

# Проводимость двухслойных моно- и поликристаллических слоев металла в условиях взаимной диффузии

© Л.В. Дехтярук, И.М. Пазуха, С.И. Проценко, И.В. Чешко

Сумский государственный университет,  
40007 Сумы, Украина

E-mail: dekhtyaruk@mail.ru

(Поступила в Редакцию 9 августа 2005 г.)

Теоретически проанализирован коэффициент удельной электропроводности двухслойной пленки с моно- и поликристаллической структурой в условиях взаимной диффузии металлов при произвольном соотношении между толщинами слоев и длиной свободного пробега электронов в них. Показано, что изменение проводящих свойств двухслойной пленки в результате диффузионного отжига позволяет исследовать сам процесс объемной и зернограничной диффузии, определить эффективную глубину проникновения атомов примеси в объем образца и в межкуристаллитные границы и получить информацию о коэффициентах объемной и зернограничной диффузии.

Работа выполнена в рамках Проекта о научно-техническом сотрудничестве № М/18-2004 между Сумским государственным университетом и Институтом ядерной физики Польской академии наук (Краков).

PACS: 73.50.Bk, 73.61.-r

## 1. Введение

Проблема стабильности транспортных характеристик двухслойных и многослойных металлических пленок, широко используемых в микроэлектронике и вычислительной технике, определяет постоянный интерес к изучению процесса взаимной диффузии в таких системах. Одной из возможностей получения достоверной информации о коэффициентах объемной  $D_l$  и зернограничной  $D_b$  диффузии является исследование временной эволюции транспортных коэффициентов в двухслойных моно- и поликристаллических образцах в условиях внешнего (рассеяние электронов на внешних границах двухслойной пленки) и внутреннего (рассеяние носителей заряда на межслойной и межкуристаллитных границах) размерных эффектов в процессе диффузионного отжига. Так, в частности, по смещению линий радиочастотного размерного эффекта [1,2] и по изменению амплитуды осцилляций Зондгеймера в тонких монокристаллических слоях металла [3] после диффузионного отжига экспериментально была определена эффективная глубина проникновения атомов примеси в объем образца, что позволило оценить коэффициент объемной диффузии  $D_l$ .

При низкотемпературном диффузионном отжиге  $T < 0.38T_m$  ( $T_m$  — температура плавления) объемная диффузия в поликристаллическом образце практически „заморожена“ [4,5] и атомы примеси в основном мигрируют только вдоль межкуристаллитных границ, что приводит к изменению характера рассеяния носителей заряда границами зерен [6–9] и соответственно к изменению проводимости двухслойной поликристаллической пленки. Зная проводимость образца до и после диффузионного отжига, можно определить эффективную глубину проникновения атомов примеси вдоль межкуристаллитных границ и таким образом оценить коэффициент зернограничной диффузии  $D_b$ .

При больших временах диффузионного отжига эффективный путь атомов диффузанта определяется толщиной слоев металла, и экспериментальное нахождение коэффициентов объемной и зернограничной диффузии сводится к определению минимального времени диффузионного отжига  $t_{D \min}$ , такого, чтобы при  $t_D > t_{D \min}$  проводимость моно- и поликристаллического образца практически не изменялась [6–9].

В настоящей работе детально проанализирована проводимость моно- и поликристаллической двухслойной пленки (ДП) в условиях взаимной диффузии металлов.

## 2. Постановка задачи. Общая формула для проводимости двухслойной моно- и поликристаллической пленки

Рассмотрим моно- и поликристаллическую ДП толщиной  $d = d_1 + d_2$ , нормаль к границам раздела (ГР) слоев которой параллельна оси  $X$ , а внешнее электрическое поле напряженностью  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(0, E, 0)$  приложено вдоль межслоевой границы (рис. 1,  $a, b$ ).

Удельная проводимость ДП может быть вычислена с помощью кинетического уравнения Больцмана, в котором интеграл столкновений электронов записан в  $\tau$ -приближении. При наличии процесса взаимной диффузии удельная проводимость моно- и поликристаллической ДП может быть записана в следующем виде [10,11]:

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

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

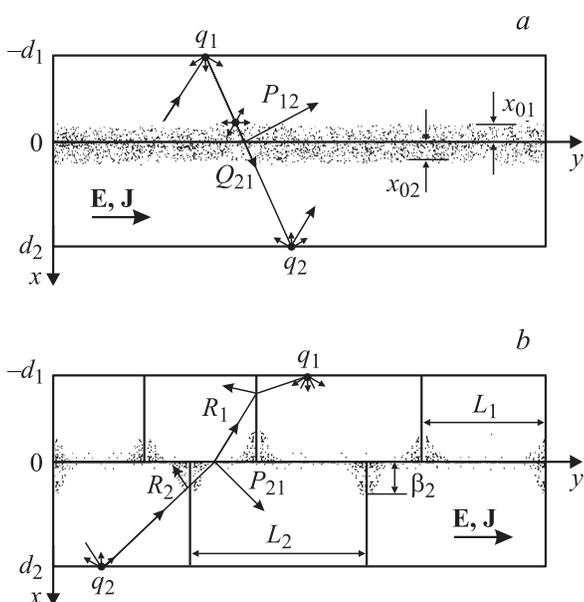
$$\Delta(t_D) = 1 - q_i P_{ij} W_i^2(0) - q_j P_{ji} W_j^2(0) - q_i q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) W_i^2(0) W_j^2(0), \quad (2)$$

$$i \neq j = 1, 2,$$

$$I_i = \int_0^{d_i} dx W_i(x) \int_x^{d_i} dx' W_i^{-1}(|x'|),$$

$$I_{di} = \int_0^{d_i} dx W_i(x), \quad I_{0i} = \int_0^{d_i} dx W_i(0) W_i^{-1}(|x|). \quad (3)$$

Здесь  $e$  — заряд электрона;  $\varepsilon_i$ ,  $\mathbf{v}_i$  и  $\mathbf{p}$  — его энергия, скорость и квазиимпульс соответственно;  $t_D$  — время диффузионного отжига;  $h$  — постоянная Планка;  $f_0(\varepsilon_i)$  — фермиевская функция распределения носителей заряда;  $q_i = \text{const}$  — вероятность отражения электрона  $i$ -й поверхностью ДП с сохранением энергии и тангенциальной по отношению к внешней границе компоненты квазиимпульса;  $P_{ij} = \text{const}$  — вероятность зеркального отражения электронов ГР между  $i$ -м и  $j$ -м слоями;  $Q_{ji} = \text{const}$  — вероятность туннелирования носителей заряда из  $j$ -го в  $i$ -й слой ДП



**Рис. 1.** Модель двухслойной монокристаллической (а) и поликристаллической (б) пленки в условиях объемной (а) и зернограничной (б) диффузии атомов примеси. Ломаной линией схематически показана возможная траектория электрона.

без рассеяния (так что  $P_{ji} + Q_{ji} \leq 1$ ). Величина

$$W_i(x) = \exp \left\{ -\frac{1}{|v_{xi}|} \int_x^{d_i} \frac{dx'}{\tau_i(x', \mathbf{p})} \right\} \quad (4)$$

определяет вероятность того, что электрон, стартовав из точки с координатой  $x$  в  $i$ -м слое ДП, придет к внешней границе с координатой  $x_s = (-d_1, d_2)$ , не рассеявшись на продиффундировавших из соседнего слоя в объем и межкристаллитные границы примесей.

Характерная частота внутриобъемных столкновений носителей заряда  $\tau_i^{-1}(x, \mathbf{p})$  в формуле (4) может быть представлена в виде трех слагаемых [10,11]

$$\tau_i^{-1}(x, \mathbf{p}) = \tau_{0i}^{-1} + \tau_{1i}^{-1}(x) + \tau_{2i}^{-1}(x, \mathbf{p}), \quad (5)$$

где  $\tau_{0i}^{-1} = \text{const}$  не зависит от координаты  $x$ , а определяется рассеянием электронов на фононах и остаточных примесях в объеме ДП до диффузионного отжига,  $\tau_{1i}^{-1}(x)$  описывает рассеяние носителей заряда на продиффундировавших в объем слоев металла атомах диффузанта. Наличие в формуле (5) слагаемого  $\tau_{2i}^{-1}(x, \mathbf{p})$  связано с рассеянием носителей заряда на границах зерен, вдоль которых мигрируют атомы примеси.

Результаты дальнейших вычислений существенно зависят от структуры слоев ДП, т.е. от того, являются ли слои монокристаллическими или имеют поликристаллическую структуру.

