$$\beta_{fp} / \beta_0 = 1 + \frac{g(\alpha) - A_{M.S.} + B_{M.S.} + C_{M.S.}}{f(\alpha) - A_{M.S.}}, \quad (1.479)$$

що відрізняється від запропонованого у праці [3] із вищезазначеної причини.

Співвідношення (1.478) і (1.479) можуть бути використані при розрахунках як для полікристалічних, так і для монокристалічних плівок. У цьому пункті розглядаються лише розмірні та зерномежові ефекти в полікристалічних плівках і можна відзначити, що для таких плівок загальне співвідношення має вигляд

$$\frac{\beta_{fp}}{\beta_0} = 1 + \frac{g(\alpha) - A_{M.S.} + B_{M.S.} + C_{M.S.}}{f(\alpha) - A_{M.S.}} + \left(\frac{D_{M.S.} - A_{M.S.}}{f(\alpha) - A_{M.S.}} \right) \chi_d + \left(\frac{g(\alpha) + B_{M.S.} + C_{M.S.} - D_{M.S.}}{f(\alpha) - A_{M.S.}} \right) \chi_D. \quad (1.480)$$

Якщо припустити, що термічне розширення товщини і діаметра зерна незначні, то співвідношення для β_{fp} / β_g матиме вигляд

$$\beta_{fp} / \beta_g \approx \left(1 + \frac{g(\alpha) - A_{M.S} + B_{M.S} + C_{M.S}}{f(\alpha) - A_{M.S}} \right) \left(1 + \frac{g(\alpha)}{f(\alpha)} \right)^{-1}. \quad (1.481)$$

На рис. 1.38 подані розрахункові залежності β_{fp} / β_g від ефективної товщини k (співвідношення 1.479).

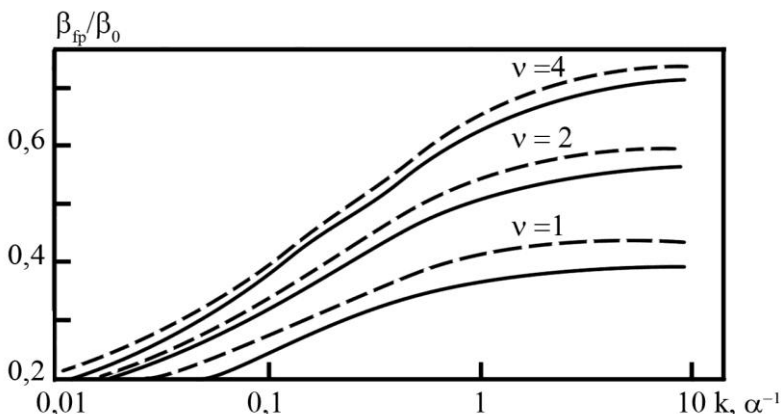


Рисунок 1.38 – Графік залежності β_{fp} / β_g від k (суцільна лінія) та від α^{-1} (пунктирна лінія) при $p = 0,5$ для полікристалічних плівок

При узгодженні з характером залежності для питомої провідності, розмірні ефекти в ТКО істотно залежать від параметра зерна α і ТКО β_{fp} прямує до β_g (рівняння 1.468), якщо зведена товщина прямує до нескінченності.

Детальна процедура лінеаризації [140] показала, що рівняння (1.481) може бути подано у вигляді двох типів рівнянь:

$$k \beta_g / \beta_{fp} \approx k + (1 - p) H(\alpha)', \quad (1.482)$$

$$k \beta_{fg} / \beta_g \approx k - (1 - p) H(\alpha). \quad (1.483)$$

Рівняння (1.483) має більший діапазон застосування.

Значення функції $H(\alpha)$ наведені в табл. 1.11. Необхідно відзначити, що цьому рівнянню відповідає лінійна залежність $H(\alpha)^{-1}$ від α , яка дозволяє графічно визначити величину функції $H(\alpha)$ з точністю до 1 % у широкому діапазоні α ($0,25 < \alpha < 10$).

Таблиця 1.11 – Значення функції $H(\alpha)$, розраховані на основі співвідношення (1.483) [140]

α	0	0,25	0,5	1	2	5	10
$H(\alpha)$	0,375	0,248	0,200	0,140	0,089	0,042	0,022

Порівняння точності наближення в широкому діапазоні k при різних значеннях p і α подано у праці [140]. Необхідно зауважити, що чим більші значення α і p , тим більший діапазон застосування лінеаризованої форми. Наприклад, у випадку дифузного розсіяння на зовнішніх поверхнях та при $\alpha = 0,25$ відхилення становить менше 2 % в інтервалі $k = 0,7 - 10$, а при $\alpha = 0,10$ – в інтервалі $k = 0,07 - 10$.

1.3.7.2 Ефективні моделі Фукса-Зондгеймера і часу релаксації для ТКО

У цьому пункті будуть подані лише основні риси математичного підходу, оскільки він потребує незначної модифікації порівняно з попереднім аналізом (підпункти 1.3.6.3, 1.3.7.1).

Співвідношення для ефективної питомої провідності ФЗ (1.291) дозволяє провести логарифмічне диференціювання:

$$\frac{d\sigma_f}{\sigma_f} - \frac{d\sigma_0}{\sigma_0} = \frac{1}{f(\alpha)} \frac{df(\alpha)}{d\alpha} \frac{d\alpha}{d\lambda_0} d\lambda_0 +$$

$$+ \frac{1}{1-A(k_g)} \frac{d\{1-A(k_g)\}}{dk_g} \frac{dk_g}{d\lambda_0} d\lambda_0 \quad (1.484)$$

при
$$\frac{dk_g}{k_g} = \frac{dk}{k} - \frac{df(\alpha)}{f(\alpha)}. \quad (1.485)$$

Нехтуючи термічним розширенням D_g і d , результуюче співвідношення для β_f/β_g може бути записане згідно з [69] як

$$\beta_f/\beta_0 = \left\{ 1 + \frac{g(\alpha)}{f(\alpha)} \right\} \left\{ 1 + \frac{-A(k_g) + B(k_g)}{1-A(k_g)} \right\}, \quad (1.486)$$

де $A(k_g)$ і $B(k_g)$ ідентичні функціям ФЗ (співвідношення (1.446) і (1.447)) за винятком того, що ефективна зведена товщина k_g заміняє зведену товщину k . Аналіз рівняння (1.486) дозволяє зробити такі висновки:

1. При повному дзеркальному розсіюванні на зовнішніх поверхнях плівки рівняння (1.486) стає виразом для меж зерен (1.470).

2. У разі, якщо зерномежове розсіяння не робить внесок у загальну величину питомого опору, співвідношення (1.486) зводиться до моделі ФЗ.

Крім того, можна було б сподіватися, що метод, який полягає у визначенні середньої ефективної довжини вільного пробігу для опису зерномежового розсіяння, що відбувається одночасно з розсіюванням в об'ємі плівки на фонах і дефектах, застосовуватиметься до всіх теорій, які використовують модель Фукса. Особливо це стосується моделі Котті, в рамках якої було отримане співвідношення для ефективного ТКО:

$$\beta_f/\beta_0 \approx \left\{ 1 + \frac{g(\alpha)}{f(\alpha)} \right\} \left\{ 1 - \frac{G(\mu_g)}{C(\mu_g)} \right\} \quad (1.487)$$

при
$$\mu_g = \mu(k_g) = k_g \left(\ln \frac{1}{p} \right)^{-1}.$$

Обговоримо модель часу релаксації. Шляхом логарифмічного диференціювання рівняння (1.298) та припускаючи, що величини χ_D і χ_d незначні, згідно з [141] отримуємо такий вираз:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_f}{\sigma_f} - \frac{d\sigma_0}{\sigma_0} = \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} \left\{ \left\{ \frac{-A(k) + B(k)}{1 - A(k)} \right\} + \right. \\ \left. + \left\{ 1 + \frac{g\{\alpha[1 - A(k)]\}}{f\{\alpha[1 - A(k)]\}} \right\} + \frac{g\{\alpha[1 - A(k)]\}}{f\{\alpha[1 - A(k)]\}} \right\}, \end{aligned} \quad (1.148)$$

оскільки

$$\begin{aligned} d[\alpha(1 - A(k))] = \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} \times \\ \times \left\{ -\frac{d[1 - A(k)]}{dk} \cdot k\alpha + [1 - A(k)] \cdot \alpha \right\}, \end{aligned} \quad (1.489)$$

$$\begin{aligned} d[\alpha(1 - A(k))] = \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} \alpha \times \\ \times \left\{ \{-A(k) + B(k)\} + \{1 - A(k)\} \right\}. \end{aligned} \quad (1.490)$$

Отже, в рамках моделі часу релаксації методом для ТКО можна записати вираз

$$\beta_f/\beta_0 = \left\{ 1 + \frac{-A(k) + B(k)}{1 - A(k)} \right\} \left\{ 1 + \frac{g\{\alpha[1 - A(k)]\}}{f\{\alpha[1 - A(k)]\}} \right\} \quad (1.491)$$

де перший член в дужках ідентичний співвідношенню ФЗ. Оскільки дана функція була табульована кількома авторами [141], то величина ТКО полікристалічних плівок може бути легко розрахована на основі цього аналітичного виразу.

Необхідно зазначити, що ці два математичні підходи не пов'язані з припущенням про зміну розміру зерна з товщиною i , отже, є дійсними для полікристалічних плівок i плівок, які задовольняють умову монокристалічності.

1.3.7.3 Одно- і тривимірна моделі ТКО

Для визначення ТКО плівки в рамках одновимірної моделі необхідно провести незначні математичні перетворення для того, щоб отримати похідні від рівняння (1.355). Зміні параметра ν при зміні температури (зазначене питання вже розглядалося у попередньому пункті (співвідношення 1.462)) з точки зору одновимірної моделі для ТКО плівок виражається як

$$\beta_s / \beta_0 = 1 - \frac{\nu}{h(\nu)} \frac{d\bar{h}}{d\nu} - \frac{\nu}{h(\nu)} \frac{d\bar{h}}{d\nu} \frac{\chi_D}{\beta_0} \quad (1.492)$$

при
$$\bar{h} \left(\nu = \frac{3}{2} \nu - 3\nu^2 + 3\nu \ln(1 + \nu^{-1}) \right), \quad (1.493)$$

$$\nu \frac{d\bar{h}}{d\nu} = \frac{3}{2} \nu - 6\nu^2 + 9\nu^3 \ln(1 + \nu^{-1}) - \frac{3\nu^3}{1 + \nu}. \quad (1.494)$$

Необхідно зазначити, що рівняння (1.492) справедливе у разі якщо розсіювання на зовнішніх поверхнях плівки не дає внеску у загальну величину питомого опору. Якщо ж розсіювання на зовнішніх поверхнях плівки робить свій внесок у величину p , то як альтернативний вираз для розв'язання задачі може бути використане рівняння, ідентичне (1.486) або (1.487), за винятком того, що k_g

замінюється на $k \cdot [\bar{h}(\nu)]^{-1}$.

Оскільки в більшості експериментів поправковим коефіцієнтом, пропорційним χ_D/β_0 , можна знехтувати, то рівняння (1.494) може бути спрощене до вигляду

$$\beta_g/\beta_0 \approx 1 - \frac{\nu}{h(\nu)} \frac{d\bar{h}(\nu)}{d\nu}. \quad (1.495)$$

Тому цікаво буде порівняти рівняння (1.495) з виразом (1.470), отриманим у рамках моделі МШ, для того, щоб визначити, чи залишається для ТКО справедливим співвідношення $\alpha \approx 0,5\nu$ яке працює у випадку питомої провідності. Табл. 1.12 показує, що існує аналогія між поведінкою питомого опору плівки і його ТКО. Насправді співвідношення виконується з відхиленням менше 6 % у широкому діапазоні ν ($\nu > 0,1$).

