Журнал технической физики, 2016, том 86, вып. 10

01

Распределение электрического тока в тонком металлическом слое при различных коэффициентах зеркальности на поверхностях

© А.И. Уткин, А.А. Юшканов

Московский государственный областной университет,
105005 Москва, Россия
e-mail: aiutkin@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 27 апреля 2015 г. В окончательной редакции 1 марта 2016 г.)

Выполнен расчет распределения электрического тока в тонком металлическом слое с учетом различных коэффициентов зеркальности его поверхностей. Проанализирована зависимость функции проводимости от расстояния до нижней поверхности слоя. Использовалось кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации электронов.

Введение

В настоящее время микроэлектроника, оптоэлектроника и тонкопленочные технологии активно развиваются. Это связано прежде всего с важным прикладным значением тонких, в том числе поликристаллических и металлических, пленок [1–5]. Разумное применение тонких пленок в микро- и оптоэлектронике позволит последним перейти на качественно новый уровень своего развития. Например, тонкие пленки могут использоваться в качестве проводящих, светоотражающих, защитных покрытий. Поэтому к качеству, параметрам и свойствам тонких [6–9] пленок предъявляются довольно высокие требования.

На данном этапе развития тонкопленочных технологий наибольший интерес представляет исследование электромагнитных свойств тонких пленок в различных диапазонах частот [10,11].

Отметим, что в последнее время возрос интерес к учету влияния различных коэффициентов зеркальности на поверхностях пленки на их электрофизические свойства [12,13]. В этих работах рассмотрение было ограничено статическим случаем.

Настоящая работа является продолжением [14]. В этой работе была проанализирована зависимость функции проводимости Σ от частоты внешнего поля и от частоты объемных столкновений электронов с учетом различных коэффициентов зеркальности q_1 и q_2 поверхностей тонкого металлического слоя. Результаты настоящей работы имели хорошее согласование с экспериментальными данными работы [15]. Однако не был рассмотрен важный случай зависимости локальной электрической проводимости от пространственной координаты z — как локальная проводимость меняется в зависимости от расстояния до поверхности тонкого слоя.

Укажем, что в нашем случае толщина тонкой металлической пленки a не превышает толщины скин-слоя δ и сравнима со средней длиной свободного пробега электронов Λ. Для типичных металлов минимальная толщина скин-слоя $\delta \sim 100\,\mathrm{nm}$ [16]. Поэтому скин-эффект не учитывается и данная задача допускает аналитическое решение для произвольных граничных условий. Не учитываются также и квантовые эффекты, поскольку толщина пленки много больше длины волны де Бройля, которая в типичных металлах составляет величину порядка межатомного расстояния. Попытка их учета была предпринята в работе [17] для случая квантовой пленки в диэлектрическом окружении.

Постановка задачи

Рассмотрим тонкий проводящий слой толщиной a и коэффициентами зеркальности верхней q_1 и нижней q_2 поверхностей слоя в случае однородного периодического по времени электрического поля $\mathbf{E}$. Электрическое поле параллельно проводящему слою и направлено вдоль координатной оси X, координатная ось Z направлена вверх, вглубь тонкого слоя.

Однородное периодическое по времени поле меняется по закону

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t).$$

Здесь ω — частота переменного электрического напряжения, приложенного к проводящему слою.

Скин-эффект не учитывается. Учет скин-эффекта был рассмотрен в работе [18] в случае тонкой цилиндрической проволоки.

Уточним: когда толщина пленки много больше длины свободного пробега электронов $(a \gg \Lambda)$, для решения данной задачи можно воспользоваться макроскопической электродинамикой, применив локальный закон Ома:

$$\mathbf{j} = \Sigma(\omega)\mathbf{E}.$$

Здесь $\Sigma(\omega)$ — проводимость Друде, $\mathbf{j}$ — плотность электрического тока.

В случае же, когда толщина пленки сравнима с длиной свободного пробега электронов или меньше ее $(a \le \Lambda)$, макроскопическая электродинамика становится неприменимой, и для решения задачи необходимо применять методы физической кинетики, что мы и делаем в настоящей работе.

Локальная проводимость

Для получения выражения для локальной электрической проводимости воспользуемся кинетическим уравнением Больцмана в приближении времени релаксации электронов [19]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{eE}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \gamma_x} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \tag{1}$$

$$f_0(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\big((\varepsilon - \mu)/kT\big) + 1}.$$

Здесь $f_0(\varepsilon)$, f, e, m, v_z, v_x, τ и μ — соответственно функция Ферми–Дирака, функция распределения электронов при наличии внешнего электрического поля, заряд электрона, эффективная масса электрона, проекции скорости электронов проводимости, электронное время релаксации и химический потенциал.

