

11;13

Квантово-механический подход к описанию взаимодействия СВЧ-электромагнитного излучения с тонкими проводящими пленками

© В.В. Старостенко, В.Б. Орленсон, А.С. Мазинов[¶], Л.Н. Ахрамович

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Россия

[¶] E-mail: mazinovas@cfuv.ru

Поступило в Редакцию 11 февраля 2020 г.

В окончательной редакции 16 февраля 2020 г.

Принято к публикации 17 февраля 2020 г.

Представлен квантово-механический подход к анализу взаимодействия электромагнитного излучения со сверхтонкими проводящими пленками в частотном диапазоне 1–200 GHz. Показано, что при толщинах пленок менее 10 nm необходимо учитывать симметрию строения атомной решетки проводника, нарушение которой может привести к увеличению энергетического зазора между валентной зоной и зоной проводимости. Возникающая запрещенная зона оказывает сильное влияние на проводимость тонкой металлической пленки и на ее электродинамические характеристики при взаимодействии с СВЧ-излучением. На примере алюминия показано, что нарушение симметрии его гранецентрированной решетки приводит к образованию запрещенной зоны порядка 0.07 eV.

Ключевые слова: электромагнитное взаимодействие, сверхтонкие пленки, металлodieлектрическая структура, дисперсионное соотношение.

DOI: 10.21883/PJTF.2020.09.49373.18242

Электромагнитные свойства тонких проводящих пленок давно вызывают интерес в различных областях радиоэлектронной промышленности. Так, в работе 1934 г. [1] впервые теоретически была показана возможность аномального частотно-независимого поглощения электромагнитной энергии ($A = 50\%$) в СВЧ- и ближнем ИК-диапазонах частот, а также получено условие, при котором достигалось такое поглощение. Большое число работ посвящено изучению проводимости тонких аморфных проводящих пленок в зависимости от их толщины и вида осаждаемого материала на подложке. Также значительное внимание уделялось экспериментальным исследованиям взаимосвязи резистивных свойств металлodieлектрических структур (МДС) разной толщины с их оптическими коэффициентами [2–9]. Теоретические же модели в силу того, что линейные размеры образующих пленку проводящих островков на несколько порядков меньше длины падающей волны, строились исходя из предположения однородной проводящей пластины с гладкими границами [10–12]. В этих работах, как правило, аналитический учет пространственных и омических неоднородностей проводился с помощью различных теорий гомогенизации, которые с некоторой степенью точности позволяли вычислить эффективные значения проводимости σ_{eff} (на основе проведенных измерений) и показателя преломления n_{eff} соответственно. Такой подход не позволяет в полной мере исследовать влияние реального рельефа МДС на дифракционные свойства и оптические коэффициенты проводящих нанопленок. Для более глубокого анализа в работе [13] были проведены расчеты оптических

коэффициентов для МДС с разной геометрией рельефа проводящего слоя в СВЧ-диапазоне методом связанных волн (RCWA) [14], поскольку этот метод решает уравнения Максвелла в пространственно-спектральной области и позволяет достаточно адекватно провести анализ МДС, в которых длина электромагнитной волны падающего излучения много больше линейных размеров наночастиц: $\lambda/l \sim 10^3 - 10^4$.

Как было отмечено в работах [2–8], помимо того, что проводящая пленка состоит из металлических островков, сами островки имеют аморфную структуру решетки. Это обстоятельство влияет на величину проводимости наночастиц, которая существенно отличается от проводимости объемного (кристаллического) материала в меньшую сторону. Таким образом, при толщинах проводящих пленок менее 10 nm прослеживается сильная взаимосвязь между электродинамическими параметрами (в СВЧ-диапазоне) и характеристиками металлического материала. На данный момент в большинстве работ описание проводимости металлических тонких пленок производится эмпирическим путем. В настоящей же работе анализ проводимости МДС осуществляется исходя из квантово-механической теории.