### 3. Проводимость двухслойной монокристаллической пленки в условиях объемной диффузии

Первоначально рассмотрим случай, когда средний размер кристаллитов  $L_i$  в каждом слое ДП значительно больше длины свободного пробега  $l_{0i}$  носителей заряда или межкристаллитные границы практически прозрачны для электронов  $R_{0i} \ll 1$  ( $R_{0i}$  — вероятность рассеяния носителей заряда на границах зерен). В этом случае для зернограничного параметра  $\alpha_{0i} = (l_{0i}/L_i)(R_{0i}/(1 - R_{0i}))$  в модели Маядаса и Шацкеса (модель МШ) [12] выполняется неравенство  $\alpha_{0i} < d_i/l_{0i}$  и рассеянием электронов на межкристаллитных границах можно пренебречь [13,14], положив  $\tau_{2i}^{-1}(x, \mathbf{p})$  в формуле (5) равным нулю, а  $\tau_{1i}^{-1}(x)$  может быть записано в следующем виде [2,15,16]:

$$\tau_{1i}^{-1}(x) = v_0 \sigma_{\text{eff}i} n_{0i} C_{li}(x, t_D). \quad (6)$$

Здесь  $v_0$  — скорость электронов на поверхности Ферми,  $\sigma_{\text{eff}i}$  — эффективное сечение рассеяния носителей заряда на атомах примеси,  $n_{0i}$  — концентрация атомов в слоях ДП до диффузионного отжига.

Если толщина слоев  $d_i$  является полубесконечной для атомов примеси ( $d_i \gg \sqrt{D_{li} t_D}$ ), коэффициент объемной диффузии постоянен ( $D_{li} = \text{const}$ ), нет скачка концентрации на ГР слоев металла и существует предел рас-

творимости, то распределение атомов примеси  $C_{li}(x, t_D)$  в каждом слое ДП равно [17]

$$G_{11}(x, t_D) = C_0 \left\{ \gamma_l - (1 - \gamma_l) \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{D_{11}t_D}} \right\}, \quad x < 0, \quad (7)$$

$$C_{12}(x, t_D) = C_0 \gamma_l \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_{12}t_D}}, \quad x > 0, \quad (8)$$

где  $\gamma_l = 1/(1 + \sqrt{D_{12,1}})$ ,  $D_{12,1} = D_{12}/D_{11}$ ,  $D_{li}$  — коэффициент объемной диффузии в  $i$ -м слое ДП.

Предполагая, что закон дисперсии в каждом слое ДП квадратичный и изотропный, и выполнив интегрирование по поверхности Ферми в формуле (1), можно показать, что удельная проводимость ДП с монокристаллической структурой после диффузионного отжига будет определяться следующим выражением:

$$\sigma(t_D) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_i(t_D), \quad (9)$$

где  $\sigma_{0i}$  — проводимость безграничного монокристаллического образца, время релаксации носителей заряда в котором равно  $\tau_{0i}$ . Размерная функция  $\Phi_i(t_D)$  может быть записана в следующем виде:

$$\Phi_i(t_D) = k_i^2 \left\langle \frac{G_i(t_D)}{z^2(1 - E_i)} \right\rangle, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} G_i(t_D) = & 2J_i + \frac{1}{\Delta(t_D)} \left\{ q_i(1 - q_j P_{ji} E_j^2 W_{lj}^2(0)) J_{di}^2 \right. \\ & + J_{0i}(J_{0i} + 2q_i E_i W_{li}(0) J_{di}) \\ & \times (P_{ij} + q_j(Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) E_j^2 W_{lj}^2(0)) \\ & + Q_{ji} d_{j,i} (J_{0i} + q_i E_i W_{li}(0) J_{di}) \\ & \left. \times (J_{0j} + q_j E_j W_{lj}(0) J_{dj}) \right\}, \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta(t_D) = & 1 - q_i P_{ij} E_i^2 W_{li}^2(0) - q_j P_{ji} E_j^2 W_{lj}^2(0) \\ & - q_i q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) E_i^2 E_j^2 W_{li}^2(0) W_{lj}^2(0), \\ J_i = & \int_0^1 dx W_{li}(x) \int_x^1 dx' W_{li}^{-1}(|x'|) \exp\left(-\frac{k_i}{z}(x' - x)\right), \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_{di} = & \int_0^1 dx W_{li}(x) \exp\left(-\frac{k_i}{z}(1 - x)\right), \\ J_{0i} = & \int_0^1 dx W_{li}(0) W_{li}^{-1}(|x|) \exp\left(-\frac{k_i}{z}x\right), \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{j,i} = & \frac{d_j}{d_i}, \quad E_i = \exp\left\{-\frac{k_i}{z}\right\}, \quad k_i = \frac{d_i}{l_{0i}}, \\ \langle \dots \rangle = & \frac{3}{4k_i} \int_0^1 dz (z - z^3)(1 - E_i) \left\{ \dots \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

Вероятность того, что электрон пройдет отрезок пути  $[x, 1]$  без рассеяния в объеме  $i$ -го слоя ДП, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} W_{11}(x) = & \exp\left\{-\frac{k_1}{z} A_1 C_0 \left[ \gamma_l(1 - x) - (1 - \gamma_l) \right. \right. \\ & \times \left( \operatorname{erf} \frac{1}{\sqrt{t_{11}}} - x \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{t_{11}}} + \sqrt{\frac{t_{11}}{\pi}} \right. \\ & \left. \left. \times \left[ \exp\left(-\frac{1}{t_{11}}\right) - \exp\left(-\frac{x^2}{t_{11}}\right) \right] \right] \right\}, \quad (15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{12}(x) = & \exp\left\{-\frac{k_2 A_2 C_0}{z} \gamma_l \left[ \operatorname{erfc} \frac{1}{\sqrt{t_{12}}} - x \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{t_{12}}} \right. \right. \\ & \left. \left. - \sqrt{\frac{t_{12}}{\pi}} \left( \exp\left(-\frac{1}{t_{12}}\right) - \exp\left(-\frac{x^2}{t_{12}}\right) \right) \right] \right\}, \quad (16) \end{aligned}$$

$$A_i = l_{0i} \sigma_{\text{eff}} n_{0i}, \quad t_{li} = \frac{4D_{li}}{d_i^2} t_D. \quad (17)$$

До диффузионного отжига ( $t_D = 0$ ) в объеме слоев ДП диффузант отсутствует ( $C_{li}(x, t_D) = 0$ ), что позволяет выполнить интегрирование по координате в формулах (12) и (13) и показать, что удельная проводимость ДП равна [18]

$$\sigma(0) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_i(0), \quad (18)$$

где

$$\Phi_i(0) = 1 - \langle G_i(0) \rangle$$

$$\begin{aligned} & \begin{cases} 1 - \frac{3}{16k_i} (2 - q_i - P_{ij} - Q_{ji} \tau_{0j,i}), & k_i \gg 1, \\ \frac{3}{4} \frac{(1+q_i)[(1+P_{ij})(1-q_j P_{ji}) + q_j Q_{ij} Q_{ji} + (1+q_j) Q_{ji} d_{j,i}]}{(1-q_i P_{ij})(1-q_j P_{ji}) - q_i q_j Q_{ij} Q_{ji}} \\ \times k_i \ln \frac{1}{k_i}, & k_i \ll 1, \end{cases} \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_i(0) = & \frac{1}{\Delta(0)} \left\{ (2 - q_i - P_{ij} + (q_i + P_{ij} - 2q_i P_{ij}) E_i) \right. \\ & \times (1 - q_j P_{ji} E_j^2) - q_j Q_{ij} Q_{ji} E_j^2 (1 - E_i + 2q_i E_i) \\ & \left. - Q_{ji} \tau_{0ji} (1 - E_j) (1 + q_i E_i) (1 + q_j E_j) \right\}, \\ \Delta(0) = & 1 - q_i P_{ij} E_i^2 - q_j P_{ji} E_j^2 \\ & - q_i q_j (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji}) E_i^2 E_j^2, \\ \tau_{0j,i} = & \frac{\tau_{0j}}{\tau_{0i}}, \quad (20) \end{aligned}$$

При небольших временах диффузионного отжига  $d_i/\sqrt{D_{li}t_D} \gg 1$  производная функции  $W_{li}(x)$  имеет максимум при  $x_{0i} = a_{li}\sqrt{D_{li}t_D}$  ( $W''_{li}(x_{0i}) = 0$ ) и является „острой“ функцией по сравнению с  $\exp\{-k_i x/z\}$  [2,15], что позволяет вычислить интегралы в формуле (9) асимптотически при  $t_{li} \ll 1$ . В результате вычислений получим [10,11]

$$\sigma(t_D) \cong \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \times \begin{cases} 1 - \frac{3(2-q_i)}{16} \frac{l_{0i}}{d_i - x_{0i}(t_D)}, & k_i \gg 1, \\ \frac{3}{4} (1+q_i) \frac{(d_i - x_{0i}(t_D))^2}{d_i l_{0i}} \ln \frac{l_{0i}}{d_i - x_{0i}(t_D)}, & k_i \ll 1, \end{cases} \quad (21)$$

где

$$l_{0i} = v_0 \tau_{0i}, \quad x_{0i}(t_D) = a_{li} \sqrt{D_{li} t_D}, \quad a_{li} \approx 2 \ln^{1/2} \left\{ \frac{2\sqrt{D_{li} t_D}}{v_0 \tau_{1i}(0)} \right\}. \quad (22)$$

Величина  $x_{0i}$  представляет собой эффективную глубину проникновения атомов примеси в  $i$ -й слой ДП.