Для функции $f_0(\varepsilon)$ используется ступенчатая аппроксимация

$$f_0 = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = \begin{cases} 1, & 0 \le \varepsilon \le \varepsilon_F, \\ 0, & \varepsilon_F < \varepsilon. \end{cases}$$

Здесь $\varepsilon_F = mv^2/2$ — энергия Ферми, v_F — скорость Ферми. Величина среднего свободного пробега электронов Λ и электронное время релаксации τ связаны соотношением $\Lambda = v_F \tau$.

Также для энергии ε и $f_0(\varepsilon)$ имеем

$$\varepsilon = \frac{mv^2}{2},$$

$$f_0 = \eta(\varepsilon_F - \varepsilon),$$

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_x} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial v_x} = -\delta(\varepsilon_F - \varepsilon) m v_x.$$

Здесь δ — дельта-функция Дирака.

Линеаризируем уравнение (1) по полю $\mathbf{E}$ и по малым отклонениям $f_1(z, \mathbf{v})$ от равновесной функции распределения электронов Ферми–Дирака $f_0(\varepsilon)$:

$$f(z, \mathbf{v}) = f_0(\varepsilon) + f_1(z, \mathbf{v}).$$

Здесь $f_1(z, \mathbf{v})$ — малое отклонение от $f_0(\varepsilon)$; $f(z, \mathbf{v})$ — функция распределения электронов по скоростям при наличии внешнего электрического поля. Тогда уравнение Больцмана в приближении времени релаксации электронов будет иметь вид

$$v_z \frac{\partial f_1}{\partial z} + \frac{eE}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} - i\omega f_1 = -\frac{f_1}{\tau}. \tag{2}$$

Общее решение (2) имеет вид

$$f_1(z, \mathbf{v}) = \frac{e\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 + \varphi(\mathbf{v}) \exp\left(-\frac{z}{v_z} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) \right) \right\}.$$

Функция $\varphi(\mathbf{v})$ определяется из вида граничных условий на поверхностях металлического слоя. Таким образом, для однозначного определения функции f_1 необходимо задать граничные условия в случае тонкого металлического слоя. В качестве граничных условий на поверхностях слоя будем рассматривать зеркально-диффузные граничные условия [19,20]. Учитывая, что коэффициенты зеркальности поверхностей q_1 и q_2 различны, граничные условия принимают вид

$$f_1(v_z, z = a) = q_1 f_1(-v_z, z = a), \quad v_z > 0,$$

$$f_1(v_z, z = 0) = q_2 f_1(-v_z, z = a), \quad v_z < 0.$$

Функция $f_1(z, \mathbf{v})$ распадается на две функции: f_1^+ — для электронов, движущихся в направлении оси Z ($v_z > 0$), и f_1^- — для всех электронов, движущихся в противоположном направлении оси Z ($v_z < 0$):

$$\begin{cases} f_1^+(z, \mathbf{v}) = \dfrac{e\tau E}{m} \dfrac{\partial f_0}{\partial v_x} \\ \quad \times \left\{ 1 + \varphi^+(\mathbf{v}) \exp\left(-\dfrac{z}{v_z} \left(\dfrac{1}{\tau} - i\omega \right) \right) \right\}, & v_z > 0, \\ f_1^-(z, \mathbf{v}) = \dfrac{e\tau E}{m} \dfrac{\partial f_0}{\partial v_x} \\ \quad \times \left\{ 1 + \varphi^-(\mathbf{v}) \exp\left(\dfrac{a - z}{v_z} \left(\dfrac{1}{\tau} - i\omega \right) \right) \right\}, & v_z < 0, \end{cases} \tag{3}$$

Для удобства введем обозначения

$$\Omega = \frac{a}{v_F} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) = x - iy,$$

$$A = \frac{e\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x}.$$

Теперь необходимо найти вид функций $\varphi^+(\mathbf{v})$ и $\varphi^-(\mathbf{v})$, которые связаны с движением электронов в направлении оси Z и в противоположном направлении оси Z:

$$z = 0, \quad f^+ = q_1 f_1^-(-v_z),$$

$$z = a, \quad f^- = q_2 f_2^+(-v_z).$$

Тогда

$$\begin{cases} 1 + \varphi^+(v_z) = q_1\big(1 + \varphi^-(-v_z) \exp(-\Omega)\big), \\ 1 + \varphi^-(v_z) = q_2\big(1 + \varphi^+(-v_z) \exp(-\Omega)\big). \end{cases} \tag{4}$$