Таблиця 1.12 – Величини β_g/β_0 , отримані на основі розрахунків за співвідношеннями (1.496) і (1.470), враховуючи, що $\alpha \approx 0,5\nu$

Одновимірна модель		Модель МШ	
ν	β_g/β_0	α	β_g/β_0
0,1	0,144189	5	0,136496
0,5	0,427305	1	0,420558
1	0,588699	0,5	0,598757
5	0,871636	0,1	0,875283
10	0,030851	0,05	0,932284

Співвідношення для ТКО плівки також може бути отримане на основі тривимірної моделі. Скориставшись співвідношеннями (1.410) і (1.411), а також зазначивши, що

$$\frac{d\mu}{\mu} = \frac{dd}{d} - \frac{d\lambda_0}{\lambda_0}. \quad (1.496)$$

Таким чином можна записати, що

$$\frac{da_3}{a_3} = -\frac{db_3}{b_3} - \frac{c^2}{v+c^2} \left[-\frac{d\lambda_0}{\lambda_0} + \frac{dD_g}{D_g} \right] \quad (1.497)$$

при
$$\frac{db_3}{b_3} = -\frac{d\lambda_0}{\lambda_0} - \frac{1}{b_3} \left[\mu^{-1} \frac{dd}{d} + (1+c)v^{-1} \frac{dD_g}{D_g} \right]. \quad (1.498)$$

Провівши математичні перетворення, отримуємо загальний вираз для ТКО полікристалічної плівки:

$$\beta_{fp}/\beta_0 = -\frac{V(a_3)}{b_3 U(a_3)} - \frac{\chi_d}{\beta_0 \mu} \frac{1+a_3 V(a_3)}{b_3 U(a_3)} - \frac{\chi_D}{\beta_0} \left\{ \frac{(1-c)}{vb_3} \left[1 + \frac{a_3 V(b_3)}{U(a_3)} \right] - \frac{c^2 a_3}{c^2 + v} \cdot \frac{V(a_3)}{U(a_3)} \right\} \quad (1.499)$$

при
$$U(a) = a - \frac{1}{2} + (1-a^2) \ln(1+a^{-1}), \quad (1.500)$$

$$V(a) = \frac{dU(a)}{da} = 2 - \frac{1}{a} - 2a \ln(1+a^{-1}). \quad (1.501)$$

Досить імовірним є той факт, що термічні коефіцієнти лінійного розширення розміру зерна і товщини плівки мають однакову величину, тому рівняння (1.499) можна спростити до вигляду

$$\beta_{fp}/\beta_0 \approx -\frac{V(a_3)}{bU(a_3)} \left\{ 1 + \frac{\chi}{\beta_0} \right\} - \frac{\chi}{\beta_0}, \quad \chi_D \approx \chi_d = \chi. \quad (1.502)$$

Якщо величинами χ_D і χ_d можна знехтувати, то рівняння (1.499) можна записати у такому вигляді:

$$\beta_{fp} / \beta_0 \approx -V(a_3) \cdot [b \cdot U(a_3)]^{-1}. \quad (1.503)$$

Співвідношення (1.503) становить вираз для ТКО полікристалічних плівок, що враховує зерномежове розсіяння та розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях плівки. При застосуванні даного співвідношення необхідно, щоб виконувалися наступні вимоги:

1) порівняння рівнянь (1.503) і (1.464) вказує на те, наскільки розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях стає незначним для ТКО плівкам. Отже, β_{fp} зводиться до β_g , оскільки b_3 і a_3 , як правило, відповідають $(1-C) \cdot v^{-1}$ і $a_{3\infty}$ відповідно;

2) співвідношення (1.451) вказує на те, що у разі, якщо розсіювання на межах зерен не робить внесок у питомий опір, співвідношення для ТКО (1.496) збігається із співвідношенням Котті для ТКО.

Знову повертаємося до рис. 1.38, на якому зображено графік залежності β_{fp} / β_g від k (суцільна лінія) та від α^{-1} (пунктирна лінія) при $p = 0,5$ для полікристалічних плівок. Для спрощення процедури порівняння з результатами розрахунку на основі моделі МШ на цьому рисунку також подано залежність β_{fp} / β_g від α^{-1} . З рис. 1.38 бачимо, що характер залежностей майже ідентичний, що дозволяє зробити висновок протє, що, як і у випадку питомої провідності, виконується співвідношення

$$v \approx \alpha^{-1} \quad (1.504)$$

Згідно із процедурою, наведеною вище, вираз для β_g / β_{fp} полікристалічної плівки відповідно до [130] може бути поданий у вигляді

$$\beta_g / \beta_{fp} \approx 1 + \frac{1}{k} \left\{ \ln \frac{1}{p} \right\} \cdot M'(v) \quad (1.505)$$

при
$$M'(v) \approx [4 + 3,74v^{-1}]^{-1}. \quad (1.506)$$

Потрібно зазначити, що існує аналогія між функціями $M\Box(v)$ і $M(v)$ (співвідношення (1.416)), тому функція $M\Box(v)$ також може бути застосована коректно лише при $v < 1$.

1.3.7.4 Модель ізотропного зерномежового розсіювання для ТКО

Оскільки величину σ_{fp}/σ_g можна визначити в рамках моделі Котті (див. співвідношення 1.431), то розрахунки, наведені у підпункті 1.3.6.3, можуть бути використані в подальшому для ТКО.

Нехтуючи термічним розширенням параметрів α і D_g , вираз для β_{fp}/β_g можна легко отримати із співвідношення (1.451):

$$\beta_{fp} / \beta_g = 1 - \frac{G(a_{31})}{C(a_{31})} \text{ при } \chi_d, \chi_D \ll \beta_0, \quad (1.507)$$

де $C(a_{31})$ – функція Котті (співвідношення 1.83), $G(a_{31})$ визначається зі співвідношення (1.452), a_{31} – зі співвідношення (1.425).

Лінеаризовані вирази для β_{fp}/β_g і β_g/β_{fp} можна отримати із співвідношення (1.448):

$$\beta_{fp} / \beta_g \approx 1 - \frac{3}{8} a_{31}^{-1} \text{ при } a_{31} > 1, \quad (1.508)$$

$$\beta_g / \beta_{fp} \approx 1 + \frac{3}{8} a_{31}^{-1} \text{ при } a_{31} > 1. \quad (1.509)$$

Величина β_g може бути розрахована із співвідношення (1.430). Тоді отримуємо

$$\beta_g / \beta_0 = \{1 + AD_g^{-1} \lambda_0 \ln(1/t)\}^{-1}. \quad (1.510)$$

Альтернативна форма

$$\beta_g / \beta_0 = \sigma_g / \sigma_0 \quad (1.511)$$

Відзначимо, що асимптотичний вираз (співвідношення 1.508) збігається з асимптотичним виразом функції Котті (співвідношення 1.320), тому

$$\beta_{fp} \cdot \beta_{fp} = \beta_g \cdot \beta_g \text{ при } a_{31} > 1, \quad (1.512)$$

що вказує на те, що розмірні ефекти питомого опору і ТКО ідентичні при великих товщинах.

1.3.7.5 Порівняння з експериментом

Із співвідношень (1.482), (1.483), (1.508) і (1.509) можна отримати два типові лінеаризовані вирази:

$$d(\beta_{fp} / \beta_g) \approx d - \left\{ \lambda_0 \ln \left(\frac{1}{p} \right) \right\} \cdot N \quad (1.513)$$

$$d(\beta_{fp} / \beta_g) \approx d + \left\{ \lambda_0 \ln \left(\frac{1}{p} \right) \right\} \cdot N, \quad (1.514)$$

де N – параметр, що залежить від зерномежового розсіювання.

Будь-які експериментальні дані можуть бути подані у вигляді лінійної залежності, якщо використати співвідношення (1.513) або (1.514). Таким чином, можна провести апробацію моделі МШ, тривимірної моделі або моделі ізотропного зерномежового розсіювання. Крім того рівняння (1.513) і (1.514) аналогічні рівнянням Вісмана, наведеним у праці [111].

Теоретичні співвідношення для питомого опору та оберненої величини ТКО ідентичні в рамках ізотропної моделі та відрізняються для моделі МШ і тривимірної моделі. Відхилення більш істотне при використанні моделі

МШ. Саме тому в даній роботі акцентується увага лише на декількох моделях провідності.

У випадку плівок Al і Zn [73; 76; 80; 105–107, 130; 131], що отримувалися методом високочастотного розпилення та пройшли процедуру старіння з метою стабілізації електричних параметрів, повторюваність експериментальних результатів спостерігалася в роботах [103; 106], у той час як результати інших робіт потребують порівняння.

Різні варіанти залежностей $d \cdot \beta_{fp}$ і $d \cdot (1/\beta_{fp})$ від d , подані на рис. 1.39 і 1.40, узгоджуються зі співвідношеннями (1.513) і (1.514).

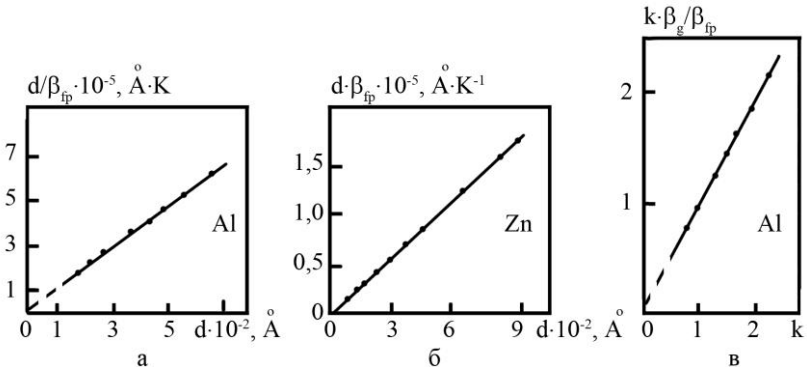


Рисунок 1.39 – Графіки залежностей $d \cdot \beta_{fp}$ d для плівок Al (а) Zn (б) та β_g/β_{fp} від зведеної товщини k для плівок Al (в)

Використовуючи літературні дані для λ_0 і σ_0 [145] та враховуючи, що середній розмір зерна дорівнює першій критичній товщині [103; 106; 172], можна визначити параметри електроперенесення, пов'язані з межами зерен і зовнішніми поверхнями за кутом нахилу лінійної

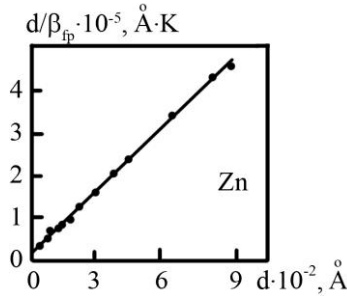


Рисунок 1.40 – Графік залежності $d \cdot (1/\beta_{fp})$ від d для плівок Zn

залежності та за точкою перетину графіка з віссю координат. Результати розрахунків зведені у табл. 1.13. Із практичної точки зору дані для ТКО більш зручні для розрахунку, ніж дані для питомого опору, що пов'язано з похибками при визначенні експериментальної величини питомого опору.

Як приклад, під час апробації експериментальних даних для питомого опору і ТКО в рамках моделі МШ були отримані різні значення коефіцієнта дзеркальності p , хоча відмінність була незначна. Головною особливістю є те, що коефіцієнт дзеркальності p виявляється більшим при розрахунках у рамках статистичних моделей: тривимірної та ізотропної зерномежової. У той час коефіцієнт відбиття R набуває великих значень при малих значеннях коефіцієнта проходження t .

Практично заради точності зручно проводити розрахунки для ТКО при великих товщинах за співвідношенням (1.509), в той час як співвідношення (1.508) справедливо застосувати при малих товщинах.