Из полученных асимптотических выражений (21) следует, что изменение проводимости двухслойного образца в результате диффузионного отжига равно

$$\Delta\sigma = \sigma(0) - \sigma(t_D) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 \sigma_{0i} x_{0i} \begin{cases} \frac{3(2-q_i)}{16k_i}, & k_i \gg 1, \\ \frac{3}{2} (1+q_i) k_i \ln \frac{1}{k_i}, & k_i \ll 1. \end{cases} \quad (23)$$

Полученное точное выражение (9) может быть упрощено, если предположить, что слой толщиной  $d_1$  играет роль диффузанта, а диффузия происходит только в базисный слой толщиной  $d_2$  ДП, в котором распределение атомов примеси может быть описано следующим выражением [17]:

$$C_{12}(x, t_D) = C_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_{12} t_D}}. \quad (24)$$

В этом случае проводимость двухслойного образца будет определяться выражением (9), в котором размерные функции  $\Phi_i(t_D)$  могут быть записаны в следующем виде:

$$\Phi_1(t_D) = 1 - \langle G_1(t_D) \rangle, \quad \Phi_2(t_D) = k_2^2 \left\langle \frac{G_2(t_D)}{z^2(1-E_2)} \right\rangle, \quad (25)$$

$$G_1(t_D) = 2 - \frac{(1-E_1)}{\Delta(t_D)} \left\{ q_1(1 - q_2 P_{21} E_2^2 W_{12}^2(0)) + (1 + 2q_1 E_1)(P_{12} + q_2(Q_{12} Q_{21} - P_{12} P_{21})) E_2^2 W_{12}^2(0) + \frac{Q_{21} d_{2,1} k_1}{z(1-E_1)} (1 + q_1 E_1)(J_{02} + q_2 E_2 W_{12}(0) J_{d2}) \right\}, \quad (26)$$

$$G_2(t_D) = 2J_2 + \frac{1}{\Delta(t_D)} \left\{ q_2(1 - q_1 P_{12} E_1^2) J_{d2}^2 + J_{02}(J_{02} + 2q_2 E_2 W_{12}(0) J_{d2})(P_{21} + q_1(Q_{12} Q_{21} - P_{12} P_{21}) E_1^2) + \frac{z Q_{12} d_{2,1}}{k_1} (1 - E_1)(1 + q_1 E_1) \times (J_{02} + q_2 E_2 W_{12}(0) J_{d2}) \right\}, \quad (27)$$

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

Здесь интегралы  $J_2$ ,  $J_{02}$  и  $J_{d2}$  определены выражениями (12) и (13), где вероятность  $W_{12}(x)$  описывается формулой (16), в которой следует положить  $\gamma_i = 1$ .

При диффузном характере рассеяние носителей заряда на внутренней и внешних границах ДП проводимость  $\sigma_i \sim d_i$ , где  $d_i$  — толщина  $i$ -го слоя (согласно концепции „неэффективности“ Пиппарда [19], в этом случае мы по сути пренебрегаем вкладом в проводимость электронов, которые движутся почти параллельно границам образца и сталкиваются с ними, относительное число таких электронов порядка  $\ln(1/k_i)$ ). Тогда при выполнении неравенства  $d_{1,2} < 10^{-2} - 10^{-3}$  проводимостью слоя диффузанта толщиной  $d_1$  можно пренебречь, и проводимость образца  $\sigma_{12}(t_D)$  с ультратонким слоем примеси на базисном слое толщиной  $d_2$  будет определяться следующим выражением:

$$\frac{\sigma_{12}(t_D)}{\sigma_0} = \Phi_2(t_D) = k_2^2 \left\langle \frac{G_2(t_D)}{z^2(1-E_2)} \right\rangle, \quad (28)$$

$$G_2(t_D) = 2J_2 + \frac{q_1 J_{02}^2 + q_2 J_{d2}^2 + 2q_1 q_2 E_2 W_{12}(0) J_{02} J_{d2}}{1 - q_1 q_2 E_2^2 W_{12}^2(0)}, \quad (29)$$

где интегралы  $J_2$ ,  $J_{02}$  и  $J_{d2}$  введены в формулах (12) и (13), в которых вероятность  $W_{12}(x)$  описывается выражением (16) при  $\gamma_i = 1$ .

При выполнении неравенства  $d_2 \gg \sqrt{D_{12} t_D}$  проводимость тонкого слоя металла равна

$$\frac{\sigma_{12}(t_D)}{\sigma_0} \cong \begin{cases} 1 - \frac{3l_{02}}{16(d_2 - x_{02}(t_D))} (2 - q_2), & k_2 \gg 1, \\ \frac{3}{4} (1 + q_2) \frac{(d_2 - x_{02}(t_D))^2}{d_2^2 l_{02}} \times \ln \left( \frac{l_{02}}{d_2 - x_{02}(t_D)} \right), & k_2 \ll 1, \end{cases} \quad (30)$$

$$x_{02}(t_D) = a_{12} \sqrt{D_{12} t_D}, \quad a_{12} \approx 2 \ln^{1/2} \{ 2\sigma_{\text{эфф}} n_{02} C_{02} \sqrt{D_{12} t_D} \}. \quad (31)$$

Асимптотические выражения (30) позволяют выразить эффективную глубину проникновения атомов примеси  $x_{O_2}$  в объем базисного слоя металла через изменения его проводимости  $\Delta\sigma_2 = \sigma_2(0) - \sigma_2(t_D)$  после диффузионного отжига. Для простоты предполагая, что внешние границы пленки диффузным образом рассеивают носители заряда, получим величину  $x_{O_2}$

$$x_{O_2} \cong d_2 \frac{\Delta\sigma_2}{\sigma_{O_2}} \begin{cases} \left(\frac{3}{8k_2}\right)^{-1}, & k_2 \gg 1, \\ \left(\frac{3}{2} k_2 \ln\left(\frac{1}{k_2}\right)\right)^{-1}, & k_2 \ll 1. \end{cases} \quad (32)$$

Проводимость базисного слоя  $\sigma_2(0)$  до диффузионного отжига определяется формулой Фукса [20], если  $q_1 = q_2 = q$ . Если же границы образца различным образом рассеивают электроны (т.е.  $q_1 \neq q_2$ ), то коэффициент электропроводности определяется формулой Лукаса [21].

С другой стороны, эффективная глубина проникновения атомов примеси для модели времени релаксации (6) описывается формулой (31), в которой величина коэффициента  $a_{l_2}$  зависит от параметров, определяющих структуру образца, и от коэффициента объемной диффузии. Однако при малых временах диффузионного отжига величина  $a_{l_2}$  является медленно изменяющейся функцией  $D_{l_2}$  [2,15,16] и ее приближенно можно рассматривать как параметр задачи. В этом случае, сравнивая формулы (31) и (32), для коэффициента объемной диффузии можно получить следующее выражение:

$$D_{l_2} = \frac{d_2^2}{a_{l_2}^2 t_D} \frac{\Delta\sigma_2^2}{\sigma_{O_2}^2} \begin{cases} \left(\frac{3}{8k_2}\right)^{-2}, & k_2 \gg 1, \\ \left(\frac{3}{2} k_2 \ln\left(\frac{1}{k_2}\right)\right)^{-2}, & k_2 \ll 1. \end{cases} \quad (33)$$

В том случае, когда толщина слоя  $d_2$  является конечной для атомов примеси ( $d_2 \sim \sqrt{D_{l_2} t_D}$ ), их распределение может быть описано выражением [17]

$$C_{l_2}(x, t_D) = C_0 \left\{ \frac{d_{1,2}}{1+d_{1,2}} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\pi d_{1,2}}{1+d_{1,2}}\right) \times \cos\left(\frac{n\pi x}{d_2(1+d_{1,2})}\right) \exp\left(-\frac{n^2\pi^2}{d_2^2(1+d_{1,2})^2} D_{l_2} t_D\right) \right\}, \quad (34)$$

а проводимость тонкого слоя металла  $\sigma_2(t_D)$  будет определяться формулой (28), в которой вероятность  $W_{l_2}(x)$  имеет следующий вид:

$$W_{l_2}(x) = \exp\left\{-\frac{k_2 A_2 C_0}{z} \frac{d_{1,2}}{1+d_{1,2}} \left[1-x + \frac{4}{\pi} (1+d_{1,2}) \times \sin\frac{\pi(1-x)}{2(1+d_{1,2})} \cos\frac{\pi(1+x)}{2(1+d_{1,2})} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4(1+d_{1,2})^2} t_{l_2}\right)\right]\right\}. \quad (35)$$

Поскольку  $d_{1,2} \ll 1$ , при записи выражения (35) было учтено, что  $\sin(n\pi d_{1,2}/(1+d_{1,2})) \cong n\pi d_{1,2}/(1+d_{1,2})$  и при больших временах диффузионного отжига экспоненциальный множитель в формуле (34) мал, вследствие чего можно ограничиться только первыми двумя слагаемыми [17].

