

PACS numbers: 68.35.Fx, 68.55.Jk, 72.10.Fk, 72.15.Lh, 72.15.Qm, 73.40.Jn, 73.50.Bk

Транспортні розмірні ефекти у двошарових полікристалічних плівках

Л. В. Дехтярук, І. Ю. Проценко, А. М. Черноус

*Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2,
40007 Суми, Україна*

В огляді систематизовано результати теоретичних досліджень транспортних розмірних ефектів у двошарових полікристалічних плівках (ДП), кінетичні характеристики яких суттєво відрізняються від відповідних характеристик масивних металів і тонких плівок. Однією з головних причин такої відмінності є взаємодія носіїв заряду із зовнішніми межами і межею поділу шарів металу (зовнішній розмірний ефект) та взаємодія електронів з міжкристалітними межами (внутрішній розмірний ефект). Така взаємодія призводить до додаткового розсіяння носіїв заряду, і транспортні коефіцієнти можуть бути значно менші (більші) за кінетичні коефіцієнти металів, з яких виготовлено окремі шари металу. Внаслідок зерномежової низькотемпературної взаємної дифузії металів в ДП розвіна здатність міжкристалітних меж змінюється, що призводить до зміни провідності двошарової плівки. Дослідження такої зміни дозволяє визначити коефіцієнт зерномежової дифузії. Теоретично розглянуті в огляді ефекти можна використати для аналізу транспортних ефектів у двошаровій полікристалічній плівці та для оцінки коефіцієнта зерномежової дифузії.

В обзоре систематизированы результаты теоретического исследования транспортных размерных эффектов в двухслойной поликристаллической пленке (ДП) кинетические характеристики которой существенно отличаются от соответствующих характеристик массивных металлов и тонких пленок. Одной из основных причин такого отличия является взаимодействие носителей заряда с внешними поверхностями и границей раздела (внешний размерный эффект) и взаимодействие электронов с межкристаллитными границами (внутренний размерный эффект). Такое взаимодействие приводит к дополнительному рассеянию носителей заряда, и транспортные коэффициенты могут быть значительно меньше (больше) кинетических коэффициентов металлов, из которых изготовлены отдельные слои металла. Вследствие низкотемпературной зернограничной взаимной диффузии металлов рассеивающая способность межкристаллит-

ных границ изменяется, что приводит к изменению проводимости двухслойной пленки. Исследование такого изменения позволяет определить коэффициент зернограничной диффузии. Теоретически рассмотренные в обзоре эффекты могут быть использованы для анализа транспортных коэффициентов в двухслойной поликристаллической пленке и для оценки коэффициента зернограничной диффузии.

We have systemized the results of theoretical investigations of different size effects in transport phenomena in bilayer polycrystalline films (BF), whose kinetic characteristics are essentially different as compared with the characteristics of bulk metals and thin films. A primary reason is a scattering of the charge carriers at both the external boundaries and the interlayer interface (the external size effect) and at the grain boundaries (the internal size effect). As a result of the scattering, the transport coefficients may be decreased (or increased) essentially with respect to the coefficients of metals, which formed the BF. The low-temperature grain-boundary interdiffusion of metals in bilayer films leads to some changes in the scattering power of the grain boundaries, and consequently, it leads to changes of the conductivity of the BF. Investigating the changes, we may determine the coefficients of the grain-boundary diffusion. The effects investigated theoretically in our review may be used for both the analysis of transport phenomena in bilayer polycrystalline films and the estimation of coefficients of the grain-boundary diffusion.

Ключові слова: двошарова полікристалічна плівка, транспортні коефіцієнти, модель Маядаса і Шацкеса, зовнішній та внутрішній розмірний ефект, інтерфейс, зерномежова дифузія.

(Отримано 26 грудня 2006 р.)

1. ВСТУП

Значний інтерес до вивчення транспортних розмірних ефектів у двошарових та багатошарових плівкових системах зумовлений, як широким їх використанням у сучасній мікроелектроніці в якості елементної бази, так і можливістю одержання важливої з фундаментальної точки зору інформації щодо взаємодії носіїв заряду з внутрішніми та зовнішніми межами зразків. З іншого боку, комбінуючи метали з різними електрофізичними властивостями, можна одержати нові провідники з принципово новими властивостями, які не можуть бути реалізовані в однорідних провідниках [1, 2].

Металеві дво- та багатошарові плівкові зразки, які використовуються при виготовленні мікроелектронних приладів та сенсорів і одержуються шляхом осадження на підкладку, як правило, є моноблочними за товщиною, а уздовж інтерфейсів мають полікристалічну структуру. У випадку, коли характерний розмір зерен L у площині шарів металу за порядком величини збігається з довжиною

вільного пробігу носіїв заряду l_0 , виникає конкуренція процесів розсіювання електронів на зовнішніх, внутрішніх та міжкристалітних межах зразка. При цьому на зовнішніх поверхнях та на інтерфейсах розсіюються електрони, які стикаються з ними під великими кутами $\theta \gg d/l_0$, а релаксацію носіїв заряду, які рухаються майже паралельно межах поділу ($\theta \ll d/l_0$), в основному зумовлено їх розсіюванням на межах зерен. Вказана специфіку розсіювання вперше досить коректно було враховано Маядасом і Шацкесом [3] (модель МШ). Автори роботи [3] запропонували модель, у якій кристаліти (зерна) мають однаковий розмір, а міжкристалітні межі є перпендикулярними до зовнішніх поверхонь зразка і описуються Гавсовим розподілом. Вплив полікристалічності зразка у моделю МШ враховувалося за допомогою параметра α_0 , який визначає внесок меж зерен у сумарний опір полікристалічного шару металу. У результаті розрахунку Маядасом та Шацкесом був одержаний досить складний аналітичний вираз для питомої провідності, який досить складно порівнювати з експериментальними даними. Тому у подальшій появилася значна кількість теоретичних робіт, у яких були запропоновані наближені вирази формули Маядаса та Шацкеса [4–6]. Так у роботі [4] було одержано наближене співвідношення для коефіцієнта питомого опору ρ , яке містить табульовані функції і має жорсткі обмеження на область зміни параметрів, які входять у вираз для ρ . Ці обмеження були зняті у роботах [5, 6], у яких були одержані загальні асимптотичні формули, які виконуються при довільних значеннях параметрів дзеркальності та зерномежового параметра α_0 . Автори роботи [7] розробили так звану модель ефективної довжини вільного пробігу носіїв заряду, за допомогою якої були одержані наближені формули для ряду інших транспортних коефіцієнтів у рамках моделю МШ.

Інша група робіт [8–10] була присвячена удосконаленню моделю МШ і врахуванню скінченності розмірів кристалітів у всіх напрямках. Однак, як показав числовий розрахунок [9], значення провідності, одержаної за формулою МШ [3] і у рамках тривимірного моделю [10], практично співпадають. Цей результат, очевидно, пов'язаний з тим, що міжкристалітні межі, які паралельні вектору густини електричного струму слабо впливають на електропровідність плівки.

Основні результати теоретичного дослідження транспортних розмірних ефектів у полікристалічних плівках наведено у монографії [11].

Не дивлячись на простоту моделю, теорія Маядаса та Шацкеса задовільно узгоджується з експериментом [12–21] і дозволяє описати транспортні розмірні ефекти у двошарових полікристалічних плівках.

Ціллю даного огляду є систематизація результатів теоретичних досліджень транспортних розмірних ефектів у двошарових полікристалічних плівках, які були виконані за останнє десятиріччя.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ЗАГАЛЬНІ АНАЛІТИЧНІ ВИРАЗИ ДЛЯ ТРАНСПОРТНИХ КОЕФІЦІЄНТІВ У ПОЛІКРИСТАЛІЧНИХ ДВОШАРОВИХ ПЛІВКАХ

2.1. Загальні аналітичні формули для кінетичних коефіцієнтів

Розглянемо двошарову плівку (ДП) товщиною $d = d_1 + d_2$, яка складається з полікристалічних шарів нормального металу різної товщини ($d_i \neq d_j$) та ступеня чистоти ($l_{0i} \neq l_{0j}$, l_{0i} — довжина вільного пробігу носіїв заряду) (рис. 1). Будемо вважати, що нормаль до межі поділу (МП) зразка паралельна вісі X , а розміри ДП у напрямках осей Y і Z нескінченні, так що рух носіїв заряду у площині YZ нічим не відрізняється від їх руху у безмежовім металі. Припустимо, що до двошарової плівки прикладене зовнішнє однорідне електричне поле напруженістю $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$ та градієнт температури $\Delta T = (0, \partial T / \partial y, 0)$ паралельно до межі поділу шарів металу.

Для того, щоб розрахувати густину струму \mathbf{J} і тепловий потік \mathbf{U}

$$\begin{cases} \mathbf{J} \\ \mathbf{U} \end{cases} = \frac{2}{dh^3} \sum_{i=1}^2 \int_0^{d_i} dx \int d^3 p \begin{cases} e \\ -(\epsilon_i - \mu) \end{cases} \mathbf{v}_i f_i(|x|, \mathbf{p}), \quad (2.1)$$

необхідно розв'язати кінетичне рівняння Больцманна для функції розподілу електронів $f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ у кожному шарі ДП

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(\epsilon_i) - \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_i} \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (2.2)$$

яке у τ -наближенні для інтеграла зіткнень має наступний вигляд:

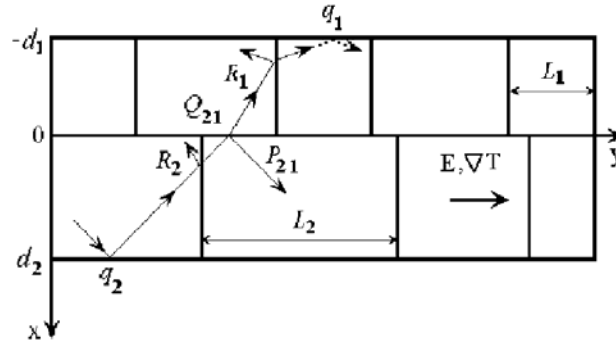


Рис. 1. Модель двошарової плівки, яка складається з полікристалічних шарів нормального металу різної товщини ($d_i \neq d_j$) та ступеня чистоти ($l_i \neq l_j$). Ламаною лінією схематично показано можливу траєкторію носія заряду.

$$\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} + \frac{\Psi_i}{\tau_i(\varepsilon_i)} = e v_i \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{e} \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_F}{T} \nabla T \right\} \equiv \mathbf{g}_i(\mathbf{p}). \quad (2.3)$$

У формулах (2.1)–(2.3) e , \mathbf{r} і \mathbf{p} — заряд, координата та квазіімпульс носія заряду; \mathbf{v}_i і ε_i — його швидкість та енергія; T — температура; ε_F — енергія Фермі; h — Плянкова стала; $f_0(\varepsilon_i)$ — функція розподілу Фермі; $t = x/v_x$ — час руху носія заряду траєкторією.

Величина τ_i у кінетичнім рівнянні (2.3) має зміст середнього часу вільного пробігу між двома актами об'ємного розсіяння носіїв заряду і описує процеси релаксації електронного потоку на домішках, теплових коливаннях ґратниці, а також на межах зерен і у рамках модифікованого моделю МШ має наступний вигляд [3, 22]:

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{1}{\tau_{0i}} \left\{ 1 + \alpha_{0i} \frac{p_F}{|p_{yi}|} \right\}. \quad (2.4)$$

Тут τ_{0i} — характерний час релаксації носіїв заряду відносно їх пружних зіткнень в об'ємі зразка, тобто час, за який «стирається» пам'ять електрона про минуле. Другий доданок у дужках формули (2.4) враховує розсіяння електронів на міжкристалітних межах, p_{yi} — перпендикулярна до меж зерен компонента квазіімпульсу електрона. Зер-

номежовий параметер $\alpha_{0i} = \frac{l_{0i}}{L_i} \frac{R_{0i}}{1 - R_{0i}}$, з одного боку, у залежності

від знаку нерівності між l_{0i} та L_i визначає структуру зразка, а з іншого боку, — характер взаємодії носіїв заряду з міжкристалітними межами, L_i — середній розмір кристалітів у площині шару металу, R_{0i} — ймовірність дзеркального розсіяння електронів на межах зерен.

Добре відомо, що транспортні коефіцієнти напівпровідникових зразків досить чутливі до енергетичної залежності часу релаксації носіїв заряду [23]. З цієї причини будемо використовувати модель, в якій час релаксації електронів залежить від енергії наступним чином [23]:

$$\tau_{0i} = \tau_{0i}^* \left\{ \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_F} \right\}^{\gamma_i^*}, \quad (2.5)$$

де величина $\tau_{0i}^* = \text{const}$ і не залежить від енергії, γ_i^* — деяка стала величина, числове значення якої визначається переважаючим механізмом розсіяння електронів. Наприклад, якщо $\gamma_i^* = -1/2$, то основним механізмом розсіяння носіїв заряду є їх розсіяння на акустичних фононах; $\gamma_i^* = 0$ у випадку розсіяння електронів на незаряджених дефектах кристалічної ґратниці; $\gamma_i^* = 3/2$, якщо носії заряду розсіюються на йонізованих атомах домішок.

Загальним розв'язком кінетичного рівняння (2.3) є функція [24, 25]

$$\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = F_i e^{\frac{\lambda_i - t}{\tau_i}} + \int_{\lambda_i}^t dt' g_i(\mathbf{p}) e^{\frac{t' - t}{\tau_i}}, \quad (2.6)$$

де $\lambda_i < t$ й має зміст моменту часу останньої взаємодії носія заряду із зовнішніми поверхнями $x_s = -d_1, d_2$ або МП $x_s = 0$ і дорівнює:

$$\lambda_i = t - \left| \frac{x - x_s}{v_{xi}} \right|. \quad (2.7)$$

Для простоти будемо вважати, що закон дисперсії для електронів у кожному шарі ДП — квадратичний та ізотропний. У цьому випадку перенормування хімічного потенціалу носіїв заряду після взаємодії із зовнішніми межами [26] та МП шарів [27,28] відсутнє, і крайові умови для функції $\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ (2.6), що дозволяють знайти функції F_i , мають наступний вигляд [27–30]:

$$\Psi_i^{s_i}(s_j d_i, \mathbf{p}) = q_i \Psi_i^{s_j}(s_j d_i, \mathbf{p}'), \quad (2.8)$$

$$\Psi_i^{s_j}(0, \mathbf{p}) = P_{ij} \Psi_i^{s_i}(0, \mathbf{p}') + Q_{ji} \Psi_j^{s_j}(0, \mathbf{p}''), \quad i \neq j = 1, 2, \quad (2.9)$$

де $q_i = \text{const}$ — параметер дзеркальності Фукса [29, 30], який має зміст ймовірності розсіювання електрона із збереженням енергії і тангенційної до i -ї зовнішньої поверхні двошарового зразка компоненти квазіімпульсу; $P_{ij} = \text{const}$ — ймовірність дзеркального розсіювання носіїв заряду на межі поділу між i -м та j -м шарами металу; $Q_{ji} = \text{const}$ — ймовірність проходження електрона з j -го шару в i -й шар без розсіювання, так що $P_{ij} + Q_{ji} \leq 1$. Квазіімпульси \mathbf{p}, \mathbf{p}' і \mathbf{p}'' зв'язані умовами збереження енергії й тангенційної по відношенню до зовнішньої межі та МП шарів компоненти квазіімпульсу; $s_i = \text{sign} v_{xi}$ вказує знак нормальної до зовнішньої поверхні та МП шарів складової швидкості v_{xi} носіїв заряду. Крайова умова (2.9) враховує, що функція розподілу електронів, які летять від межі поділу шарів металу, формується не лише носіями заряду, що налітають на інтерфейс, а й електронами, які тунелюють із сусіднього шару металу з ймовірністю Q_{ji} .

Підставляючи функції $\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ у формі (2.6), які у кожному шарі металу ДП приймають два значення, що відповідають електронам, які летять до межі ($F_i^{(-)}$) й від неї ($F_i^{(+)}$), в крайові умови (2.8) і (2.9), одержимо систему з 4-х лінійних алгебраїчних рівнянь щодо $F_i^{(\pm)}$. Знаючи функції розподілу $\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ у кожному шарі ДП, розрахуємо густину струму \mathbf{J} (2.1) і тепловий потік \mathbf{U} (2.1). Порівнюючи результати розрахунку з узагальненими рівняннями перенесення для \mathbf{J} й \mathbf{U} [31]

$$\begin{cases} \mathbf{J} \\ \mathbf{U} \end{cases} = \begin{cases} eK_0 \\ K_1 \end{cases} e\mathbf{E} - \begin{cases} eK_1 \\ K_2 \end{cases} \frac{\nabla T}{T}, \quad (2.10)$$

одержимо наступні формули для кінетичних коефіцієнтів K_m ($m=0, 1, 2$), які характеризують електронний транспорт у двошарових системах з полікристалічною структурою:

$$K_0 = \frac{1}{d e^2} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_i, \quad (2.11)$$

$$K_1 = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e^2 \epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i - U_i \left(\frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_i} - \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0i}} \right) - \right. \\ \left. - U_j \left(\frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_j} - \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0j}} \right) - (\gamma_i^* - \gamma_j^*) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \tau_{0j,i}} \right\}, \quad (2.12)$$

$$K_2 = \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{3 d e^2} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_i. \quad (2.13)$$

Тут σ_{0i} — питомий коефіцієнт електропровідності безмежового зразка з монокристалічною структурою [24, 25], k_B — стала Больцманна, $k_i = d_i / l_{0i}$ — нормована на довжину вільного пробігу електронів товщина i -го шару металу ДП, $\tau_{0j,i} = \tau_{0j} / \tau_{0i}$, а функція $D_{j,i}$ має наступний вигляд:

$$D_{j,i} = \frac{d_j \sigma_{0j} \Phi_j}{d_i \sigma_{0i} \Phi_i}. \quad (2.14)$$

Особливості зонної енергетичної структури двошарових систем характеризуються параметрами V та U_i , які можуть бути визначені наступним чином [32]:

$$V = \left\{ \frac{\partial \ln A}{\partial \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon = \epsilon_F}, \quad U_i = \left\{ \frac{\partial \ln l_{0i}}{\partial \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon = \epsilon_F} = \left\{ \frac{\partial \ln v}{\partial \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon = \epsilon_F} + \gamma_i^* \equiv U_v + \gamma_i^*, \quad (2.15)$$

де A — площа поверхні Фермі; U_i — зміна середньої довжини вільного пробігу електронів зі зміною енергії біля поверхні Фермі в i -м шарі металу.

