ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 10, № 3 (2009) С. 586-587

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 10, № 3 (2009) P. 586-587

PACS: 61.43.DQ, 68.60.DV, 71.20.RV

ISSN 1729-4428

Р.І. Бігун, З.В. Стасюк

Межі застосовності теорій квантового переносу в ультратонких плівках простих металів

Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Драгоманова,50, Львів, 79005

На основі результатів розрахунку електронної структури ультратонких металевих плівок у рамках теорії функціоналу густини показано, що величина енергії Фермі E_F вільних плівок міді та золота товщиною більшою за 2-3 нм достатньо близька до значення енергії Фермі масивних зразків металу. Отриманий результат дає змогу використовувати теоретичні моделі [3-5] для пояснення кінетичних явищ в ультратонких плівках золота та міді.

Ключові слова: тонкі металеві плівки простих металів, електронна структура, теорія функціоналу густини, енергія Фермі.

Стаття поступила до редакції 29.04.2009; прийнята до друку 15.06.2009.

Коли товщина плівки стає співмірною довжині хвилі Фермі λ_F вільного електрона, на явища переносу в плівці починають впливати квантово-інтерференційні ефекти. У роботах Тесановіча З. [1,2] на основі квантово-механічного підходу до аналізу впливу поверхневої шорсткості на транспортні явища в металевих плівках було виявлено залежність умов квантового переносу від амплітуди поверхневих шорсткостей. Результати теорії успішно використано для пояснення розмірних залежностей питомого опору тонких плівок $CoSi_2$. Було показано, що питома провідність σ має набагато сильнішу залежність від товщини ($\sigma \sim d^2$) тонких плівок, на відміну від аналогічної залежності для товстих плівок ($\sigma \sim d$). Отримані результати були узагальнені в роботах Фішмана Д. та Цалєцкого Д. [3-5], в яких показано, що в режимі квантового переносу заряду залишкова провідність проявляє степеневу залежність від товщини плівки d: $\sigma \sim d^{\alpha}$ (де $2,1 < \alpha < 6$). Показник $\alpha = 2,1$ відповідає числу каналів провідності $N >> 1$, що характеризує металевий перенос заряду у плівці, а $\alpha = 6$ відповідає $N = 1$ та характеризує напівпровідникові та діелектричні плівки. Вище згадані теорії явищ переносу заряду базуються на припущені, що електронна енергетична структура досліджуваного зразка ідентична енергетичній структурі масивного зразка металу. Тому цікавим є розрахунок зонної енергетичної структури ультратонких плівок металів з метою вияснення умов, при яких електронний енергетичний спектр плівкового зразка може вважатись ідентичним електронній структурі масивного металу.

Розрахунок зонної енергетичної структури вільних плівок металів проводили в рамках теорії функціоналу густини (ТФГ) [6,7]. В [6] розроблено програмний пакет FLEUR, який дозволяє проводити гнучкий розрахунок зонної структури, як тонких плівок металів, так і масивних зразків.

Розрахунок електронної енергетичної структури вільних металевих плівок, виконаний при трактуванні плівки в якості одномірного потенціальної ями шириною рівною товщині плівки, дає осциляційні залежності основних параметрів від товщини шару [3-5]. На Рис. 1 наведено відносні зміни енергії Фермі плівки міді при зміні товщини шару (крива 1). З рисунка видно, що в діапазоні товщин у межах 1-10 атомних шарів наявні осциляції E_F і лише при більших товщинах плівок енергія Фермі прямує до величин, близьких енергії Фермі масивного металу. Розрахунок електронної будови плівок одновалетних металів, виконаний з використанням моделі [6,7], дозволяє отримати результати, які краще відтворюють експериментальні дані. Зрелаксована структура ґратки плівки металу має менші значення повної енергії системи, що наближає структуру даної плівки металу до експериментально спостережуваної. З кривих 2 та 3 показаних на Рис. 1 видно, що найбільші відхилення значень енергії Фермі спостерігаються в області малих товщин плівки металу товщиною до 1-3 атомних шарів, а при товщинах 5-6 атомних шарів амплітуда відхилень зменшується, а значення енергії Фермі наближається до значення енергії Фермі масивного металу. Отриманий результат підтверджує