В этом случае эффективная глубина проникновения атомов примеси будет определяться толщиной пленки, и коэффициент объемной диффузии может быть оценен по следующей формуле [6–9]:

$$D_{l_2} = \frac{d_2^2}{\pi^2 t_{D \min}} (1+d_{1,2})^2, \quad (36)$$

где  $t_{D \min}$  — минимальное время диффузионного отжига, выбранное таким образом, чтобы при  $t_D > t_{D \min}$  проводимость монокристаллического образца практически не изменялась [6–9].

Временное изменение проводимости двухслойного образца в процессе диффузионного отжига может быть проанализировано с использованием более простого метода — так называемого метода средней концентрации [22], в котором предполагается, что примесь равномерно распределена в объеме слоев ДП и не зависит от координаты

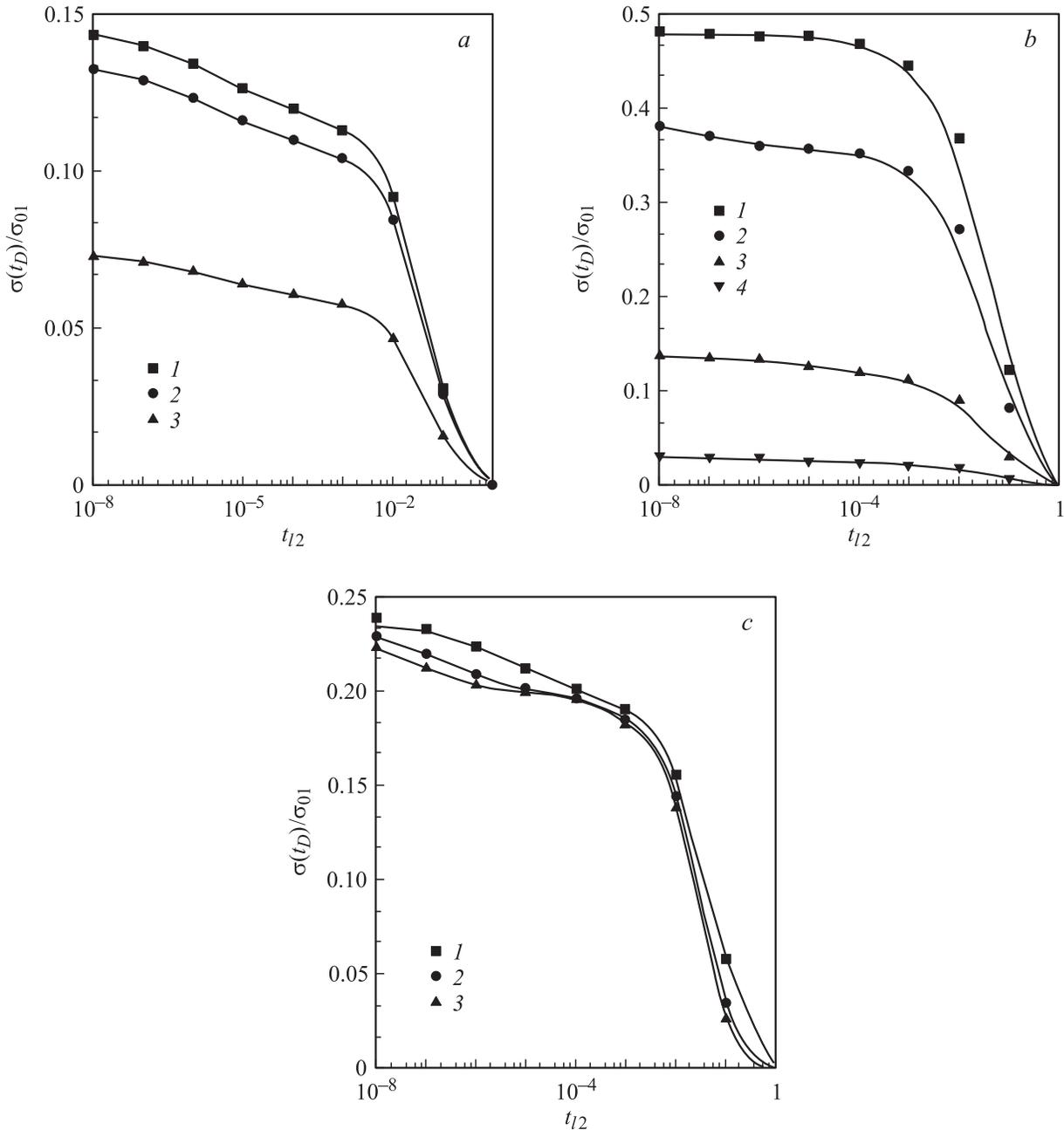
$$\bar{C}_{ii}(t_D) = \frac{1}{d_i} \int_0^{d_i} dx C_{ii}(x, t_D), \quad (37)$$

$$\bar{C}_{i1} = C_0 \left\{ \gamma_i - (1-\gamma_i) \times \left[ \operatorname{erf} \frac{1}{\sqrt{t_{i1}}} - \sqrt{\frac{t_{i1}}{\pi}} \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{t_{i1}}\right)\right) \right] \right\}, \quad (38)$$

$$\bar{C}_{i2} = C_0 \gamma_i \left\{ \operatorname{erfc} \frac{1}{\sqrt{t_{i2}}} + \sqrt{\frac{t_{i2}}{\pi}} \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{t_{i2}}\right)\right) \right\}. \quad (39)$$

Это упрощение позволяет выполнить интегрирование по координате  $x$  в формулах (12) и (13) и показать, что проводимость двухслойного образца снова будет определяться формулой (9), в которой следует произвести следующие замены:  $\sigma(t_D) \rightarrow \bar{\sigma}(t_D)$  и  $\Phi_i(t_D) \rightarrow \bar{\Phi}_i(t_D)$ . Точное и асимптотические (для предельных значений параметра  $k_i$ ) выражения для размерной функции  $\bar{\Phi}_i(t_D)$  имеют вид

$$\bar{\Phi}_i(t_D) = \frac{k_i}{k_i} \{1 - \langle \bar{G}_i(t_D) \rangle\} \cong \begin{cases} \frac{k_i}{k_i} \left(1 - \frac{3}{16k_i} (2 - q_i - P_{ij} - Q_{ji} \bar{\tau}_{j,i})\right), & k_i \gg 1, \\ \frac{3}{4} \frac{(1+q_i)[(1+P_{ij})(1-q_j P_{ji}) + q_j Q_{ij} Q_{ji} + (1+q_j) Q_{ji} d_{i,i}]}{(1-q_i P_{ij})(1-q_j P_{ji}) - q_i q_j Q_{ij} Q_{ji}} \times k_i \ln \frac{1}{k_i}, & k_i \ll 1, \end{cases} \quad (40)$$



**Рис. 2.** Зависимость проводимости двухслойной монокристаллической пленки от времени диффузионного отжига  $t_{12} = (4D_{12}/d_2^2)t_D$  при следующих значениях параметров: *a* —  $q_1 = 0.1$ ,  $q_2 = 0.3$ ,  $Q_{ij} = 0.1$ ,  $P_{ij} = 0.3$ ,  $A_1 = 1300$ ,  $A_2 = 1500$ ,  $D_{12,1} = 0.1$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $l_{2,1} = 0.5$ ,  $d_{1,2} = 0.01$  (1), 0.1 (2), 1 (3); *b* —  $q_i = 0.3$ ,  $Q_{ij} = 0.1$ ,  $P_{ij} = 0.3$ ,  $d_{1,2} = 0.01$ ,  $A_1 = 1300$ ,  $A_2 = 1500$ ,  $D_{12,1} = 0.1$ ,  $l_{2,1} = 0.5$ ,  $k_2 = 10$  (1), 1 (2), 0.1 (3), 0.01 (4); *c* —  $q_i = 0.3$ ,  $Q_{ij} = 0.1$ ,  $P_{ij} = 0.2$ ,  $d_{1,2} = 0.1$ ,  $D_{12,1} = 0.1$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $l_{2,1} = 1$ ,  $A_i = 1000$  (1), 5000 (2), 10000 (3).