Розмірні функції Φ_i , які визначають вплив розмірів шарів ДП на транспортні коефіцієнти, можна записати у наступнім вигляді:

$$\Phi_i = f(\alpha_{0i}) - \langle G_i \rangle, \quad (2.16)$$

$$G_i = \frac{1}{\Delta} \left\{ (2 - q_i - P_{ij} + (q_i + P_{ij} - 2q_i P_{ij}) E_i) (1 - q_j P_{ji} E_j^2) - \right. \\ \left. - q_j Q_{ij} Q_{ji} E_j^2 (1 - E_i + 2q_i E_i) - Q_{ji} \tau_{j,i} (1 - E_j) (1 + q_i E_i) (1 + q_j E_j) \right\}, \quad (2.17)$$

$$\Delta = (1 - q_i P_{ij} E_i^2)(1 - q_j P_{ji} E_j^2) - q_i q_j Q_{ij} Q_{ji} E_i^2 E_j^2, \quad (2.18)$$

$$E_i = \exp \left\{ -\frac{k_i H_{0i}}{z} \right\},$$

$$H_{0i} = 1 + \frac{\alpha_{0i}}{\cos \varphi \sqrt{1 - z^2}}, \quad \tau_{j,i} = \tau_{0j,i} \frac{H_{0i}}{H_{0j}} \equiv \tau_{0j,i} H_{0i,j}, \quad (2.19)$$

$$\langle \dots \rangle = \frac{3}{\pi k_i} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \int_0^1 dz \frac{(z - z^3)(1 - E_i)}{H_{0i}^2} \left\{ \dots \right\}. \quad (2.20)$$

Функція $f(\alpha_{0i})$ у формулі (2.16) описує провідність безмежового зразка ($d_i \rightarrow \infty$) з полікристалічною структурою і у рамках моделю МШ дорівнює [3]:

$$f(\alpha_{0i}) = 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} + 3\alpha_{0i}^2 - 3\alpha_{0i}^3 \ln \left(1 + \frac{1}{\alpha_{0i}} \right) \equiv \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} + 3\alpha_{0i}^2, & \alpha_{0i} \ll 1; \\ \frac{3}{4\alpha_{0i}} - \frac{3}{5\alpha_{0i}^2}, & \alpha_{0i} \gg 1. \end{cases} \quad (2.21)$$

Таким чином, ми одержали загальні аналітичні вирази для транспортних коефіцієнтів (2.11)–(2.13), які описують електронний транспорт у двошарових полікристалічних плівках. Інтеграл, що входить у розмірні функції (2.16), не можна виразити через елементарні функції, і тому подальша аналіза кінетичних явищ у двошарових зразках можлива лише на основі числових розрахунків. Однак, при великих і малих значеннях параметрів k_i та α_{0i} для транспортних коефіцієнтів можна одержати досить прості асимптотичні формули, які значно спрощують порівняння експериментальних результатів з теоретичними.

2.2. Асимптотичні вирази для розмірної функції

Якщо параметер $k_i \gg 1$, тобто товщина шарів металу d_i значно більша за довжину вільного пробігу електронів l_{0i} у них, то експоненти, які містяться у формулі (2.16), малі і ними можна знехтувати. Виконавши інтегрування по φ та z , одержимо наступну формулу для розмірних функцій Φ_i , яка виконується при довільних значеннях параметрів q_i , P_{ij} , Q_{ji} та α_{0i} :

$$\Phi_i = f(\alpha_{0i}) - \frac{3}{16 k_i} \left\{ (2 - q_i - P_{ij}) \Gamma_{1,i} - Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{2,i} \right\}. \quad (2.22)$$

Тут [18, 19]

$$\Gamma_{1,i} = 1 - \frac{32}{3\pi} \alpha_{0i} + 12\alpha_{0i}^2 + \frac{16}{\pi} \left\{ 5 - (4 - 5\alpha_{0i}^2) I_i \right\} \alpha_{0i}^3 - 40\alpha_{0i}^4, \quad (2.23)$$

$$\Gamma_{2,i} = 1 - \frac{16}{3\pi} \left\{ \alpha_{0i} + \alpha_{0j} - \frac{3\pi(\alpha_{0i}^3 - \alpha_{0j}^3)}{4(\alpha_{0i} - \alpha_{0j})} - \frac{3(\alpha_{0i}^4 - \alpha_{0j}^4)}{(\alpha_{0i} - \alpha_{0j})} + \frac{3\pi(\alpha_{0i}^5 - \alpha_{0j}^5)}{2(\alpha_{0i} - \alpha_{0j})} + \frac{3[\alpha_{0i}^4(1 - \alpha_{0i}^2)I_i - \alpha_{0j}^4(1 - \alpha_{0j}^2)I_j]}{\alpha_{0i} - \alpha_{0j}} \right\}, \quad (2.24)$$

$$I_i = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha_{0i}^2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \alpha_{0i}^2}}{\alpha_{0i}}, & \alpha_{0i} \leq 1; \\ \frac{\arccos\left(\frac{1}{\alpha_{0i}}\right)}{\sqrt{\alpha_{0i}^2 - 1}}, & \alpha_{0i} > 1. \end{cases} \quad (2.25)$$

Для двошарової плівки, полікристалічні шари якої мають однакову структуру ($\alpha_{0i} = \alpha_{0j}$), функція $\Gamma_{1,i} = \Gamma_{2,i}$, а формула (2.22) значно спрощується і набуває вигляду:

$$\Phi_i = f(\alpha_{0i}) - \frac{3 T_i}{16 k_i} \Gamma_{1,i}, \quad (2.26)$$

де

$$T_i = 2 - q_i - P_{ij} - Q_{ji} \tau_{0j,i}. \quad (2.27)$$

Якщо ширина кристалітів L_i значно більша за довжину вільного пробігу електронів l_{0i} ($L_i \gg l_{0i}$) або міжкристалітні межі майже прозорі для носіїв заряду ($R_{0i} \ll 1$), то параметер зерномежового розсіювання $\alpha_{0i} \ll 1$. Якщо ж шари металу ДП мають дрібнозернисту структуру ($L_i \ll l_{0i}$) або межі зерен майже не прозорі для електронів ($1 - R_{0i} \ll 1$), то $\alpha_{0i} \gg 1$. Для цих граничних випадків параметра α_{0i} формула (2.22) запишеться у вигляді:

$$\Phi_i = 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} - \frac{3}{16 k_i} \left\{ (2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{32}{3\pi} \alpha_{0i} \right) - \right.$$

$$-Q_{ji}\tau_{0ji}\left(1-\frac{16}{3\pi}(\alpha_{0i}+\alpha_{0j})\right)\Bigg\}, \quad \alpha_{0i} \ll 1; \quad (2.28)$$

$$\Phi_i = \frac{3}{4\alpha_{0i}} \left\{ 1 - \frac{1}{4k_i\alpha_{0i}} \left[(2-q_i-P_{ij}) \left(1 - \frac{512}{105\pi\alpha_{0i}} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - Q_{ji}\tau_{0ji} \frac{\alpha_{0i}}{\alpha_{0j}} \left(1 - \frac{256(\alpha_{0i}+\alpha_{0j})}{105\pi\alpha_{0i}\alpha_{0j}} \right) \right] \right\}, \quad \alpha_{0i} \gg 1. \quad (2.29)$$

У випадку, коли товщини шарів d_i значно менші за довжину вільного пробігу електронів l_{0i} у них, тобто $k_i \ll 1$, то для функцій Φ_i можна одержати наступні наближенні вирази :

$$\Phi_i \cong \frac{3}{4}\Phi_i^* k_i \begin{cases} \ln \frac{1}{k_i}, & \alpha_{0i} \leq k_i; & (2.30, a) \\ \ln \frac{1}{k_i} - \frac{4}{\pi}\alpha_{0i}, & k_i < \alpha_{0i} \ll 1; & (2.30, б) \\ \ln \frac{1}{\alpha_{0i}k_i}, & 1 < \alpha_{0i} \ll \frac{1}{k_i}. & (2.30, в) \end{cases}$$

$$\Phi_i^* = \frac{(1+q_i)\left[(1+P_{ij})(1-q_jP_{ji})+q_jQ_{ij}Q_{ji}+(1+q_j)Q_{ji}d_{j,i}\right]}{(1-q_iP_{ij})(1-q_jP_{ji})-q_iq_jQ_{ij}Q_{ji}}, \quad (2.31)$$

а $d_{j,i}=d_j/d_i$ — відношення товщин шарів металу ДП.

Таким чином, числове значення розмірних функцій Φ_i двошарових систем, які складаються із тонких полікристалічних шарів металу, як і для тонкої плівки [29], визначається невеликою групою ефективних, тобто відповідальних за ефект (Піпшардова «концепція неефективності» [33]), носіїв заряду, які рухаються паралельно зовнішнім межах та МП шарів металу і не стикаються з ними на довжині вільного пробігу l_{0i} . Відносна кількість таких електронів порядку d_i/l_{0i} . Логаритмічний фактор $\ln 1/k_i$ враховує внесок електронів у числове значення Φ_i , які рухаються під малими кутами $\theta_i=d_i/l_{0i} \ll 1$ до МП та зовнішніх меж і розсіюються ними.

При виконанні нерівності $\alpha_{0i} \leq k_i$ основним механізмом релаксації електронів являється їх розсіяння на зовнішніх межах та на МП шарів, і полікристалічний зразок наближено можна розглядати, як монокристалічний, оскільки внесок електронів, які розсіюються на міжкристалічних межах, у значення транспортних коефіцієнтів ДП є незначним у цьому випадку (див. формулу (2.30, a), яка співпадає з від-

повідною формулою роботи [34]).

Із зростанням зерномежового параметра α_{0i} збільшується і внесок у величину коефіцієнтів носіїв заряду, які розсіюються на межах зерен (їх відносна кількість порядку $4\alpha_{0i}/\pi$; див. формулу (2.30, б)). При подальшій зростанні параметра α_{0i} , так що $\alpha_{0i} \gg 1/k_i$, основним механізмом релаксації електронів являється їх розсіяння на міжкристалітних межах (див. формулу (2.30, в)), і, відповідно, зовнішній, у порівнянні із внутрішнім розмірним ефектом, незначний, а двошаровий зразок являється ефективно «товстим».

Відзначимо, що значення розмірних функцій Φ_i суттєво залежить від відношення товщин шарів металу $d_{j,i}$. Цей факт свідчить про те, що, якщо ДП складається з тонких шарів металу, очевидно, підбираючи товщини шарів металу з відповідними фізичними властивостями, можна одержати багатошаровий зразок з потрібними електрофізичними характеристиками.

Таким чином ми знайшли загальні вирази для кінетичних коефіцієнтів K_m (2.11)–(2.13), які характеризують транспортні явища у ДП і асимптотичні значення для розмірних функцій Φ_i для граничних значень параметрів k_i та α_{0i} . Далі ми проаналізуємо найбільш цікаві з точки зору експерименту часткові випадки. Однак, перш ніж перейти до розгляду конкретних кінетичних коефіцієнтів, покажемо формальну відповідність між ДП та мультишаром, між двошаровим зразком і одношаровою плівкою і необмеженим зразком.

2.3. Формальна відповідність між двошаровим та багатошаровим зразками

Якщо двошарова полікристалічна плівка складається із шарів металу з однаковими об'ємними та структурними характеристиками, тобто виконуються рівності

$$\sigma_{0i} = \sigma_{0j}, \quad l_{0i} = l_{0j}, \quad \alpha_{0i} = \alpha_{0j}, \quad (2.32)$$

і відсутнє розсіяння носіїв зарядів на межах поділу шарів і на зовнішніх межах

$$q_i = q_j = 1, \quad P_{ij} + Q_{ji} = 1, \quad (2.33)$$

то ДП формально можна розглядати, як необмежений зразок, оскільки числове значення транспортних коефіцієнтів для ДП буде співпадати зі своїми об'ємними значеннями.

Якщо ж межі поділу шарів металу у двошаровій плівці абсолютно непрозорі для електронів ($Q_{ij} = Q_{ji} = 0$), то функції Φ_i у кожному шарі металу не залежать від параметрів, які характеризують сусідній шар металу, і дорівнюють:

$$\Phi_i = f(\alpha_{0i}) - \left\langle \frac{2 - q_i - P_{ij} + (q_i + P_{ij} - 2q_i P_{ij}) E_i}{1 - q_i P_{ij} E_i^2} \right\rangle, \quad (2.34)$$

а при виконанні співвідношень (2.32) і рівностей

$$P_{ij} = P_{ji} = P, \quad q_i = q_j = q, \quad d_i = d_j = d, \quad (2.35)$$

двошаровий зразок формально можна розглядати, як одношарову плівку, розмірна функція якої дорівнює:

$$\Phi = f(\alpha_0) - \left\langle \frac{2 - q - P + (q + P - 2qP) E}{1 - qPE^2} \right\rangle. \quad (2.36)$$

У випадку, коли межа поділу шарів металу двошарової плівки абсолютно прозора для носіїв заряду ($Q_{ij} = Q_{ji} = 1$) і виконуються рівності (2.32), ДП знову формально можна розглядати, як тонкий шар металу, однак уже товщиною $d = d_1 + d_2$, розмірна функція якого визначається формулою

$$\Phi = f(\alpha_0) - \left\langle \frac{2 - q_1 - q_2 + (q_1 + q_2 - 2q_1 q_2) E}{1 - q_1 q_2 E^2} \right\rangle. \quad (2.37)$$

У формулах (2.34), (2.36) і (2.37) величина E , кутові дужки та функція $f(\alpha_0)$ визначаються формулами (2.19)–(2.21), у яких необхідно знехтувати індексом « i ».

Порівнюючи асимптотичні формули (2.28)–(2.30) для ДП з відповідними формулами для багатошарової плівки [19], можна показати, що, якщо шари ДП тонкі ($k_i \ll 1$), а зовнішні межі дзеркальним чином розсіюють електрони ($q_{ef} = 1$), двошарову плівку формально можна розглядати, як мультишар. Якщо ж шари металу ДП товсті ($k_i \gg 1$), то двошаровий зразок знову формально можна розглядати, як багатошарову плівку, однак у даному випадку його зовнішні поверхні будуть описуватися деяким ефективним параметром дзеркальності, який має наступний вигляд:

$$q_{ef} = \begin{cases} P_{ij} + Q_{ji} \tau_{0j,i} \left(1 + \frac{16}{3\pi} (\alpha_{0i} - \alpha_{0j}) \right), & \alpha_{0i} \ll 1; \\ P_{ij} + Q_{ji} \tau_{0j,i} \frac{\alpha_{0i}}{\alpha_{0j}} \left(1 + \frac{256}{105\pi} \frac{\alpha_{0j} - \alpha_{0i}}{\alpha_{0i} \alpha_{0j}} \right), & \alpha_{0i} \gg 1. \end{cases} \quad (2.38)$$

Звідси випливає, що зменшення середнього розміру зерен або зменшення прозорості меж кристалітів у сусіднім j -м шарі металу (тобто при збільшенні параметра α_{0j}) призводить до зменшення ефе-

ктивного параметра дзеркальності i , відповідно, до зменшення провідності двошарового зразка. Якщо ж збільшується ступінь чистоти та прозорість МП шарів металу, то ефективний параметер q_{ef} збільшується, і збільшується провідність ДП. Відзначимо, що у випадку виконання рівностей $\alpha_{0i} = \alpha_{0j}$, значення ефективного параметра дзеркальності $q_{ef} = P_{ij} + Q_{ji} \tau_{0j,i}$ (див. формулу (2.38)) для монокристалічних [34, 35] та полікристалічних зразків збігаються.

3. КОЕФІЦІЄНТИ ПИТОМОЇ ЕЛЕКТРО- І ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ

Коефіцієнт K_0 при E у співвідношенні (2.11) пропорційний коефіцієнту питомої електропровідності σ двошарової плівки і визначається за струму в ізотермічних умовах ($\nabla T = 0$):

$$\sigma = e^2 K_0 = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_i. \quad (3.1)$$

Функції Φ_i та їх асимптотичні вирази для великих і малих значень параметрів k_i та α_{0i} були одержані у попереднім розділі.

