Письма в ЖТФ, том 22, вып. 1 12 января 1996 г.

01;06

АНИЗОТРОПИЯ ПРОВОДИМОСТИ И СООТНОШЕНИЯ ВЗАИМНОСТИ ДВУХФАЗНЫХ ПЛЕНОК С РЕГУЛЯРНОЙ СТРУКТУРОЙ

© *И. Н. Сачков, Е. А. Митюшов*

Гетерофазные тонкие пленки, используемые в микроэлектронике, зачастую обладают матричной структурой, особенности геометрии которой приводят к анизотропии физических свойств, в частности электропроводности, подобных материалов [1]. Установление значений главных компонент тензора проводимости с учетом параметров, характеризующих форму включений и их взаимное положение, представляет достаточно сложную задачу из-за необходимости корректного учета взаимного влияния компонент среды на процессы переноса в ней [2].

Решение обсуждаемой задачи традиционно осуществляется на основе ряда аналитических подходов, позволяющих получить точные значения компонент тензора эффективной проводимости лишь для некоторых характерных ситуаций (нулевая проводимость включений, малая их концентрация) [1,2].

В настоящей работе предлагается новый подход к исследованию анизотропии проводимости гетерогенных систем, основанный на использовании метода конечных элементов и вариационного принципа. Новый подход позволяет резко расширить круг исследуемых особенностей процессов переноса, учитывать разнообразие геометрии реальных систем.

Ряд реальных анизотропных двумерных систем можно рассматривать как матричные структуры с регулярно расположенными включениями прямоугольной, ромбической, эллиптической и круглой форм [1,2]. В настоящей работе будем полагать, что геометрические центры включений образуют прямоугольную решетку. Схемы рассматриваемых структур представлены на рис. 1. Считаем, что проводимости компонент гетерогенной среды изотропны и постоянны. Таким образом, анизотропия эффективной проводимости обсуждаемых систем обусловлена как формой включений, так и их взаимным расположением.

При расчете компонент тензора эффективных проводимостей рассматриваемых структур используем предложенный в работе [3] подход, основанный на использовании ва-

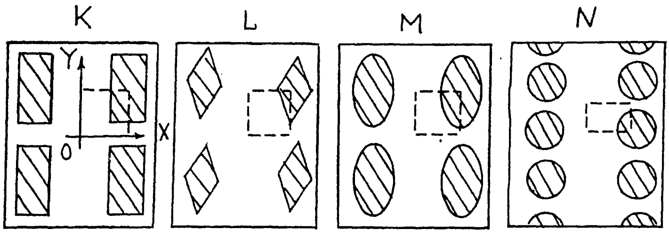

Рис. 1. Схемы обсуждаемых анизотропных структур.

риационной формулировки уравнений переноса и метода конечных элементов. Выделим прямоугольные элементарные ячейки, границы которых проходят по линиям зеркальной симметрии обсуждаемых регулярных структур. Используем ячейки минимального размера, изображенные на рис. 1 штриховыми линиями.

Выберем в качестве начала отсчета декартовой системы координат $(X;Y)$ одну из вершин ячейки, направив оси вдоль ее сторон. При этом X и Y являются также и главными осями тензора эффективных коэффициентов переноса, а размеры ячейки равны Y_0 и X_0. Ее проводимость σ_{yy} при распространении потока вдоль направления Y установим с помощью следующих соотношений:

$$\sigma_{yy} = \langle j \rangle / \langle f \rangle,$$

$$\langle j \rangle = \int_{S_c} \sigma(\partial\varphi/\partial Y) dS, \tag{1}$$

$$\langle f \rangle = \int_{S_c} (\partial\varphi/\partial Y) dS,$$

здесь φ — потенциал, S_c — площадь элементарной ячейки.

Для установления φ (X, Y) используем вариационный подход [4], согласно которому в процессах переноса экстремален функционал

$$\chi = \int_{S_c} \sigma(\mathrm{grad}\varphi)^2 dS, \tag{2}$$

где σ — локальный изотропный коэффициент переноса.

Нахождение функции φ, минимизирующей величину χ, осуществим методом конечных элементов [5] с дисретизацией двумерного пространства S_c треугольными симплекс-элементами. При этом $\varphi(X, Y)$ аппроксимируется в пределах области S_c непрерывной кусочно-линейной функцией, параметры которой однозначно заданы совокупностью узловых значений $\{\varphi_j\}$. Алгоритм отыскания φ_j описан в работах [3,5–7]. Далее, используя аппроксимированные значения потенциала, нетрудно рассчитать σ_{yy}. Подобным же образом устанавливается и σ_{xx}.

Компьютерный эксперимент по определению зависимостей эффективных проводимостей обсуждаемых матричных структур от параметров, характеризующих форму включений, величин проводимостей фаз и их концентраций, осуществлялся в настоящей работе с помощью ЭВМ серии IBM PC. При этом использовались сетки плотностью 50×100 разбиений, адаптированные к форме включений. Относительная погрешность определения величины проводимости, оцененная по методике, описанной в [3], не превышала 1%.