Угловые скобки и функция  $\bar{G}_i(t_D)$  определены выражениями (14) и (20) соответственно, в которых следует произвести замены

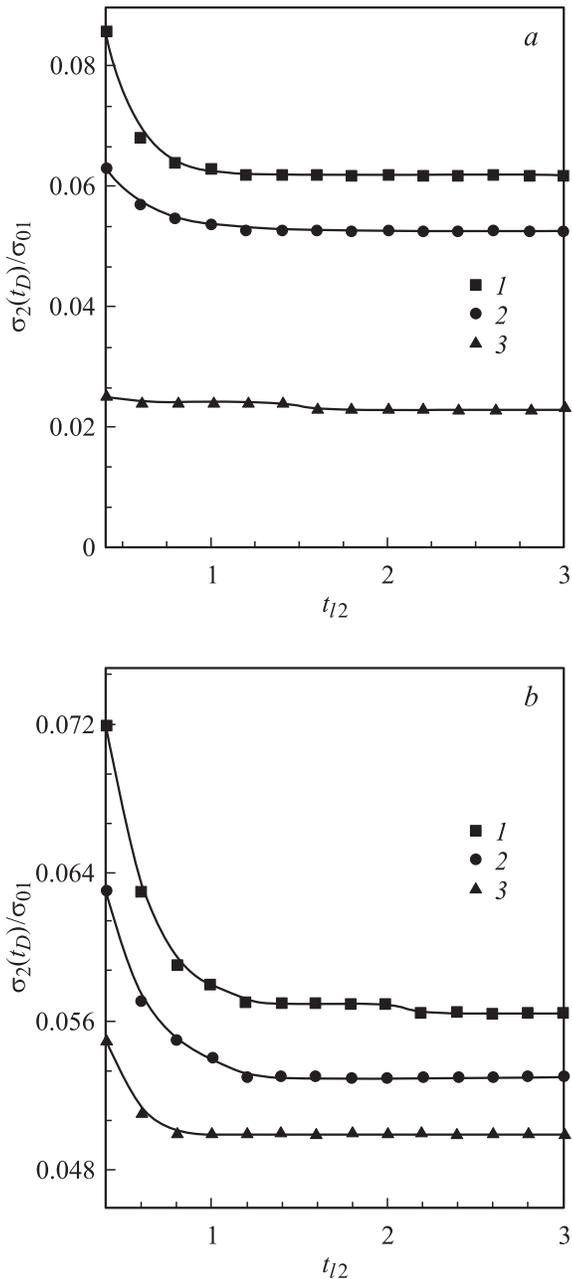
$$k_i \rightarrow \bar{k}_i(t_D) = \frac{d_i}{\bar{l}(t_D)},$$

$$E_i \rightarrow \bar{E}_i(t_D) = \exp\left\{-\frac{\bar{k}_i(t_D)}{z}\right\},$$

$$\tau_{0j,i} \rightarrow \bar{\tau}_{j,i}(t_D) = \tau_{0j,i} \frac{1 + A_i \bar{C}_{li}(t_D)}{1 + A_j \bar{C}_{lj}(t_D)},$$

$$\bar{l}_i(t_D) = \frac{l_{0i}}{1 + A_i \bar{C}_{li}(t_D)} \quad -$$

эффективная длина свободного пробега носителей заряда в  $i$ -м слое двухслойного монокристаллического образца.



**Рис. 3.** Зависимость проводимости тонкого слоя металла, на одну из поверхностной которого нанесен ультратонкий слой металла, от времени диффузионного отжига  $t_{12} = (4D_{12}/d_2^2)t_D$  в предположении, что образец конечный для атомов примеси ( $\sqrt{D_{12}t_D} \sim d_2$ ), при следующих значениях параметров: *a* —  $q_1 = 0.1$ ,  $q_2 = 0.3$ ,  $A = 1500$ ,  $d_{1,2} = 0.01$ ,  $k_2 = 1$  (1), 0.1 (2), 0.01 (3); *b* —  $q_i = 0.1$ ,  $A = 1500$ ,  $d_{1,2} = 0.01$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $q_2 = 1.0$  (1), 0.5 (2), 0 (3).

Кривые, приведенные на рис. 2 и 3, получены с помощью численного расчета по точным формулам (9) и (28) и иллюстрируют временное изменение проводимости двухслойного (рис. 2, *a–c*) и однослойного (3, *a, b*) монокристаллических образцов в результате диффузионного отжига.

#### 4. Зернограничная диффузия в двухслойных пленках с поликристаллической структурой

Теоретический анализ влияния зернограничной диффузии на проводимость двухслойных поликристаллических пленок (рис. 1, *b*) может быть проведен с помощью модифицированной модели МШ [12], учитывающей изменение коэффициента отражения электронов  $R_{0i}$  межкристаллитными границами вследствие миграции вдоль них примесных атомов в процессе взаимной зернограничной диффузии. Такой подход к решению задачи о временном изменении коэффициента электропроводности двухслойных поликристаллических пленок был предложен в работах [6–9].

При низкотемпературном отжиге объемная диффузия „заморожена“ ( $\tau_1^{-1}(x) = 0$ ) [4,5] и сопротивление ДП, обусловленное рассеянием носителей заряда в объеме образца, на межслоевой и внешних границах остается практически неизменным, в то время как сопротивление межкристаллитных границ существенно изменяется за счет появления в них атомов примеси [6–9]. В этом случае эффективное время релаксации носителей заряда, учитывающее рассеяние электронов в объеме образца и на границах зерен, имеет следующий вид [7,10,12]:

$$\frac{1}{\tau_i(x, p_y)} = \frac{1}{\tau_{0i}} \left\{ 1 + \alpha_i(x) \frac{p_0}{|p_y|} \right\}, \quad (42)$$

где  $p_0$  — квазиимпульс электронов на поверхности Ферми,  $p_y$  — его компонента, нормальная к границам зерен.

Величина  $\alpha_i(x)$  является функцией координаты  $x$  вследствие наличия атомов примеси в межкристаллитных границах. При малой концентрации диффундирующих атомов диффузанта в границах зерен величина  $C_{bi}(x, t_D) \ll 1$  и коэффициент рассеяния электронов межкристаллитными границами может быть представлен как  $R_i(x, t_D) = R_{0i} + \gamma_{bi}C_{bi}(x, t_D)$  [6–9], а величина  $\alpha_i(x)$  равна

$$\alpha_i(x) = \alpha_{0i} \frac{1 + (\gamma_{bi}/R_{0i})C_{bi}(x, t_D)}{1 - (\gamma_{bi}/(1 - R_{0i}))C_{bi}(x, t_D)}, \quad (43)$$

где  $\alpha_{0i} = \text{const}$ ,  $R_{0i} = \text{const}$  являются параметрами задачи. Коэффициент  $\gamma_{bi}$  порядка единицы и может иметь любой знак, поскольку, проникая в границы зерен, атомы примеси могут вызвать как увеличение, так и уменьшение  $R_{0i}$ . Если процесс зернограничной диффузии сопровождается образованием твердых растворов [23], то вероятность  $R_{0i}$  увеличивается, и проводимость двухслойного образца уменьшается со временем, т. е.  $\gamma_{bi} > 0$ . Помимо рассеяния непосредственно на межкристаллитных границах электроны могут рассеиваться на существующих вблизи них упругих полях деформации. Атомы примеси вызывают релаксацию этих полей, что соответствует отрицательным значениям  $\gamma_{bi}$  и уменьшению  $R_{0i}$  и, следовательно, увеличению проводимости двухслойной поликристаллической пленки [6–9].

При выполнении неравенства  $\sqrt{D_{bi}t_D} \ll \delta_i$  ( $\delta_i$  — диффузионная ширина междолинной границы) оттоком атомов примеси с границ зерен в объем образца можно пренебречь [24] и считать диффузионный поток одномерным. В этом случае распределение атомов примеси в междолинных границах будет иметь следующий вид [25,26]:

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

$$\beta_i = \left\{ \frac{2}{\delta_i D_{bi}} \left( \frac{D_{li}}{\pi t_D} \right)^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (44)$$

где  $D_{bi}$  — коэффициент зернограницной диффузии в  $i$ -м слое ДП. Величина  $\beta_i^{-1}$  имеет смысл характерной глубины проникновения атомов примеси в  $i$ -й слой ДП вдоль междолинной границы.