Для проведення числового розрахунку коефіцієнт провідності ДП (3.1) зручно записати наступним чином:

$$\frac{\sigma}{\sigma_{01}} = \frac{\Phi_1}{1 + d_{2,1}} \{1 + D_{2,1}\}, \quad (3.2)$$

і у разі виконання нерівності $d_{j,i} \ll 1$ формулу (3.2) наближено можна представити у вигляді:

$$\sigma = \sigma_{0i} \Phi_i \{1 - d_{j,i} + D_{j,i}\}. \quad (3.3)$$

Звідси випливає, що

$$\frac{\sigma}{\sigma_{01}} \cong \begin{cases} \Phi_1, & d_{2,1} \rightarrow 0; \\ \frac{\sigma_{02}}{\sigma_{01}} \Phi_2 \approx \frac{l_{02}}{l_{01}} f(\alpha_{02}), & d_{2,1} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3.4)$$

Тут ми врахували, що зі збільшенням товщини шару покриття d_2 , розмірна функція $\Phi_2 \rightarrow f(\alpha_{02})$, оскільки він стає необмеженим, а $\sigma_{0i} \sim l_{0i}$.

Криві, наведені на рис. 2, одержано числовим розрахунком за точною, у рамках використовуваного модифікованого моделю МШ [3,22], формулою (3.2); вони ілюструють залежність σ/σ_{01} (σ_{01} — об'ємне значення провідності базового шару металу товщиною d_1) від відношення товщин шарів металу $d_{2,1} = d_2/d_1$ при різних значеннях параметрів, які характеризують зразок ($k_2 = k_1 d_{2,1} l_{01,2}$).

Одержані залежності $\sigma(d_{2,1})$ показують, що в області малих значень $d_{2,1} \ll 1$ провідність ДП визначається характером взаємодії носіїв заряду із МП, в той час як при $d_{2,1} \gg 1$ величина σ/σ_{01} визначається відношенням довжин вільного пробігу електронів $l_{02,1}$ в шарах металу та об'ємним значенням електропровідності шару покриття $f(\alpha_{02})$, тобто $\sigma/\sigma_{01} \cong l_{02} f(\alpha_{02})/l_{01}$ (див. рис. 2, а та формулу (3.4)). Якщо $d_2 \sim d_1$, то на залежності σ/σ_{01} , як функції $d_{2,1}$, виникає міні-

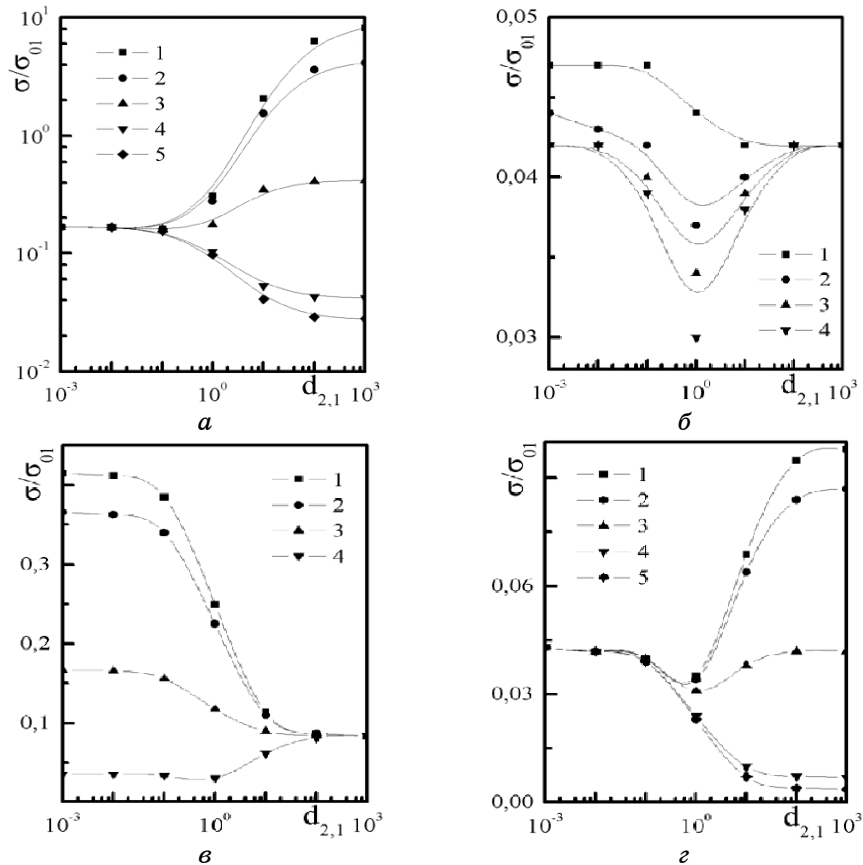


Рис. 2. Залежність провідності двошарової плівки від відношення товщин шарів металу $d_{2,1}$ при таких значеннях параметрів:

- а) $q_i = Q_{ij} = P_{ij} = 0,1$; $\alpha_{0i} = 1$; $k_1 = 0,1$: 1 — $l_{01,2} = 0,05$; 2 — $l_{01,2} = 0,1$; 3 — $l_{01,2} = 1$; 4 — $l_{01,2} = 15$;
 б) $q_i = P_{ij} = 0,1$; $\alpha_{0i} = 1$; $k_1 = 0,01$; $l_{01,2} = 10$: 1 — $Q_{ij} = 0,9$; 2 — $Q_{ij} = 0,5$; 3 — $Q_{ij} = 0,3$; 4 — $Q_{ij} = 0$;
 в) $q_i = P_{ij} = Q_{ij} = 0,1$; $l_{01,2} = 5$; $\alpha_{0i} = 1$: 1 — $k_1 = 10$; 2 — $k_1 = 1$; 3 — $k_1 = 0,1$; 4 — $k_1 = 0,01$;
 з) $q_i = P_{ij} = Q_{ij} = 0,1$; $l_{01,2} = 10$; $\alpha_{01} = 0,1$; $k_1 = 0,01$: 1 — $\alpha_{02} = 0,01$; 2 — $\alpha_{02} = 0,1$; 3 — $\alpha_{02} = 1$; 4 — $\alpha_{02} = 10$; 5 — $\alpha_{02} = 20$.

мум, який обумовлений конкуренцією внесків у провідність об'ємного, поверхневого та зерномежового розсіяння (див. рис. 2, б-г).

Для спрощення інтерпретації числових розрахунків припустимо, що зерномежовий параметер $\alpha_{0i} \leq k_i$. Якщо знехтувати внеском у провідність електронів, які рухаються майже паралельно інтерфейсу (тобто знехтувати логаритмічним фактором у формулі (2.30)), та обмежитися лінійними множниками по параметрам дзеркальності P_{ij} і Q_{ji} у виразі (2.31), то розмірні функції наближено дорівнюють

$$\Phi_i \cong k_i (1 + q_i + P_{ij} + Q_{ji} d_{j,i}). \quad (3.5)$$

Коефіцієнт 3/4 у формулі (3.5) ми не наводимо, оскільки він подалі не суттєвий. Підставляючи (3.5) у вираз (3.2) і досліджуючи на екстремум одержаний результат, переконуємося, що у точці

$$d_{2,1\min} = \left\{ 1 + \frac{1 + q_1 + P_{12} - Q_{21} - Q_{12} \sigma_{021} l_{01,2}}{(1 + q_2 + P_{21}) \sigma_{021} l_{01,2}} \right\}^{1/2} - 1 \quad (3.6)$$

питома провідність ДП має мінімальне значення. Якщо носії заряду дифузним чином взаємодіють з межею поділу шарів металу та зовнішніми межами зразка ($q_i, P_{ij}, Q_{ji} \rightarrow 0$) і враховуючи, що $\sigma_{0i} \sim l_{0i}$, то $d_{2,1\min} \cong 0,414$, що і підтверджується числовим розрахунком.

Із збільшенням ймовірності проходження носіїв заряду у сусідній шар металу без розсіяння (див. рис. 2, б), товщини базового шару металу d_1 (див. рис. 2, в) вказаний мінімум вироджується, і провідність зразка монотонно зменшується зі зростанням товщини двошарового зразка.

При пружнім розсіянні носіїв заряду на внутрішніх і зовнішніх межах, в силу виконання закону Відеманна-Франца

$$\kappa = \frac{1}{T} K_2 = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} T \sigma \quad (3.7)$$

у теплопровідності двошарових плівок будуть спостерігатися ефекти, аналогічні ефекту електропровідності, які були розглянуті вище.

4. ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ЕФЕКТИ

Враховуючи простий зв'язок між коефіцієнтом термо-е.р.с. S та коефіцієнтом Пельтье $\Pi = ST$, у данім розділі проаналізуємо залежність величини S від відношення товщин шарів металу $d_{2,1}$ при різних значеннях параметрів, які характеризують двошаровий зразок. Згідно [31], термо-е.р.с. можна визначити наступним чином:

$$S = K_1 / (eTK_0), \quad (4.1)$$

де кінетичні коефіцієнти K_0 та K_1 визначаються формулами (2.11) і (2.12) відповідно. Підставляючи значення коефіцієнтів K_0 та K_1 у формулу (4.1), одержимо наступний загальний аналітичний вираз для термо-е.р.с. двошарової полікристалічної плівки [36, 37]:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e \varepsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i - U_i \left(\frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_i} - \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0i}} \right) - U_j \left(\frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_j} - \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0j}} \right) - (\gamma_i^* - \gamma_j^*) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \tau_{0i,i}} \right\}, \quad (4.2)$$

де розмірні функції Φ_i є визначеними за формулою (2.16).

Виконуючи логаритмічне диференціювання у формулі (4.2), одержимо загальний вираз для коефіцієнта термо-е.р.с. ДП:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e \varepsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \{V + U_i - M_{Si}\}. \quad (4.3)$$

Тут

$$M_{Si} = \frac{1}{\Phi_i} [U_i J_{Si} + U_j J_{Si}^* + (\gamma_i^* - \gamma_j^*) J_{\tau i}]; \quad (4.4)$$

$$J_{Si} = f^*(\alpha_{0i}) + \left\langle G_i - \frac{k_i E_i}{z} \{G_i(1 - E_i)^{-1} - \Theta_i\} - \frac{H_{0i} - 1}{H_{0i}} \{\Lambda_i + 2G_i\} \right\rangle; \quad (4.5)$$

$$J_{Si}^* = \left\langle \frac{H_{0j} - 1}{H_{0j}} \Lambda_i - \frac{k_j E_j}{z} \Theta_i^* \right\rangle; \quad (4.6)$$

$$J_{\tau i} = \langle \Lambda_i \rangle; \quad (4.7)$$

$$f^*(\alpha_{0i}) = \frac{3}{2} \alpha_{0i} - \frac{3\alpha_{0i}^2(2 + 3\alpha_{0i})}{1 + \alpha_{0i}} + 9\alpha_{0i}^3 \ln \left(1 + \frac{1}{\alpha_{0i}} \right) \cong \begin{cases} \frac{3}{2} \alpha_{0i} - 6\alpha_{0i}^2, & \alpha_{0i} \ll 1, \\ \frac{3}{4\alpha_{0i}} - \frac{6}{5\alpha_{0i}^2}, & \alpha_{0i} \gg 1; \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\Theta_i = \left\{ (q_i + P_{ij} - 2q_i P_{ij}) (1 - q_j P_{ji} E_j^2) + q_j (1 - 2q_i) Q_{ij} Q_{ji} E_j^2 - q_i Q_{ji} \tau_{j,i} (1 - E_j) (1 + q_j E_j) \right\} \Delta^{-1} + G_i \Xi_i; \quad (4.9)$$

$$\Theta_i^* = \left\{ 2q_j P_{ji} \left(2 - q_i - P_{ij} + (q_i + P_{ij} - 2q_i P_{ij}) E_i \right) E_j + 2q_j Q_{ij} Q_{ji} E_j (1 - E_i + 2q_i E_i) - Q_{ji} \tau_{j,i} (1 + q_i E_i) (1 - q_j + 2q_j E_j) \right\} \Delta^{-1} - G_i \Xi_j; \quad (4.10)$$

$$\Xi_i = 2q_i \left\{ P_{ij} + q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) E_j^2 \right\} E_i \Delta^{-1}; \quad (4.11)$$

$$\Lambda_i = Q_{ji} \tau_{j,i} (1 - E_j) (1 + q_i E_i) (1 + q_j E_j) \Delta^{-1}. \quad (4.12)$$

Функції G_i , E_i , H_{0i} , $f(\alpha_{0i})$ і кутові дужки визначені формулами (2.17)–(2.21).

Якщо двошарова плівка складається з товстих шарів металу ($k_i \gg 1$) з довільною полікристалічною структурою, то термо-е.р.с. ДП буде визначатися формулою (4.3), у якій функції J_{Si} , J_{Si}^* , $J_{\tau i}$ дорівнюють:

$$J_{Si} = f^*(\alpha_{0i}) + \frac{3}{16k_i} \left\{ (2 - q_i - P_{ij}) \Gamma_{3,i} - Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{4,i} \right\}, \quad (4.13)$$

$$J_{Si}^* = \frac{\alpha_{0j}}{\pi k_i} Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{5,i}, \quad J_{\tau i} = \frac{3}{16k_i} Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{2,i}, \quad (4.14)$$

$$\Gamma_{3,i} = 1 - \frac{64}{3\pi} \alpha_{0i} + 36\alpha_{0i}^2 + \frac{16}{\pi} \left(25 - (16 - 25\alpha_{0i}^2) I_i - \frac{1 - \alpha_{0i}^2 I_i}{1 - \alpha_{0i}^2} \right) \alpha_{0i}^3 - 200\alpha_{0i}^4, \quad (4.15)$$

$$\Gamma_{4,i} = 1 - \frac{16}{\pi} \alpha_{0i} + 24\alpha_{0i}^2 + \frac{8}{\pi} \left(30 - 10(2 - 3\alpha_{0i}^2) I_i - \frac{1 - \alpha_{0i}^2 I_i}{1 - \alpha_{0i}^2} \right) \alpha_{0i}^3 - 120\alpha_{0i}^4, \quad (4.16)$$

$$\Gamma_{5,i} = 1 + \frac{3\pi}{2} (4\alpha_{0i}^3 + 3\alpha_{0i}^2 \alpha_{0j} + 2\alpha_{0i} \alpha_{0j}^2 + \alpha_{0j}^3) \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \frac{1 - (1 - \alpha_{0i}^2) I_i}{\alpha_{0i}} \right\} - \frac{3\pi(2\alpha_{0i} + \alpha_{0j})}{4} - \frac{3 \left\{ \alpha_{0i}^4 \left(1 + \frac{\alpha_{0j}(1 - \alpha_{0i}^2) I_i - \alpha_{0i}(1 - \alpha_{0j}^2) I_j}{\alpha_{0i} - \alpha_{0j}} \right) + \alpha_{0j}^4 I_i \right\}}{\alpha_{0i}(\alpha_{0i} - \alpha_{0j})}. \quad (4.17)$$

Одержану для довільних значень зерномежового параметра α_{0i} асимптотичну формулу (4.3) для величини S можна спростити для граничних значень параметра α_{0i} :

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\varepsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \left(1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} \right) - \right.$$

$$-\frac{3}{16k_i} \left[U_i (2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{12}{\pi} \alpha_{0i} \right) - Q_{ji} \tau_{0ji} \left(U_i \left(1 - \frac{16}{3\pi} \left(\alpha_{0j} + \frac{\alpha_{0i}}{4} \right) \right) + U_j \frac{16}{3\pi} \alpha_{0j} + (\gamma_i^* - \gamma_j^*) \left(1 - \frac{16}{3\pi} \left(\alpha_{0j} + \frac{\alpha_{0i}}{8} \right) \right) \right] \right], \quad \alpha_{0i} \ll 1; \quad (4.18)$$

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \left[\frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{3}{16k_i \alpha_{0i}^2} (2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{5}{\pi \alpha_{0i}} \right) \right] + \frac{Q_{ji} \tau_{0i,j}}{4k_i \alpha_{0j}} \left[U_i \left(1 + \frac{6}{5\alpha_{0i}} - \frac{256}{105\pi} \frac{\alpha_{0i} + \alpha_{0j}}{\alpha_{0i} \alpha_{0j}} \right) - U_j \left(1 + \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{256}{105\pi} \frac{2\alpha_{0i} + \alpha_{0j}}{\alpha_{0i} \alpha_{0j}} \right) - (\gamma_i^* - \gamma_j^*) \left(1 + \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{256}{105\pi} \frac{\alpha_{0i} + \alpha_{0j}}{\alpha_{0i} \alpha_{0j}} \right) \right] \right\}, \quad \alpha_{0i} \gg 1. \quad (4.19)$$

У разі виконання рівностей $\alpha_{0i} = \alpha_{0j}$ і $U_i = U_j$, формули (4.18) та (4.19) значно спрощуються і набувають вигляду:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \begin{array}{l} V + U_i \left(1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} - \frac{3T_i}{16k_i} \left(1 - \frac{12}{\pi} \alpha_{0i} \right) \right), \quad \alpha_{0i} \ll 1; \\ V + U_i \left[\frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{3T_i}{16k_i \alpha_{0i}^2} \left(1 - \frac{5}{\pi \alpha_{0i}} \right) \right], \quad \alpha_{0i} \gg 1. \end{array} \right. \quad (4.20)$$

Тут T_i визначено формулою (2.27).