Из выражения (4) находим

$$\varphi^+(v_z) = \frac{q_1\big(1 + q_2 \exp(-\Omega)\big) - \big(1 + q_1 \exp(-\Omega)\big)}{1 - q_1 q_2 \exp(-2\Omega)},$$

$$\varphi^-(v_z) = \frac{q_2\big(1 + q_1 \exp(-\Omega)\big) - \big(1 + q_2 \exp(-\Omega)\big)}{1 - q_1 q_2 \exp(-2\Omega)}.$$

Тогда выражение (3) примет вид

$$\begin{cases} f_1^+(z,\mathbf{v}) = A\left\{1 + \dfrac{\substack{q_1\left(1+q_2\exp(-\Omega)\right)- \\ -\left(1+q_1\exp(-\Omega)\right)}}{1-q_1q_2\exp(-2\Omega a)}\right. \\ \qquad\qquad \left.\times\exp(-\Omega z)\right\}, \qquad v_z > 0 \\ f_1^-(z,\mathbf{v}) = A\left\{1 + \dfrac{\substack{q_2\left(1+q_1\exp(-\Omega)\right)- \\ -\left(1+q_2\exp(-\Omega)\right)}}{1-q_1q_2\exp(-2\Omega a)}\right. \\ \qquad\qquad \left.\times\exp\left(-\Omega\left(1-\dfrac{z}{a}\right)\right)\right\}, \qquad v_z < 0 \end{cases}$$

Локальная электрическая проводимость σ, плотность электрического тока $\mathbf{j}$ и электрическое поле $\mathbf{E}$ связаны соотношениями

$$\mathbf{j} = 2e\left(\frac{m}{h}\right)^3 \int \mathbf{v} f_1 d\mathbf{v},$$

$$n = 2\left(\frac{m}{h}\right)^3 \int f_0 d^3v = 2\left(\frac{m}{h}\right)^3 \frac{4}{3}\pi v_F^3,$$

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}.$$

Здесь e, h и n — соответственно заряд электрона, постоянная Планка и концентрация электронов проводимости.

Для нахождения плотности тока $j(z)$ перейдем в сферическую систему координат (v, Θ, Φ) в пространстве скоростей ($\mathbf{v}$-пространство), учитывая, что функция f_0 зависит только от v:

$$j(z) = \frac{2e^2m^2E}{h^3} \int\limits_0^\infty dv \int\limits_0^{2\pi} d\phi\tau v^3 \cos^2(\Phi) \frac{\partial f_0}{\partial v}$$

$$\times \left[\int\limits_0^{2\pi} \sin^3(\theta) \times \Big(1 + \varphi^+(v_z)\exp\big(-\Omega z/\cos(\theta)\big)\Big) d\theta\right.$$

$$\left. + \int\limits_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \sin^3(\theta)\Big(1+\varphi^-(v_z)\exp\big(\Omega(1-z/a)\cos(\theta)\big)\Big) d\theta\right]. \tag{5}$$

Здесь h — постоянная Планка, m — эффективная масса электрона, e — заряд электрона, $\mathbf{E}$ — электрическое поле; $v_z = \mathbf{v}\cos(\Theta) = v_F \cdot \cos(\Theta)$.

Преобразовав выражение (5), можно получить аналитическое выражение для локальной электрической проводимости слоя как функции безразмерной комплексной частоты рассеяния электронов Ω с коэффициентами зеркальности верхней q_1 и нижней q_2 поверхностей, а также безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ:

$$\sigma = \frac{3ne^2a}{4mv_F\Omega} \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3\theta$$

$$\times \left[2 + \frac{q_1\big(1-\exp(-\Omega/\cos\theta) + q_2\exp(-\Omega/\cos\theta)\big) - 1}{1 - q_1q_2\exp(-2\Omega/\cos\theta)}\right.$$

$$\times \exp(-\Omega\xi/\cos\theta)$$

$$+ \frac{q_2\big(1-\exp(-\Omega/\cos\theta) + q_1\exp(-\Omega/\cos\theta)\big) - 1}{1 - q_1q_2\exp(-2\Omega/\cos\theta)}$$

$$\left.\times \exp\big(-\Omega(1-\xi)/\cos\theta\big)\right] d\theta. \tag{6}$$

Здесь $\xi = z/a$, n — концентрация электронов проводимости.