Предполагая, что закон дисперсии квадратичен и изотропен в каждом слое ДП, и выполнив интегрирование по поверхности Ферми с учетом формул (42)–(44), можно показать, что проводимость двухслойного поликристаллического образца в условиях взаимной диффузии будет определяться формулой (9), в которой размерная функция  $\Phi_i(t_D)$  равна

$$\Phi_i(t_D) = k_i^2 \left\langle \left\langle \frac{G_{bi}(t_D) H_i^2}{z^2 (1 - R_{bi})} \right\rangle \right\rangle, \quad (45)$$

$$E_{bi} = \exp \left\{ -\frac{k_i H_i}{z} \right\}, \quad H_i = 1 + \frac{\alpha_{0i}}{\cos \varphi \sqrt{1 - z^2}},$$

$$\langle \langle \dots \rangle \rangle = \frac{3}{\pi k_i} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \int_0^1 dz \frac{(z - z^3)(1 - E_{bi})}{H_i^2} \{ \dots \}. \quad (46)$$

Выражение для функции  $G_{bi}(t_D)$  определено формулой (11), где интегралы  $J_i$ ,  $J_{0i}$  и  $J_{di}$  задаются соотношениями (12) и (13), в которых необходимо произвести замену  $W_{li}(x) \rightarrow W_{bi}(x)$ :

$$W_{bi}(x) = \exp \left\{ -\frac{k_i (H_i - 1)}{z} \right.$$

$$\left. \times \left[ 1 - x + \frac{\sqrt{t_{bi}}}{R_{0i}} \ln \left( \frac{1 - \frac{\gamma_{bi} C_{0i}}{1 - R_{0i}} \exp \left( -\frac{1}{\sqrt{t_{bi}}} \right)}{1 - \frac{\gamma_{bi} C_{0i}}{1 - R_{0i}} \exp \left( -\frac{x}{\sqrt{t_{bi}}} \right)} \right) \right] \right\}, \quad (47)$$

$$t_{bi} = \frac{\pi \delta_i^2 D_{bi}^2}{4 d_i^4 D_{li}} t_D. \quad (48)$$

Здесь  $W_{bi}(x)$  определяет вероятность того, что носители заряда пройдут отрезок пути  $[x, 1]$ , не рассеявшись на междолинных границах, вдоль которых мигрируют атомы примеси.

До диффузионного отжига ( $t_D = 0$ ) атомы диффузанта в междолинных границах отсутствуют

( $C_{bi}(x, t_D) = 0$ ) и проводимость ДП с поликристаллической структурой описывается формулой (18), в которой размерная функция  $\Phi_i(0)$  равна [14,27]

$$\Phi_i(0) = T(\alpha_{0i}) - \langle \langle G_{bi}(0) \rangle \rangle. \quad (49)$$

Здесь выражение

$$T(\alpha_{0i}) = 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} + 3\alpha_{0i}^2 - 3\alpha_{0i}^3 \ln \left( 1 + \frac{1}{\alpha_{0i}} \right)$$

$$\cong \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} + 3\alpha_{0i}^2, & \alpha_{0i} \ll 1, \\ \frac{3}{4\alpha_{0i}} - \frac{3}{5\alpha_{0i}^2}, & \alpha_{0i} \gg 1 \end{cases}$$

определяет проводимость безграничного образца с поликристаллической структурой в модели МШ [12]. Угловые скобки в формуле (49) определены выражением (46), а функция  $G_{bi}(0)$  может быть получена из формулы (20) путем замены

$$E_i \rightarrow E_{bi}, \quad \tau_{0j,i} \rightarrow \tau_{j,i} = \tau_{0j,i} \frac{H_i}{H_j} \equiv \tau_{0j,i} H_{i,j}.$$

Если слои ДП толстые ( $d_i \gg l_{0i}$ ), для размерной функции  $\Phi_{bi}(0)$  могут быть получены следующие асимптотические выражения, выполняющиеся при произвольных значениях параметров  $\alpha_{0i}$ ,  $P_{ij}$ ,  $Q_{ji}$  [14]:

$$\Phi_i(0) = T(\alpha_{0i}) - \frac{3}{16k_i} \{ (2 - q_i - P_{ij}) \Gamma_{1,i} - Q_{ji} \tau_{0j,i} \Gamma_{2,i} \}$$

$$\cong \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} - \frac{3}{16k_i} \left[ (2 - q_i - P_{ij}) \left( 1 - \frac{32}{3\pi} \alpha_{0i} \right) - Q_{ji} \tau_{0j,i} \left( 1 - \frac{16}{3\pi} (\alpha_{0i} + \alpha_{0j}) \right) \right], & \alpha_{0i} \ll 1, \\ \frac{3}{4\alpha_{0i}} \left[ 1 - \frac{1}{4k_i \alpha_{0i}} \left[ (2 - q_i - P_{ij}) \left( 1 - \frac{512}{105\pi \alpha_{0i}} \right) - \frac{Q_{ji} \tau_{0j,i} \alpha_{0i}}{\alpha_{0j}} \left( 1 - \frac{256(\alpha_{0i} + \alpha_{0j})}{105\pi \alpha_{0i} \alpha_{0j}} \right) \right] \right], & \alpha_{0i} \gg 1, \end{cases} \quad (50)$$

$$\Gamma_{1,i} = 1 - \frac{32}{3\pi} \alpha_{0i} + 12 \alpha_{0i}^2$$

$$+ \frac{16}{\pi} \{ 5 - (4 - 5\alpha_{0i}^2) \Theta_i \} \alpha_{0i}^3 - 40 \alpha_{0i}^4,$$

$$\Gamma_{2,i} = 1 - \frac{16}{3\pi} \{ \alpha_{0i} + \alpha_{0j} - \frac{3\pi}{4} (\alpha_{0i}^2 + \alpha_{0i} \alpha_{0j} + \alpha_{0j}^2) - 3(\alpha_{0i}^3 + \alpha_{0i}^2 \alpha_{0j} + \alpha_{0i} \alpha_{0j}^2 + \alpha_{0j}^3) + \frac{3\pi}{2} (\alpha_{0i}^4 + \alpha_{0i}^3 \alpha_{0j} + \alpha_{0i}^2 \alpha_{0j}^2 + \alpha_{0i} \alpha_{0j}^3 + \alpha_{0j}^4) + \frac{3}{\alpha_{0i} - \alpha_{0j}} [ \alpha_{0i}^4 (1 - \alpha_{0i}^2) \Theta_i - \alpha_{0j}^4 (1 - \alpha_{0j}^2) \Theta_j ] \},$$

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

Если же толщина слоев  $d_i$  значительно меньше длины свободного пробега электронов  $l_{0i}$  ( $k_i \ll 1$ ), то функция  $\Phi_i(0)$  равна

$$\Phi_i(0) = \frac{3}{4} \frac{(1+q_i)[(1+P_{ij})(1-q_j P_{ji}) + q_i Q_{ij} Q_{ji} + (1+q_j) Q_{ji} d_{j,i}]}{(1-q_i P_{ij})(1-q_j P_{ji}) - q_i q_j Q_{ij} Q_{ji}}$$

$$\times k_i \begin{cases} \ln \frac{1}{k_i}, & \alpha_{0i} \leq k_i, \\ \ln \frac{1}{k_i} - \frac{4}{\pi} \alpha_{0i}, & k_i < \alpha_{0i} \ll 1, \\ \ln \frac{1}{\alpha_{0i} k_i}, & 1 < \alpha_{0i} \ll \frac{1}{k_i}. \end{cases} \quad (51)$$

При небольших временах диффузионного отжига ( $\beta_i^{-1} \ll d_i$ ) интегралы в формуле (9), в которой размерная функция  $\Phi_i(t_D)$  определена выражением (45), можно вычислить асимптотически при  $d_i/l_{0i} \rightarrow \infty$  и получить следующие выражения для проводимости ДП, состоящей из толстых поликристаллических слоев металла:

$$\sigma(t_D) \cong \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i}$$

$$\times \begin{cases} \left[ 1 - \frac{3}{2} \alpha_{0i} \left( 1 + \frac{1}{R_{0i} \beta_i d_i} \right) \times \ln \left[ 1 + \gamma_{bi} C_{0i} \frac{1 - \exp(-\beta_i d_i)}{1 - (R_{0i} + \gamma_{bi} C_{0i})} \right] \right], & \alpha_{0i} \ll 1, \\ \frac{3}{4 \alpha_{0i}} \left( 1 + \frac{1}{(1 - R_{0i}) \beta_i d_i} \right) \times \ln \left[ 1 - \gamma_{bi} C_{0i} \frac{1 - \exp(-\beta_i d_i)}{R_{0i} + \gamma_{bi} C_{0i}} \right], & \alpha_{0i} \gg 1. \end{cases} \quad (52)$$

Асимптотические выражения (52) позволяют найти изменения проводимости  $\Delta\sigma = \sigma(0) - \sigma(t_D)$  ДП, состоящей из толстых поликристаллических слоев, в результате диффузионного отжига

$$\Delta\sigma = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 \sigma_{0i} \beta_i^{-1}$$

$$\times \begin{cases} \frac{3}{2} \alpha_{0i} \left[ R_{0i} \left( \frac{1 - R_{0i}}{\gamma_{bi} C_{0i}} - 1 \right) \right]^{-1}, & \alpha_{0i} \ll 1, \\ \frac{3}{4 \alpha_{0i}} \left[ (1 - R_{0i}) \left( 1 + \frac{R_{0i}}{\gamma_{bi} C_{0i}} \right) \right]^{-1}, & \alpha_{0i} \gg 1. \end{cases} \quad (53)$$

Полученные точные выражения (9) и (45) для проводимости двухслойной поликристаллической пленки в условиях взаимной диффузии могут быть упрощены, если предположить, что слой толщиной  $d_1$  играет роль диффузанта. В этом случае проводимость ДП будет определяться выражением (9), в котором размерные функции имеют следующий вид:

$$\Phi_1 = T(\alpha_{01}) - \langle\langle G_{b1} \rangle\rangle,$$

$$\Phi_2(t_D) = k_2^2 \langle\langle \frac{G_{b2}(t_D) H_2^2}{z^2 (1 - E_{b2})} \rangle\rangle, \quad (54)$$

где функции  $G_{bi}$  определены выражениями (26) и (27), в которых вероятность  $W_{li}(x)$  следует заменить на  $W_{bi}(x)$ ,

экспоненты  $E_1$  — на  $E_{b1}$ , а в третьем слагаемом в фигурных скобках при  $Q_{ji} d_{j,i}$  множитель  $k_i/z$  — на  $k_i/z H_i$ .