У випадку, коли двошарова плівка складається з тонких шарів металу ($k_i \ll 1$), то для коефіцієнта термо-е.р.с. можуть бути одержані наступні наближені вирази:

$$S \cong -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \begin{array}{l} V + U_i \ln^{-1} \frac{1}{k_i}, \quad \alpha_{0i} \leq k_i; \quad (4.21, a) \\ V + U_i \frac{1 - (4/\pi)\alpha_{0i}}{\ln(1/k_i) - (4/\pi)\alpha_{0i}}, \quad k_i < \alpha_{0i} \ll 1; \quad (4.21, б) \\ V - U_i \frac{3}{4\alpha_{0i}^2} \ln^{-1} \left(\frac{1}{\alpha_{0i} k_i} \right), \quad 1 < \alpha_{0i} \ll \frac{1}{k_i}. \quad (4.21, в) \end{array} \right.$$

Таким чином, ми одержали загальний та асимптотичні вирази для коефіцієнта термо-е.р.с. двошарової полікристалічної плівки. Пода-

льша його аналіза можлива лише на основі чисельного розрахунку.

Для проведення числового розрахунку коефіцієнт термо-е.р.с. S зручно записати у наступнім вигляді:

$$\frac{S}{S_{01}} = \frac{1}{1 + D_{2,1}} \sum_{i \neq j} \left(\frac{V + U_i}{V + U_j} D_{i,j} \right)^{i-1} \left\{ 1 - \frac{M_{S_i}}{V + U_i} \right\}. \quad (4.22)$$

При виконанні нерівності $d_{i,j} \ll 1$ формулу (4.22) наближено можна представити у вигляді:

$$S = S_{0i} \left\{ 1 - \frac{M_{S_i}}{V + U_i} \right\} - D_{i,i} \left\{ S_{0i} \left[1 - \frac{M_{S_i}}{V + U_i} \right] - S_{0j} \left[1 - \frac{M_{S_j}}{V + U_j} \right] \right\}. \quad (4.23)$$

Звідси впливає асимптотична поведінка S/S_{01} для граничних значень відношень товщин шарів $d_{2,1}$:

$$\frac{S}{S_{01}} \approx \begin{cases} 1 - \frac{M_{S1}}{V + U_1}, & d_{2,1} \rightarrow 0; \\ \frac{S_{02}}{S_{01}} \left[1 - \frac{M_{S2}}{V + U_2} \right], & d_{2,1} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (4.24)$$

Криві, наведені на рис. 3, одержано числовим розрахунком за загальною формулою (4.22); вони ілюструють залежність нормованої на об'ємне значення S_{01} базового шару металу термо-е.р.с. ДП від відношення товщин шарів $d_{2,1}$. Одержані залежності $S(d_{2,1})$ показують, що характер зміни термо-е.р.с. є аналогічним поведінці коефіцієнта електропровідності ДП при зміні $d_{2,1}$. Слід відзначити, що $S(d_{2,1})$, на відміну від провідності та інших транспортних коефіцієнтів, сильно чутлива до енергетичної залежності часу релаксації електронів, яка визначається переважаючим механізмом розсіянням носіїв заряду в об'ємі шарів металу. Зокрема, коли основним механізмом розсіяння електронів є їх розсіяння на акустичних фонових, термо-е.р.с. не залежить від товщин шарів металу, оскільки у цьому випадку довжина вільного пробігу електронів не залежить від енергії [38]. Тим самим експериментальне знаходження розмірної залежності термо-е.р.с. у двошарових зразках дозволяє одержати докладну інформацію про переважаючий механізм розсіяння носіїв заряду в об'ємах шарів металу ДП, яку не можна одержати, досліджуючи розмірні залежності інших транспортних коефіцієнтів.

5. ТЕМПЕРАТУРНИЙ КОЕФІЦІЄНТ ОПОРУ

Температурна зміна опору R_{DL} двошарової полікристалічної плівки в

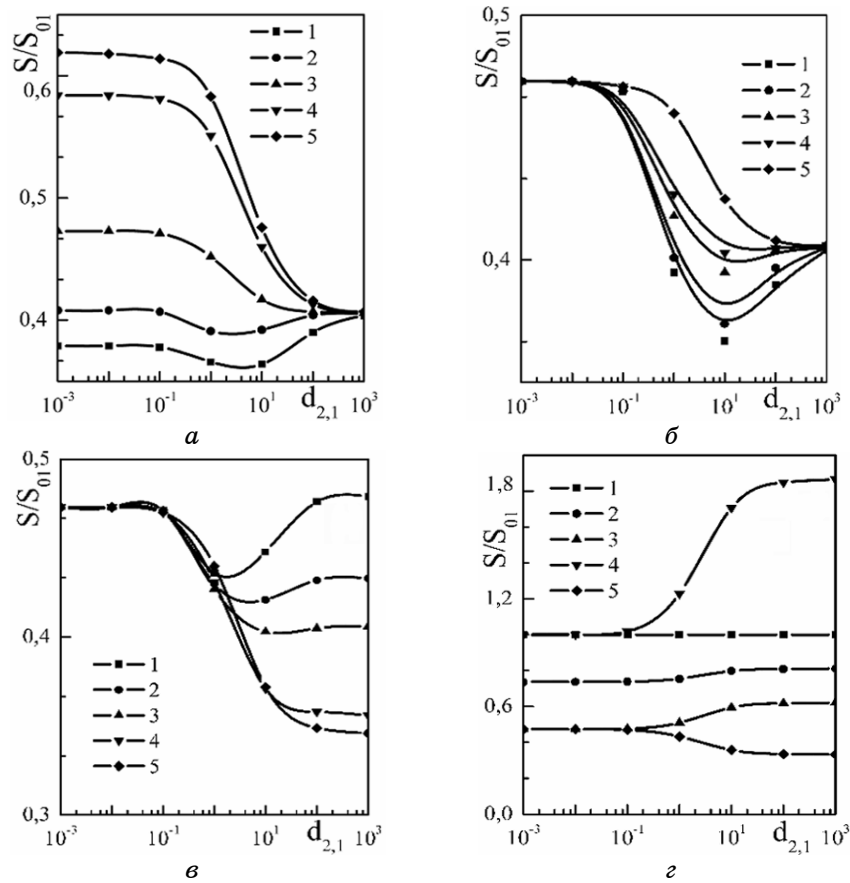


Рис. 3. Залежність коефіцієнта термо-е.р.с. S/S_{01} двошарової полікристалічної плівки від відношення товщин шарів металу $d_{2,1}$ при таких значеннях параметрів:

- а) $q_i = P_{ij} = 0,1$; $Q_{ij} = 0,3$; $\alpha_{0i} = 1$; $l_{01,2} = 5$; $V = 1$; $U_v = 0,5$; $\gamma_i^* = 1,5$; 1 — $k_1 = 0,001$; 2 — $k_1 = 0,01$; 3 — $k_1 = 0,1$; 4 — $k_1 = 1$; 5 — $k_1 = 10$;
 б) $q_i = P_{ij} = 0,1$; $Q_{ij} = 0,3$; $\alpha_{0i} = 1$; $k_1 = 0,1$; $V = 1$; $U_v = 0,5$; $\gamma_1^* = 1,5$; $\gamma_2^* = 0,0$; 1 — $l_{01,2} = 0,05$; 2 — $l_{01,2} = 0,1$; 3 — $l_{01,2} = 0,5$; 4 — $l_{01,2} = 1$; 5 — $l_{01,2} = 10$;
 в) $q_i = P_{ij} = 0,1$; $Q_{ij} = 0,3$; $k_1 = 0,1$; $\alpha_{0i} = 1$; $l_{01,2} = 1$; $V = 1$; $U_v = 0,5$; $\gamma_1^* = 1,5$; $\gamma_2^* = 0,0$; 1 — $\alpha_{02} = 0,1$; 2 — $\alpha_{02} = 0,5$; 3 — $\alpha_{02} = 1$; 4 — $\alpha_{02} = 5$; 5 — $\alpha_{02} = 10$;
 г) $q_i = P_{ij} = 0,1$; $Q_{ij} = 0,3$; $\alpha_{0i} = 1$; $l_{01,2} = 5$; $k_1 = 0,1$; $V = 1$; $U_v = 0,5$; 1 — $U_i = 0,0$; 2 — $U_i = 0,5$; 3 — $U_i = 2,0$; 4 — $U_i = 0,0$; $U_2 = 2,0$; 5 — $U_i = 2,0$, $U_2 = 0,0$.

умовах зовнішнього та внутрішнього розмірного ефекту визначається залежністю довжини вільного пробігу l_{0i} носіїв заряду від температури з одного боку та температурною залежністю геометричних розмірів шарів металу d_i і середнього розміру кристалітів L_i з іншого.

Тут і далі будемо вважати, що параметри дзеркальності q_i , P_{ij} , P_{ji} ,

Q_{ij} , Q_{ji} та R_{0i} , які описують характер взаємодії електронів із зовнішніми та внутрішніми межами зразків, від температури не залежать.

Температурний коефіцієнт опору (ТКО) β дорівнює [11, 32]:

$$\beta = \frac{d \ln R_{DL}}{dT}, \quad (5.1)$$

$$R_{DL} = \frac{a_1}{a_2 d \sigma}, \quad (5.2)$$

де a_1 і a_2 — довжина та ширина зразка, d — товщина ДП, σ — її питома провідність, яка визначається формулою (3.1).

У більшості теоретичних робіт (див. оглядові монографії типу [32]) при розрахунку ТКО допускається, що температурний коефіцієнт опору β (який безпосередньо і вимірюється в експерименті) дорівнює температурному коефіцієнту питомого опору β_p , тобто $\beta \equiv \beta_p$. Однак ця рівність, як правило, виконується для зразків з монокристалічною структурою оскільки коефіцієнт температурного розширення β_T геометричних розмірів зразка малий: $\beta_T < (10^{-2} - 10^{-3})\beta_p$ [32]. Якщо ж зразок має дрібнозернисту структуру ($\alpha_{0i} \gg 1$), то у двошарових плівкових системах сумарний температурний коефіцієнт розширення товщин шарів металу та кристалітів у них за порядком величини може співпасти з температурним коефіцієнтом питомого опору, тобто $\beta_T \sim \beta_p$ [32]. Саме з цієї причини ТКО двошарових полікристалічних структур було визначено, як зміну опору R_{DL} з температурою (5.1), і враховано ефекти теплового розширення товщин шарів металу d_i і середньої ширини зерен L_i .

Підставляючи формулу (3.1) у співвідношення (5.2), а одержаний результат у вираз (5.1), одержимо загальну аналітичну формулу для ТКО двошарової полікристалічної плівки з урахуванням температурної зміни геометричних розмірів шарів металу та середнього розміру кристалітів у них [18, 19, 39]:

$$\begin{aligned} \beta = \sum_{i \neq j} \frac{\beta_{0i}}{1 + D_{j,i}} & \left\{ 1 - \left(1 + \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_i} - \beta_{0j,i} \left(1 + \frac{2\chi_{dj}}{\beta_{0j}} \right) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_j} + \right. \\ & + \left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} + \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}} \right) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0i}} + \beta_{0j,i} \left(1 + \frac{\chi_{dj}}{\beta_{0j}} + \frac{\chi_{Lj}}{\beta_{0j}} \right) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0j}} - \\ & \left. - \left(\left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right) - \beta_{0j,i} \left(1 + \frac{\chi_{dj}}{\beta_{0j}} \right) \right) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \tau_{0j,i}} \right\}; \quad (5.3) \end{aligned}$$

функція $D_{j,i}$ визначається формулою (2.14), $\beta_{0j,i} = \beta_{0j}/\beta_{0i}$ — відношення об'ємних значень ТКО шарів металу, $\chi_{di} = d \ln d_i / dT$, $\chi_{Li} = d \ln L_i / dT$

— феноменологічні параметри, які визначають зміну товщини шарів d_i і середнього розміру зерен D_i з температурою. Температурний коефіцієнт опору безмежового зразка β_{0i} з монокристалічною структурою дорівнює [6, 18]:

$$\beta_{0i} = -\frac{d \ln \sigma_{0i}}{dT} - \frac{d \ln d_i}{dT}, \quad (5.4)$$

де враховано, що коефіцієнти, які визначають температурну зміну ширини та довжини i -го шару металу, збігаються внаслідок того, що розміри шарів металу уздовж осей Y та Z нескінченно великі.

Підставляючи розмірні функції Φ_i у формі (2.16) в формулу (5.3), одержимо загальну формулу для ТКО двошарової полікристалічної плівки в рамках модифікованого моделю МШ [3, 22] при довільному співвідношенні між довжиною вільного пробігу l_{0i} електронів і товщиною шарів d_i та довільному характері взаємодії носіїв заряду із внутрішніми та зовнішніми межами зразка:

$$\beta = \sum_{i \neq j} \frac{\beta_{0i}}{1 + D_{j,i}} \{M_{\beta i} - \beta_{0j,i} M_{\beta i}^*\}; \quad (5.5)$$

$$M_{\beta i} = 2 \left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right) - \frac{1}{\Phi_i} \left\{ \left(1 + \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right) J_{di} + \left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} + \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}} \right) J_{\alpha i} + \left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right) J_{\tau i} \right\}, \quad (5.6)$$

$$M_{\beta i}^* = \frac{1}{\Phi_i} \left\{ \left(1 + \frac{\chi_{dj}}{\beta_{0j}} + \frac{\chi_{Lj}}{\beta_{0j}} \right) J_{\alpha i}^* - \left(1 + \frac{2\chi_{dj}}{\beta_{0j}} \right) J_{di}^* - \left(1 + \frac{\chi_{dj}}{\beta_{0j}} \right) J_{\tau i} \right\}, \quad (5.7)$$

$$J_{di} = f(\alpha_{0i}) - \left\langle \frac{k_i E_i H_{0i}}{z} \{G_i (1 - E_i)^{-1} - \Theta_i\} \right\rangle, \quad (5.8)$$

$$J_{di}^* = \left\langle \frac{k_j E_j H_{0j}}{z} \Theta_i^* \right\rangle, \quad (5.9)$$

$$J_{\alpha i} = f^*(\alpha_{0i}) + \left\langle \frac{k_i E_i}{z} (H_{0i} - 1) \left\{ G_i (1 - E_i)^{-1} - \Theta_i - \frac{z}{k_i E_i H_{0i}} (\Lambda_i + 2G_i) \right\} \right\rangle, \quad (5.10)$$

$$J_{\alpha i}^* = \left\langle \frac{k_j E_j}{z} (H_{0j} - 1) \left\{ \Theta_i^* + \frac{z}{k_j E_j H_{0j}} \Lambda_i \right\} \right\rangle, \quad (5.11)$$

а функції G_i , E_i , H_{0i} , $f(\alpha_{0i})$, кутові дужки та $J_{\tau i}$ визначені формулами (2.17)–(2.21) та виразом (4.7).

Для того щоб спростити процедуру порівняння теоретичних ре-

зультатів з експериментальними загальну формулу (5.5) спростимо для граничних випадків параметрів k_i та α_{0i} .

Якщо виконується нерівність $k_i \gg 1$, то ТКО зразків для довільних значень q_i, P_{ij}, Q_{ij} і α_{0i} визначається формулою (5.5), в якій функції $J_{di}, J_{di}^*, J_{ai}, J_{ai}^*$ і $J_{\tau i}$ можуть бути записані у вигляді:

$$J_{di} = f(\alpha_{0i}), \quad J_{di}^* = 0, \quad (5.12)$$

$$J_{ai} = f^*(\alpha_{0i}) - \frac{\alpha_{0i}}{\pi k_i} \left\{ 2(2 - q_i - P_{ij}) \Gamma_{6,i} - Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{5,i} \right\}, \quad (5.13)$$

$$J_{ai}^* = \frac{\alpha_{0j}}{\pi k_i} Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{5,j}, \quad J_{\tau i} = \frac{3}{16k_i} Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{2,i}; \quad (5.14)$$

$$\Gamma_{6,i} = 1 - \frac{9\pi}{4} \alpha_{0i} - 6 \left(5 - (3 - 5\alpha_{0i}^2) I_i - \frac{1 - \alpha_{0i}^2 I_i}{4(1 - \alpha_{0i}^2)} \right) \alpha_{0i}^2 + 15\pi \alpha_{0i}^3. \quad (5.15)$$

Зауважимо, що при виконанні рівності $\alpha_{0i} = \alpha_{0j}$ $\Gamma_{6,i} = \Gamma_{4,j}$.