Таблиця 1.13 – Результати розрахунків параметрів електроперенесення на основі різних моделей

Плівка	Dg, нм	$\rho_0 \cdot 10^8$, Ом·м	$\beta_0 \cdot 10^3$, К ⁻¹	λ_0 , нм	$\rho_g \cdot 10^8$, Ом·м	$\beta_g \cdot 10^3$, К ⁻¹	p	t	R	Примітки
Al	11,4	2,650	4,29	31	10,4	1,100	0,426		0,442	(1) модель МШ
							0,510		0,422	(2) модель МШ
								0,260		(2) одновимірна модель
							0,500- 0,600	0,499		(1) тривимірна модель
							0,600	0,490		(2) тривимірна модель
							0,595	0,478	0,520	(1) ізотропна модель
0,595	0,476	0,520	(2) ізотропна модель							
Zn	15,0	5,916	4,19	12	12,2	1,923	0,500		0,52	(1) модель МШ
							0,484- 0,509		0,52	(2) модель МШ
							0,500- 0,800	0,430		(1) тривимірна модель
							0,700	0,420		(2) тривимірна модель
							0,597	0,362		(1) ізотропна модель
							0,597	0,400		(2) ізотропна модель

(1) за даними для ТКО; (2) за даними для питомого опору

1.3.8 Розмірний ефект ТКО у монокристалічній металевій плівці

1.3.8.1 Співвідношення Маядаса-Шацкеса і похідні лінеаризованих рівнянь

Теоретичні роботи, подані в підпункті 1.3.7.1 також можуть бути використані при аналізі розмірного ефекту ТКО у монокристалічній плівці, зокрема аналіз може бути проведений у рамках моделі на основі загального рівняння (1.478). Для плівок, що задовольняють умову монокристалічності, величина розміру зерна дорівнює або більша, ніж товщина плівки [139; 143]. Тому рівняння (1.478) може бути переписане згідно з [139] у вигляді

$$\beta_{fm} / \beta_0 = 1 + \frac{g(a) - A_{M.S} + B_{M.S} + C_{M.S}}{f(a) - A_{M.S}} \left\{ 1 + \frac{\chi}{\beta_0} \right\}. \quad (1.515)$$

Якщо знехтувати термічним коефіцієнтом лінійного розширення χ , то дане рівняння зводиться до (1.478). Чисельні оцінки рівняння (1.478) для випадку, коли $D_g = d$, які були зроблені у праці Моли і Гераса [63], вказують на те, що ТКО нескінченно товстої монокристалічної плівки може бути визначений як ТКО монокристала.

Мола і Герас [63] показали, що співвідношення (1.515) може бути лінеаризоване у граничному випадку $\chi \ll \beta_0$ і подано у вигляді

$$\frac{d}{\beta_{fm}} \approx \frac{1}{\beta_0} [d + P(p, R) \lambda_0] \quad (1.516)$$

Функція $P(p, R)$ може бути протабульована лише при $p = 0$ (табл. 1.14).

Таблиця 1.14 – Табуляція функції $P(p, R)$ [63]

R	0,1	0,22	0,32	0,42	0,52
$P(p = 0, R)$	0,58	0,83	1,08	1,34	1,84

Необхідно зауважити, що при $p = 0$ коефіцієнт R визначається із точки перетину графіка залежності d/β_{fm} від d з віссю ординат та перевищує значення більші 0,1. У випадку часткового дзеркального розсіювання на зовнішніх поверхнях коефіцієнт зерномежового розсіювання $R < 0,4$ (розрахунки проводилися в рамках моделі МШ). Тому виникають складності при виборі співвідношення (модель ФЗ чи МШ) для аналізу розмірного ефекту в ТКО.

1.3.8.2 Модель ефективної СДВП для ТКО

У рамках ефективної моделі ФЗ і моделі часу релаксації були отримані результати, які ідентичні співвідношенням (1.486) і (1.491). У зв'язку із цим обмежимося порівнянням результатів, розрахованих на основі цих наближених моделей з результатами апробації моделі МШ (1.479). Детальний аналіз визначення ТКО тонких плівок, що задовольняють умову монокристалічності, в рамках моделі часу релаксації був зроблений у праці [141]. Числові значення були розраховані на основі рівняння (1.491) при різних величинах коефіцієнта дзеркальності p і коефіцієнта зерномежового розсіювання R , враховуючи, що параметр α залежить від товщини плівки. Результати розрахунків на основі рівняння (1.491) порівнювалися з розрахунками в рамках моделі МШ і наближеним лінеаризованим виразом Моли і Гераса (1.508). Головною особливістю є те, що при більших значеннях p спостерігається найменше відхилення від розрахунків у рамках моделі МШ. Наприклад, при $0 < k < 10$ і $0,1 < R < 0,42$ відхилення становить менше 3 % при $p = 0$ і

зменшується до 1,5 % при $p = 0,5$. Однак при відносно великих значеннях R відхилення збільшується і становить 4,5 % при $R = 0,62$ і $p = 0$. На основі вищезазначеного можна зробити висновок, що ця процедура може бути зручним способом отримання альтернативного простого виразу для ТКО тонкої плівки, що задовольняє умову монокристалічності.

У випадку ефективної моделі ФЗ для плівок, що задовольняють умову монокристалічності, ефективна зведена товщина k_g є функцією товщини d і розмірно залежить від розміру зерна D_g . Числові оцінки показали, що ТКО плівок, що задовольняють умову монокристалічності, можна також інтерпретувати з достатньою точністю (близько 5 %) у рамках ефективної моделі МШ. Однак потрібно зазначити, що автори праць [143; 134] досягли результату, замінивши ефективну функцію ФЗ (рівняння 1.486) на ефективну функції Котті $C(\mu_g)$ і отримавши вираз ідентичний рівнянню (1.487). Відзначимо також, що у праці Варкуша [143] зерномежове розсіяння було враховане шляхом введення функції $F_w(v)$ замість функції МШ. Однак підхід Варкуша можна вважати еквівалентним дослідженням інших авторів [134].

1.3.8.3 Двовимірний модель ТКО

У рамках двовимірної моделі логарифмічне диференціювання розмірних параметрів a_2 і b_2 дозволяє отримати вираз

$$\frac{da_2}{a_2} = -\frac{db_2}{b_2} - \frac{c_2}{C^2 + v} \left(\frac{dD_g}{D_g} - \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} \right) \quad (1.517)$$

при
$$\frac{db_2}{b_2} = \frac{d\lambda_0}{\lambda_0} - \frac{1}{\mu b_2} \frac{dd}{d} + \frac{C}{v b_2} \frac{dD_g}{D_g}. \quad (1.518)$$

Для знаходження виразу для ТКО в рамках двовимірної моделі скористаємося співвідношенням для питомої провідності:

$$\sigma_{fm} / \sigma_0 = \frac{3}{2b_2} \cdot U(a_2). \quad (1.519)$$

Після логарифмічного диференціювання

$$\frac{d\sigma_{fm}}{\sigma_{fm}} - \frac{d\sigma_0}{\sigma_0} = \frac{db_2}{b_2} + \frac{1}{U(a_2)} \frac{dU(a_2)}{da_2} da_2, \quad (1.520)$$

виконавши математичні перетворення, отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\beta_{fm}}{\beta_0} = & -\frac{V(a_2)}{b_2 U(a_2)} - \frac{x_D}{\beta_0} \left\{ \frac{C^2 a_2}{C^2 + v} \cdot \frac{V(a_2)}{U(a_2)} + \right. \\ & \left. + \frac{C}{vb_2} \left[1 + \frac{a_2 V(a_2)}{U(a_2)} \right] - \frac{x_d}{\beta_0 \mu b_2} \left[1 + \frac{a_2 V(a_2)}{U(a_2)} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.521)$$

де функції $U(a)$ і $V(a)$ визначаються за співвідношеннями (1.500) і (1.501).

Існують два граничні випадки співвідношення (1.521):

1) якщо відсутня розчинність між компонентами системи і матеріалом підкладки ($\chi_d \approx \chi_D \approx \chi$):

$$\beta_{fm} / \beta_0 \approx -\frac{1}{b_2} \frac{V(a_2)}{U(a_2)} - \frac{x}{\beta_0} \left\{ 1 + \frac{1}{b_2} \frac{V(a_2)}{U(a_2)} \right\}. \quad (1.522)$$

2) якщо величини χ_d і χ_D набагато менші β_0 :

$$\beta_{fm} / \beta_0 \approx -\frac{1}{b_2} \cdot \frac{V(a_2)}{U(a_2)}. \quad (1.523)$$

Графік залежності β_{fm}/β_0 від k , побудований на основі співвідношення (1.523) для граничного випадку $D_g = d$

зображений на рис. 1.41. Згідно з цим графіком величина β_{fm} зводиться до співвідношення Котті (1.451)), у разі, якщо коефіцієнт проходження t прямує до одиниці або β_{fm} зводиться до β_0 , коли товщина плівки прямує до нескінченності.

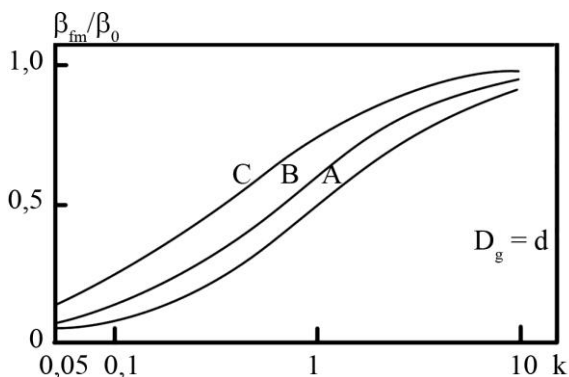


Рисунок 1.41 – Залежності β_{fm}/β_0 від k для плівок, що задовольняють умову монокристалічності, при $p = 0,5$ та умову $D_g = d$: $t = 0,5$ (графік А); $0,7$ (графік В) і $0,9$ (графік С)

Порівнюючи дані результати з результатами в рамках моделі МШ (табл. 1.15), можна побачити, що відхилення становить менше 8 % при великих k .

Необхідно також зазначити, що величину ТКО β_{fm} згідно зі співвідношенням (1.382) можна визначити із такого рівняння:

$$\rho_{fm} \cdot \beta_{fm} \approx \rho_0 \cdot \beta_0 \quad \text{при } k > 0,01. \quad (1.524)$$

Таблиця 1.15 – Порівняння розрахункових величин β_{fm}/β_0 при $p = 0,5$ у рамках моделі МШ і двовимірної моделі

	Модель МШ			Двовимірна модель		
k	$R = 0,1$	$R = 0,22$	$R = 0,42$	$t = 0,895$	$t = 0,754$	$t = 0,485$

0,1	0,200	0,162	0,084	0,239	0,151	0,085
0,4	0,549	0,420	0,265	0,538	0,413	0,270
1	0,737	0,653	0,653	0,734	0,635	0,480
4	0,917	0,869	0,770	0,913	0,873	0,786

Точність визначення величини β_{fm} становить не менше ніж 5 % при $t > 0,8$. Цей аргумент відіграє важливу роль при розв'язанні проблеми експериментального визначення параметрів електроперенесення.

1.3.8.4 Визначення параметрів електроперенесення

Відомі два методи експериментального визначення параметрів електроперенесення. Перший метод полягає у використанні лінеаризованого виразу (1.516), отриманого в рамках моделі Моли та Гераса. Якщо коефіцієнт дзеркальності p не дорівнює нулю, то він може бути визначений із табульованої функції $P(p, R)$. Другий метод полягає в інтерпретації даних для ТКО в рамках двовимірної моделі. Згідно зі співвідношенням (1.524) ТКО плівок, що задовольняють умову монокристалічності, у разі, якщо розмір зерна дорівнює товщині плівки, параметри електроперенесення можуть бути визначені на основі співвідношення

$$\beta_0 / \beta_{fm} \approx 1 + k^{-1} N(t, p), \quad (1.525)$$

де функція $N(t, p)$ знаходиться із рівнянь (1.388) і (1.389) як

$$N(t, p) = 0,36 \ln \frac{1}{p} + 1,144 \ln \frac{1}{t}. \quad (1.526)$$

На основі графіка залежності d/β_{fm} від d , що будується на основі моделі Мола і Гераса і становить пряму лінію, величина β_0 може бути визначена за тангенсом кута

нахилу прямої, а функція $N(t, p)$ за точкою перетину з віссю ординат. Ця процедура не дозволяє отримати окремо коефіцієнти t і p , але дозволяє отримати інформацію про те, як змінюється коефіцієнт проходження t при зміні коефіцієнта дзеркальності p , і та про зміну параметрів зерна D_g і t у процесі термовідпалювання.

1.3.8.5 Порівняння з експериментом; вплив домішок і дефектів

Праці [51; 67; 93; 99; 144] присвячені вивченню ТКО плівок, що задовольняють умову монокристалічності. Серед них лише праці [51; 67; 93; 99] містять дані для питомий опір, тому вони можуть бути використані для апробації двовимірної моделі. Результати розрахунків в рамках моделі ФЗ (див. роботи [46; 53; 55]) показали, що ця модель задовільно описує розмірний ефект в монокристалічних плівках, однак лише у разі, якщо плівки повністю задовольняють умову монокристалічності. Аналіз праць Пала та ін. [99] (присвячена дослідженню розмірного ефекту в тонких плівках Al) та [67; 93] (вивчався розмірний ефект для ТКО плівок Sn і In, товщиною 500–5000 Å) показав, що плівки мають монокристалічну структуру тільки при товщинах, менших 900 Å (плівки Sn) та 1700 Å (плівки In). При більших товщинах структура стає полікристалічною, внаслідок чого при сталому розмірі зерна величина ТКО стає відмінною від β_0 .

