

ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ТОНКИХ ПЛЕНКАХ И НАНОКРИСТАЛЛАХ

Каролик А.С.

Институт прикладной физики НАНБ

220072, Минск, ул. Академическая, 16; karolik@iaph.bas-net.by

В тонких пленках, ультрадисперсных и нанокристаллических структурах плотность границ зерен обычно на несколько порядков величины выше, чем в обычных поликристаллах. Поэтому границы зерен во многом определяют проводящие свойства этих материалов.

В тонких пленках с толщиной, близкой к среднему размеру зерен, границы имеют преимущественно столбчатую структуру с осью разориентировки, перпендикулярной (или почти перпендикулярной) плоскости подложки и направлению электрического тока. В компактных наноструктурных (НКМ) и субмикроструктурных (СМК) материалах векторы разориентировки зерен (в отсутствие текстуры) имеют произвольную ориентацию так же, как в обычных поликристаллах, однако, сами границы являются преимущественно высокоугловыми, характеризуются более высокой степенью избыточного объема и сохраняют высокий уровень внутренних напряжений.

Ранее нами была предложена модель границ зерен, позволяющая с единых представлений рассматривать границы зерен с любой разориентировкой и с произвольной ориентацией плоскости границы относительно направления тока [1]. Эта модель успешно зарекомендовала себя в расчетах энергии границ зерен как функции угла разориентировки и вклада границ зерен в электросопротивление одновалентных, поливалентных и переходных металлов, как массивных, так и тонких фольг [2,3]. В данной работе эта модель несколько трансформирована для учета особенностей рассеяния и расчета остаточного электросопротивления границах зерен в столбчатых тонких пленках и компактных наноструктурах.

Мы здесь рассматриваем только неупругие искажения в области ядер линейных дефектов, образующих границу, так как вклад дислокационных полей упругих искажений в электросопротивление слишком мал (на два порядка ниже), и пренебрегаем взаимодействием линейных дефектов в границе. Поскольку сечение рассеяния зависит, прежде всего, от величины избыточного заряда, создаваемого дефектом в решетке, точное расположение атомов в границе, как и геометрическая форма возникающих там пустот, не существенны. Поэтому линейные дефекты в границе можно аппроксимировать аксиально-симметричными потенциалами (барьер или яма, окруженная барьером).

Транспортное сечение рассеяния Q на линейных дефектах, составляющих границу, рассчитывалось методом парциальных волн. Высота потенциального барьера V_0 определялась самосогласованным образом из условия экранирования заряда дефекта перераспределенными электронами проводимости. Внешний радиус потенциала R_2 определялся из величины дилатации решетки в области ядра линейного дефекта ΔV .

Как показано в работе [4], обусловленное дислокациями изменение объема кристалла ΔV складывается из неупругой дилатации в ядре дислокации, $\Delta V_{core} = 2b_B^2$, и упругого изменения объема кристалла, исключая область ядра, ΔV_D . В линейной теории упругости $\Delta V_D = -b_B^2$ и $\Delta V = b_B^2$, однако, в сильно деформированной нелинейной упруго изотропной среде $\Delta V > b_B^2$ и даже возможно $\Delta V \geq 2b_B^2$ (здесь b_B - величина вектора Бюргера).

Сечение рассеяния, усредненное по всем возможным направлениям вектора разориентировки, представляет собой суперпозицию резонансной, интерференционной и потенциальной компонент и определяется выражением [2]

$$Q = \frac{1}{2k} \int_0^\pi \left(\frac{\Gamma^2}{(E_\perp - E_r)^2 + \Gamma^2/4} - \frac{2[\Gamma^2 \sin \delta_0 - \Gamma(E_\perp - E_r) \sin(2\delta_0)]}{(E_\perp - E_r)^2 + \Gamma^2/4} + 4 \sum_{m=0}^{\infty} \sin^2 \delta_m \right) d\varphi = Q_R + Q_I + Q_P = \frac{2}{k} \int_0^\pi \sum_{m=0}^{\infty} \sin^2(\eta_m - \eta_{m+1}) d\varphi \quad (1)$$

В это выражения входят сдвиги фаз η_m , представляющие собой суперпозицию потенциальной α_m и резонансной β_m составляющих (аналитические выражения для них приведены в [2]); $\delta_m = \alpha_m - \alpha_{m+1}$; E_r и Γ - соответственно положение и ширина резонансного уровня; $E_\perp = k_\perp^2$; $k_\perp = k_F \sin \varphi$ - перпендикулярная оси разориентировки составляющая волнового вектора; k_F - величина волнового вектора на уровне Ферми.

Удельное электросопротивление единицы плотности линейных дефектов, составляющих границу (дислокаций, сверхдислокаций или цилиндрических пор), рассчитывалось по формуле

$$\frac{\Delta\rho_L}{N_L} = \frac{\hbar k_F \Omega_a Q}{n_s e^2}, \quad (2)$$

здесь Ω_a - атомный объем, n_s - число носителей тока на атом.

Для кубических структур изменение удельного электросопротивления на единицу площади границ в единице объема кристалла определялось из соотношения

$$\frac{\Delta\rho_G}{N_G} = \frac{\Delta\rho_L}{N_L D} = \frac{2\Delta\rho_L \sin \theta/2}{N_L b}, \quad (3)$$

где D - среднее расстояние между линейными дефектами в границе, вектор Бюргерса b рассчитывался по формулам

$$b = \begin{cases} b_B, & \vartheta < \vartheta_c & \text{(I);} \\ 2D_c \sin(\vartheta/2), & \vartheta_c \leq \vartheta \leq \vartheta^* & \text{(II);} \\ 2D_c \sin(\vartheta^*/2), & \vartheta^* < \vartheta \leq \vartheta_s/2 & \text{(III).} \end{cases} \quad (4)$$

Здесь I, II и III - соответственно низкоугловая, переходная и высокоугловая области углов разориентировки, ϑ_c и ϑ^* - углы, разделяющие эти области; $\vartheta_s/2$ - угол максимальной разориентировки, для кубических структур $\vartheta_s = \pi/2$. В качестве b_B бралась величина устойчивого вектора Бюргерса полной дислокации.