Одержану асимптотичну формулу для температурного коефіцієнта опору ДП для довільних значень параметра α_{0i} можна спростити для граничних значень параметра α_{0i} , тобто для $\alpha_{0i} \ll 1$ або $\alpha_{0i} \gg 1$. У цьому випадку ТКО двошарового зразка знову визначається формулою (5.5), в якій функції $M_{\beta i}$ і $M_{\beta i}^*$ мають наступний вигляд: для $\alpha_{0i} \ll 1$

$$\begin{aligned} M_{\beta i} = & 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} - \frac{3}{16k_i} \left\{ (2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{12}{\pi} \alpha_{0i} \right) + \frac{3}{5\pi} Q_{ji} \tau_{0j,i} \alpha_{0i} \right\} - \\ & - \left\{ \frac{3}{2} \alpha_{0i} + \frac{3}{8k_i} \left[(2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{9}{\pi} \alpha_{0i} \right) - \frac{Q_{ji} \tau_{0j,i}}{2} \left(1 - \frac{16}{3\pi} \left(\alpha_{0j} + \frac{1}{4} \alpha_{0i} \right) \right) \right] \right\} \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} - \\ & - \frac{3}{2} \alpha_{0i} \left\{ 1 - \frac{3}{4\pi k_i} \left[(2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{13}{2} \alpha_{0i} \right) - \frac{Q_{ji} \tau_{0j,i}}{10} \left(1 - \frac{7\pi}{3} (\alpha_{0i} + \alpha_{0j}) \right) \right] \right\} \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}}, \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} M_{\beta i}^* = & \frac{3}{16k_i} Q_{ji} \tau_{0j,i} \left\{ \left[1 - \frac{32}{3\pi} \left(\alpha_{0j} + \frac{1}{16} \alpha_{0i} \right) \right] \left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0j}} \right) - \right. \\ & \left. - \frac{16}{3\pi} \alpha_{0j} \left[1 - \frac{3\pi}{4} \left(2\alpha_{0j} + \frac{9}{25} \alpha_{0i} \right) \right] \frac{\chi_{Lj}}{\beta_{0j}} \right\}; \end{aligned} \quad (5.17)$$

для $\alpha_{0i} \gg 1$

$$\begin{aligned}
M_{\beta_i} &= \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{3}{16k_i\alpha_{0i}^2} \left\{ (2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{8}{5\alpha_{0i}} \right) - \frac{\pi}{100} Q_{ji} \tau_{0j,i} \frac{\alpha_{0i}}{\alpha_{0j}} \right\} - \\
&- \left\{ 1 - \frac{4}{5\alpha_{0i}} + \frac{1}{4k_i} \left[\frac{2 - q_i - P_{ij}}{\alpha_{0i}} \left(1 - \frac{3}{5\alpha_{0i}^2} \right) - \frac{Q_{ji} \tau_{0j,i}}{\alpha_{0j}} \left(1 - \frac{\pi}{4\alpha_{0j}} + \frac{\pi}{5\alpha_{0i}^2} \right) \right] \right\} \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} - \\
&- \left\{ 1 - \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{1}{4k_i\alpha_{0i}} \left[(2 - q_i - P_{ij}) \left(1 - \frac{3}{2\alpha_{0i}} \right) - \frac{\pi}{135\alpha_{0j}} Q_{ji} \tau_{0j,i} \right] \right\} \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}}, \quad (5.18)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_{\beta_i}^* &= \frac{Q_{ji} \tau_{0j,i}}{4k_i\alpha_{0j}} \left\{ \frac{\pi}{4\alpha_{0j}} \left(1 + \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{5(2\alpha_{0i} + \alpha_{0j})}{2\pi\alpha_{0i}\alpha_{0j}} \right) \left(1 + \frac{\chi_{dj}}{\beta_{0j}} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \left(1 + \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{\pi(2\alpha_{0i} + \alpha_{0j})}{4\alpha_{0i}\alpha_{0j}} \right) \frac{\chi_{Lj}}{\beta_{0j}} \right\}. \quad (5.19)
\end{aligned}$$

Якщо виконуються рівності $\alpha_{0i} = \alpha_{0j}$ та $\beta_{0i} = \beta_{0j}$, то формули (5.16)–(5.19) набувають вигляду:

для $\alpha_{0i} \ll 1$

$$\begin{aligned}
M_{\beta_i} - M_{\beta_i}^* &= 1 - \frac{3}{2}\alpha_{0i} - \frac{3T_i}{16k_i} \left(1 - \frac{12}{\pi}\alpha_{0i} \right) - \left\{ \frac{3}{2}\alpha_{0i} + \frac{3T_i}{8k_i} \left(1 - \frac{9}{\pi}\alpha_{0i} \right) \right\} \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} \\
&\quad - \frac{3}{2}\alpha_{0i} \left\{ 1 - \frac{3T_i}{4\pi k_i} \left(1 - \frac{13}{2}\alpha_{0i} \right) \right\} \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}}; \quad (5.20)
\end{aligned}$$

для $\alpha_{0i} \gg 1$

$$\begin{aligned}
M_{\beta_i} - M_{\beta_i}^* &= \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{3T_i}{32k_i\alpha_{0i}^2} \left\{ 1 - \frac{3}{2\alpha_{0i}} \right\} - \left\{ 1 - \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{3T_i}{8k_i\alpha_{0i}} \left(1 - \frac{1}{\alpha_{0i}} \right) \right\} \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} - \\
&\quad - \left\{ 1 - \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{T_i}{8k_i\alpha_{0i}} \left(1 - \frac{3}{2\alpha_{0i}} \right) \right\} \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}}. \quad (5.21)
\end{aligned}$$

Для двошарової плівки, яка складається з тонких полікристалічних шарів металу ($k_i \ll 1$), для ТКО можна одержати наступні наближені вирази:

$$\beta \cong \sum_{i \neq j} \frac{\beta_{0i}}{1 + D_{j,i}} \times$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} \left(1 + \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right) \frac{1}{\ln(1/k_i)} - \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}}, \quad \alpha_{0i} \leq k_i; \\ \frac{1 + \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}} - \left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} + \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}} \right) \frac{4}{\pi} \alpha_{0i}}{\ln(1/k_i) - (4/\pi) \alpha_{0i}} - \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}}, \quad k_i < \alpha_{0i} \ll 1; \\ - \left(\frac{\left(1 + \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} + \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}} \right) \frac{3}{4\alpha_{0i}^2} + \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}} - \frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}}}{\ln(1/\alpha_{0i}k_i)} + \frac{2\chi_{di}}{\beta_{0i}} \right), \quad 1 < \alpha_{0i} \ll \frac{1}{k_i}. \end{array} \right. \quad (5.22)$$

Таким чином, як впливає з формули (5.22) у випадку, коли домінуючим ефектом являється внутрішній розмірний ефект у порівнянні із зовнішнім розмірним ефектом, ТКО двошарової полікристалічної плівки є негативною величиною.

Для проведення числового розрахунку загальну формулу для температурного коефіцієнта двошарової полікристалічної плівки (5.5) зручно записати у вигляді:

$$\frac{\beta}{\beta_{01}} = \frac{1}{1 + D_{2,1}} \sum_{i \neq j} (D_{i,j} \beta_{0i,j})^{i-1} \{ M_{\beta i} - \beta_{0j,i} M_{\beta i}^* \}, \quad (5.23)$$

а при виконанні нерівності $D_{j,i} \ll 1$ вона набуває вигляду:

$$\beta = \beta_{0i} M_{\beta i} - \beta_{0j} M_{\beta i}^* - D_{j,i} \{ \beta_{0i} (M_{\beta i} - M_{\beta i}^*) - \beta_{0j} (M_{\beta j} - M_{\beta j}^*) \}. \quad (5.24)$$

Звідси впливає, що

$$\frac{\beta}{\beta_{01}} \cong \begin{cases} M_{\beta 1} - \frac{\beta_{02}}{\beta_{01}} M_{\beta 1}^*, & d_{2,1} \rightarrow 0; \\ \frac{\beta_{02}}{\beta_{01}} M_{\beta 2} - M_{\beta 2}^* \cong \frac{\beta_{02}}{\beta_{01}} \left[1 - \left\{ 1 + \frac{\chi_{d2}}{\beta_{02}} + \frac{\chi_{L2}}{\beta_{02}} \right\} \frac{f^*(\alpha_{02})}{f(\alpha_{02})} \right], & d_{2,1} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (5.25)$$

У формулі (5.25) враховано, що при $d_{2,1} \rightarrow \infty$ шар металу, що напорошується на базову плівку, становиться товстим шаром, числове значення ТКО якого і визначає сумарний температурний коефіцієнт двошарової полікристалічної плівки.

Залежність ТКО двошарового полікристалічного зразка від відношення товщин шарів $d_{2,1}$ при різних значеннях параметрів, які характеризують ДП, представлено на рис. 4. Для того щоб спрости-

ти інтерпретацію результатів числового розрахунку температурний коефіцієнт опору ДП представимо у наступнім вигляді:

$$\beta = \left[\beta_1 + \frac{d_{2,1}}{1 + d_{2,1}} (\sigma_{2,1} \beta_2 - \beta_1) \right] / \left[1 + \frac{d_{2,1}}{1 + d_{2,1}} (\sigma_{2,1} - 1) \right]. \quad (5.26)$$

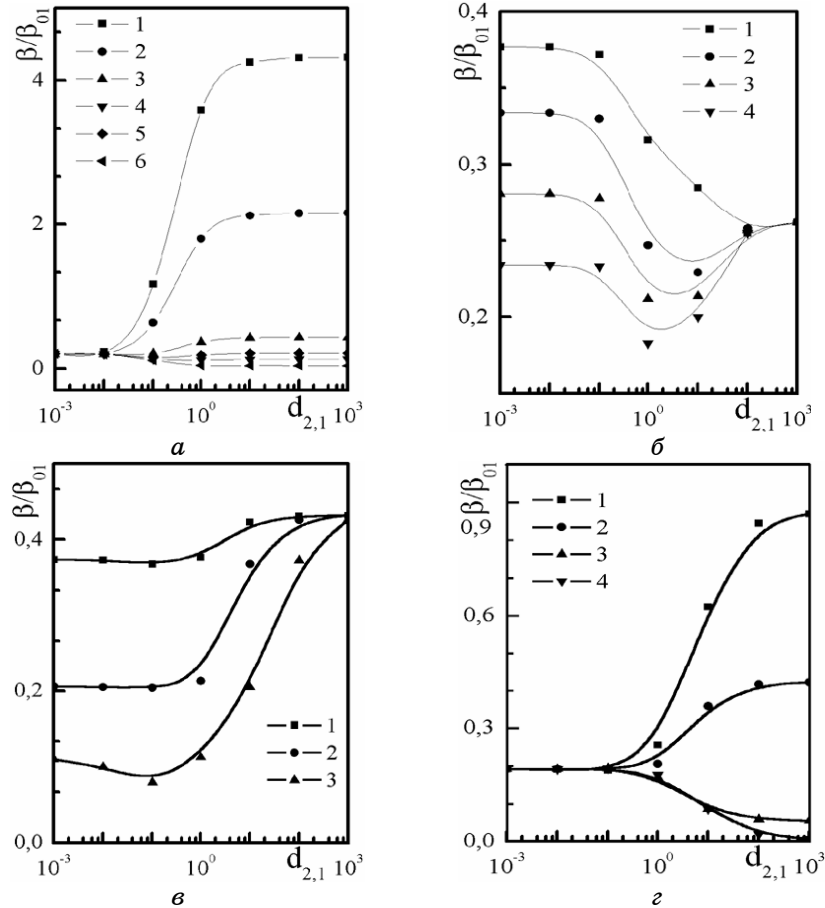


Рис. 4. Залежність температурного коефіцієнта опору двошарового зразка від $d_{2,1}$ при таких значеннях параметрів $\left(\frac{\chi_{di}}{\beta_{0i}} = \frac{\chi_{Li}}{\beta_{0i}} = 10^{-3} \right)$:

- а) $q_i = P_{ij} = Q_{ji} = 0,1$; $k_1 = 0,1$; $l_{01,2} = 1$; $\alpha_{0i} = 1$: 1 — $\beta_{02,1} = 10$; 2 — $\beta_{02,1} = 5$; 3 — $\beta_{02,1} = 1$; 4 — $\beta_{02,1} = 0,3$; 5 — $\beta_{02,1} = 0,5$; 6 — $\beta_{02,1} = 0,1$;
 б) $q_i = Q_{ji} = 0,1$; $k_1 = 0,1$; $l_{01,2} = 1$; $\beta_{02,1} = 0,3$; $\alpha_{0i} = 1$: 1 — $P_{ij} = 0$; 2 — $P_{ij} = 0,1$; 3 — $P_{ij} = 0,4$; 4 — $P_{ij} = 0,8$;
 в) $q_i = P_{ij} = Q_{ji} = 0,1$; $l_{01,2} = 1$; $\beta_{02,1} = 1$; $\alpha_{0i} = 1$: 1 — $k_1 = 1$; 2 — $k_1 = 0,1$; 3 — $k_1 = 0,01$;
 з) $q_i = P_{ij} = Q_{ji} = 0,1$; $l_{01,2} = 1$; $k_1 = 0,1$; $\alpha_{0i} = 1$; $\beta_{02,1} = 1$: 1 — $\alpha_{02} = 0,1$; 2 — $\alpha_{02} = 1$; 3 — $\alpha_{02} = 10$; 4 — $\alpha_{02} = 20$.

Формула (5.26) значно спрощується, якщо шари металу ДП мають однакові провідні властивості, тобто $\sigma_{2,1} = \sigma_2 / \sigma_1 = 1$:

$$\beta = \beta_1 + \frac{d_{2,1}}{1 + d_{2,1}} (\beta_2 - \beta_1). \quad (5.27)$$

Звідси випливає, що при малих значеннях $d_{2,1} \ll 1$ другим множником у формулі (5.27) можна знехтувати, і ТКО двошарової плівки визначається своїм значенням в базовій плівці, однак його сумарне значення буде визначатися характером взаємодії носіїв заряду із зовнішніми та внутрішніми межами зразка (див. рис. 4). Зі збільшенням $d_{2,1}$, так що $d_2 \sim d_1$, характер поведінки $\beta(d_{2,1})$ буде залежати від знаку нерівності між β_1 та β_2 . У випадку, коли $\beta_2 \ll \beta_1$, ТКО буде монотонно зменшуватися із зростанням $d_{2,1}$.

При виконанні протилежної нерівності $\beta_2 \gg \beta_1$ спостерігається протилежна тенденція, тобто ТКО монотонно збільшується із зростанням товщини ДП. У випадку, коли $\beta_2 \sim \beta_1$, ТКО проходить через мінімум, який має ту ж природу, що й у провідності ДП.

При збільшенні ймовірності проходження електронів в сусідній шар металу або товщини базисного шару вказаний мінімум вироджується, і температурний коефіцієнт опору змінюється монотонним чином зі зміною $d_{2,1}$.

6. КОЕФІЦІЄНТИ ПОПЕРЕЧНОЇ ТА ПОЗДОВЖНЬОЇ ТЕНЗОЧУТЛИВОСТІ

Зміст ефекту тензочутливості полягає у зміні електричного опору (електропровідності) металевих або напівпровідникових зразків за наявності поздовжньої або поперечної деформації. Безпосередньо ефект тензочутливості не впливає з кінетичного рівняння Больцманна, однак його потрібно віднести до транспортних явищ, оскільки тензоопір характеризує зміну одного з найбільш важливих кінетичних коефіцієнтів — провідності (опору) під дією напруги у провіднику, яка створюється зовнішнім навантаженням. Причини тензоефекту пов'язані зі зміною концентрації дефектів, зміною товщин шарів металу та розміру кристалітів у них, зміною довжини вільного пробігу електронів тощо [40–43].

Кількісними характеристиками ефектів поперечної та поздовжньої тензочутливості є коефіцієнти поздовжньої $\gamma^{(1)}$ та поперечної $\gamma^{(2)}$ тензочутливості

$$\gamma^{(n)} = \frac{d \ln R_{DL}}{d \ln a_n}, \quad n = 1, 2, \quad (6.1)$$

які показують у скільки разів відносна зміна опору більша (менша)

його відносної деформації. У формулі (6.1) й у всіх виразах, які будуть наведені нижче, якщо верхній індекс n дорівнює 1, то формули визначають коефіцієнт поздовжньої тензочутливості; якщо ж $n=2$, то усі формули визначають коефіцієнт поперечної тензочутливості; R_{DL} — опір двошарового зразка, який визначається формулою (5.2).

Для того щоб одержати аналітичну формулу, яка визначає коефіцієнти поздовжньої та поперечної тензочутливості у двошаровій плівці необхідно вираз (3.1) підставити у формулу (5.2), а одержаний результат — у співвідношення (6.1) (тут ми знову вважаємо, що величини $q_i, P_{ij}, P_{ji}, Q_{ij}, Q_{ji}$ і R_{0i} являються параметрами задачі, тобто не залежать від поздовжньої та поперечної деформації). Кінцевий результат розрахунку можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} & \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} - (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_i} - (\eta_{lj}^{(n)} - \eta_{dj}^{(n)}) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_j} - \right. \\ & \left. - (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0i}} - (\eta_{Lj}^{(n)} - \eta_{lj}^{(n)}) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_{0j}} - (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{lj}^{(n)}) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \tau_{0j,i}} \right\}, \quad (6.2) \end{aligned}$$

де $\eta_{li}^{(n)} = -\frac{d \ln l_{0i}}{d \ln a_n}$, $\eta_{di}^{(n)} = -\frac{d \ln d_i}{d \ln a_n}$, $\eta_{Li}^{(n)} = -\frac{d \ln L_i}{d \ln a_n}$ — феноменологічні

параметри, які визначають зміну довжини вільного пробігу електронів l_{0i} , товщини шару d_i і середньої ширини кристалітів L_i у площині металевої плівки за наявності поздовжньої або поперечної деформації. Функції D_{ji} та Φ_i визначаються формулами (2.14) і (2.16), а коефіцієнт тензочутливості (КТ) безмежного зразка з монокристалічною структурою $\gamma_{0i}^{(n)}$ у формулі (6.2) дорівнює [20, 44]:

$$\gamma_{0i}^{(n)} = \eta_{li}^{(n)} + 2(2-n)(1 + \eta_{di}^{(n)}). \quad (6.3)$$

Обчислюючи логаритмічні похідні у формулі (6.2), одержимо загальний вираз для коефіцієнтів тензочутливості двошарової плівки з полікристалічною структурою:

$$\gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \{ \gamma_{0i}^{(n)} - M_{\gamma i}^{(n)} \}. \quad (6.4)$$

Тут

$$\begin{aligned} M_{\gamma i}^{(n)} = \frac{1}{\Phi_i} & \left\{ (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) \mathcal{J}_{\gamma i} - (\eta_{lj}^{(n)} - \eta_{dj}^{(n)}) \mathcal{J}_{di}^* - (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \mathcal{J}_{\alpha i} - \right. \\ & \left. - (\eta_{Lj}^{(n)} - \eta_{lj}^{(n)}) \mathcal{J}_{\alpha i}^* - (\eta_{lj}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \mathcal{J}_{\tau i} \right\}, \quad (6.5) \end{aligned}$$

$$J_{li} = \left\langle G_i - \frac{k_i E_i H_{0i}}{z} \{G_i(1 - E_i)^{-1} - \Theta_i\} \right\rangle \equiv \langle G_i \rangle - J_{di}, \quad (6.6)$$

а функції J_{di} , J_{di}^* , J_{α_i} , $J_{\alpha_i}^*$ та J_{τ_i} визначаються формулами (5.8)–(5.11) та (4.7), відповідно.