Результати праць Пала та ін. можуть бути інтерпретовані в рамках двовимірної моделі, оскільки ці автори визначили величину добутку $(1-p)\lambda_0$ і функції $N(t,p)$. Величина $\lambda_0 = 700$ Å, що значно більша порівняно з роботою [145] ($\lambda_0 = 380$ Å).

Проведемо порівняння експериментальних результатів, наведених у працях Нарасімха Рао та ін. [53; 55], Лінь і

Леонарда [46] і Сурі та ін. [51], з теоретичними розрахунками. Експериментальні дослідження питомого опору і ТКО для тонких термовідпалених плівок золота були проведені Лінь і Леонардом. Вони отримали значення для ТКО нескінченної товщини $3,32 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$, що добре узгоджується з табличним значенням $3,4 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ [133] для масивних зразків. Перебудувавши свої дані в координатах $k\beta_0/\beta_f$ від k , вони отримали значення функції $N(t, p) = 0,42$, що відповідає результатам, визначеним на основі даних питомого опору. Ці результати означають, що розмірний ефект у термовідпалених плівках золота може бути описаний у рамках моделей для плівок, що задовольняють умови монокристалічності.

Аналіз експериментальних результатів для питомого опору плівок Cu в рамках двовимірної моделі, поданий у підпункті 1.3.4.5, свідчить про добру узгодженість експериментальних результатів з розрахунковими. Аналогічна ситуація спостерігається і для ТКО. На основі графіка $k\beta_0/\beta_f$ від k (рис. 1.42), враховуючи, що $D_g = d$, була отримана величина функції $N(t, p) = 0,32$. Експериментальні залежності β_{fm}/β_0 від k збігаються з розрахунковими (вставка на рис. 1.42) при $t = 0,9$ і $p = 0,6$ та при $t = 0,8$ і $p = 0,9$.

Нарасімха Рао та ін. у праці [55] показали, що модель ФЗ і двовимірна модель при $D_g = d$ не дають задовільних результатів при аналізі явища розмірного ефекту питомого опору і ТКО тонких плівок срібла. Виходячи з цього, у праці [146] була задовільня узгодженість із розрахунками в рамках моделі ФЗ і

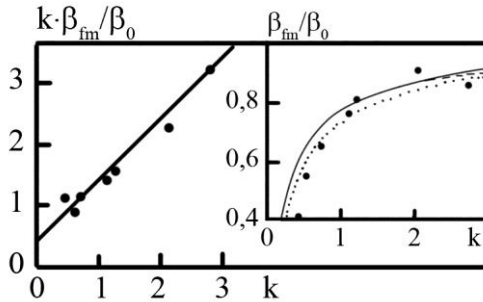


Рисунок 1.42 – Графіки залежностей $k\beta_f/\beta_0$ від k та β_{fm}/β_0 від k (на вставці) для термовідпалених плівок Cu [53] при $t=0,8$; $p=0,9$ (суцільна лінія); при $t=0,9$ і $p=0,5$ (пунктирна лінія)

двовимірної моделі за виконання таких вимог:

1) коефіцієнти t і p повинні набувати значень 0,8 і 0,5 відповідно, що при малих товщинах забезпечує значення функції $N(t, p) = 0,37$; слід зазначити, що інші пари значень також можливі;

2) при малих товщинах розмір зерна дорівнює товщині плівки;

3) при великих товщинах залежність розміру зерна від товщини плівки лінійна.

Як бачимо з рис. 1.43, експериментальні результати добре узгоджуються з розрахунковими при $k=0,3$.

Сурі та ін. [51] показали, що розмірний ефект у тонких термовідпалених плівках міді, які задовольняють умові монокристалічності, може бути описаний в рамках двовимірної моделі. Ці автори вважають, що аномально сильні розмірні ефекти питомого опору і ТКО можуть бути пов'язані зі структурними дефектами. Якщо позначити величину питомого опору, що характеризує внесок дефектів у загальний питомий опір як ρ_{imp} , то вираз для

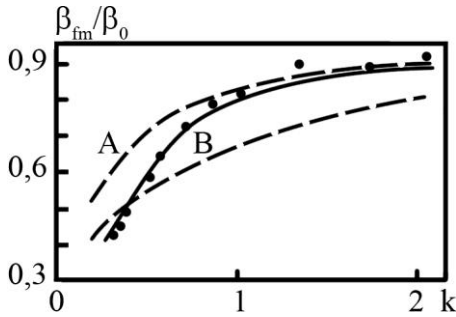


Рисунок 1.43 – Порівняння експериментальних даних для ТКО плівок Cu [55] при різних значеннях зведеної товщини з розрахунковими на основі двовимірної моделі (суцільна лінія) і моделі ФЗ (пунктирна лінія А – $p = 0$, В – $p = 0$)

$\beta_{f, imp}$ можна записати у вигляді

$$\beta_{f, imp} \approx \frac{1}{\rho_{f, imp}} \frac{d\{\rho_0 + \rho_g + \rho_s\}}{dT} \quad (1.527)$$

із урахуванням, як і в праці [51], температурної залежності параметрів розсіювання на дефектах. Тоді згідно з правилом Маттіссена $\rho_{f, imp}$ визначається як

$$\rho_{f, imp} \approx \rho_0 + \rho_g + \rho_s + \rho_{imp} \quad (1.528)$$

де індекси 0, g та s пов'язані з процесами розсіювання в плівці на фонах і дефектах: межах зерен та зовнішніх поверхнях відповідно.

Отже,

$$\frac{d\{\rho_0 + \rho_g + \rho_s\}}{dT} \approx \frac{d\rho_{fm}}{dT} \approx \rho_{fm} \cdot \beta_{fm} \quad (1.529)$$

де β_{fm} – ТКО, що відповідає питомому опору ρ_{fm} без

урахування структурних дефектів.

На основі співвідношень (1.518) і (1.520) отримуємо

$$\rho_{f,imp} \cdot \beta_{f,imp} \approx \rho_{fm} \cdot \beta_{fm} \quad (1.530)$$

Повертаючись до співвідношення (1.524), можна зазначити, що величина $\beta_{f,imp}$ залежати від $\rho_{f,imp}^{-1}$. Крім того, величина $\rho_{f,imp} \cdot \beta_{f,imp}$ наблизатиметься до нуля для монокристалічних плівок, у яких відсутні структурні дефекти.

1.3.9 Вплив макронапружень і матеріалу підкладки на величину ТКО

1.3.9.1 Вплив термічних макронапружень

У пункті 1.3.8 були наведені основні співвідношення, що описують розмірний ефект ТКО без урахування термічного розширення товщини плівки (співвідношення 1.445, 1.502 і 1.521) та розміру зерна (співвідношення 1.463, 1.468 і 1.502). Однак більшість експериментальних робіт, присвячених вивченню електрофізичних властивостей тонких металевих плівок, свідчать про те, що термічними коефіцієнтами лінійного розширення товщини плівки та діаметра зерна можна знехтувати лише по відношенню до ТКО β_0 . Справедливість такого припущення є хибною у разі, якщо β_0 набуває малих значень (наприклад для напівпровідників або сплавів [133]).

Крім того, не слід забувати, що розрахунки, подані в пункті 1.3.8, не враховують зміни параметрів електроперенесення ρ , R і t при зміні температури. Фізичні параметри, які подаються у цьому пункті, вводяться для підтвердження припущення про незначний вплив

температури на p , R і t . До таких параметрів можна віднести шорсткість поверхні, яка не повинна залежати від температури. Це спрощене припущення може бути сумнівним у випадку коефіцієнта R , оскільки він розраховується за співвідношенням (1.278), згідно з яким R має енергетичну залежність. Температурна залежність, згідно з працею [136], виявляється незначною, тому в більшості випадків для розрахунку ТКО напівпровідників або сплавів можуть бути використані співвідношення, подані у праці [139], враховуючи зауваження, наведені в підпункті 1.3.2.1 для моделі МШ. Згідно з позначеннями підпункта 1.3.7.1 загальний вираз для ТКО може бути поданий у вигляді

$$\beta_f - \beta_0 = [f(a) - A_{M.S}]^{-1} \left\{ \{g(a) - A_{M.S} + B_{M.S} + C_{M.S}\} \beta_0 + \{g(a) + B_{M.S} + C_{M.S} + D_{M.S}\} \chi_D + (D_{M.S} - A_{M.S}) \chi_d - \{g(a) + B_{M.S} + C_{M.S} - D_{M.S}\} (1-R)^{-1} \chi_R \right\} \quad (1.531)$$

при
$$\chi_R = \frac{d \ln R}{dT}. \quad (1.532)$$

Термічний коефіцієнт опору може бути визначений як

$$\beta_{Rf} = \frac{d \ln R_f}{dT}. \quad (1.533)$$

Ураховуючи, що коефіцієнти лінійного розширення довжини, ширини та товщини плівки однакові, співвідношення (1.533) можна записати так:

$$\beta_{Rf} = \beta_f - \chi. \quad (1.534)$$

Таким чином, можна зробити висновок, що ТКО плівки β_{Rf} зводиться до β_f , якщо коефіцієнт лінійного розширення плівки значно менший, ніж β_f , тобто $\chi \ll \beta_f$. Ця умова

більш жорстка, ніж $\chi \ll \beta_0$ (використовувалася для отримання спрощеного виразу β_f/β_0 у пункті 1.3.6.), оскільки β_f набуває більш низьких значень ніж β_0 (див. працю [133] та пункт 1.3.6).

1.3.9.2 Вплив матеріалу підкладки

У разі, якщо плівка знаходиться на підкладці, коефіцієнт лінійного розширення якої χ_s відрізняється від коефіцієнта χ_f , то на плівку діятимуть макронапруження термічного походження.

Вплив макронапружень термічного походження на ТКО вперше досліджений у праці [147]. Для спрощення аналізу даного ефекту у роботі [148] були введені припущення, які будуть описані нижче.

Внаслідок зміни температури T від деякого початкового значення T_i , відбувається різна за величиною деформація $\dot{\varepsilon}$ у напрямі довжини L , ширини W і в подальшому товщини плівки $\dot{\varepsilon}_d$. Різні величини $\dot{\varepsilon}_1$ і $\dot{\varepsilon}_2$, що характеризують деформацію у напрямках L і W відповідно, роблять свій внесок у величину $\dot{\varepsilon}_d$.

Згідно з теорією пружності [149] коефіцієнт лінійного розширення, пов'язаний з деформацією плівки при зміні температури, може бути визначений як

$$\dot{\varepsilon} = (\chi_s - \chi_f)(T - T_i). \quad (1.535)$$

Для того щоб визначити сумарний вплив макронапружень термічного походження на ТКО, вводиться механічний коефіцієнт деформації плівки. Навантаження, що діє в L -напрямі, викликає деформацію плівки $\dot{\varepsilon}_L$ у напрямі L та деформацію $P_f \dot{\varepsilon}_L$ у напрямі W ,

де P_f – коефіцієнт Пуассона півки.

Аналогічно, навантаження, що діє у W -напрямі викликає деформацію півки $\dot{\varepsilon}_w$ у напрямі W та деформацію $P_f \dot{\varepsilon}_w$ у напрямі L .

Отже, результуюча деформація відповідно у напрямках L і W може бути визначена як

$$\dot{\varepsilon}_1 = \dot{\varepsilon}_L - P_f \dot{\varepsilon}_w, \quad (1.536)$$

$$\dot{\varepsilon}_2 = -P_f \dot{\varepsilon}_w + \dot{\varepsilon}_w. \quad (1.537)$$

У напрямку d для результуючої деформації можна записати співвідношення

$$\dot{\varepsilon}_d = -P_f \left(\dot{\varepsilon}_L + \dot{\varepsilon}_w \right), \quad (1.538)$$

де $\dot{\varepsilon}_L$ і $\dot{\varepsilon}_w$ визначаються як

$$\dot{\varepsilon}_L = \left(\dot{\varepsilon}_1 + P_f \dot{\varepsilon}_2 \right) \left(1 - P_f^2 \right)^{-1}, \quad (1.539)$$

$$\dot{\varepsilon}_w = \left(P_f \dot{\varepsilon}_1 + \dot{\varepsilon}_2 \right) \left(1 - P_f^2 \right)^{-1}. \quad (1.540)$$

У випадку термічної деформації

$$\dot{\varepsilon}_1 = \dot{\varepsilon}_2 = \dot{\varepsilon}, \quad (1.541)$$

де $\dot{\varepsilon}$ визначається за співвідношенням (1.534).