Зависимость величины проводимости наночастицы от ее структуры кристаллической решетки можно получить, воспользовавшись известным из физики твердого тела соотношением [15]:

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_g/2k_B T), \quad (1)$$

где σ_0 — проводимость объемного кристалла, $E_g = E_c - E_v$ — ширина запрещенной зоны (E_c —

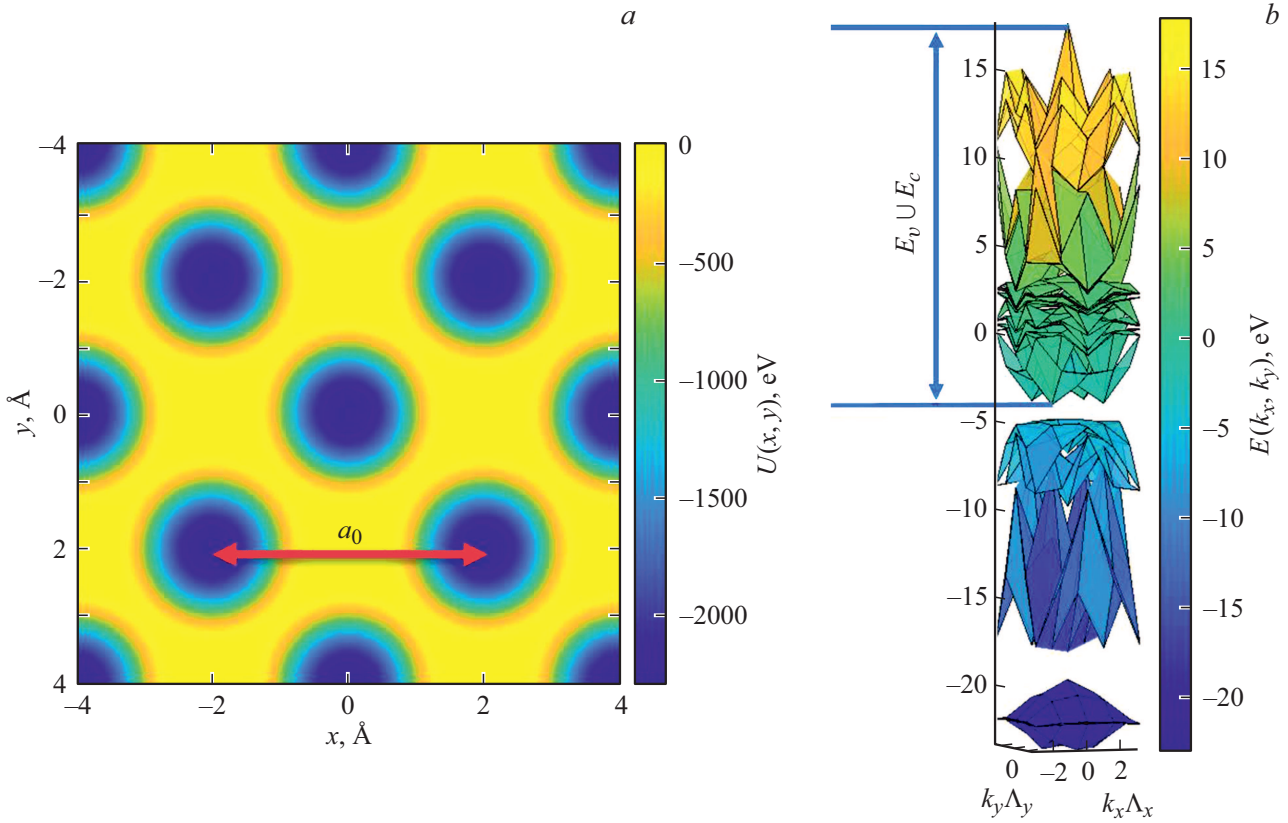


Рис. 1. *a* — двумерный график элементарной ячейки функции потенциальной энергии $U(x, y)$ кристаллического алюминия; *b* — дисперсионное соотношение, нулевой уровень отвечает уровню Ферми.

дно зоны проводимости, E_v — потолок валентной зоны), k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Таким образом, согласно соотношению (1), величина E_g является ключевым параметром, позволяющим связать параметры металлического материала с его электродинамическими характеристиками. Значение запрещенной зоны сильно зависит от вида кристаллической решетки. Эта зависимость определяется исходя из закона дисперсии, который получается из решения уравнения Шредингера [15] рассматриваемого кристалла:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2)$$

Для нахождения дисперсионного соотношения в настоящей работе уравнение Шредингера (2) решается методом разложения по плоским волнам. В этом методе волновые функции электрона ψ представлены в базисе плоских волн, а оператор Гамильтона имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{p,q} = (\hbar^2/2m) ((k_x - K_p)^2 + (k_y - K_q)^2) \delta_{K_p, K_q} + u(K_p - K_{p'}, K_q - K_{q'}), \quad (3)$$