При выполнении неравенства  $d_{1,2} < 10^{-2} - 10^{-3}$  проводимостью слоя толщиной  $d_1$  можно пренебречь, и коэффициент электропроводности тонкого поликристаллического образца, на одну из поверхностей которого нанесен ультратонкий слой примесей, равен

$$\frac{\sigma_2(t_D)}{\sigma_{02}} = \Phi_2(t_D) = k_2^2 \langle\langle \frac{G_{b2}(t_D) H_2^2}{z^2 (1 - E_{b2})} \rangle\rangle$$

$$\cong \begin{cases} \left[ 1 - \frac{3}{2} \alpha_{02} \left[ 1 + \frac{1}{\beta_2 d_2 R_{02}} \right] \times \ln \left( 1 + \gamma_{b2} C_{02} \frac{1 - \exp(-\beta_2 d_2)}{1 - (R_{02} + \gamma_{b2} C_{02})} \right) \right], & \alpha_{02} \ll 1, \\ \frac{3}{4 \alpha_{02}} \left[ 1 + \frac{1}{\beta_2 d_2 (1 - R_{02})} \right] \times \ln \left( 1 - \gamma_{b2} C_{02} \frac{1 - \exp(-\beta_2 d_2)}{R_{02} + \gamma_{b2} C_{02}} \right), & \alpha_{02} \gg 1. \end{cases} \quad (55)$$

Здесь функция  $G_{b2}(t_D)$  определена выражением (29), где во всех интегралах вероятность  $W_{l2}(x)$  следует заменить на  $W_{b2}(x)$ , которая описывается формулой (47). Отсюда эффективная глубина проникновения атомов примеси вдоль границ зерен  $\beta_2^{-1}$  равна

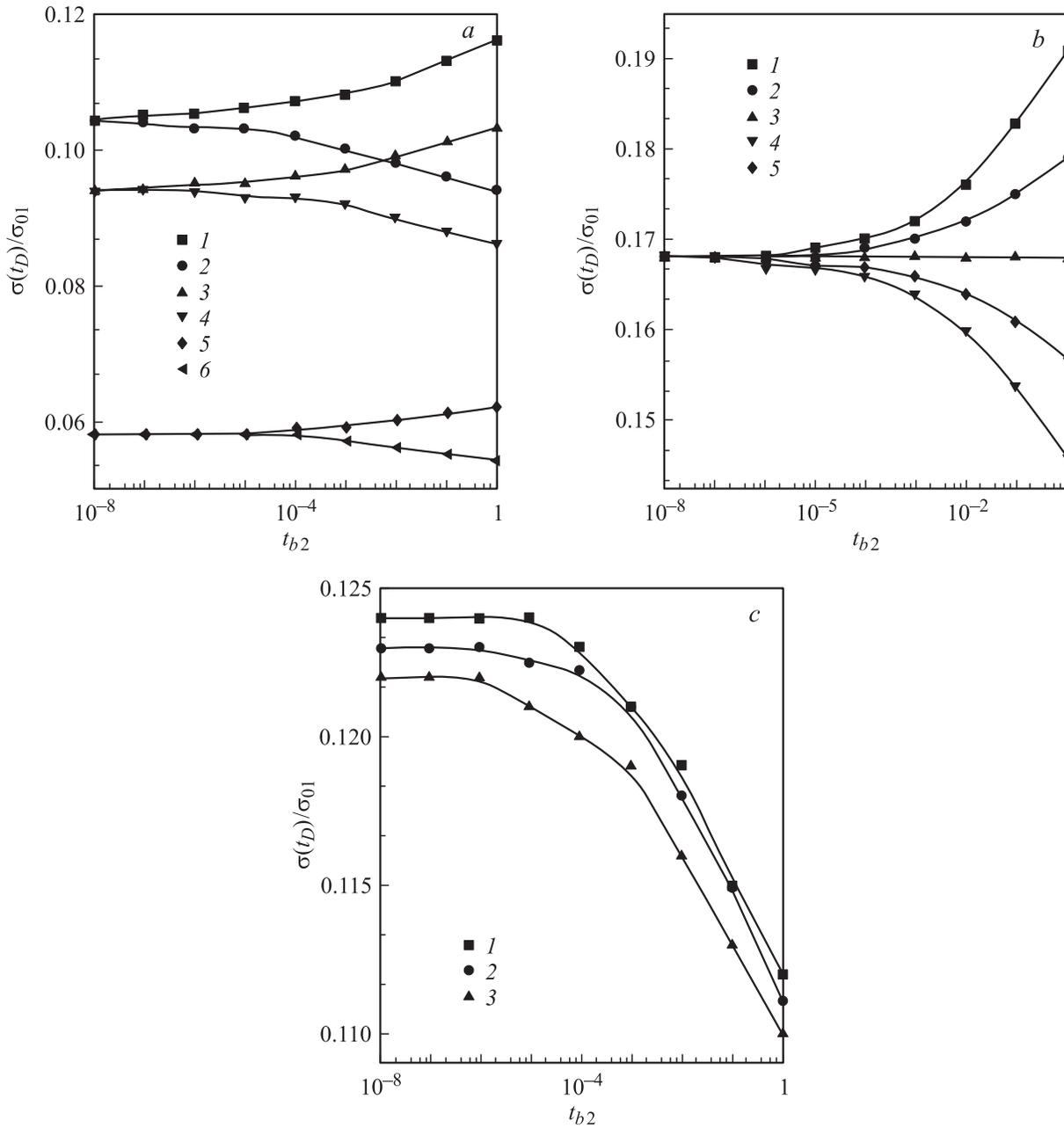
$$\beta_2^{-1} = d_2 \frac{\Delta\sigma_2}{\sigma_{02}} \begin{cases} \left| \frac{R_{02} \left( 1 - \frac{1 - R_{02}}{\gamma_{b2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{2} \alpha_{02}} \right|, & \alpha_{02} \ll 1, \\ \left| \frac{(1 - R_{02}) \left( 1 + \frac{R_{02}}{\gamma_{b2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{4 \alpha_{02}}} \right|, & \alpha_{02} \gg 1. \end{cases} \quad (56)$$

Здесь  $\Delta\sigma_2 = \sigma_2(0) - \sigma_2(t_D)$  — изменение проводимости поликристаллического слоя металла в результате диффузионного отжига, причем проводимость поликристаллического образца до диффузионного отжига  $\sigma_2(0)$  определена в работах [11,28]. С другой стороны, эффективная глубина проникновения примесей в границы зерен определена формулой (44). Сравнивая выражения (44) и (56), можно получить следующее выражение, с помощью которого можно оценить коэффициент зернограничной диффузии:

$$D_{b2} = \left( \frac{4D_{l2}}{\pi t_D \delta_2^2} \right)^{1/2} \left( \frac{d_2 \Delta\sigma_2}{\sigma_{02}} \right)^2$$

$$\times \begin{cases} \left( \frac{R_{02} \left( 1 - \frac{1 - R_{02}}{\gamma_{b2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{2} \alpha_{02}} \right)^2, & \alpha_{02} \ll 1, \\ \left( \frac{(1 - R_{02}) \left( 1 + \frac{R_{02}}{\gamma_{b2} C_{02}} \right)}{\frac{3}{4 \alpha_{02}}} \right)^2, & \alpha_{02} \gg 1. \end{cases} \quad (57)$$

В том случае, когда толщина слоя  $d_2$  является конечной для атомов примеси, мигрирующих вдоль меж-