Отже,

$$\dot{\varepsilon}_L = \dot{\varepsilon}_w = \dot{\varepsilon} \left(1 - \mu_f \right)^{-1} = \left(1 - \mu_f \right)^{-1} \left(\chi_S - \varphi_f \right) \left(T - T_i \right), \quad (1.542)$$

$$\dot{\varepsilon}_d = -2\mu_f (1 - \mu_f)^{-1} (\chi_s - \chi_f)(T - T_i) \quad (1.543)$$

Диференціальна зміна питомого опору при деформації, що відбувається внаслідок зміни температури, визначається рівнянням

$$\left. \frac{d\rho_f}{\rho_f} \right|_{t.s.} = \gamma_{Lu} \dot{\varepsilon}_L + \gamma_{Wu} \dot{\varepsilon}_W, \quad (1.544)$$

де γ_{Lu} і γ_{Wu} – коефіцієнти поздовжньої та поперечної тензочутливості плівки без підкладки.

За величиною $d\rho_f/\rho_f$, пов'язаною з дією макронапружень термічного походження, згідно з працею [150] можна визначити різницю між ТКО плівок на підкладці та без:

$$\beta_{fs} - \beta_f = \gamma_{Lu} \frac{\partial \dot{\varepsilon}_L}{\partial T} + \gamma_{Wu} \frac{\partial \dot{\varepsilon}_W}{\partial T}. \quad (1.545)$$

Розв'язок рівняння (1.542) дає

$$\beta_{fs} - \beta_f = (\gamma_{Lu} + \gamma_{Wu})(\chi_s - \chi_f)(1 - P_f)^{-1}. \quad (1.546)$$

Для розрахунку ТКО плівки на підкладці необхідно враховувати вплив макронапружень як на питому величину провідності, так і на геометричні розміри плівки. Оскільки загальна механічна деформація у напрямках L , W і d визначається за співвідношеннями (1.535), (1.541) і (1.543)), то для зміни ТКО можна записати такий вираз:

$$\beta_{Rfs} - \beta_{Rf} = [(\gamma_{Lu} + \gamma_{Wu}) + 2P_f](\chi_s - \chi_f)(1 - P_f)^{-1}. \quad (1.547)$$

Для тонких полікристалічних плівок чисельна оцінка теоретичних рівнянь, отриманих у рамках моделі, що враховує зерномежове розсіювання електронів у

співвідношення для питомої провідності (пункт 1.2), наведена у працях [72, 80, 151] показала, що

$$\gamma_{Lu} + \gamma_{Wu} \gg 2P_f. \quad (1.548)$$

На основі цього можна записати, що

$$\beta_{Rfs} - \beta_{Rf} \approx \beta_{fs} - \beta_f. \quad (1.549)$$

Детальні розрахунки коефіцієнтів тензочутливості подані у розділі 3. Як було показано в праці [152] коефіцієнти тензочутливості плівок без підкладки γ_{Lu} і γ_{Wu} можна записати через відповідні коефіцієнти для плівок на підкладках γ_L і γ_W . Тоді

$$\gamma_{Lu} + \gamma_{Wu} = (\gamma_{Lu} + \gamma_{Wu})(1 - P_f)(1 - P_s)^{-1}, \quad (1.550)$$

де P_s – коефіцієнт Пуассона для підкладки.

Отже, рівняння (1.546) і (1.547) перетворюються до вигляду

$$\beta_{Rfs} - \beta_{Rf} = (\gamma_L + \gamma_W)(\chi_s - \chi_f)(1 - P_s)^{-1}, \quad (1.551)$$

$$\begin{aligned} \beta_{Rfs} - \beta_{Rf} = & \left[\gamma_L + \gamma_W + 2P_f(1 - P_s)(1 - P_f)^{-1} \right] \times \\ & \times (\chi_s - \chi_f)(1 - P_s)^{-1}. \end{aligned} \quad (1.552)$$

Згідно з будь-якою моделлю (див. підрозділ 1.2) загальна питома провідність плівки залежить від товщини плівки і розміру зерен. Внесок у загальну величину ТКО внаслідок зміни лише СДВП λ_0 при зміні температури може бути визначений згідно з працями [153-155] так:

$$\beta_{f0} = (\beta_f + \chi_f)(1 + \chi_f \cdot \beta_0^{-1})^{-1}. \quad (1.553)$$

Ураховуючи, що

$$\chi_d = \chi_D = \chi_f, \quad (1.554)$$

величину β_{f0} можна визначити через β_{fs} :

$$\beta_{f0} = \left\{ \beta_{fs} - (\gamma_L + \gamma_W)(\chi_s - \chi_f)(1 - P_s)^{-1} + \chi_f \right\} \times \left\{ 1 + \chi_f \cdot \beta_0^{-1} \right\}^{-1}. \quad (1.555)$$

Співвідношення (1.555) – це найбільш загальний вираз, що не враховує зміну параметрів електроперенесення p , R , t з температурою. Аналіз праць, у яких проводилося дослідження впливу макронапружень термічного походження на ТКО [154; 162–166], показав, що спостерігається лише часткове узгодження експериментальних результатів з співвідношенням (1.555), а рівняння (1.552) не узгоджується із розрахунками Холла [147]. Це відбувається внаслідок того, що розрахунки розмірно-залежних параметрів при деформації були проведені неправильно (див. розділ 3).

Рівняння (1.547) узгоджується із виразом, поданими у праці Верма і Джей [165]:

$$\beta_{fs} - \beta_f = \left[\gamma_1 + \gamma_2 - 2P_f(1 - P_f)^{-1} \gamma_3 \right] (\chi_s - \chi_f), \quad (1.556)$$

де

$$\gamma_i = \frac{1}{\rho_f} \left(\frac{\partial \rho_f}{\partial \varepsilon_i} \right)_{\varepsilon_j, \varepsilon_k} \quad \text{при } i \neq j \neq k. \quad (1.557)$$

Згідно з працею [150] параметр γ_i може бути визначений із таких співвідношень:

$$\gamma_{Lu} = \gamma_1 - P_f \gamma_2 - P_f \gamma_3, \quad (1.558)$$

$$\gamma_{Wu} = -P_f \gamma_1 + \gamma_2 - P_f \gamma_3. \quad (1.559)$$

Отже, рівняння (1.556) зводиться до рівняння (1.547).

На основі вищезазначеного можна зробити висновок,

що визначити вплив матеріалу підкладки на ТКО за експериментальним значенням досить складно. Можна стверджувати лише, що внесок буде тим більшим, чим менша величина ТКО.

1.3.10 Розмірні ефекти у питомому опорі й ТКО металевих плівок

1.3.10.1 Граничні випадки правила Маттіссена

Згідно з правилом Маттіссена питомий опір тонкої металевої плівки може бути розрахований шляхом визначення внеску в питомий опір всіх джерел електронного розсіювання [83].

Таким чином, питомий опір полікристалічних і монокристалічних металевих плівок ρ_{fp} і ρ_{fm} можна визначити на основі лінеаризованих рівнянь, поданих у підпунктах 1.3.4.3 і 1.3.5.3, у вигляді

$$\rho_{fp} = \rho_g + \rho_e, \quad (1.560)$$

$$\rho_{fm} = \rho_0 + \rho_{dm}, \quad (1.561)$$

де ρ_e – питомий опір, пов'язаний з розсіюванням електронів на зовнішніх поверхнях плівки; ρ_{dm} – із зерномежовим розсіюванням та розсіювання електронів на зовнішніх поверхнях.

Останні два співвідношення можуть бути подані у вигляді виразу

$$\rho_f = \rho_\infty + \rho_d, \quad (1.562)$$

де ρ_∞ – питомий опір нескінченно товстої плівки; ρ_d – питомий опір, пов'язаний з розмірно залежними параметрами.

Диференціювання рівняння (1.562) за температурою приводить до

$$\beta_f \rho_f \approx \beta_\infty \rho_\infty + \beta_d \rho_d. \quad (1.563)$$

Якщо питомий опір плівки залежить від товщини і не залежить від температури, то рівняння (1.562) зводиться до

$$\beta_f \rho_f \approx \beta_\infty \rho_\infty, \text{ при } \beta_d = 0. \quad (1.564)$$

Величину $\beta_\infty \rho_\infty$ можна визначити з будь-якої моделі для питомої провідності, наведеної у пунктах 1.2, 1.3.2-1.3.5 цього розділу.

Згідно з моделлю ФЗ (пункт 1.2.1) та двовимірною моделлю (1.3.4) можна записати, що

$$\beta_\infty \rho_\infty \approx \beta_0 \rho_0, \quad (1.565)$$

де індекс 0 відповідає масивному матеріалу.

У рамках тривимірної моделі (пункт 1.8.5)

$$\beta_\infty \rho_\infty \approx \beta_g \rho_g. \quad (1.566)$$

Подібне співвідношення було отримане в рамках моделі МШ.

Ураховуючи стандартні припущення при розрахунках величини ТКО металевих плівок (підпункт 1.3.6.1), теоретичне співвідношення для β_g [142; 167; 168] набуває числових значень [167; 169] таких, що

$$\beta_g \rho_g = \beta_0 \rho_0. \quad (1.567)$$

Отже, рівняння, яке виражає правило Маттіссена, має вигляд

$$\beta_f \rho_f \approx \beta_0 \rho_0 \quad (1.568)$$

якщо

$$\beta_d = 0. \quad (1.569)$$

Умова (1.569) виконується для товстих монокристалічних і полікристалічних плівок, тому асимптотичні вирази для питомого опору пов'язані із

зерномежовим і поверхневим розсіюваннями (підпункти 1.3.2.5, 1.3.2.6, 1.3.4.3, 1.3.5.3 і 1.3.5.6). Із позначеннями, що визначаються рівняннями (1.560) і (1.561) при використанні позначень співвідношень (1.560) і (1.561) можна записати, що

$$\rho_{dm} = \rho_e + \rho_{gm} \text{ при } k > 1, \quad (1.570)$$

де $\rho_e = \rho_0 \lambda_0 d^{-1} h_e(p)$ при $k > 1$, (1.571)

$$\rho_{gm} = \rho_0 \lambda_0 d^{-1} h_e(t), \text{ при } k > 1, \quad (1.572)$$

якщо врахувати, що $D_g = d$; $h_e(p)$ і $h_e(t)$ – аналітичні функції для параметрів p і t , які не залежать від температури.

Із співвідношень

$$\rho_d = \rho_e, \quad (1.573)$$

$$\rho_d = \rho_{dm}, \quad (1.574)$$

які пов'язані із полікристалічною та монокристалічною плівками відповідно, отримуємо загальне співвідношення

$$\rho_d \square \rho_0 \lambda_0 \text{ при } k > 1, \quad (1.575)$$

що приводить до виразу

$$\beta_d = \beta_e = \beta_{dm} = 0 \text{ при } k > 1, \quad (1.576)$$

який добре узгоджується із співвідношенням (1.569).

Отже, рівняння (1.568) описує правило Маттіссена для полікристалічних і монокристалічних металевих плівок.

1.3.10.2 Відхилення від правила Маттіссена для полікристалічної плівки

Виходячи з досліджень, пов'язаних із використанням

ефективних моделей провідності (підпункти 1.3.1.2, 1.3.1.3, 1.3.2.3 і 1.3.2.5) та тривимірної моделі (підпункт 1.3.5.3), необхідно зазначити, що питомий опір плівки може бути виражений як

$$\rho_{fp} = \rho_g + \rho_1, \quad (1.577)$$

де ρ_1 – питомий опір, що залежить від усіх параметрів розсіювання.