где \hbar — постоянная Планка, m — масса электрона, δ_{K_p, K_q} — дельта-символ Кронекера, k_x, k_y — волновые векторы внутри первой зоны Бриллюэна, $k_x = [-\pi/\Lambda_x, \pi/\Lambda_x]$, $k_y = [-\pi/\Lambda_y, \pi/\Lambda_y]$ и

$K_p = -(2\pi p/\Lambda_x)x$, $K_q = -(2\pi q/\Lambda_y)y$, p, q — номера пространственных гармоник, $p = q = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, +\infty$, Λ_x и Λ_y — периоды решетки вдоль соответствующих осей (x и y). Функция потенциальной энергии определяется соотношением

$$u(K_p, K_q) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} U(x_i, y_j) \times \exp(-j(K_q x_i + K_p y_j)), \quad (4)$$

где K_p, K_q — x - и y -компоненты волнового вектора, N_x, N_y — количество точек разбиения модельного пространства, $U(x_i, y_j)$ — двумерная функция потенциальной энергии.

В качестве первого приближения в настоящей работе рассматривается лишь основная симметрия (100) гранецентрированной (ГЦК) решетки алюминия с постоянной $a_0 = 4 \text{ \AA}$, что позволило свести задачу к решению уравнения Шредингера в двумерном пространстве. Для начала рассматривалось дисперсионное соотношение кристаллического металла, где энергетические зоны, находящиеся ниже нулевого уровня (уровня Ферми), отвечают валентной зоне и локализованным внутриатомным уровням, а выше нулевого уровня — зоне проводимости (рис. 1, *b*).

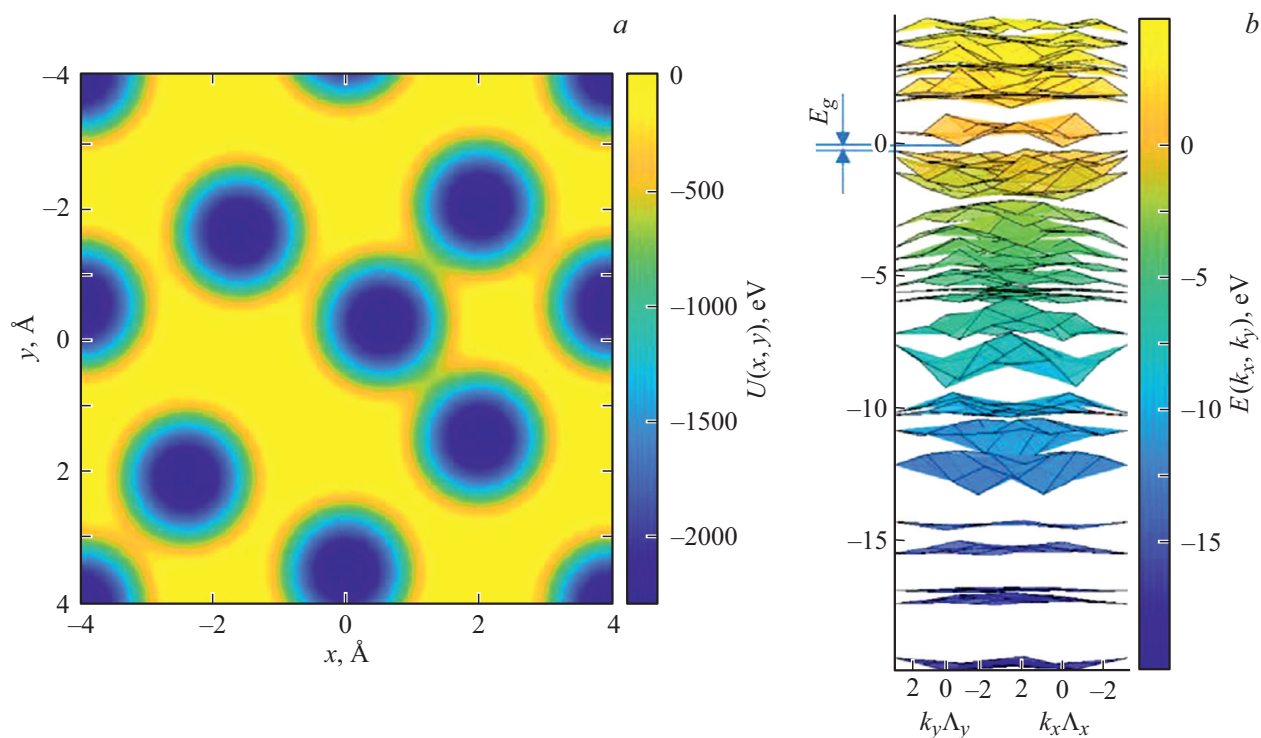


Рис. 2. *a* — двумерный график элементарной ячейки функции потенциальной энергии $U(x, y)$ аморфной алюминиевой наночастицы; *b* — дисперсионное соотношение для аморфной алюминиевой наночастицы.