Одержані вирази можуть бути спрощені для граничних значень параметрів k_i та α_{0i} . У випадку, коли параметер $k_i \gg 1$, для довільних значень параметрів q_i , P_{ij} , Q_{ji} і α_{0i} КТ буде визначатися формулою (6.4), у якій асимптотичні значення функцій J_{di}^* , J_{α_i} , $J_{\alpha_i}^*$ і J_{τ_i} визначаються формулами (5.12)–(5.14), а J_{γ_i} дорівнює:

$$J_{\gamma_i} = \frac{3}{16k_i} \{(2 - q_i - P_{ij})\Gamma_{1,i} - Q_{ji}\tau_{0j,i}\Gamma_{2,i}\}. \quad (6.7)$$

У випадку, коли двошарова плівка складається з шарів металу з крупнозернистою ($\alpha_{0i} \ll 1$) або дрібнозернистою ($\alpha_{0i} \gg 1$) структурами, КТ набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} + \frac{3\alpha_{0i}}{2} (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) - \frac{3}{16k_i} \{(2 - q_i - P_{ij}) \left[\left(1 - \frac{6\alpha_{0i}}{\pi}\right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{6}{\pi} \alpha_{0i} (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \right] - Q_{ji}\tau_{0j,i} \left[\left(1 - \frac{16}{3\pi} \left(\alpha_{0j} + \frac{\alpha_{0i}}{8}\right)\right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) + \frac{6}{\pi} \alpha_{0i} (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{16}{3\pi} \alpha_{0j} (\eta_{Lj}^{(n)} - \eta_{lj}^{(n)}) - \left(1 - \frac{16}{3\pi} \left(\alpha_{0j} + \frac{\alpha_{0i}}{8}\right)\right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{lj}^{(n)}) \right] \right\}, \quad \alpha_{0i} \ll 1; \quad (6.8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} + \left(1 - \frac{4}{5\alpha_{0i}}\right) (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) - \right. \\ \left. - \frac{1}{4k_i\alpha_{0i}} \left\{ (2 - q_i - P_{ij}) \left[\left(1 - \frac{3}{4\alpha_{0i}}\right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) + \left(1 - \frac{3}{2\alpha_{0i}}\right) (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \right] - \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{Q_{ji}\tau_{0j,i}\alpha_{0i}}{\alpha_{0j}} \left[\left(1 + \frac{4}{5\alpha_{0i}} - \frac{\pi(\alpha_{0i} + \alpha_{0j})}{4\alpha_{0i}\alpha_{0j}}\right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \left(1 + \frac{3}{4\alpha_{0i}} - \frac{9(\alpha_{0i} + \alpha_{0j})}{8\alpha_{0i}\alpha_{0j}}\right) (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \right] \right\}, \quad \alpha_{0i} \gg 1. \quad (6.9) \end{aligned}$$

Одержані формули (6.8) і (6.9) спрощуються, якщо для ДП викону-

ється рівність $\alpha_{0i} = \alpha_{0j}$. У цьому випадку КТ дорівнюють:

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} + \frac{3}{2} \alpha_{0i} (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) - \frac{3 T_i}{16 k_i} \left[\left(1 - \frac{6}{\pi} \alpha_{0i} \right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{6}{\pi} \alpha_{0i} (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \right] \right\}, \quad \alpha_{0i} \ll 1; \end{aligned} \quad (6.10)$$

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} + \left(1 - \frac{4}{5 \alpha_{0i}} \right) (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) - \frac{T_i}{4 k_i \alpha_{0i}} \left[\left(1 - \frac{3}{4 \alpha_{0i}} \right) (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(1 - \frac{3}{2 \alpha_{0i}} \right) (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \right] \right\}, \quad \alpha_{0i} \gg 1. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Якщо ж товщини шарів металу d_i ДП тонкі ($k_i \ll 1$), то для величини $\gamma^{(n)}$ можна одержати наступні наближені формули при довільнім співвідношенні між товщинами шарів ДП:

$$\gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} - (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) \left(1 - \ln^{-1} \frac{1}{k_i} \right) \right\}, \quad \alpha_{0i} \leq k_i; \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} - (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) \left(1 - \frac{1}{\ln \frac{1}{k_i} - \frac{4}{\pi} \alpha_{0i}} \right) + \frac{(\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \frac{4}{\pi} \alpha_{0i}}{\ln \frac{1}{k_i} - \frac{4}{\pi} \alpha_{0i}} \right\}, \\ k_i < \alpha_{0i} \ll 1; \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} \gamma^{(n)} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ \gamma_{0i}^{(n)} - (\eta_{li}^{(n)} - \eta_{di}^{(n)}) \left(1 - \frac{1}{\ln \frac{1}{\alpha_{0i} k_i}} \right) + (\eta_{Li}^{(n)} - \eta_{li}^{(n)}) \frac{1}{\ln \frac{1}{\alpha_{0i} k_i}} \right\}, \\ 1 < \alpha_{0i} \ll 1/k_i. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Для проведення числового розрахунку точну формулу (6.4) для коефіцієнта поздовжньої тензочутливості двошарової полікристалічної плівки зручно записати у наступнім вигляді:

$$\frac{\gamma^{(1)}}{\gamma_{01}^{(1)}} = \frac{1}{1 + D_{2,1}} \sum_{i \neq j} (D_{i,j} \gamma_{0i,j}^{(1)})^{i-1} \left\{ 1 - \frac{M_{\gamma i}^{(1)}}{\gamma_{0i}^{(1)}} \right\}; \quad (6.15)$$

при виконанні нерівності $D_{j,i} \ll 1$ вона набуває вигляду:

$$\gamma^{(1)} = \gamma_{0i}^{(1)} M_{\gamma i}^{(1)} - D_{j,i} \left\{ \gamma_{0i}^{(1)} - M_{\gamma i}^{(1)} - \left(\gamma_{0j}^{(1)} - M_{\gamma j}^{(1)} \right) \right\}. \quad (6.16)$$

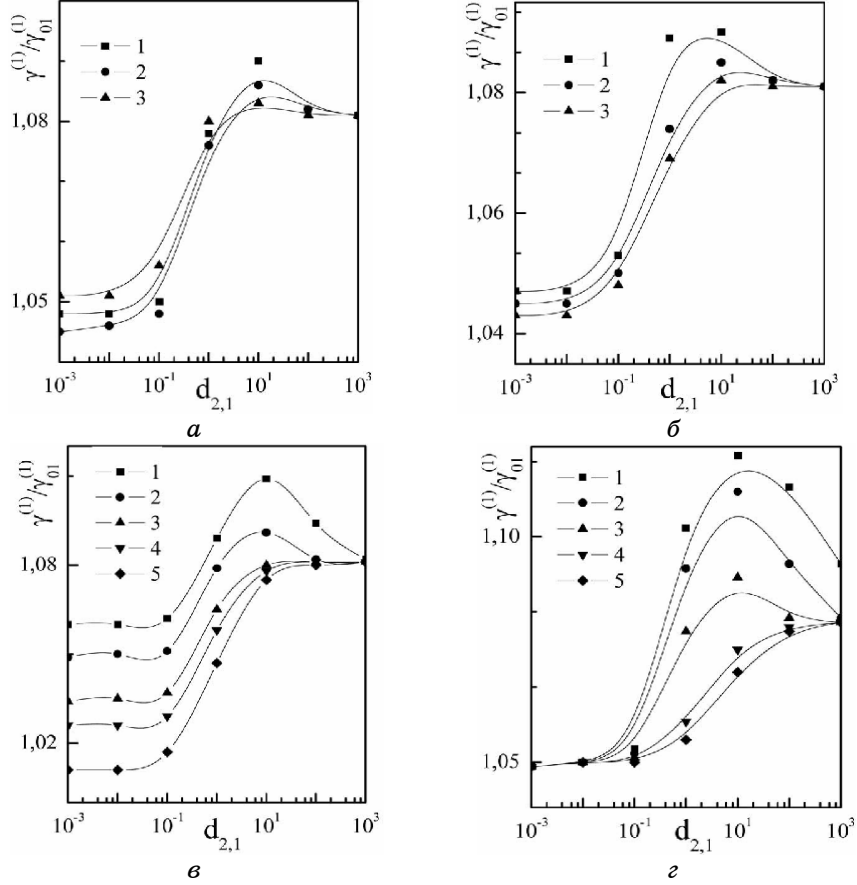


Рис. 5. Залежність коефіцієнта поздовжньої тензочутливості $\gamma^{(1)} / \gamma_{01}^{(1)}$ двошарової полікристалічної плівки від відношення товщин шарів металу $d_{2,1}$ при таких значеннях параметрів:

- a) $q_i = 0,5$; $Q_{ji} = 0,1$; $k_1 = 0,1$; $\alpha_{0i} = 1$; $l_{01,2} = 1$; $\eta_{di}^{(1)} = \eta_{Li}^{(1)} = 0,3$; $\eta_{l1}^{(1)} = 0,1$; $\eta_{l2}^{(1)} = 0,2$; 1 — $P_{ij} = 0,0$; 2 — $P_{ij} = 0,4$; 3 — $P_{ij} = 0,9$;
- б) $q_i = 0,5$; $Q_{ji} = 0,1$; $k_1 = 0,1$; $\alpha_{0i} = 0,1$; $l_{01,2} = 1$; $\eta_{di}^{(1)} = \eta_{Li}^{(1)} = 0,3$; $\eta_{l1}^{(1)} = 0,1$; $\eta_{l2}^{(1)} = 0,2$; 1 — $Q_{ji} = 0,0$; 2 — $Q_{ji} = 0,6$; 3 — $Q_{ji} = 0,9$;
- в) $q_i = P_{ij} = 0,1$; $Q_{ji} = 0,2$; $\alpha_{0i} = 1$; $l_{01,2} = 1$; $\eta_{di}^{(1)} = \eta_{Li}^{(1)} = 0,3$; $\eta_{d2}^{(1)} = \eta_{L2}^{(1)} = 0,35$; $\eta_{l1}^{(1)} = 0,1$; $\eta_{l2}^{(1)} = 0,2$; 1 — $k_1 = 0,01$; 2 — $k_1 = 0,1$; 3 — $k_1 = 0,5$; 4 — $k_1 = 1$; 5 — $k_1 = 10$;
- з) $k_1 = 0,1$; $q_i = P_{ij} = 0,1$; $Q_{ji} = 0,2$; $\alpha_{0i} = 0,1$; $\eta_{di}^{(1)} = \eta_{Li}^{(1)} = 0,3$; $\eta_{d2}^{(1)} = \eta_{L2}^{(1)} = 0,35$; $\eta_{l1}^{(1)} = 0,1$; $\eta_{l2}^{(1)} = 0,2$; 1 — $l_{01,2} = 0,01$; 2 — $l_{01,2} = 0,1$; 3 — $l_{01,2} = 1$; 4 — $l_{01,2} = 10$; 5 — $l_{01,2} = 20$.

Звідси випливає, що

$$\frac{\gamma^{(1)}}{\gamma_{01}^{(1)}} \cong \begin{cases} 1 - \frac{M_{\gamma 1}^{(1)}}{\gamma_{01}^{(1)}}, & d_{2,1} \rightarrow 0; \\ \frac{\gamma_{02}^{(1)}}{\gamma_{01}^{(1)}} \left(1 - \frac{M_{\gamma 2}^{(1)}}{\gamma_{02}^{(1)}} \right), & d_{2,1} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (6.17)$$

Залежність коефіцієнта поздовжньої тензочутливості двошарового полікристалічного зразка від відношення товщин шарів $d_{2,1}$ при різних значеннях параметрів, що характеризують ДП, представлено на рис. 5.

В області малих значень $d_{2,1} \ll 1$ величина $\gamma^{(1)} / \gamma_{01}^{(1)}$ практично не змінюється зі зростанням сумарної товщини плівки. Із виконанням протилежної нерівності $d_{2,1} \gg 1$ коефіцієнт тензочутливості $\gamma^{(1)} / \gamma_{01}^{(1)}$ асимптотично прямує до об'ємного значення КТ шару металу товщиною d_2 . Якщо ж $d_1 \sim d_2$, то на залежності $\gamma^{(1)} / \gamma_{01}^{(1)}$, як функції $d_{2,1}$, виникає максимум, який обумовлений конкуренцією внесків в КТ об'ємного, інтерфейсного та зерномежового розсіяння носіїв заряду. Зі збільшенням параметра дзеркальності P_{ij} та Q_{ji} , товщини базового шару металу k_1 і ступеня його чистоти вказаний максимум вироджується, і КТ монотонно змінюється зі зростанням $d_{2,1}$.

7. ВПЛИВ ВЗАЄМНОЇ ДИФУЗІЇ НА ПРОВІДНІСТЬ ДВОШАРОВОЇ ПОЛІКРИСТАЛІЧНОЇ ПЛІВКИ

7.1. Загальний та асимптотичні вирази для провідності двошарової плівки в умовах взаємної зерномежової дифузії

Широке використання багатошарових металевих плівок у мікроелектроніці і обчислювальній техніці та пов'язана з цим проблема стабільності характеристик багатошарових елементів визначають постійний інтерес до вивчення процесів взаємної дифузії у таких системах [45]. Однією з можливостей одержання достовірної інформації про коефіцієнт зерномежової дифузії D_b є дослідження часової еволюції провідності двошарових плівок в умовах зовнішнього та внутрішнього розмірного ефекту [46–52].

При низькотемпературнім відпалюванні об'ємна дифузія фактично «заморожена» [53], і опір плівки, обумовлений розсіянням носіїв заряду в об'ємі зразку, на міжшаровій та зовнішніх межах залишається практично незмінним. У той же час опір міжкристалічних меж суттєво змінюється внаслідок міграції уздовж них атомів домішок [47–50].

Теоретичну аналізу впливу зерномежової дифузії на провідність

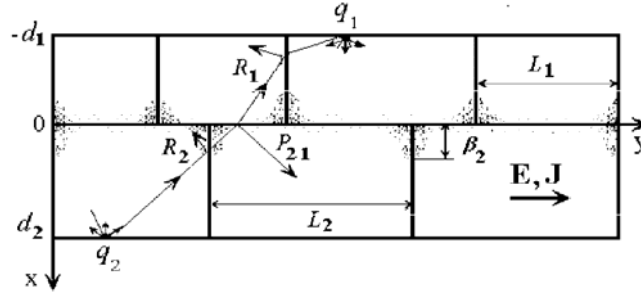


Рис. 6. Модель двошарової полікристалічної плівки в умовах зерномежової дифузії атомів домішок. Ламаною лінією показано можливу траєкторію носія заряду.

двошарової полікристалічної плівки (рис. 6) можна виконати за допомогою модифікованого моделю Маядаса та Шацкеса [3], яка враховує зміну коефіцієнта розсіяння електронів межами зерен R_{0i} внаслідок наявності в них атомів домішок. Такий підхід до розв'язку задачі про часову зміну коефіцієнта провідності в умовах взаємної дифузії ДП був запропонований у роботах [47, 48].

Питома провідність двошарової полікристалічної плівки може бути розрахована за допомогою кінетичного рівняння Больцманна, у якому інтеграл зіткнень електронів записаний у τ -наближенні. За наявності взаємної дифузії металів питому провідність ДП можна записати у наступнім вигляді [50–52]:

$$\sigma(t_D) = -\frac{2e^2}{d h^3} \sum_{i=1}^2 \int_{v_{xi}>0} d^3 p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_i} \frac{v_{yi}^2}{v_{xi}} G_i^*(t_D), \quad (7.1)$$

$$G_i^*(t_D) = 2 I_i + \frac{1}{\Delta(t_D)} \left\{ q_i (1 - q_j P_{ji} W_j^2(0)) I_{di}^2 + I_{0i} (I_{0i} + 2q_i I_{di} W_i(0)) (P_{ij} + \right. \\ \left. + q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) W_j^2(0)) + Q_{ji} (I_{0i} + q_i W_i(0) I_{di}) (I_{0j} + q_j W_j(0) I_{dj}) \right\}, \quad (7.2)$$

$$\Delta_i^*(t_D) = 1 - q_i P_{ij} W_i^2(0) - q_j P_{ji} W_j^2(0) - q_i q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) W_i^2(0) W_j^2(0), \\ I_i = \int_0^{d_i} dx W_i(x) \int_x^{d_i} dx' W_i^{-1}(|x'|), \quad I_{di} = \int_0^{d_i} dx W_i(x), \quad I_{0i} = \int_0^{d_i} dx W_i(0) W_i^{-1}(|x|). \quad (7.3)$$

У формулах (7.2) і (7.3) t_D — час дифузійного відпалювання, а функція $W_i(x)$ має наступний вигляд:

$$W_i(x) = \exp \left\{ -\frac{1}{|v_{xi}|} \int_x^{d_i} \frac{dx'}{\tau_i(x', \mathbf{p})} \right\} \quad (7.4)$$

і визначає ймовірність того, що електрон, стартувавши з позиції з координатою x в i -м шарі двошарової плівки, прийде до зовнішньої межі з координатою $x_s = -d_1, d_2$, не розсіявшись на домішках, які дифундують уздовж міжкристалітних меж.