Полагая, что в нанокристаллических и субмикроструктурных металлах величина дилатации в ядре единичной дислокации в границе составляет $\Delta V = 2b_B^2$ на единицу длины дислокации, и что границы имеют только высокие углы разориентировки ($\vartheta \geq \vartheta^*$, для меди $\vartheta^* = 16^\circ$) получаем, что единица плотности границ зерен вносит вклад в электросопротивление меди, никеля и железа соответственно 5.2, 10.4 и 30.5×10^{-12} Ом см², что примерно в полтора-два раза выше электросопротивления высокоугловых границ в

крупнозернистых поликристаллах [2]. Имеющиеся экспериментальные данные величены $\Delta\rho_G/N_G$ для компактных ультрадисперсных металлов (Cu, Ni, Fe) с размером зерна в диапазоне от 100 до 250 нм [5] составляют соответственно 5.3, 10.6 и 60×10^{-12} Ом см² (рассчитано из графиков). Таким образом, можно говорить о достаточно хорошем согласии с экспериментом для меди и никеля и удовлетворительном – для железа.

Нами была исследована зависимость сечения рассеяния на линейном дефекте, составляющем границу, от угла φ . Результаты расчета в виде зависимостей $Q(k)$, $Q_R(k)$ и $Q_P(k)$ для двух постоянных углов $\pi/3$ и $\pi/2$ в меди представлены на рисунке. Вертикальной линией показано $k = k_F$.

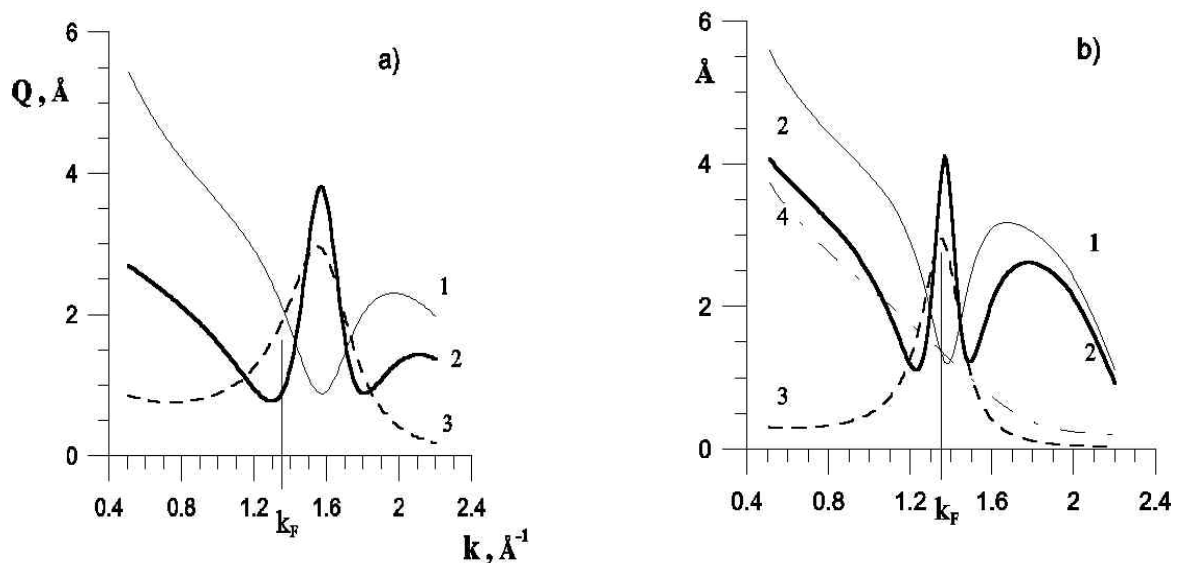


Рис. Зависимость сечения рассеяния и его компонент от величины волнового вектора k в меди для двух постоянных углов $\varphi = \pi/3$ (a) и $\varphi = \pi/2$ (b): 1 - Q_P ; 2 - Q ; 3 - Q_R ; 4 - $Q(k)$ для цилиндрической поры.

Очевидно, что рост угла φ ведет к уменьшению потенциальной компоненты в полном сечении рассеяния и росту резонансной составляющей. Для угла $\varphi = \pi/2$ (случай, соответствующий столбчатым границам зерен в тонких пленках) имеет место минимум Q_P и максимум Q_R . Как показали расчеты, при одинаковой степени дилатации резонансно и потенциально рассеивающие линейные дефекты дают примерно одинаковый вклад в электросопротивление поликристаллических и нанокристаллических материалов (когда угол φ может быть любым), но в тонких пленках, когда угол φ близок к $\pi/2$, резонансные состояния могут вносить в несколько раз больший вклад в электросопротивление.

Литература

- [1] А.С. Каролик ФММ, **75**, 34 (1993).
- [2] A.S. Karolik, A.A. Lukhovich J. Phys.: Condens. Matter, **6**, 873 (1994).
- [3] А.С. Каролик Весці НАНБ, сер. фіз.-мат. навук, № 4, 96 (2002).
- [4] В.Т. Шматов ФММ, **40**, 910 (1975).

[5] K. Pekala, M. Pekala Nanostruct. Mater., 6, 819 (1995).