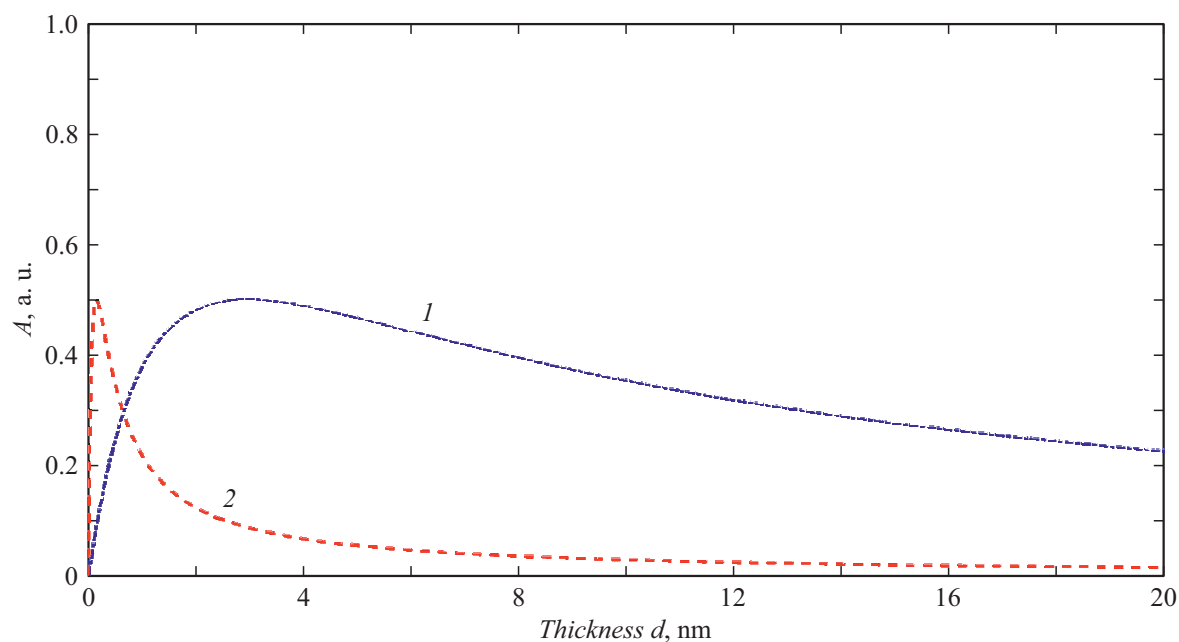


Рис. 3. Зависимости коэффициентов поглощения МДС от толщины. *1* — для аморфного алюминия, $\sigma = 1.8 \cdot 10^6$ S/m, *2* — для кристаллического алюминия, $\sigma_0 = 3.8 \cdot 10^7$ S/m.

Элементарная ячейка функции потенциальной энергии определялась периодически расположенными потенциальными ямами, глубина которых оценивалась исходя из формулы энергетических уровней водородоподобного атома. Для первого энергетического уровня

$$E_1 = -2298 \text{ eV:}$$

$$E_n = -13.6(Z/n)^2 \text{ eV,} \quad (5)$$

где Z — заряд ядра (для алюминия $Z = 13$), n — номер энергетического уровня ($n = 1$). Для более точной

аппроксимации кулоновского взаимодействия форма потенциальных ям была выбрана в виде обратных гауссовых функций (рис. 1, *a*).

Как видно из рис. 1, *a*, значение запрещенной зоны равно $E_g = 0$ eV, т.е. валентная зона и зона проводимости сливаются в одну, что указывает на то, что кристаллический алюминий является хорошим проводником с объемной проводимостью $\sigma_0 = 3.8 \cdot 10^7$ S/m. По мере нарушения периодичности расположения потенциальных ям внутри элементарной ячейки (рис. 2, *a*) сплошная энергетическая зона $E_v \cup E_c$ (рис. 1, *b*) разбивается на несколько зон с образованием запрещенной зоны $E_g = 0.07$ eV (рис. 2, *b*). Подставляя последнюю в (1), получим проводимость аморфного алюминия, равную $\sigma = 1.8 \cdot 10^6$ S/m. Следовательно, даже незначительное нарушение геометрии двумерной ГЦК-решетки ведет к уменьшению проводимости аморфного металла как минимум на один порядок по сравнению с проводимостью объемного кристаллического проводника.