Характерну частоту об'ємних зіткнень $\tau_i^{-1}(x, p)$ носіїв заряду у співвідношенні (7.4) можна представити у вигляді [3, 47]

$$\frac{1}{\tau_i(x, p_y)} = \frac{1}{\tau_{0i}} \left\{ 1 + \alpha_i(x) \frac{p_0}{|p_y|} \right\}, \quad (7.5)$$

де $\tau_{0i}^{-1} = \text{const}$ і не залежить від координати x , а визначається розсіянням електронів на фонах та на залишкових домішках в об'ємі шарів металу двошарової плівки. Зерномежовий параметер $\alpha_i(x)$ є функцією координати x внаслідок наявності атомів домішок у міжкристалітних межах. Якщо концентрація дифундуючих атомів у межах зерен мала, то коефіцієнт розсіяння електронів міжкристалітними межами $R_i(x, t_D)$ може бути записаний у вигляді [47]:

$$R_i(x, t_D) = R_{0i} + \gamma_{bi} C_{bi}(x, t_D), \quad (7.6)$$

де $R_{0i} = \text{const}$ і визначає ймовірність розсіяння носіїв заряду на міжкристалітних межах за відсутності в них атомів домішок; величина γ_{bi} є порядку одиниці і може мати будь-який знак, оскільки, проникаючи в межі зерен, атоми домішок можуть визвати, як збільшення, так і зменшення R_{0i} . Якщо процес зерномежової дифузії супроводжується утворенням твердих розчинів [54], то ймовірність розсіяння електронів на межах зерен R_{0i} збільшується, і провідність двошарового зразка буде зменшуватися, тобто $\gamma_{bi} > 0$. Окрім розсіяння безпосередньо на міжкристалітних межах, електрони можуть розсіюватися на існуючих поблизу них пружних полях деформації. Атоми домішок викликають релаксацію цих полів, що відповідає негативним значенням γ_{bi} й зменшенню R_{0i} і, відповідно, збільшенню провідності двошарової полікристалічної плівки [47–49].

З урахуванням (7.6) зерномежовий параметер $\alpha_i(x)$ можна записати наступним чином:

$$\alpha_i(x) = \alpha_{0i} \frac{1 + (\gamma_{bi} / R_{0i}) C_{bi}(x, t_D)}{1 - (\gamma_{bi} / (1 - R_{0i})) C_{bi}(x, t_D)}, \quad (7.7)$$

де $\alpha_{0i} = \frac{l_{0i}}{L_i} \frac{R_{0i}}{1 - R_{0i}} = \text{const}$ і є параметром задачі.

Якщо час відпалювання невеликий, тобто виконується нерівність $\sqrt{D_{bi} t_D} \ll \delta_i$ (δ_i — дифузійна ширина i -ї міжкристалітної межі), і знехтувати відтоком атомів домішок з меж зерен в об'ємі шарів

металу, то розподіл атомів домішок в міжкристалітних межах має наступний вигляд [55, 56]:

$$C_{bi}(x, t_D) = C_{0i} \exp\{-\beta_i x\}, \quad (7.8)$$

$$\beta_i = \left\{ \frac{2}{\delta_i D_{bi}} \left(\frac{D_{li}}{\pi t_D} \right)^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (7.9)$$

де D_{li} — коефіцієнт об'ємної дифузії в i -м шарі двошарової плівки. Величина β_i^{-1} визначає характерну глибину проникнення атомів домішок до i -го шару двошарової плівки уздовж міжкристалітних меж.

Вважаючи, що закон дисперсії — квадратичний та ізотропний у кожному шарі ДП, та виконавши інтегрування по поверхні Фермі у формулі (7.1) з урахуванням формул (7.5)–(7.9), можна показати, що провідність двошарового полікристалічного зразка в умовах взаємної дифузії металів буде визначатися наступною формулою [53]:

$$\sigma(t_D) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_{bi}(t_D), \quad (7.10)$$

$$\Phi_{bi}(t_D) = k_i^2 \left\langle \frac{G_{bi}(t_D) H_{0i}^2}{z^2 (1 - E_i)} \right\rangle, \quad (7.11)$$

$$G_{bi}(t_D) = 2 J_i + \frac{1}{\Delta(t_D)} \left\{ q_i (1 - q_j P_{ji} E_j^2 W_{bj}^2(0)) J_{di}^2 + \right. \\ \left. J_{0i} (J_{0i} + 2q_i E_i W_{bi}(0) J_{di}) (P_{ij} + q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) E_j^2 W_{bj}^2(0)) + \right. \\ \left. Q_{ji} d_{j,i} (J_{0i} + q_i E_i W_{bi}(0) J_{di}) (J_{0j} + q_j E_j W_{bj}(0) J_{dj}) \right\}, \quad (7.12)$$

$$\Delta(t_D) = 1 - q_i P_{ij} E_i^2 W_{bi}^2(0) - q_j P_{ji} E_j^2 W_{bj}^2(0) - \\ q_i q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) E_i^2 E_j^2 W_{bi}^2(0) W_{bj}^2(0),$$

$$J_i = \int_0^1 dx W_{bi}(x) \int_x^1 dx' W_{bi}^{-1}(|x'|) \exp(-k_i(x' - x)/z), \quad (7.13)$$

$$J_{di} = \int_0^1 dx W_{bi}(x) \exp(-k_i(1 - x)/z), \quad (7.14)$$

$$J_{0i} = \int_0^1 dx W_{bi}(0) W_{bi}^{-1}(|x|) \exp(-k_i x/z), \quad (7.15)$$

де E_i , H_{0i} та кутові дужки визначені формулами (2.19) та (2.20), а ймовірність того, що носії заряду пройдуть відрізок шляху $[x, 1]$, не розсіявшись на міжкристалітних межах за наявності в них атомів домішок, дорівнює:

$$W_{bi}(x) = \exp \left\{ -\frac{k_i(H_{0i} - 1)}{z} \left[1 - x + \frac{\sqrt[4]{t_{bi}}}{R_{0i}} \ln \left(\frac{1 - \frac{\gamma_{bi} C_{0i}}{1 - R_{0i}} \exp(-1/\sqrt[4]{t_{bi}})}{1 - \frac{\gamma_{bi} C_{0i}}{1 - R_{0i}} \exp(-x/\sqrt[4]{t_{bi}})} \right) \right] \right\}, \quad (7.16)$$

$$t_{bi} = \frac{\pi \delta_i^2 D_{bi}^2}{4 d_i^4 D_{li}} t_D. \quad (7.17)$$

При невеликому часі дифузійного відпалювання ($\beta_i^{-1} \ll d_i$) інтеграли у формулі (7.10) можна обчислити асимптотично при ($d_i l_{0i}^{-1} \rightarrow \infty$) і одержати наступні вирази для провідності двошарової плівки, що складається з товстих полікристалічних шарів металу:

$$\sigma(t_D) \cong \sum_{i=1}^2 \frac{d_i \sigma_{0i}}{d} \left\{ \begin{array}{l} 1 - \frac{3\alpha_{0i}}{2} \left(1 + \frac{\ln \left[1 + \gamma_{bi} C_{0i} \frac{1 - e^{-\beta_i d_i}}{1 - R_{0i} - \gamma_{bi} C_{0i}} \right]}{R_{0i} \beta_i d_i} \right), \quad \alpha_{0i} \ll 1; \\ \frac{3}{4\alpha_{0i}} \left(1 + \frac{\ln \left[1 - \gamma_{bi} C_{0i} \frac{1 - e^{-\beta_i d_i}}{R_{0i} + \gamma_{bi} C_{0i}} \right]}{(1 - R_{0i}) \beta_i d_i} \right), \quad \alpha_{0i} \gg 1. \end{array} \right. \quad (7.18)$$

Асимптотичні формули (7.18) дозволяють знайти зміну провідності $\Delta\sigma = \sigma(0) - \sigma(t_D)$ двошарової плівки, яка викликана дифузійним відпалюванням:

$$\Delta\sigma = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 \sigma_{0i} \beta_i^{-1} \left\{ \begin{array}{l} \frac{3}{2} \alpha_{0i} \left[R_{0i} \left(\frac{1 - R_{0i}}{\gamma_{bi} C_{0i}} - 1 \right) \right]^{-1}, \quad \alpha_{0i} \ll 1; \\ \frac{3}{4\alpha_{0i}} \left[(1 - R_{0i}) \left(1 + \frac{R_{0i}}{\gamma_{bi} C_{0i}} \right) \right]^{-1}, \quad \alpha_{0i} \gg 1. \end{array} \right. \quad (7.19)$$

Тут $\sigma(0)$ — провідність двошарової полікристалічної плівки до дифузійного відпалювання і визначається формулами (3.1) та (2.16)–(2.19).

Одержаний загальний вираз (7.10) для провідності двошарової

плівки в умовах взаємної дифузії металів можна спростити, якщо вважати, що шар металу товщиною d_1 грає роль дифузанта. У цьому випадку провідність ДП буде знову визначатися формулою (7.10), у якій розмірні функції мають наступний вигляд:

$$\Phi_{b_1} = f(\alpha_{01}) - \langle G_{b_1} \rangle, \quad \Phi_{b_2}(t_D) = k_2^2 \left\langle \frac{G_{b_2}(t_D) H_{02}^2}{z^2 (1 - E_2)} \right\rangle, \quad (7.20)$$

а функції G_{bi} дорівнюють:

$$\begin{aligned} G_{b_1}(t_D) = & 2 - \frac{(1 - E_1)}{\Delta_b(t_D)} \left\{ q_1 (1 - q_2 P_{21} E_2^2 W_{b_2}^2(0)) + \right. \\ & + (1 + 2q_1 E_1) (P_{12} + q_2 (Q_{12} Q_{21} - P_{12} P_{21}) E_2^2 W_{b_2}^2(0)) + \\ & \left. + \frac{Q_{21} d_{2,1} k_1}{z (1 - E_1) H_{01}} (1 + q_1 E_1) (J_{02} + q_2 E_2 W_{b_2}(0) J_{d2}) \right\}, \quad (7.21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{b_2}(t_D) = & 2 J_2 + \frac{1}{\Delta_b(t_D)} \left\{ q_2 (1 - q_1 P_{12} E_1^2) J_{d2}^2 + \right. \\ & + J_{02} (J_{02} + 2q_2 E_2 W_{b_2}(0) J_{d2}) (P_{21} + q_1 (Q_{12} Q_{21} - P_{12} P_{21}) E_1^2) + \\ & \left. + \frac{z Q_{12} d_{1,2}}{k_2 H_{02}} (1 - E_1) (1 + q_1 E_1) (J_{02} + q_2 E_2 W_{b_2}(0) J_{d2}) \right\}, \quad (7.22) \end{aligned}$$

$$\Delta_b(t_D) = 1 - q_1 P_{12} E_1^2 - q_2 P_{21} E_2^2 W_{b_2}^2(0) - q_1 q_2 (Q_{12} Q_{21} - P_{12} P_{21}) E_1^2 E_2^2 W_{b_2}^2(0).$$

При виконанні нерівності $d_{1,2} < 10^{-2} - 10^{-3}$ провідністю шару металу товщиною d_1 можна знехтувати, і коефіцієнт електропровідності тонкого полікристалічного зразка, на одну з поверхонь якого нанесений ультратонкий шар домішок, дорівнює:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_2(t_D)}{\sigma_{02}} = \Phi_{b_2}(t_D) = k_2^2 \left\langle \frac{G_{b_2}(t_D) H_{02}^2}{z^2 (1 - E_2)} \right\rangle \equiv \\ \equiv \begin{cases} \left[1 - \frac{3}{2} \alpha_{02} \left[1 + \frac{1}{\beta_2 d_2 R_{02}} \ln \left(1 + \gamma_{b_2} C_{02} \frac{1 - \exp(-\beta_2 d_2)}{1 - (R_{02} + \gamma_{b_2} C_{02})} \right) \right] \right], & \alpha_{02} \ll 1; \\ \left[\frac{3}{4 \alpha_{02}} \left[1 + \frac{1}{\beta_2 d_2 (1 - R_{02})} \ln \left(1 - \gamma_{b_2} C_{02} \frac{1 - \exp(-\beta_2 d_2)}{R_{02} + \gamma_{b_2} C_{02}} \right) \right] \right], & \alpha_{02} \gg 1. \end{cases} \quad (7.23) \end{aligned}$$

Тут функцію $G_{b_2}(t_D)$ можна записати у наступнім вигляді:

$$G_2(t_D) = 2J_2 + \frac{q_1 J_{02}^2 + q_2 J_{d_2}^2 + 2q_1 q_2 E_2 W_{b_2}(0) J_{02} J_{d_2}}{1 - q_1 q_2 E_2^2 W_{b_2}(0)^2}. \quad (7.24)$$

Звідси ефективна глибина проникнення атомів домішок уздовж меж кристалітів β_2^{-1} дорівнює:

$$\beta_2^{-1} = d_2 \frac{\Delta\sigma_2}{\sigma_{02}} \begin{cases} \left| \frac{R_{02} \left(1 - \frac{1 - R_{02}}{\gamma_{b_2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{2} \alpha_{02}} \right|, & \alpha_{02} \ll 1; \\ \left| \frac{(1 - R_{02}) \left(1 + \frac{R_{02}}{\gamma_{b_2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{4\alpha_{02}}} \right|, & \alpha_{02} \gg 1. \end{cases} \quad (7.25)$$

Тут $\Delta\sigma_2 = \sigma_2(0) - \sigma_2(t_D)$ — зміна провідності полікристалічного шару металу в результаті дифузійного відпалювання, а провідність полікристалічної плівки до дифузійного відпалювання ($t_D = 0$) визначено формулою (2.37) [3, 57]. З іншого боку ефективну глибину проникнення атомів дифузанта уздовж меж зерен визначено формулою (7.9). Порівнюючи між собою вирази (7.9) та (7.25), можна одержати наступну формулу, яка дозволяє оцінити коефіцієнт зерномежової дифузії:

$$D_{b_2} = \left(\frac{4D_{t_2}}{\pi t_D \delta_2^2} \right)^{1/2} \left(\frac{d_2 \Delta\sigma_2}{\sigma_{02}} \right)^2 \begin{cases} \left(\frac{R_{02} \left(1 - \frac{1 - R_{02}}{\gamma_{b_2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{2} \alpha_{02}} \right)^2, & \alpha_{02} \ll 1; \\ \left(\frac{(1 - R_{02}) \left(1 + \frac{R_{02}}{\gamma_{b_2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{4\alpha_{02}}} \right)^2, & \alpha_{02} \gg 1. \end{cases} \quad (7.26)$$

У випадку, коли товщина шару металу d_2 є кінцевою для атомів домішок, які мігрують уздовж міжкристалітних меж ($d_2 \sim \beta_2^{-1}$), їх розподіл у межах зерен може бути описаний наступним виразом [47, 48, 58]:

$$C_{b_2}(x, t_D) = C_{02} \left\{ \frac{d_{1,2}}{1 + d_{1,2}} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n \pi d_{1,2}}{1 + d_{1,2}}\right) \cos\left(\frac{n \pi x}{d_2(1 + d_{1,2})}\right) \exp\left(-\frac{n^2 \pi^2}{d_2^2(1 + d_{1,2})^2} D_{b_2} t_D\right) \right\}, \quad (7.27)$$

а провідність тонкого полікристалічного шару металу може бути визначена формулою (7.23), у якій ймовірність $W_{b_2}(x)$ має наступний вигляд:

$$W_{b_2}(x) = \exp\left\{-\frac{k_2 A_2 C_{02}}{z} \frac{d_{1,2}}{1 + d_{1,2}} [1 - x + \frac{4}{\pi} (1 + d_{1,2}) \sin\frac{\pi(1-x)}{2(1+d_{1,2})} \cos\frac{\pi(1+x)}{2(1+d_{1,2})} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4(1+d_{1,2})^2} t_{b_2}\right)]\right\}. \quad (7.28)$$

Оскільки $d_{1,2} \ll 1$, то при записі правої частини виразу (7.28) було враховано, що $\sin\left(\frac{n \pi d_{1,2}}{1 + d_{1,2}}\right) \cong \frac{n \pi d_{1,2}}{1 + d_{1,2}}$ і при великому часі дифузійно-

го відпалювання експоненціальний множник у формулі (7.27) малий, внаслідок чого можна обмежитися лише першими двома доданками [58].