При великих значення зведеної товщини величина ρ_1 зводиться до ρ_e , тобто

$$\rho_1 \approx \rho_e \text{ при } k > 1. \quad (1.578)$$

Визначивши $\xi_1^*(d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \cdot \lambda_0^{-1})$ із

$$\rho_1 = \rho_e \left[1 + \xi_1^*(d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \cdot \lambda_0^{-1}) \right] \quad (1.579)$$

та продиференціювавши рівняння (1.577), отримуємо

$$\begin{aligned} \beta_{fp} \rho_{fp} = \beta_g \rho_g + \left[1 + \xi_1^*(d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \cdot \lambda_0^{-1}) \right] \beta_e \rho_e + \\ + \frac{\beta_0 \rho_0}{\lambda_0} \xi_1^*(d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \cdot \lambda_0^{-1}) \end{aligned} \quad (1.580)$$

$$\text{при } 1 + \xi_1^*(d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \cdot \lambda_0^{-1}) = - \left[\frac{\partial \xi_1^*}{\partial (d \lambda_0^{-1})} + \frac{\partial \xi_1^*}{\partial (D_g \lambda_0^{-1})} \right]. \quad (1.581)$$

Підставляючи співвідношення (1.560), (1.567) і (1.576) у рівняння (1.581), отримуємо

$$\beta_{fp} \rho_{fp} \approx \beta_0 \rho_0 \left\{ 1 + d^{-1} H_e(p, d \lambda_0^{-1}) \xi_1^{**}(d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \lambda_0^{-1}) \right\}. \quad (1.582)$$

Співвідношення (1.582) показує, що розмірний ефект добутку $\beta_{fp} \rho_{fp}$ має гіперболічну залежність від товщини, яка задається функцією ξ_1^{**} .

Для дуже тонких плівок співвідношення (1.571) застосовувати не можна, але його можна переписати у вигляді

$$\rho_e = \rho_0 \lambda_0 d^{-1} H_e^* (p, d \cdot \lambda_0^{-1}). \quad (1.583)$$

Отже,

$$\beta_{fp} \rho_{fp} \approx \beta_0 \rho_0 \left\{ 1 + d^{-1} H_e (p, d \lambda_0^{-1}) \xi_1^{**} (d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \lambda_0^{-1}) \right\}, \quad (1.584)$$

що зводиться до

$$\beta_{fp} \rho_{fp} \approx \beta_0 \rho_0 d^{-1} H_e^* (p, d \cdot \lambda_0^{-1}) \xi_1^{**} (d \cdot \lambda_0^{-1}, D_g \cdot \lambda_0^{-1}) \quad (1.585)$$

при $d \cdot \lambda_0^{-1} \ll 1$.

Згідно із цим співвідношенням повинне спостерігатися різке збільшення величини $\beta_{fp} \rho_{fp}$ при дуже малих товщинах, що добре узгоджується з розрахунковими результатами, отриманими у праці [170] (рис. 1.44).

Вплив поверхневого розсіювання менший при найменших значеннях діаметра зерна, в той час як відхилення від графіка, побудованого на основі моделі ФЗ, тобто при $\alpha = 0$, більш виражене. Це можна пояснити, зважаючи на той факт, що зерномежове розсіювання не залежить від температури, тому зміна загального питомого опору при зміні температури відбувається саме за рахунок меж зерен.

Також потрібно зауважити, що розмірний ефект $\beta_{fp} \rho_{fp}$ при врахуванні зерномежового розсіювання проявляється слабше, ніж у рамках моделі ФЗ. У праці [174] було показано, що розрахунки на основі рівнянь (1.567) і (1.585) добре узгоджуються з експериментальними результатами для плівок Ni (рис. 1.45).

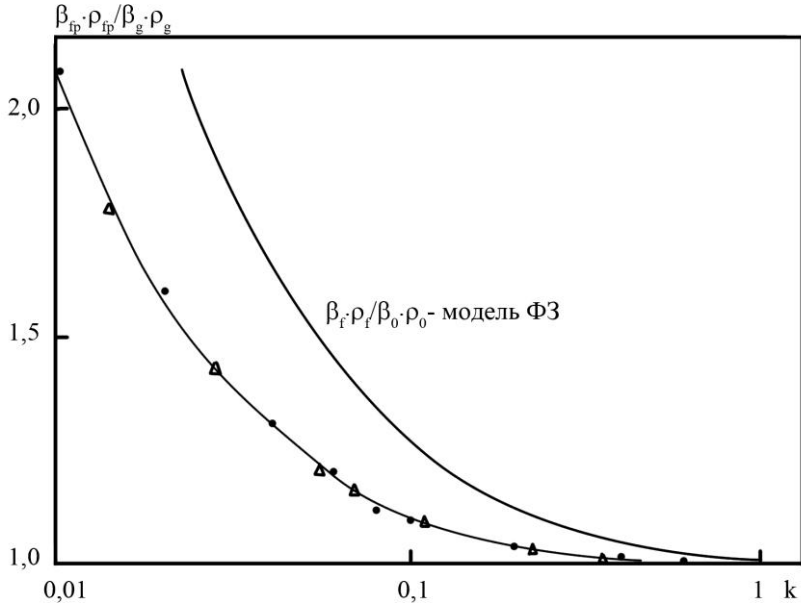


Рисунок. 1.44 – Залежності $\beta_{fp} \cdot \rho_{fp} / \beta_{g} \cdot \rho_{g}$ і $\beta_f \rho_f / \beta_0 \rho_0$ від зведеної товщини k при $\alpha = v^{-1}$ і $p = 0,5$: Δ – тривимірна модель, \bullet – модель МШ

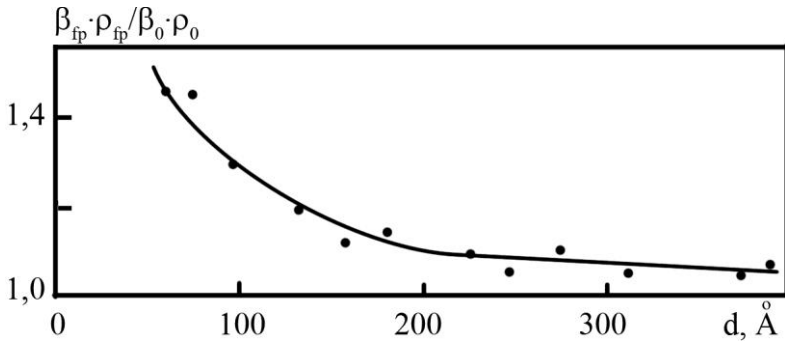


Рисунок. 1.45 – Залежність $\beta_f \rho_f / \beta_0 \rho_0$ від товщини для плівок Ni при 273 K [174]

1.3.10.3 Відхилення від правила Маттіссена для монокристалічної плівки

Питомий опір ρ_{fm} згідно з підпунктами 1.3.2.6 і 1.3.4.3 може бути визначений як

$$\rho_{fm} = \rho_0 + \rho_2, \quad (1.586)$$

де ρ_2 – питомий опір, пов'язаний із зерномежовим і поверхневим розсіюванням.

При великих товщина асимптотична величина для ρ_2

$$\rho_2 \approx \rho_e + \rho_{gm} \text{ при } k > 1 \quad (1.587)$$

визначається через $\xi_2^*(d \cdot \lambda_0^{-1})$ як

$$\rho_2 = (\rho_e + \rho_{gm}) \left[1 + \xi_2^*(d \cdot \lambda_0^{-1}) \right] \text{ при } D_g = d. \quad (1.588)$$

Звідси

$$\beta_{fm} \rho_{fm} \approx \beta_0 \rho_0 \left\{ 1 + d^{-1} \left[h_e(p) + h_{gm}(t) \right] \xi_2^{**}(d \cdot \lambda_0^{-1}) \right\}, \quad (1.589)$$

при $d \cdot \lambda_0^{-1} > 1$,

$$\text{де} \quad \xi_2^{**}(d \cdot \lambda_0^{-1}) = \frac{\partial \xi_2^{**}}{\partial (d \cdot \lambda_0^{-1})}. \quad (1.590)$$

Співвідношення (1.589) показує, що розмірний ефект визначається гіперболічною функцією $\xi_2^*(d \cdot \lambda_0^{-1})$.

Величина розмірного ефекту значно менша, ніж у рамках моделі ФЗ, відхилення між моделями МШ [116; 11] і двовимірною [11] також значне (див. рис. 1.46). Розмірний ефект менш виражений у рамках двовимірної моделі.

Відмітимо також, що в рамках двовимірної моделі співвідношення

$$\beta_{fm} \rho_{fm} \approx \beta_0 \rho_0 \quad (1.591)$$

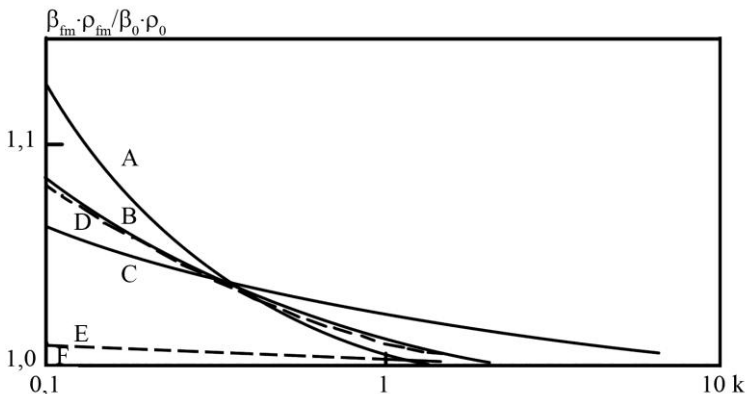


Рисунок. 1.46 – Залежності $\beta_{fm} \cdot \rho_{fm} / \beta_0 \cdot \rho_0$ від зведеної товщини k при $p = 0,5$, отримані на основі розрахунків у рамках моделі МШ (суцільна лінія) при $R = 0,1$ (A); $0,22$ (B) і $0,42$ (C) та двовимірної моделі (пунктирна лінія) при $t = 0,895$ (D); $0,754$ (E) і $0,485$ (D)

справедливе з відхиленням меншим ніж 5 % при $p < 0,8$, $t < 0,9$ і $0,01 < k < 10$ [171].

1.3.10.4 Вплив домішок та дефектів

У разі, якщо пліва має домішки і дефекти, питомий опір нескінченно товстої плівки ρ_∞ необхідно замінити на ρ_∞^* . Згідно з правилом Маттіссена ρ_∞^* визначається як

$$\rho_\infty^* = \rho_\infty + \rho_{im}, \quad (1.592)$$

де ρ_{im} – питомий опір, пов'язаний з розсіювання на домішках і дефектах.

Згідно з аналізом, подібним до проведеного у попередньому пункті, співвідношення (1.593) перетворюється до вигляду

$$\beta_f^* \rho_f^* = \beta_0 \rho_0 + \beta_{im} \rho_{im}, \quad (1.593)$$

$$\text{якщо } \beta_d = 0. \quad (1.594)$$

Співвідношення (1.594) справедливе для великих товщин, як це було показано раніше.

Якщо питомий опір, пов'язаний із домішками і дефектами, не залежить від температури, то процеси в плівці можуть бути описані на основі співвідношень:

$$\rho_f^* \approx \rho_\infty + \rho_d + \rho_{im}, \quad (1.595)$$

$$\beta_f^* \rho_f^* \approx \beta_0 \rho_0, \quad (1.596)$$

$$k \gg 1, \beta_d \approx \beta_{im} \approx 0. \quad (1.597)$$

При великих товщинах, співвідношення (1.595) задає лінійну залежність $d \cdot \rho_f^*$, d з кутом нахилу $(\rho_\infty + \rho_{im})$. Якщо плівка має монокристалічну структуру, ρ_∞ зводиться до ρ_0 і будь-який додатковий опір можна пов'язати з розсіюванням на домішках і дефектах. Якщо плівка має полікристалічну структуру, то ефекти зерномежового розсіювання та розсіювання на домішках і дефектах не можуть бути відокремлені на даному етапі. Однак, якщо лінійна залежність $d \cdot \rho_f^*$, d не спостерігається, то повинна існувати розмірна залежність питомого опору ρ_{im} , тому важко запропонувати легке розв'язання задачі.