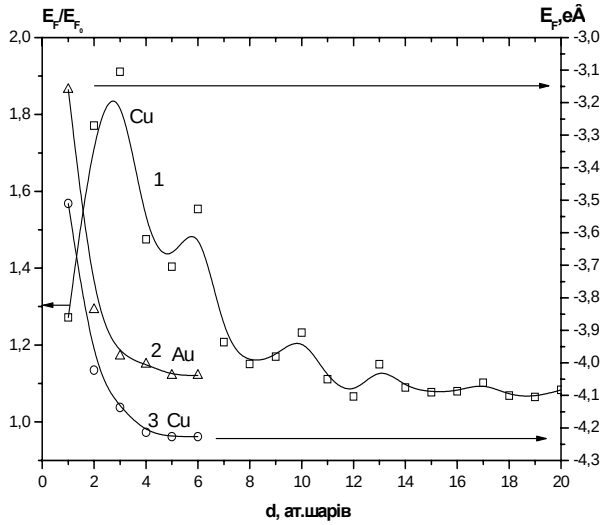

Рис. 1. 1 – відносна зміна енергії Фермі E_F у плівці міді розрахована в рамках моделі про частинку в потенціальній ямі. (E_{F_0} – енергія Фермі масивного зразка міді металу). 2 та 3 – розмірні залежності енергії Фермі E_F вільних плівок міді та золота розрахованих в рамках ТФГ.

той факт, що параметри електронної структури електрично суцільних металевих плівок товщиною більшою за 6 атомних шарів (2-3 нм) близькі до аналогічних енергетичних параметрів масивного металу. Тому при трактуванні результатів експериментального дослідження електричних властивостей ультратонких електрично суцільних плівок металів можна користуватись виразами теорії [1-5]. Зауважимо, що таке трактування було здійснене в експериментальних роботах [8,9].

Таким чином, розрахунки електронної структури ультратонких металевих плівок в рамках теорії функціоналу густини показали, що енергія Фермі E_F вільних плівок міді та золота товщиною, більшою за 2-3 нм, достатньо близька до значення енергії Фермі масивних зразків металу. Отриманий результат дає змогу використовувати теоретичні моделі [3-5] при трактуванні експериментальних даних.

Стасюк З.В. **–** доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізичної і біомедичної електроніки, факультет електроніки.
Бігун Р.І. **–** кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри фізичної і біомедичної електроніки, факультету електроніки.

[1] Tesanovic Z., Jaric M., Maekawa S. Quantum transport and surface scattering // Phys. Rev. B. 57(21), P.2760-2763 (1986).
[2] Tesanovic Z. Surface scattering effects in quantum transport // J. Phys. C: Solid State Phys. 20(6), P. L829-L834 (1987).
[3] Fishman G., Calecki D. Surface-induced resistivity of ultrathin metallic films: a limit law // Phys. Rev. Letters. 62(11), P.1302-1305. (1989).
[4] Fishman G., Calecki D. Influence of surface roughness on the conductivity of metallic and semiconduting quasi-two-dimensional structures // Phys. Rev. B. 3(14), P.11581-11586 (1990).
[5] Calecki D. Galvanomagnetic phenomena and surface roughness in thin metallic films // Phys. Rev. B. 42(11), P.6906-6915 (1990).
[6] Blűgel S., Bihlmayer G. Full-Potential linearized augmented planewave method // Computational Nanoscience. 31, P. 85-129. (2006).
[7] Jones R.O., Gunnarson O. Density functional formalism, its applications and prospects // Rev. Mod. Phys. 61, P.689-695 (1989).
[8] Р.І. Бігун, З.В. Стасюк. Перехід від квантового до класичного переносу заряду в тонких плівках міді // Фізика і хімія твердого тіла. 6(3), С. 414–417 (2005).
[9] З.В Стасюк, Р.І. Бігун. Балістичний перенос заряду в ультратонких плівках міді // Металофізика і новітні технології. 29(6), С.781-785 (2007).

R.I. Bihun, Z.V. Stasyuk

The Application Edge of Quantume Transport Theories in Ultra Thin Simple Metal Films

'Ivan Franko' Lviv National University
50, Dragomanova Str., Lviv, 79005, Ukraine

Electron structure of ultra thin cupper and gold films in the framework of density functional theory (DFT) was calculated. It was shown, that Fermi energy of cupper and gold films with thickness more 2-3 nm are close to the those bulk metals. The quntume transport theories [3-5] can be used for explanation of electron transport phenomena in ultra thin metal films.