**Рис. 4.** Зависимость проводимости двухслойной поликристаллической пленки от времени диффузионного отжига  $t_{b2} = (\pi\delta_i^2 D_{b2}^2 / 4d_2^4 D_{l2}) t_D$  при различных значениях параметров, характеризующих образец: *a* —  $q_i = 0.1$ ,  $Q_{ij} = 0.2$ ,  $P_{ij} = 0.3$ ,  $A_1 = 1300$ ,  $A_2 = 1500$ ,  $D_{l2,1} = 0.1$ ,  $d_{1,2} = 0.1$ ,  $l_{2,1} = 0.5$ ,  $\alpha_i = 3$ ,  $R_{0i} = 0.5$ ,  $C_{0i} = 0.1$ ;  $k_2$  и  $\gamma_i$  соответственно: 10 и  $-0.5$  (1), 10 и 0.5 (2), 1 и  $-0.5$  (3), 1 и 0.5 (4), 0.1 и  $-0.5$  (5), 0.1 и 0.5 (6); *b* —  $q_i = 0.1$ ,  $Q_{ij} = 0.2$ ,  $P_{ij} = 0.3$ ,  $A_1 = 1300$ ,  $A_2 = 1500$ ,  $D_{l2,1} = 0.1$ ,  $d_{1,2} = 0.1$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $l_{2,1} = 0.5$ ,  $\alpha_i = 3$ ,  $R_{0i} = 0.5$ ,  $C_{0i} = 0.1$ ,  $\gamma_i = -1.0$  (1),  $-0.5$  (2), 0 (3), 0.5 (4), 1.0 (5); *c* —  $q_i = 0.1$ ,  $Q_{ij} = 0.2$ ,  $P_{ij} = 0.3$ ,  $A_i = 1500$ ,  $D_{l2,1} = 1$ ,  $k_2 = 1.0$ ,  $l_{2,1} = 1.0$ ,  $\gamma_i = 0.5$ ,  $\alpha_i = 5$ ,  $R_{0i} = 0.5$ ,  $C_{0i} = 0.1$ ,  $d_{1,2} = 0.01$  (1), 0.1 (2), 1 (3).

кристаллитных границ ( $d_2 \sim \beta_2^{-1}$ ), их распределение в границах описывается выражением (35) [6–9], и соответственно коэффициент зернограничной диффузии может быть оценен по формуле (36) [6–9].

При больших временах диффузионного отжига можно воспользоваться упоминавшимся ранее приближением средней концентрации [22], при котором распределение примесей вдоль межкристаллитной границы предпола-

ется однородным и определяется выражением

$$\bar{C}_{bi}(t_D) = C_{0i} \sqrt[4]{t_{bi}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{4}{\sqrt[4]{t_{bi}}}\right) \right\}, \quad (58)$$

где величина  $t_{bi}$  задается формулой (48). Это упрощение позволяет выполнить интегрирование по координате  $x$  в (12) и (13) и показать, что проводимость двухслойной поликристаллической пленки определяется форму-

лой (9) с учетом следующих замен:  $\sigma(t_D) \rightarrow \bar{\sigma}(t_D)$ ,  $\Phi_i(t_D) \rightarrow \bar{\Phi}_i(t_D)$ . Точные и асимптотические выражения для размерной функции  $\bar{\Phi}_i(t_D)$  определены формулами (49)–(51) в которых следует произвести следующие замены:

$$\begin{aligned} \Phi_i(0) &\rightarrow \bar{\Phi}_i(t_D), \quad T(\alpha_{0i}) \rightarrow \bar{T}(\bar{\alpha}_{0i}), \\ \alpha_{0i} &\rightarrow \bar{\alpha}_{0i}(t_D) = \alpha_{0i} \frac{1 + (\gamma_{bi}/R_{0i})\bar{C}_{bi}(t_D)}{1 - (\gamma_{bi}/(1 - R_{0i}))\bar{C}_{bi}(t_D)}. \end{aligned} \quad (59)$$

При произвольном соотношении между величинами  $\beta_i^{-1}$  и  $d_i$  анализ экспериментальных данных может быть осуществлен на основе численного расчета по формуле (9), в которой размерная функция определена выражением (45). На рис. 4, *a–c* приведены полученные с помощью численного расчета кривые, описывающие временное изменение проводимости двухслойной поликристаллической пленки в условиях взаимной зернограничной диффузии при различных значениях параметров.

## 5. Заключение

Итак, взаимная диффузия металлов оказывает существенное влияние на электропроводность двухслойных металлических пленок с моно- и поликристаллической структурой. При небольших временах диффузионного отжига  $t_D$ , когда эффективная глубина проникновения атомов примеси в объем образца  $\sqrt{D_{li}t_D}$  значительно меньше толщины монокристаллических слоев  $d_i$  ДП, размерный эффект в ДП определяется шириной чистой области. Если же слои ДП имеют поликристаллическую структуру, то миграция атомов примеси вдоль границ зерен в результате диффузионного отжига изменяет их рассеивающую способность, а следовательно, и проводимость ДП. Экспериментальное измерение проводимости моно- и поликристаллического образца до и после диффузионного отжига позволяет определить эффективную глубину проникновения атомов примеси в объем образца и границы зерен и таким образом оценить коэффициенты объемной и зернограничной диффузии по формулам (33) и (57) соответственно.

Если же характерная глубина проникновения атомов примеси в объем слоев и в межкристаллитные границы порядка толщины слоев, то для нахождения коэффициентов объемной и зернограничной диффузии необходимо определить минимальное время диффузии отжига  $t_{D \min}$ , такое, чтобы при  $t_D > t_{D \min}$  дальнейший диффузионный отжиг двухслойного образца почти не изменял его проводимость [6–9]. В этом случае коэффициенты объемной и зернограничной диффузии могут быть вычислены по формуле (36).

При использовании метода средней концентрации для анализа временного изменения проводимости ДП с моно- и поликристаллической структурой выявленная простая связь между коэффициентами электропроводности ДП и параметрами  $\bar{l}_i(t_D)$  (41) и  $\bar{\alpha}_i(t_D)$  (59) также позволяет получить информацию о коэффициентах объемной и зернограничной диффузии.

Авторы выражают благодарность И.Е. Проценко за обсуждение результатов работы.

## Список литературы

- [1] С.В. Гуденко, И.П. Крылов. Письма в ЖЭТФ **28**, 243 (1978).
- [2] С.В. Гуденко, И.П. Крылов. ЖЭТФ **86**, 2304 (1984).
- [3] В.Ф. Коваль, В.И. Ватаманюк, Ю.С. Остроухов, О.А. Панченко. ФНТ **12**, 880 (1986).
- [4] J.C.M. Hwang, R.W. Balluffi. J. Appl. Phys. **50**, 1339 (1979).
- [5] J.C.M. Hwang, J.D. Pan, R.W. Balluffi. J. Appl. Phys. **50**, 1349 (1979).
- [6] Р.П. Волкова, Л.С. Палатник, А.Т. Пугачев. ДАН СССР **259**, 351 (1981).
- [7] Р.П. Волкова, Л.С. Палатник, А.Т. Пугачев. ФТТ **24**, 1161 (1982).
- [8] Ю.А. Волков, Р.П. Волкова, А.Т. Пугачев. ФММ **62**, 298 (1986).
- [9] Р.П. Волкова, Ю.А. Волков. Металлофиз. новейшие технол. **25**, 727 (2003).
- [10] Л.В. Дехтярук, Ю.А. Колесниченко. ФММ **75**, 21 (1993).
- [11] L.V. Dekhtyaruk, Yu.A. Kolesnichenko, V.G. Peschansky. Physics Reviews **20**, 3 (2004),
- [12] A.F. Mayadas, M. Shatzkes. Phys. Rev. B **1**, 1382 (1970).
- [13] О.А. Белоус, Л.В. Дехтярук, А.М. Черноус. Металлофиз. новейшие технол. **23**, 43 (2001).
- [14] L.V. Dekhtyaruk, S.I. Protchenko, A.M. Chornous, I.O. Shpetnyi. Ukr. J. Phys. **49**, 587 (2004).
- [15] Ю.А. Колесниченко. ФНТ **11**, 1165 (1985).
- [16] Ю.А. Колесниченко. ФНТ **12**, 632 (1986).
- [17] А.И. Райченко. Математическая теория диффузии в приложениях. Наук. думка, Киев (1981). 394 с.
- [18] Л.В. Дехтярук, Ю.А. Колесниченко. ФНТ **19**, 1013 (1993).
- [19] A.V. Pippard. Proc. Roy. Soc. **224**, 273 (1954).
- [20] K. Fuchs. Proc. Camb. Phil. A **34**, 100 (1938).
- [21] M.S.P. Lucas. J. Appl. Phys. **36**, 1632 (1965).
- [22] Тонкие пленки: взаимная диффузия и реакция / Под ред. Дж. Поута, К. Ту, Дж. Мейера. Мир, М. (1982). 576 с.
- [23] J.W. Chan, J.P. Pan, R.W. Balluffi. Scripta Met. **13**, 503 (1979).
- [24] J. Kaur, W. Gust. Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. Ziegler Press, Stuttgart. (1988). 458 p.
- [25] J.C. Fisher. Appl. Phys. **22**, 74 (1951).
- [26] С.М. Клоцман. УФН **160**, 99 (1991).
- [27] В.И. Верченко, В.И. Гришаев, Л.В. Дехтярук, Ю.А. Колесниченко, Т.Д. Шермегор. ФММ **69**, 102 (1990).
- [28] A.M. Ghodgaonkar, K. Ramani. Phys. Stat. Sol. (a) **73**, K21 (1982).