Анализ результатов расчетов приводит к выводу, что в рассматриваемых условиях при $\sigma_m > \sigma_i$ значения σ_{yy} слабо зависят от формы включений, а σ_{xx} — сильно. Если же $\sigma_m < \sigma_i$, то резко меняется поперечная и слабо — продольная проводимости систем. На рис. 2 представлены зависимости продольной σ_{yy} и поперечной σ_{xx} проводимостей от геометрического параметра A/B. Для структур K, L и M величина A/B равна отношениям либо сторон прямоугольного включения, либо диагоналей ромба, либо осей эллипса, а для N — отношению размеров ячейки Y_0/X_0. При расчете приведенных на рис. 2 данных полагали, что концентрация включений равна 0.1, а центры включений в структурах K, L и M образуют квадратную решетку.

Линии K, L, M и N на рис. 2 представляют значения σ_{xx} для структур, изображенных на рис. 1, кривая Y — значения σ_{yy} при $\sigma_m = 1$, $\sigma_i = 0.01$. Линии k, l, m и n описывают зависимости продольных, а X — поперечных эффективных проводимостей тех же систем при $\sigma_m = 0.01$, $\sigma_i = 1$.

Систематизируя результаты проведенных в настоящей работе расчетов, можно также прийти к выводу, что для обсуждаемых регулярных анизотропных структур значения **главных** компонентов тензора эффективной проводимости связаны соотношениями взаимности Дыхне–Балагурова, установленными в [8,9] для статистических систем:

$$\sigma_{yy}\sigma^*_{xx} = \sigma_m\sigma_i, \tag{3}$$

$$\sigma_{xx}\sigma^*_{yy} = \sigma_m\sigma_i,$$

где операция $*$ означает преобразование структур путем циклической замены проводимостей фаз σ_m и σ_i. Из (3), в частности, следует, что для двумерных гетерогенных систем с равными содержаниями компонент их эффективная проводимость в произвольном направлении, задаваемом углом α

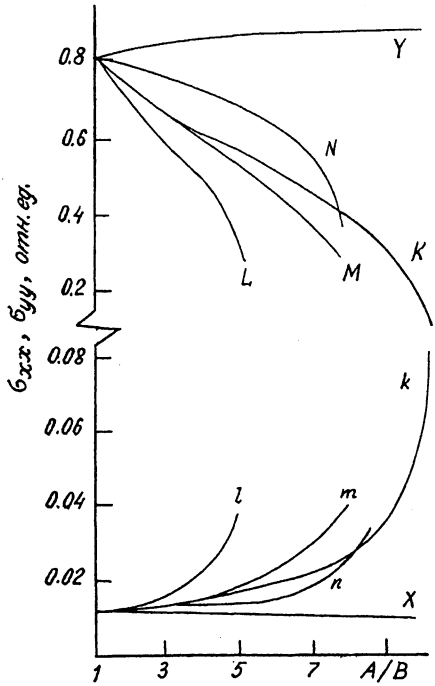

Рис. 2. Зависимости от геометрического фактора A/B значений поперечных σ_{xx} и продольных σ_{yy} эффективных коэффициентов переноса структур, изображенных на рис. 1.

относительно оси y, определяется выражением

$$\sigma(\alpha) = \sigma_{yy} + \left((\sigma_m \sigma_i - \sigma_{yy}^2)/\sigma_{yy}\right) \sin^2 \alpha \tag{4}$$

и анизотропия коэффициентов переноса подобной структуры оказывается известной, если измерено одно его значение σ_{yy}.

В заключение следует отметить высокую эффективность подхода, основанного на методе конечных элементов. Он представляется перспективным и для дальнейших исследований влияния разнообразных геометрических факторов строения проводящей среды на микро- и макрокинетику анизотропных гетерогенных систем. В частности, значительный интерес представляет анализ с его помощью особенностей пространственных распределений плотности тока, джоулева тепла и напряженности поля в композиционных и многофазных материалах микроэлектроники, зачастую обусловливающих деградационные процессы в них.

Список литературы

[1] *Митюшов Е.А., Гельд П.В., Адамеску Р.А.* Обобщенная проводимость и упругость микрооднородных гетерогенных материалов. М.: Металлургия, 1992. 145 с.

[2] *Емец Ю.П.* Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой. Киев: Наук, думка, 1986. 192 с.

[3] *Гельд П.В., Сачков И.Н., Гофман А.Г.* // ДАН. 1990. Т. 325. № 3. С. 694–697.

[4] *Михлиин С.Г.* Вариационные методы в математической физике. М.: Наука, 1970. 512 с.

[5] *Сегерлинд Л.* Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979. 392 с.

[6] *Сачков И.Н., Гельд П.В.* // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. В. 20. С. 16–19.

[7] *Гельд П.В., Сачков И.Н.* // Неорг. матер. 1994. Т. 30. № 3. С. 306–313.

[8] *Дыхне А.М.* // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. В. 1. С. 110–115.

[9] *Балагурова Б.Я.* // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. В. 4. С. 1561–1571.

Уральский политехнический
институт
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
27 июля 1995 г.