У разі, якщо виконується рівняння (1.596), структура плівки не залежить від товщини і $\beta_{im} = 0$. У протилежному разі припущення $\beta_{im} = 0$ хибне і для інтерпретації результатів необхідні інші дані. Однак у випадку монокристалічної плівки для визначення величини β_{im} можна скористатися таким виразом для питомого опору:

$$\rho_{fm}^* = \rho_0 + \rho_{dm} + \rho_{im}, \quad (1.598)$$

що дає

$$\beta_{fm}^* \rho_{fm}^* = \beta_0 \rho_0 + \beta_{im} \rho_{im}. \quad (1.599)$$

Граничний випадок співвідношення (1.598)

$$\rho_{fm}^* \Big|_{d \rightarrow \infty} = \rho_\infty^* = \rho_0 + \rho_{im}. \quad (1.600)$$

Вплив домішок і дефектів також може бути поданий через ρ_{im} і β_{im} , хоча цей розрахунок може бути проведений тільки у разі, якщо розрахункові значення ρ_{im} і β_{im} мають фізичний зміст. У протилежному разі необхідно використовувати альтернативні моделі. Наприклад, у випадку розпилених тонких плівок, згідно з працями [103; 105; 172], структура плівки має два шари (див. рис. 1.47), один із яких має домішки та дефекти, тому співвідношення для питомого опору матиме вигляд

$$(\rho_f)^{-1} = (\rho_c)^{-1} + (\rho_k)^{-1}, \text{ тобто } \rho_f = \rho_k (1 + \rho_k \cdot \rho_c^{-1})^{-1}. \quad (1.601)$$

Вираз для ТКО запишеться як

$$\beta_f = \beta_k (1 + \rho_k \rho_c^{-1})^{-1} + \beta_c \rho_k \rho_c^{-1} (1 + \rho_k \rho_c^{-1})^{-1}. \quad (1.602)$$

Оскільки розмірний ефект пов'язаний із ρ_k , а не ρ_c , а також β_k , то останні два рівняння вказують на те, що розмірні ефекти ρ_f і β_f різні. Крім того, $\beta_f \rho_f$ може бути записане у такому вигляді:

$$\rho_f \beta_f = \rho_k \beta_k (1 + \rho_k \rho_c^{-1})^{-1} + \rho_k^2 \beta_c \rho_c^{-1} (1 + \rho_k \rho_c^{-1})^{-2}. \quad (1.603)$$

При $\rho_c > \rho_k$ співвідношення (1.603) має вигляд

$$\rho_f \beta_f \approx \rho_k \beta_k \quad (1.604)$$

і може бути отримана форма, аналогічна співвідношенню (1.568).

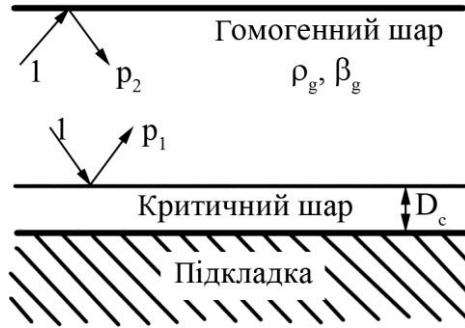


Рисунок. 1.47 – Двошарова модель для тонких металевих плівок [103]

Примітки

1 Як буде показано в книзі 2 (пункт 2.3.4), величина $\beta_f \rho_f / \beta_0 \rho_0$ може бути подана через співвідношення для коефіцієнта Холла R_{Hf} / R_{H0} і всі перелічені вище функції можуть враховуватися при аналізі розмірного ефекту в коефіцієнті Холла.

2 Співвідношення (1.568) також може бути використане для аналізу провідності тонких металевих стекл. Наприклад, у праці [173] наведені експериментальні результати дослідження розмірної залежності $\beta_f \rho_f$ для сплаву $Ni_{66}B_{34}$ (рис. 1.48).

3 Вплив температури відпалювання можна вивчити, використавши співвідношення (1.595) – (1.598). У разі якщо $\beta_f \rho_f$ залишається незмінною при відпалюванні, можна стверджувати, що зміни β_f і ρ_f обумовлені наявністю домішок або дефектів, які роблять свій внесок у величину питомого опору, що не залежить від температури. При значних змінах $\beta_f \rho_f$ під час відпалювання необхідно бути обережним при поясненні цього явища [51; 146].

4 Вплив атомів залишкової атмосфери на зовнішні поверхні металеві плівки також може бути врахований

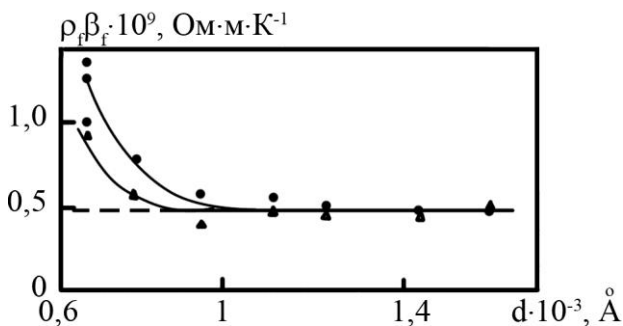


Рисунок. 1.48 – Розмірна залежність $\beta_f \rho_f$ для аморфних плівок $\text{Ni}_{66}\text{V}_{34}$, відпалених до температури 300 °C (Δ) та 200 °C (●)

оскільки величина $\beta_f \rho_f$ залишається незмінною, то потік атомів залишкової атмосфери не змінює природу матеріалу плівки в безпосередній близькості від поверхні, в той час як вона може змінити шорсткість поверхні, що проявляється у зміні величин β_f і ρ_f зі зміною товщини.

5. Із співвідношення (1.591) можна зробити висновок: якщо розмірний ефект для добутку $\beta_f \rho_f$ не проявляється навіть при дуже маленьких товщинах, то металева плівка має монокристалічну структуру.

Список літератури до розділу 1

1. Ziman J. M. *Electrons and Phonons*. – London: Oxford University Press, 1962. – Chapters VII and IX.
2. Blatt F. S. *Physics of Electronic Conduction in Solids*. – Mc Graw Hill, 1968.
3. Barnard R. O. *Thermoelectricity in Metal and Alloys*. – London: Taylor and Francis, 1972.
4. Jain G. C., Verma B. S. *Thin Solid Films*. – 1973. – V. 15. – P. 191-198.

5. Cottey A. A. Thin Solid Films. – 1967-68. – V.1. – P. 297 – 307.
6. Sondheimer E. H. Adv. in Phys. – 1952. – V. 1 – P. G - 42.
7. Mayadas A. F., Shatzkes M. Phys. Rev. B. – 1970. – V. 1. – P. 1382 - 1383.
8. Warkusz F. Electrocomp. Sc. Technol. – 1978. –V. 5.– P. 197-199.
9. Tellier C. R., Tosser A. J. Electrocomp. Sc. Technol. – 1979. V. 6. – P. 37 - 38.
10. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. J. Thin Solid Films. – 1979. –V. 62. – P. 189 - 194.
11. Tellier C. R., Tosser A. J. Thin Solid Films. – 1980. – V. 80. – P. 225-234.
12. Chopra K. L. Phys. Lett. – 1965. – V. 15. – P. 21 - 23.
13. Fuchs K. Proc. Cambridge Phil. Soc. – 1938. – V. 34. – P. 100 – 108.
14. Sondheimer E. H. Phys. Rev. –1950. – V. 80. – P. 401 – 406.
15. Lucas M.S. P. Appl. Phys. Lett. – 1964. –V. 4. – P. 73 - 74.
16. Lucas M. S. P. J. Appl. Phys. – 1965. – V. 36. – P. 1632 – 1635.
17. Juretschke H. J. J. Appl. Phys. – 1966. – V. 37. – P. 435.
18. Chambers R. G. Proc. Roy. Soc. London. – 1950. – V. A 202 – P. 378 – 394.
19. Ijaz-Ur-Rahman, Ahmed K. J. Appl. Phys. – 1978. – V.49. – P. 3625 – 3626.
20. Thomson J.J. Proc. Cambridge Phil. Soc. – 1901. – V.11. – P. 120 – 126.
21. Tellier C. R., Tosser A. J. Int. Res. Rep. Nancy. – 1979. – P. 1 – 3.
22. Halpern V. J. Phys. F: Metal Phys. – 1971. – V. 1 – P. 608 –617.
23. Cottey A. A. J. Phys. F: Metal Phys. – 1972. – V. 2. – P. 625 – 628.

24. Lucas M. S. P. *Thin Solid Films*. – 1968. – V. 2. – P. 337 – 352.
25. Lucas M. S. P. *Thin Solid Films*. – 1971. – V. 7. – P. 435 – 444.
26. Chopra K. L., Randlett M. R. *J. Appl. Phys.* – 1967. – V. 38. – P. 3144.
27. Berman A., Juretschke H. *J. Phys. Rev. B*. – 1975. – V. 11. – P. 2893 – 2902.
28. Bezak V., Kedro M., Pevala A. *Thin Solid Films*. – 1974. – V. 23. – P. 305 – 313.
29. Soffer S. J. *J. Appl. Phys.* – 1967. – V. 38. – P. 1710 – 1715.
30. Bergmann G. *J. Phys. Rev. B*. – 1979. V. 19. – P. 3933 – 3937.
31. Chambers R. G. *The Physics of Metal*. – Cambridge University, 1969. – Chapter 1.
32. Greene R. F. *J. Phys. Rev.* – 1966. – V. 141. – P. 687 – 689.
33. Greene R. F., O'Donnell R. W. *J. Phys. Rev.* – 1966. – V. 147. – P. 599 – 602.
34. Ham F. S., Mattis D. C. *I. B. M. J. Res. Dev.* – 1960. – V. 4. – P. 143 – 151.
35. Price P. J. *I. B. M. J. Res. Dev.* – 1960. – V. 4. – P. 152 – 157.
36. Parrott J. E. *Proc. Phys. Soc., London*. – 1965. – V. 85 C. – P. 1143 – 1157.
37. Ghodgaonkar A. M., Tillu A. D. *J. Phys. D. Appl. Phys.* – 1977. – V. 10. – P. 1329 – 1333.
38. Brandli G., Cotti P. *Helv. Phys. Acta*. – 1965. – V. 38. – P. 801 – 805.
39. Namba Y. *Jap. J. Appl. Phys.* – 1970. – V. 9. – P. 1326 – 1329.
40. Moraga L. A., Vilche A. *Thin Solid Films*. – 1976. – V. 38. – P. 117 – 130.
41. Chopra K. L. *Thin Film Phenomena*. – Mc Graw Hill, 1969. – 355 p.

42. Larson D. C. In Physics of thin films. – 1971. – V. 6. – 81 p.
43. Chopra K. L., Bobb L. C., Francombe M. H. J. Appl. Phys. – 1963. – V. 34. – P. 1699 – 1702.
44. Estermann I., Schlesinger T. J. Appl. Phys. – 1970. – V. 41. – P. 2802 – 2803.
45. Coutts T. J. Thin Solid Films. – 1971. V. 7. – P. 77 – 100.
46. Lin S. F., Leonard W. F. J. Appl. Phys. – 1971. – V. 42. – P. 3634 – 3639.
47. Duggal V. P., Nagpal V. P. J. Appl. Phys. – 1971. – V. 42. – P. 4500 – 4502.
48. Hubin M., Gouault J. C. R. Acad. Sc. Paris. – 1972. – V. 275. – P. 195 – 198.
49. Sheng T. T., Marcus R. B., Alexander F. et all. Thin Solid Films. – 1972. – V. 14. – P. 289 – 298.
50. Reale C. Solid State Comm. – 1973. – V. 12. – P. 421 – 424.
51. Suri R., Thakoor A. P., Chopra K. L. J. Appl. Phys. – 1975. – V. 46. – P. 2574 – 2581.
52. Barua D. C., Barua K. Ind. J. Phys. – 1975. V. 49. – P. 603 – 614.
53. Narasimha Rao V. V. R., Mohan S., Jayarama Reddy P. J. Phys. D. Appl. Phys. – 1976. – V. 9. – P. 89 – 94.
54. Flechon J., Drexler J. P., Viard M. Thin Solid Films. – 1976. – V. 31. – P. 353 – 354.
55. Narasimha Rao V. V. R., Mohan S., Jayarama Reddy P. Thin Solid Films. – 1977. – V. 42. – P. 283 – 289.
56. Dayal D., Wissmann P. Thin Solid Films. – 1977. – V. 44. – P. 185 – 191.
57. Fischer W., Geiger H., Rudolf P. et all. Appl. Phys. – 1977. – V. 13. – P. 245 – 253.
58. Sambles J. R., Eisom K. C., Jarvis P. J. Solid State Comm. – 1979. – V. 32. – P. 997 – 1000.
59. Narayandas K., Ramakrishnan P., Balasubramanian C. Thin Solid Films. – 1980. – V. 67. – P. 357 – 364.