У цьому випадку ефективна глибина проникнення атомів домішок буде визначатися товщиною плівки, і коефіцієнт зерномежової дифузії може бути оцінений за наступною формулою [47, 48]:

$$D_{b_2} = \frac{d_2^2}{\pi^2 t_{D \min}} (1 + d_{1,2})^2, \quad (7.29)$$

де $t_{D \min}$ — мінімальний час дифузійного відпалювання, такий, що при $t_D > t_{D \min}$ провідність полікристалічного зразка практично не змінювалась [47, 48].

7.2. Аналіза провідності двошарового зразка за допомогою методи середньої концентрації

Зміну провідності двошарового полікристалічного зразка в процесі дифузійного відпалювання можна проаналізувати за допомогою більш простої методи середньої концентрації [59], у якій вважається, що домішки рівномірно розподілені у межах зерен і не залежать від координати, тобто

$$\bar{C}_{bi}(t_D) = \frac{1}{d_i} \int_0^{d_i} dx C_{bi}(x, t_D) = C_{0i} \sqrt[4]{t_{bi}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{1}{\sqrt[4]{t_{bi}}}\right) \right\}, \quad (7.30)$$

де величину t_{bi} визначено формулою (7.17).

Це спрощення дозволяє виконати інтегрування за координатою в (7.10) і показати, що провідність двошарової полікристалічної плівки визначається наступною формулою:

$$\bar{\sigma}(t_D) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \left\{ f(\bar{\alpha}_i) - \langle \bar{G}_{bi} \rangle \right\}. \quad (7.31)$$

У формулі (7.31) функції \bar{G}_{bi} і $f(\bar{\alpha}_i)$ визначено формулами (2.17) та (2.21), відповідно, в яких необхідно зробити наступну заміну

$$\alpha_{0i} \rightarrow \bar{\alpha}_i(t_D) = \alpha_{0i} \frac{1 + (\gamma_{bi} / R_{0i}) \bar{C}_{bi}(t_D)}{1 - (\gamma_{bi} / (1 - R_{0i})) \bar{C}_{bi}(t_D)}; \quad (7.32)$$

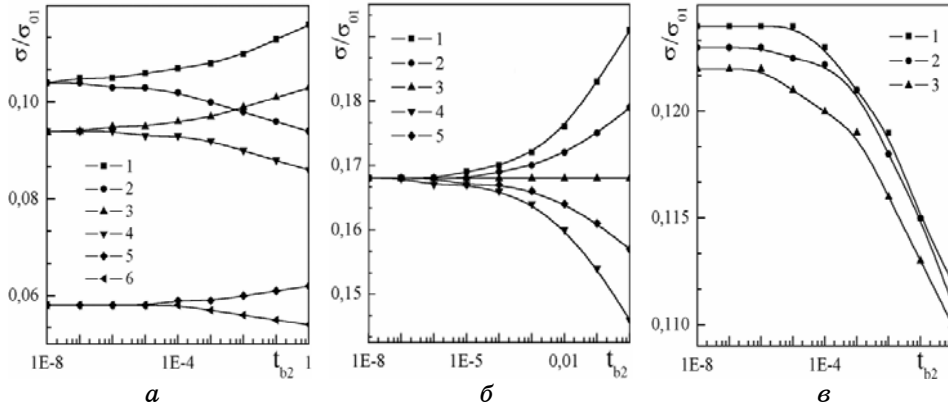


Рис. 7. Залежність провідності двошарової плівки з полікристалічною структурою від часу дифузійного відпалювання $t_{b2} = \frac{\pi \delta_i^2 D_{b2}^2}{4 d_2^4 D_{l2}} t_D$ при таких

значеннях параметрів, які характеризують зразок:

- а) $q_i = 0,1$; $P_{ij} = 0,3$; $Q_{ji} = 0,2$; $A_1 = 1300$; $A_2 = 1500$; $D_{l2,1} = 0,1$; $d_{1,2} = 0,1$; $k_2 = 0,1$; $l_{02,1} = 0,5$; $\alpha_{0i} = 3$; $R_{0i} = 0,5$; $C_{0i} = 0,1$: 1 — $k_2 = 10$, $\gamma_{bi} = -0,5$; 2 — $k_2 = 10$; $\gamma_{bi} = 0,5$; 3 — $k_2 = 1$; $\gamma_{bi} = -0,5$; 4 — $k_2 = 1$; $\gamma_{bi} = 0,5$; 5 — $k_2 = 0,1$; $\gamma_{bi} = -0,5$; 6 — $k_2 = 0,1$; $\gamma_{bi} = 0,5$;
- б) $q_i = 0,1$; $P_{ij} = 0,3$; $Q_{ji} = 0,2$; $A_1 = 1300$; $A_2 = 1500$; $D_{l2,1} = 0,1$; $d_{1,2} = 0,1$; $k_2 = 0,1$; $l_{02,1} = 0,5$; $\alpha_{0i} = 3$; $R_{0i} = 0,5$; $C_{0i} = 0,1$: 1 — $\gamma_{bi} = -1,0$; 2 — $\gamma_{bi} = -0,5$; 3 — $\gamma_{bi} = -0,0$; 4 — $\gamma_{bi} = 1,0$; 5 — $\gamma_{bi} = 1,0$;
- в) $q_i = 0,1$; $P_{ij} = 0,3$; $Q_{ji} = 0,2$; $A_1 = 1500$; $D_{l2,1} = 1$; $d_{1,2} = 0,1$; $k_2 = 1,0$; $l_{02,1} = 1,0$; $\gamma_{bi} = 0,5$; $\alpha_i = 5$; $R_{0i} = 0,5$; $C_{0i} = 0,1$: 1 — $d_{1,2} = 0,01$; 2 — $d_{1,2} = 0,1$; 3 — $d_{1,2} = 1,0$.

асимптотичні наближення розмірних функцій $\overline{\Phi}_{bi} = f(\overline{\alpha}_i) - \langle \overline{G}_{bi} \rangle$ визначено формулами (2.22)–(2.31), в яких також необхідно зробити заміну (7.32).

При довільній співвідношенні між величинами β_i^{-1} та d_i аналіза експериментальних даних може бути здійснена на основі чисельного розрахунку по формулі (7.10). На рисунку 7 наведено одержані чисельним розрахунком криві, що описують зміну провідності двошарової полікристалічної плівки в умовах взаємної зерномежової дифузії в залежності від часу дифузійного відпалювання при різних значеннях параметрів задачі.

8. ВИСНОВКИ

Таким чином, розмірні залежності транспортних коефіцієнтів двошарових полікристалічних плівок суттєво відрізняються від аналогічних залежностей для полікристалічних шарів металу. При малій товщині покриття базової плівки ($d_2/d_1 \ll 1$) його власний внесок у кінетичні коефіцієнти є незначним, однак абсолютна величина K_m відрізняється від свого значення для одношарової плівки внаслідок можливості розсіяння носіїв заряду не лише на зовнішній поверхні, а й на межі поділу шарів металу. Зі збільшенням товщини покриття ($d_2 \sim d_1$) нормована на повну товщину $d = d_1 + d_2$ величина K_m зменшується, оскільки при збільшенні d_2 одночасно збільшується відносне число електронів, які розсіюються на інтерфейсі (їх довжина вільного пробігу має порядок d_2). В інтервалі товщин $d_2 > d_1$ характер зміни коефіцієнтів K_m визначається чистотою плівки, яка осаджується на базову плівку товщиною d_1 . Якщо об'ємне значення відповідного транспортного коефіцієнта $K_m^{(0)}$ для плівки покриття є меншою за величину $K_m^{(0)}$ базового шару металу, то K_m монотонно зменшується, тобто $K_m \rightarrow K_m^{(0)}$ при $d_2 \rightarrow \infty$. При виконанні оберненої нерівності коефіцієнти K_m досягають мінімуму при товщинах шарів металу одного порядку ($d_2 \sim d_1$), і при подальшій зростанні товщини двошарової полікристалічної плівки кінетичні коефіцієнти монотонно збільшуються, асимптотично прямуючи до об'ємного значення $K_m^{(0)}$ для шару покриття.

При низькотемпературній відпалюванні двошарової полікристалічної плівки об'ємна дифузія є практично «замороженою», і міграція атомів у сусідні об'єми шарів металу відбувається в основному уздовж меж зерен, що призводить до зміни їх розсівних здатностей. Наявність домішок у межах зерен може, як збільшити (у випадку коли процес дифузії супроводжується утворенням твердих розчинів), так і зменшити (якщо атоми дифузанта викликають релаксацію пружних полів біля меж зерен) коефіцієнт розсіяння електронів міжкристалітними межами. Відповідно, дифузійне відпалювання полікристалічного зразка може призвести, як до збільшення його провід-

ности, так і до його зменшення. Вимірюючи коефіцієнт електропровідності ДП до і після дифузійного відпалювання, можна вивчити сам процес дифузії та оцінити коефіцієнт зерномежової дифузії. Якщо характерна глибина проникнення атомів домішок є порядку товщини плівки, то експериментальне визначення коефіцієнта зерномежової дифузії зводиться до визначення мінімального часу дифузійного відпалювання, такого, що при подальшій відпалюванні його провідні властивості практично не змінюються. При більшому часі відпалювання можна скористатися методом середньої концентрації. У цьому випадку відносно простий зв'язок між провідністю двошарового зразка та зерномежовим параметром також дозволяє оцінити коефіцієнт зерномежової дифузії.

Наведені в огляді результати теоретичних досліджень транспортних розмірних ефектів у двошаровій полікристалічній плівці та ефект впливу процесу взаємної дифузії на її провідні властивості можна використати для одержання інформації щодо взаємодії носіїв заряду з межею поділу та зовнішніми межами двошарової плівки, а також для аналізу транспортних ефектів у ДП та для оцінки коефіцієнта зерномежової дифузії. Враховуючи формальну відповідність між двошаровою плівкою та багатошаровою, розглянуті результати також можна застосувати для аналізу відповідних ефектів у мультишарі.

Роботу виконано при фінансовій підтримці Міністерства освіти і науки України в рамках проекту № М/148-2006 про науково-технічне співробітництво між Сумським державним університетом та Інститутом фізики Словацької академії наук (м. Братислава).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Ч. П. Пул, Ф. Дж. Оуэнс, *Нанотехнологии* (Москва: Техносфера: 2006).
2. І. Ю. Проценко, В. А. Наєнко, *Тонкі металеві плівки (технологія та властивості)* (Суми: СумДУ: 2002).
3. A. F. Mayadas and M. Shatzkes, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1382 (1970).
4. E. E. Mola and J. M. Heras, *Thin Solid Films*, **18**, No. 1: 137 (1973).
5. О. А. Білоус, Л. В. Дехтярук, А. М. Черноус, *Металлофиз. новейшие техн.*, **23**, № 1: 43 (2001).
6. О. А. Білоус, Л. В. Дехтярук, С. І. Проценко, А. М. Черноус, *Вісник СумДУ*, № 3(24)–4(25): 67 (2001).
7. C. R. Tellier, *Thin Solid Films*, **51**, No. 4: 311 (1978).
8. C. R. Pichard, A. J. Tosser, and C. R. Tellier, *J. Matter. Sci.*, **16**, No. 2: 451 (1981).
9. C. R. Tellier, C. R. Pichard, and A. J. Tosser, *Thin Solid Films*, **76**, No. 2: 129 (1981).
10. C. R. Pichard, C. R. Tellier, and A. J. Tosser, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **65**, No.1: 327 (1981).
11. C. R. Tellier and A. J. Tosser, *Size Effects in Thin Films* (Amsterdam–Oxford–

- New York: ESPC: 1982).
12. Б. И. Белевцев, Ю. Ф. Комник, В. Е. Копина, Л. А. Яцук, *ФНТ*, **6**, № 6: 754 (1980).
 13. В. Б. Лобода, И. Е. Проценко, В. Г. Шамомя, *УФЖ*, **27**, № 9: 1343 (1982).
 14. И. Е. Проценко, М. Д. Смолин, В. Г. Шамомя, А. В. Яременко, *УФЖ*, **29**, № 6: 920 (1984).
 15. В. И. Верченко, В. И. Гришаев, Л. В. Дехтярук, Ю. А. Колесниченко, Т. Д. Шермергор, *ФММ*, **69**, вып. 4: 102 (1990).
 16. И. Е. Проценко, *Изв. вузов. Физ.*, № 6: 42 (1988).
 17. Ю. А. Волков, Р. П. Волкова, *ФТТ*, **37**, вып. 12: 3687 (1995).
 18. L. V. Dekhtyaruk, S. I. Protchenko, A. M. Chornous, and I. O. Shpetnyi, *Ukr. J. Phys.*, **49**, No. 6: 587 (2004).
 19. A. Chornous, L. Dekhtyaruk, M. Marszalek, and I. Protchenko, *Cryst. Res. Technol.*, **41**, No. 4: 388 (2006).
 20. Л. В. Дехтярук, С. В. Забіла, С. І. Проценко, А. М. Черноус, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 10: 1333 (2004).
 21. З. В. Стасюк, А. І. Лопатинський, *ФХТТ*, **2**, № 4: 521 (2001).
 22. R. Dimmich, *Thin Solid Films*, **158**, No. 1: 13 (1988).
 23. В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, *Физика полупроводников* (Москва: Наука: 1990).
 24. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов* (Москва: Наука: 1971).
 25. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов* (Москва: Наука: 1987).
 26. В. Г. Песчанский, М. Я. Азбель, *ЖЭТФ*, **55**, вып. 5(11): 1980 (1968).
 27. М. И. Каганов, В. Б. Фикс, *ЖЭТФ*, **73**, вып. 2(8): 753 (1977).
 28. В. В. Устинов, *ФММ*, **49**, вып. 1: 31 (1980).
 29. K. Fuchs, *Cambr. Phil. Soc.*, **A34**, No. 1: 100 (1938).
 30. M. S. P. Lucas, *J. Appl. Phys.*, **36**, No. 5: 1632 (1965).
 31. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела* (Москва: Мир: 1974).
 32. К. Л. Чопра, *Электрические явления в тонких пленках* (Москва: Мир: 1972).
 33. V. Rippard, *Proc. Roy. Soc.*, **224**, No. 1157: 273 (1954).
 34. Л. В. Дехтярук, Ю. А. Колесниченко, *ФНТ*, **19**, № 9: 1013 (1993).
 35. Л. В. Дехтярук, Ю. О. Колесниченко, *УФЖ*, **42**, № 9: 1094 (1997).
 36. Л. В. Дехтярук, И. Е. Проценко, *ФХТТ*, **6**, № 4: 576 (2005).
 37. Л. В. Дехтярук, И. Е. Проценко, *Вісник СумДУ*, № 10: 54 (2004).
 38. F. Khater, *Acta Phys. Slov.*, **33**, No. 1: 43 (1983).
 39. Л. В. Дехтярук, М. Маршалек, И. Е. Проценко, А. Н. Черноус, *Физ. инж. поверхн.*, **2**, № 1: 130 (2004).
 40. Н. П. Клокова, *Тензорезисторы* (Москва: Машиностроение: 1990).
 41. З. Г. Мейксин, *Физика тонких пленок* (Москва: Мир: 1978), т. VIII.
 42. І. Ю. Проценко, *Технологія та фізика тонких плівок* (Суми: СумДУ: 2000).
 43. І. Ю. Проценко, Н. І. Чумакова, *Датчики неелектричних величин* (Суми: СумДУ: 2003).
 44. Л. В. Дехтярук, І. Ю. Проценко, *Вісник СумДУ*, № 6(90): 85 (2006).
 45. С. В. Дивинский, С. М. Захаров, О. А. Шматко, *УФМ*, **7**, № 1: 1 (2006).
 46. Р. П. Волкова, Л. С. Палатник, А. Т. Пугачев, *Докл. АН СССР*, **259**, № 2: 351 (1981).
 47. Р. П. Волкова, Л. С. Палатник, А. Т. Пугачев, *ФТТ*, **24**, вып. 4: 1161 (1982).
 48. Ю. А. Волков, Р. П. Волкова, А. Т. Пугачев, *ФММ*, **62**, вып. 2: 298 (1986).

49. Р. П. Волкова, Ю. А. Волков, *Металлофиз. новейшие технол.*, **25**, № 2: 227 (2003).
50. Л. В. Дехтярук, Ю. А. Колесниченко, *ФММ*, **75**, вып. 5: 21 (1993).
51. L. V. Dekhtyaruik, Yu. A. Kolesnichenko, and V. G. Peschansky, *Physics Reviews*, **20**, No. 4: 3 (2004).
52. Л. В. Дехтярук, И. М. Пазуха, С. И. Проценко, И. В. Чешко, *ФТТ*, **48**, вып.10: 1729 (2006).
53. J. C. M. Hwang and R. W. Balluffi, *J. Appl. Phys.*, **50**, No. 3(1): 1339 (1979).
54. J. W. Chan, J. D. Pan, and R. W. Balluffi, *Scripta Met.*, **13**, No. 6: 503 (1979).
55. J. C. Fisher, *J. Appl. Phys.*, **22**, No. 1: 74 (1951).
56. С. М. Клоцман, *УФН*, **160**, № 1: 99 (1991).
57. M. Ghodgaonkar and K. Ramani, *Phys. Stat. Sol. A*, **73**, No. 1: K21 (1982).
58. А. И. Райченко *Математическая теория диффузии в приложениях* (Киев: Наукова думка: 1981).
59. *Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции* (Ред. Дж. Поут, К. Ту, Дж. Мейер) (Москва: Мир: 1982).