Сделаем подстановку вида $t = \cos(\theta)$ и ведем дополнительные обозначения

$$\lambda = \frac{1}{1 - i\omega\tau} = \frac{x}{x - iy}.$$

Тогда (6) будет иметь вид

$$\Sigma = \frac{3}{4}\lambda \int\limits_0^1 (t - t^2)$$

$$\times \left[2 + \left[\frac{q_1\Big(1 - \exp\big(-(x-iy)/t\big) q_2 \exp\big(-(x-iy)/t\big)\Big) - 1}{1 - q_1q_2\exp\big(-2(x-iy)/t\big)}\right.\right.$$

$$\times \exp\big(-(x-iy)\xi/t\big)$$

$$+ \frac{q_2\Big(1 - \exp\big(-(x-iy)/t\big) q_1 \exp\big(-(x-iy)/t\big)\Big) - 1}{1 - q_1q_2\exp\big(-2(x-iy)/t\big)}$$

$$\left.\left.\times \exp\big(-(x-iy)(1-\xi)/t\big)\right]\right] dt, \tag{7}$$

$$\sigma = \frac{ne\tau^2}{m} a\Sigma = \sigma_0 a\Sigma.$$

Здесь $x = a/(v_F\tau)$ — безразмерная частота объемных столкновений электронов, $y = a\omega/v_F$ — безразмерная частота электрического поля, n — концентрация электронов проводимости, m — эффективная масса электрона.

Проанализируем выражение (7) и рассмотрим случай толстой пленки, когда ее толщина a много больше длины свободного пробега электронов Λ.

При $a \gg \Lambda$, $\Lambda/a \to 0$. Тогда выражение (7) примет вид

$$\sigma = a\sigma_0 \frac{1}{1 - i\omega\tau}.$$

Таким образом, мы получили классический результат для проводимости толстой пленки.

Обсуждение результатов

Рассмотрим зависимость действительной части функции Σ от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ. Уточним, что в статическом случае $(y = 0)$ проводимость — величина действительная.

Из рисунков 1, 3 и 5 видно, что проводимость тонкого металлического слоя с увеличением расстояния до нижней поверхности этого слоя начинает увеличиваться и достигать своего максимума, однако далее проводимость тонкого слоя начинает уменьшаться, а варьирование коэффициентов зеркальности q_1 и q_2 тонкого слоя оказывает существенное влияние на его проводимость.

Исходя из рисунков 2 и 4 стоит отметить, что проводимость тонкого металлического слоя с увеличением расстояния до нижней поверхности этого слоя сразу начинает уменьшаться. В этом случае также варьирование коэффициентов зеркальности тонкого слоя оказывает существенное влияние на его проводимость.

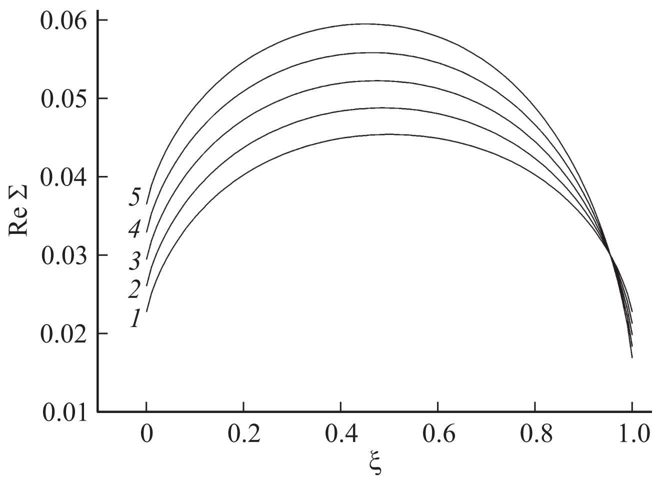

Рис. 1. Зависимость действительной части функции проводимости Σ от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ. *1* отвечает значениям: $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.5$; *2* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.4$; *3* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.3$; *4* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.2$; *5* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.1$.