60. Ghosh C. K., Pal A. K. *J. Appl. Phys.* – 1980. – V. 51. – P. 2281 – 2285.
61. Mayer H., Reichinger H., Schmider P. *Thin Solid Films.* – 1977. – V. 43. – P. 215 – 234.
62. Borrajo J., Heras J. M. *Thin Solid Films.* – 1973. – V. 13. – P. 267 – 273.
63. Mola E. E., Heras J. M. *Thin Solid Films.* – 1973. – V. 13. – P. 137 – 144.
64. Ziman J.M. *Electrons and Phonons.* – London: Oxford University Press, 1962. – 103 p.
65. Singh A. J. *J. Appl. Phys.* – 1974. – V. 45. – P. 1908 – 1909.
66. Klokhholm E., Mayadas A. F. *J. Vac. Sc. Technol.* – 1972. – V. 9. – P. 441.
67. Pal A. K., Chaudhuri S. J. *Mat. Sc.* – 1976. – V. 11. – P. 872 – 877.
68. Tellier C. R., Boutrit C., Tosser A. J. *Thin Solid Films.* – 1977. – V. 44. – P. 201 – 208.
69. Tellier C. R. *Thin Solid Films.* – 1978. – V. 51. – P. 311 – 317.
70. Tellier C. R., Tosser A. J. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1980. – V. 6. – P. 91 – 92.
71. Tellier C. R. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1978.–V. 5. – P. 127 – 132.
72. Tellier C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films.* – 1979. – V. 57. – P. 163 – 168.
73. Tellier C., Tosser A. J. *Le Vide.* – 1977. – V. 189. – P. 121 – 127.
74. Tellier C. R., Pichard C. P., Tosser A. J. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1981.
75. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. J. *Le Vide.* – 1981. – V. 208. – P. 619 – 626.
76. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. J. *Le Vide.* – 1980. – V. 305. – P. 207 – 214.

77. Ziman J. M. *Electrons and Phonons*. – London: Oxford University Press, 1962. – 350 p.
78. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. J. *Phys. Stat. Sol. (b)*. – 1980. – V. 99. – P. 353 – 358.
79. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. J. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1981. – V. 7. – P. 235 – 236.
80. Tosser A. J., Tellier C. R., Pichard C. R. *J. Mat. Sc.* – 1981. – V. 16. – P. 944 – 948.
81. Tellier C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films*. – 1976. – V. 33. – P. L 19 – L 26.
82. Tellier C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films*. – 1977. – V. 41. – P. 161 – 166.
83. Ziman J. M. *Electrons and Phonons*. – London: Oxford University Press, 1962. – 285 p.
84. Tellier C. R., Tosser A. J. *Appl. Phys.* – 1977.–V. 14. – P. 221 – 224.
85. Tellier C. R., Pichard C. R., Tosser A. J. *J. Phys. F. Metal Phys.* – 1979. – V. 96. – P. 2377 – 2380.
86. Thieme F., Kirstein P. *Thin Solid Films*. – 1975. – V. 30. – P. 371 – 375.
87. Tellier C. R., Tosser A. J. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1976. – V. 3 – P. 165 – 169.
88. Mayadas A. F., Janak J. F., Gangulee A. J. *Appl. Phys.* – 1974. – V. 45. – P. 2780 – 2781.
89. Mola E. E., Borrajo J., Heras J. M. *Surf. Sc.* – 1973. – V. 34. – P. 561 – 570.
90. Joglekar A. V., Karekar R. N., Sathianandan K. R. *J. Vac. Sc. Technol.* – 1974. – V. 11. – P. 528 – 529.
91. Van Gorp G. J. *J. Appl. Phys.* – 1975. – V. 5. – P. 1922 – 1927.
92. Pal A. K., Chaudhuri S. Barua A. K. *J. Phys. D, Appl. Phys.* – 1976. – V. 9. – P. 2261 – 2267.
93. Pal A. K., Sen P. J. *Mat. Sc.* – 1977. – V. 12. – P. 1472 – 1476.

94. Longbrake R. L., Brient S. J. *Thin Solid Films.* – 1977. – V. 43. – P. 343 – 348.
95. Chaudhuri S., Pal A. K. *J. Appl. Phys.* – 1977. – V. 38. – P. 3455 – 3461.
96. Cornely R. H., Ali T. A. *J. Appl. Phys.* – 1978. – V. 49. – P. 4094 – 4097.
97. Oikawa H. *J. Vac. Sc. Techno.* – 1978. – V. 15. – P. 1117 – 1122.
98. Stolecki B., Warkusz F., Borodzink-Kulpa A. et all. *J. Mat. Sc.* – 1979. – V. 14. – P. 1349 – 1352.
99. Bandyopadhyay S. K., Pal A. K. *J. Phys. D. Appl. Phys.* – 1979. – V. 12. – P. 953 – 959.
100. Nagano J. *Thin Solid Films.* – 1980. – V. 67. – P. 1 – 8.
101. Vavra I., Luby S. *Thin Solid Films.* – 1980. – V. 69. – P. 169 – 173.
102. Tochitskii E. I., Belyavskii N. M. *Phys. Stat. Sol. (a).* – 1980. – V. 61. – P. k21 – k24.
103. Tellier C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films.* – 1976. – V. 37. – P. 207 – 214.
104. Tosser A. J., Tellier C. R., Launey J. *Vacuum.* – 1977. – V. 27. – P. 335 – 338.
105. Tellier C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films.* – 1977. – V. 43. – P. 261 – 266.
106. Tellier C. R. *Vacuum.* – 1978. – V. 28. – P. 321 – 327.
107. Tellier C. R., Tosser A. J. *Le Vide.* – 1978. – P. 25 – 31.
108. Tellier C. R., Tosser A. J. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1976. – V. 3. – P. 85 – 89.
109. Tellier C. R. *Thin Solid Films.* – 1978. – V. 51. – P. 327 – 334.
110. Sugawara H., Nagano T., Kinbara A. *Thin Solid Films.* – 1974. – V. 21. – P. 33 – 42.
111. Wissman P. *Thin Solid Films.* – 1970. – V. 5. – P. 329 – 338.

112. Warkusz F. *Act. Phys. Polon.* – 1978. – V. A 54. – P. 31 – 38.
113. Tellier C. R., Pichard C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films.* – 1979. – V. 61. – P. 349 – 354.
114. Pichard C. R., Tosser A. J., Tellier C.R. *Electrocomp. Sc. and Techno.* – 1980. – V. 6. – P. 87 – 89.
115. Tellier C. R., Pichard C. R., Tosser A. J. *Thin Solid Films.* – 1981. – V. 76. – P. 129 – 139.
116. Mola E. E., Heras J. M. *Electrocomp. Sc. Technolo.* – 1974. – V. 1. – P. 77 – 80.
117. Dobierzewska-Mosrymas E., Warkusz F. *Electrocomp. Sc. and Techno.* – 1979. – V. 5. – P. 223 – 226.
118. Michon P. *Thin Solid Films.* – 1973. – V. 16. – P. 335 – 344.
119. Dobierzewska-Mozrymas E. Warkusz F. *Thin Solid Films.* – 1977. – V. 43. – P. 267 – 273.
120. Stolecki B., Borodziuk-Kulpa A., Wesolowska C. *Thin Solid Films.* – 1979. – V. 56. – P. 299 – 309.
121. Wedler G., Chander R. *Thin solid films.* – 1980. – V. 65. – P. 53 – 60.
122. Toombs P. A. B., Bennett P. J. *Appl. Phys.* – 1968. – V. 39. – P. 2948 – 2953.
123. Christou A., Day H. N. J. *Appl. Phys.* – 1973. – V. 44. – P. 5259 – 5265.
124. Neugebauer C. A. *Physics of Thin Films*, Academic Press, New York, 1964. – V. 2. – 37 p.
125. Longini R. L., Pansino S. R. *J. Appl. Phys.* 1969. – V. 40. – P. 2653 – 2659.
126. Catlin A., Humphris R. R. *Basic Problems in Thin Film Physics.* – Gottingen: Vandenhoeck and Ruprecht, 1966. – 175 p.
127. Pai S. T., Marton J. P., Brown J. D. *J. Appl. Phys.* – 1972. – V. 43. – P. 282 – 287.

128. Sen S., Nandi R. K., Sen Gupta S. P. *Thin Solid Films.* – 1978. – V. 48. – P. 1 – 16.
129. Mc Bee N. C., Mc Comb J. A. *Thin Solid Films.* – 1975. – V. 60. – P. 137 – 143.
130. Tellier C. R., Tosser A. *Le Vide*, 196 Suppl. – 1979. P. 93 – 99.
131. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. *J. J. Mat. Sc.* – 1980. – V. 15. – P. 2236 – 2240.
132. Ziman J. M. *Electrons and Phonons.* – London: Oxford University Press, 1962. – Chap. V.
133. Campbell D. S. *Thin Films in Physical Investigations*, Academic Press, New York. – 1966. – 299 p.
134. Tellier C. R., Tosser A. *J. Thin Solid Films.* – 1978. – V. 52. – P. 53 – 61.
135. Savormin F. C. R. *Acad. Sc., Paris.* – 1959. – V. 248. – P. 2458 – 2460.
136. Tellier C. R., Tosser A. *J. Thin Solid Films.* – 1979. – V. 60. – P. 91 – 95.
137. Singh A. *Thin Solid Films.* – 1971. – V. 7. – P. R 35 – R 36.
138. Singh A. *Proc. I. E. E. E.* – 1973. – V. 61. – P. 1653 – 1654.
139. Tellier C. R., Tosser A. *J. Thin Solid Films.* – 1977. – V. 44. – P. 141 – 147.
140. Tellier C. R., Boutrit C. *Thin Solid Films.* – 1977. – V. 46. – P. 307 – 313.
141. Tellier C. R. *Electrocomp. Sc. Techno.* – 1979. – V. 5. – P. 209 – 213.
142. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. *J. Phys. Stat. Solid.* – 1981. – V. 65. – P. 327 – 334.
143. Warkusz F. *Thin Solid Films.* – 1979. – V. 62. – P. 247 – 253.
144. Mannan K. M. *Phys. Lett. A.* – 1977 – V. 62 A – P. 519 – 520.

145. Chopra K. L. Thin Film Phenomena. – McGraw Hill, 1969. – 369 p.
146. Tellier C. R., Hafid L., Tosser A. J. Rev. Phys. Appl. – 1980. – V. 15. – P. 1573 – 1577.
147. Hall P. M. Appl. Phys. Lett. – 1968. – V. 12 – P. 212.
148. Hoffmann R. W. Physics of Thin Films. – 1966. – V. 3 – P. 210.
149. Reale C. Czech. J. Phys. B – 1971. – V. 21. – P. 662 – 672.
150. Pichard C. R., Tellier C. R., Tosser A. J., J. Phys. D. Appl. Phys. – 1980. – V. 13 – P. 1325 – 1329.
151. Pichard C. R., Tellier C. R. Rev. Phys. Appl. – 1979. – V. 14. – P. 743.
152. Tellier C. R. Thin Solid Films. – 1978. – V. 48. – P. L9 – L13.
153. Pichard C. R., Tellier C. R., Ouarbya L. et al. Research report. – 1981. – V. 81-08. – P. 1 – 14.
154. Warkusz F., J. Phys. D., Appl. Phys. – 1978. – V. 11. – P. 2035 – 2041.
155. Warkusz F. Thin Solid Films. – 1978. – V. 52. – P. L9 – L11.

Навчальне видання

Пазуха Ірина Михайлівна,
Проценко Іван Юхимович,
Чешко Ірина Володимирівна

**ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВКОВИХ
МАТЕРІАЛІВ МІКРО-
І НАНОЕЛЕКТРОНІКИ**

Навчальний посібник

У двох частинах

Частина 1

За загальною редакцією І. Ю. Проценка

Дизайн обкладинки І. В. Чешко
Редактор Н. А. Гавриленко
Комп'ютерне верстання І. В. Чешко, І. М. Пазухи

Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 13,49. Обл. вид. арк. 9,12. Тираж 300 пр. Зам. №

Видавець і виготовлювач
Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.