Для сравнения влияния кристаллической и аморфной проводимости на поглощение СВЧ-энергии были рассчитаны (с использованием модели [13]) оптические коэффициенты сверхтонких алюминиевых пленок с учетом образования запрещенной зоны в 0.07 eV при нарушении симметрии решетки (рис. 3). Полученные зависимости показывают, что падение проводимости от $\sigma_0 = 3.8 \cdot 10^7$ S/m до $\sigma = 1.8 \cdot 10^6$ S/m приводит к смещению максимума коэффициента поглощения с 0.3 до 3 nm.

Численные расчеты позволяют прийти к выводу, что незначительные нарушения идеальной геометрии кристаллического материала могут привести к появлению малой запрещенной зоны. А поскольку проводимость металлической пленки имеет экспоненциальную зависимость от ширины запрещенной зоны E_g , данные нарушения сильно влияют на ее электродинамические характеристики, в частности на коэффициент поглощения, т.е. максимум коэффициента поглощения смещается из области десятых долей нанометров в область единиц нанометров.

Таким образом, при исследовании взаимодействия тонких проводящих пленок с толщинами менее 10 nm следует учитывать как сложную геометрию распределения проводящих островков на поверхности подложки, так и степень аморфности кристаллической решетки напыляемого металлического материала, которая довольно сильно влияет на значение проводимости, а следовательно, и на электродинамические свойства МДС в СВЧ-диапазоне.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Woltersdorff W.* // *Z. Phys.* 1934. V. 91. P. 230–252.
- [2] *Abdellaoui N., Pereira A., Novotny M., Bulir J., Fitl P., Lancok J., Moine B., Pillonne A.* // *Appl. Surf. Sci.* 2017. V. 418. P. 517–521. DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.11.234
- [3] *Li S., Luo J., Anwar S., Li S., Lu W., Hang Z.H., Lai Y., Hou B., Shen M., Wang C.* // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 91. P. 220301. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.220301>
- [4] *Андреев В.Г., Вдовин В.А., Пронин С.М., Хорин И.А.* // *Журнал радиоэлектроники.* 2017. В. 11. Режим доступа: <http://jre.cplire.ru/jre/nov17/17/text.pdf>
- [5] *Пронин С.М., Вдовин В.А., Андреев В.Г.* // *Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та.* 2016. В. 5. С. 165411.
- [6] *Старостенко В.В., Мазинов А.С., Фитаев И.Ш., Таран Е.П., Орленсон В.Б.* // *Прикладная физика.* 2019. В. 4. С. 60–65.
- [7] *Антонец И.В., Котов Л.Н., Калинин Ю.Е., Ситников А.В., Шавров В.Г., Щеглов В.И.* // *Письма в ЖТФ.* 2014. Т. 40. В. 14. С. 1–6.
- [8] *Soethe V.L., Nohara E.L., Fontana L.C., Rezende M.C.* // *J. Aerosp. Technol. Manag.* 2011. V. 3. P. 279–286. DOI: 10.5028/jatm.2011.03030511
- [9] *Антонец И.В., Котов Л.Н., Некипелов С.В., Карпушов Е.Н.* // *ЖТФ.* 2004. Т. 74. В. 11. С. 102–106.
- [10] *Антонец И.В., Котов Л.Н., Голубев Е.А., Шаров В.Г., Щеглов В.И.* // *Журнал радиоэлектроники.* 2018. В. 5. DOI: 10.30898/1684-1719.2018.5.2
- [11] *Li S., Anwar S., Lu W., Hang Z.H., Hou B., Shen M., Wang C.* // *AIP Adv.* V. 4. P. 017130. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4863921>
- [12] *Bosman H., Lau Y.Y., Gilgenbach R.M.* // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 82. P. 1353–1355. DOI: 10.1063/1.1556969
- [13] *Orlensov V.B., Zuev S.A., Starostenko V.V.* // *ITM Web Conf.* 2019. V. 30. P. 08011. DOI: <https://doi.org/10.1051/itmconf/20193008011>
- [14] *Rumpf R.C.* // *Prog. Electromagn. Res. B.* 2011. V. 35. P. 241–261.
- [15] *Маделунг О.* *Теория твердого тела.* М.: Наука, 1980. 418 с.