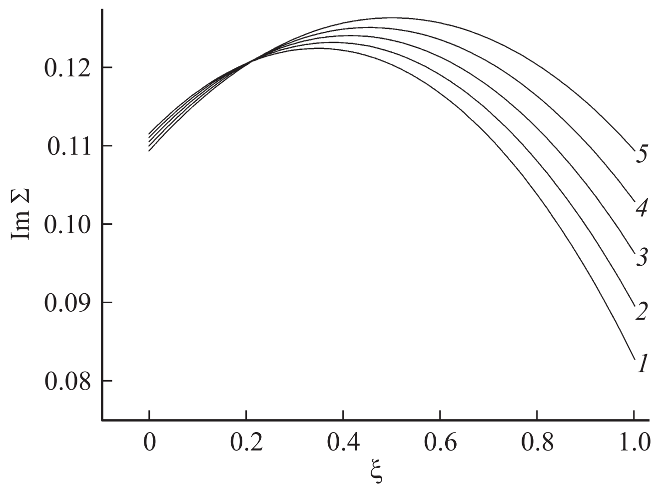

Рис. 3. Зависимость мнимой части функции проводимости Σ от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ. *1* отвечает значениям: $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.5$; *2* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.4$; *3* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.3$; *4* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.2$; *5* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 0.5$, $q_2 = 0.1$.

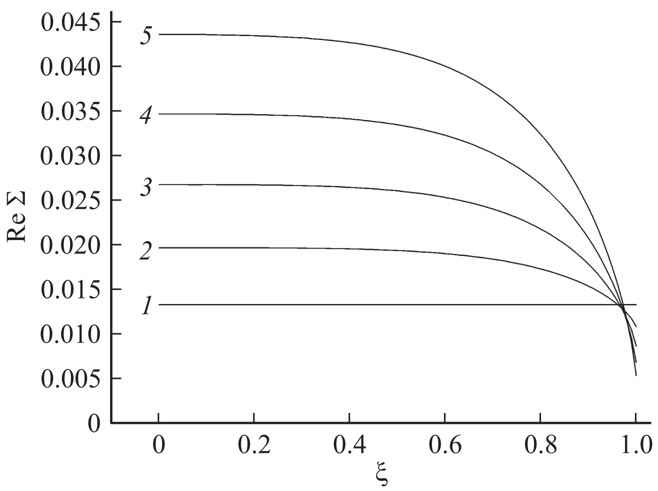

Рис. 2. Зависимость действительной части функции проводимости Σ от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ. *1* отвечает значениям: $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 1$; *2* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.8$; *3* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.6$; *4* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.4$; *5* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.2$.

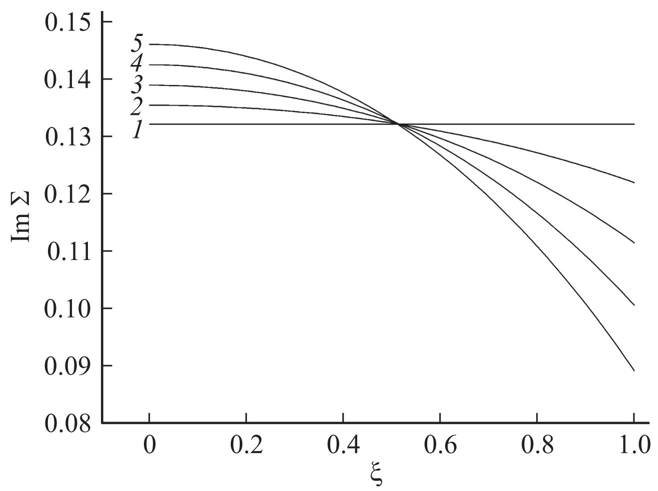

Рис. 4. Зависимость мнимой части функции проводимости Σ от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ. *1* отвечает значениям: $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 1$; *2* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.8$; *3* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.6$; *4* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.4$; *5* — $x = 0.1$, $y = 1$, $q_1 = 1$, $q_2 = 0.2$.

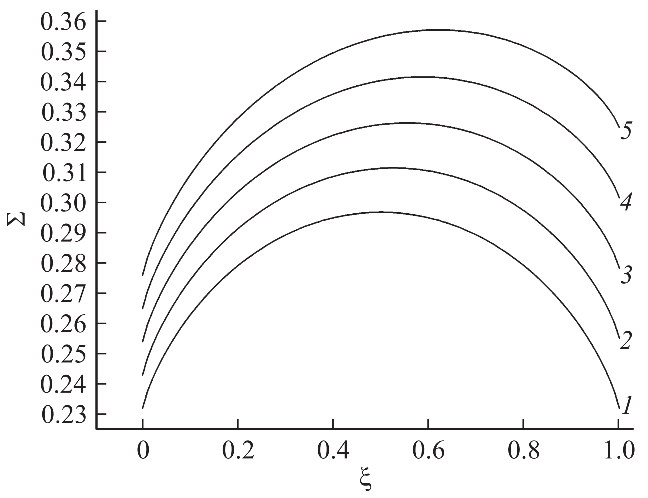

Рис. 5. Зависимость функции проводимости Σ от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ. *1* отвечает значениям: $x = 0.1$, $y = 0$, $q_1 = 0$, $q_2 = 0$; *2* — $x = 0.1$, $y = 0$, $q_1 = 0$, $q_2 = 0.1$; *3* — $x = 0.1$, $y = 0$, $q_1 = 0$, $q_2 = 0.2$; *4* — $x = 0.1$, $y = 0$, $q_1 = 0$, $q_2 = 0.3$; *5* — $x = 0.1$, $y = 0$, $q_1 = 0$, $q_2 = 0.4$.

Заключение

Подводя итог, отметим, что различие коэффициентов зеркальности q_1 и q_2 тонкого слоя существенно меняет профиль плотности электрического тока, делая его асимметричным.

В чисто зеркальном случае, когда $q_1 = q_2 = 1$, функция проводимости Σ не зависит от безразмерного расстояния до нижней поверхности слоя ξ.

Доказано, что получается классический результат для проводимости толстой пленки, когда ее толщина a много больше длины свободного пробега электронов Λ.

Список литературы

[1] *Каминский В.В., Степанов Н.Н., Казанин М.М., Молодых А.А., Соловьев С.М.* // ФТТ. 2013. Т. 55. Вып. 5. С. 991–994.

[2] *Ващенко Е.В., Гладских И.А., Пржибельский С.Г., Хромов В.В., Вартанян Т.А.* // Оптический журнал. 2013. Т. 80. № 5. С. 3–10.

[3] *Майссел Л., Глэнк Р.* Технология тонких пленок. Справочник. Т. 1. М.: Мир, 1977. 768 с.

[4] *Суху Р.* Магнитные тонкие пленки. М.: Мир, 1967. 423 с.

[5] *Хасс Г.* Физика тонких пленок. Т. 2. М.: Мир, 1967. 343 с.

[6] *Абелес Ф.* Оптические свойства металлических пленок. Физика тонких пленок / Под ред. М.К. Франкомба, Р.У. Гофмана. Т. 2. М.: Мир, 1973. 392 с.

[7] *Чопра К.Л.* Электрические явления в тонких пленках / Под ред. Т.Д. Шермергора. Пер. с англ. А.Ф. Волкова, Е.И. Гиваргизова и др. М.: Мир, 1972. 432 с.

[8] *Fuchs K.* // Proc. Camb. Phil. Soc. 1938. Vol. 34. P. 100–108.

[9] *Sondheimer E.H.* // Advances in Physics. 2001. Vol. 50. N 6. P. 499–537.

[10] *Андреев В.Г., Вдовин В.А., Воронов П.С.* // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. Вып. 22. С. 68–73.

[11] *Курбацкий В.П.* // ЖТФ. 2015. Т. 85. № 5. С. 106–109.

[12] *Chawla J.S., Galla D.* // Appl. Phys. Lett. 2009. Vol. 94. P. 252 101.

[13] *Chawla J.S., Gstrein F., O'Brien K.P., Clarke J.S., Gall D.* // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84. P. 235 423.

[14] *Utkin A.I., Yushkanov A.A.* // Universal J. Appl. Mathematics. 2013. Vol. 1. N 2. P. 127–130.

[15] *Sun T., Bo Y., Warren A.P., Kumar V., Scott R., Katayun B., Coffey K.R.* // J. Vac. Sci. Technol. A. 2008. Vol. 26. P. 605.

[16] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Физическая кинетика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 536 с.

[17] *Бабич А.В., Погосов В.В.* // ФТТ. 2013. Т. 55. № 1. С. 177–185.

[18] *Завитаев Э.В., Русаков О.В., Юшканов А.А.* // ФТТ. 2012. Т. 54. Вып. 6. С. 1041–1047.

[19] *Абрикосов А.А.* Основы теории металлов: Учеб. руководство. М.: Наука, 1987. С. 41.

[20] *Латышев А.В., Юшканов А.А.* Аналитическое решение задачи о поведении вырожденной электронной плазмы. Гл. 10 в Энциклопедии низкотемпературной плазмы. Т. VII-I. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. М.: Янус-К, 2008. С. 159–177.