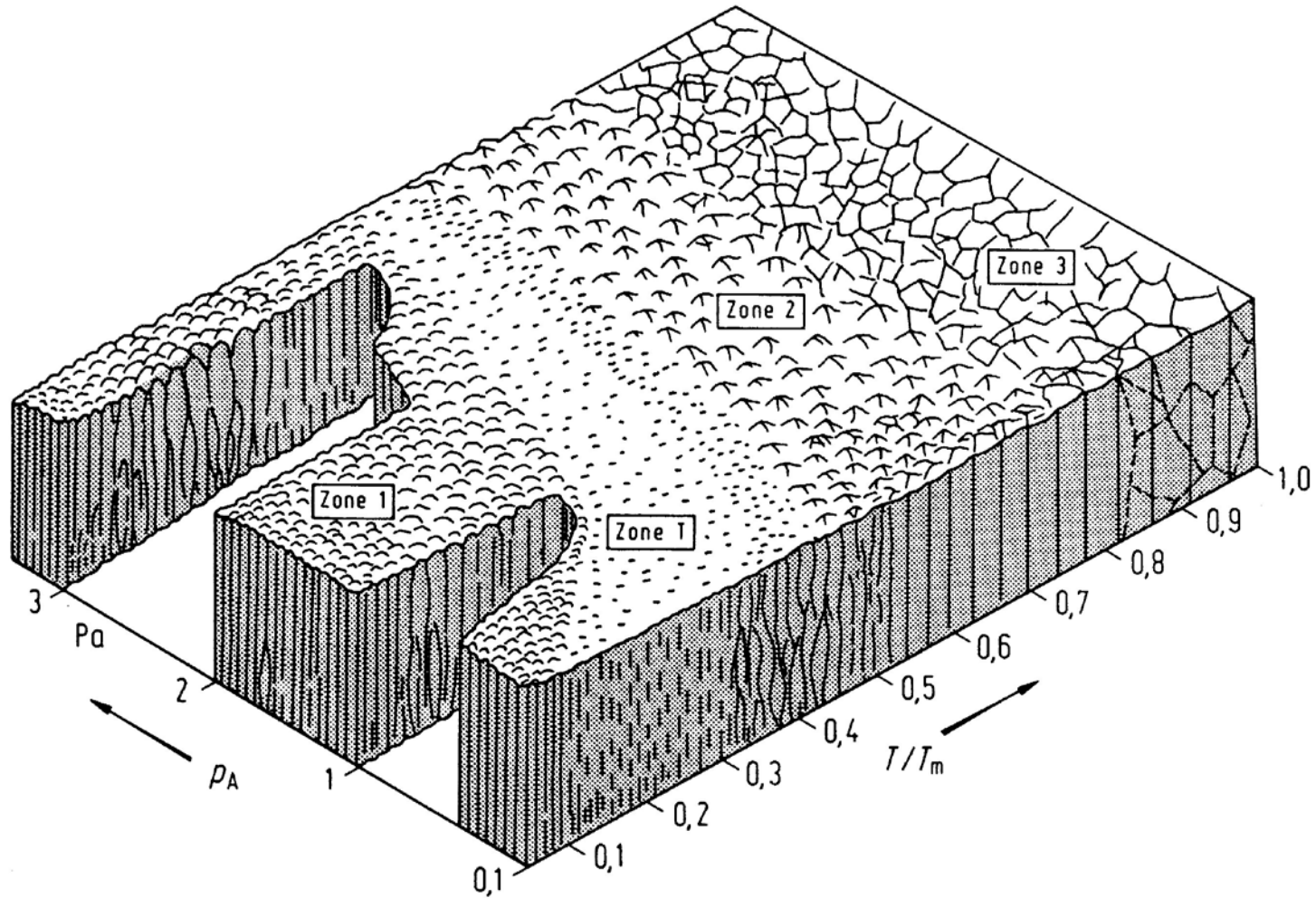


Wiederholung: Strukturzonendiagramme



Wiederholung: Wachstumsmechanismen

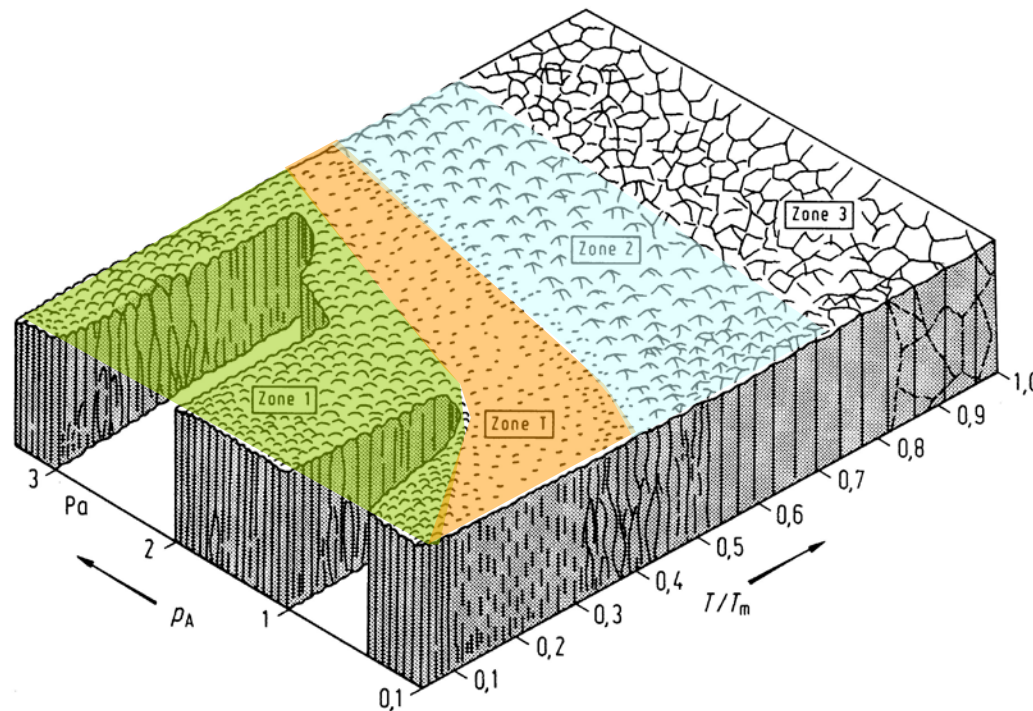
Zone	Mechanismus	Merkmal
1: $T/T_M < 0,2$	Abschattung	Fibern, Poren
T: $T/T_M < 0,4$	Teilchenenergie	Nanokörner
2: $T/T_M < 0,8$	Oberflächendiffusion	Säulige Kristalle
3: $T/T_M > 0,8$	Volumsdiffusion	3d - Körner

Wiederholung: Spannungen/Schichtstruktur

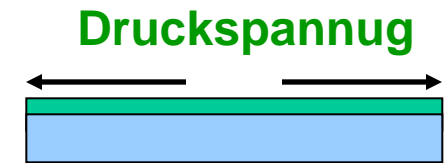
Intrinsische Spannung:

σ_I

Intrinsische Spannungen sind eine direkte Folge der Schichtstruktur und der Depositionsbedingungen.

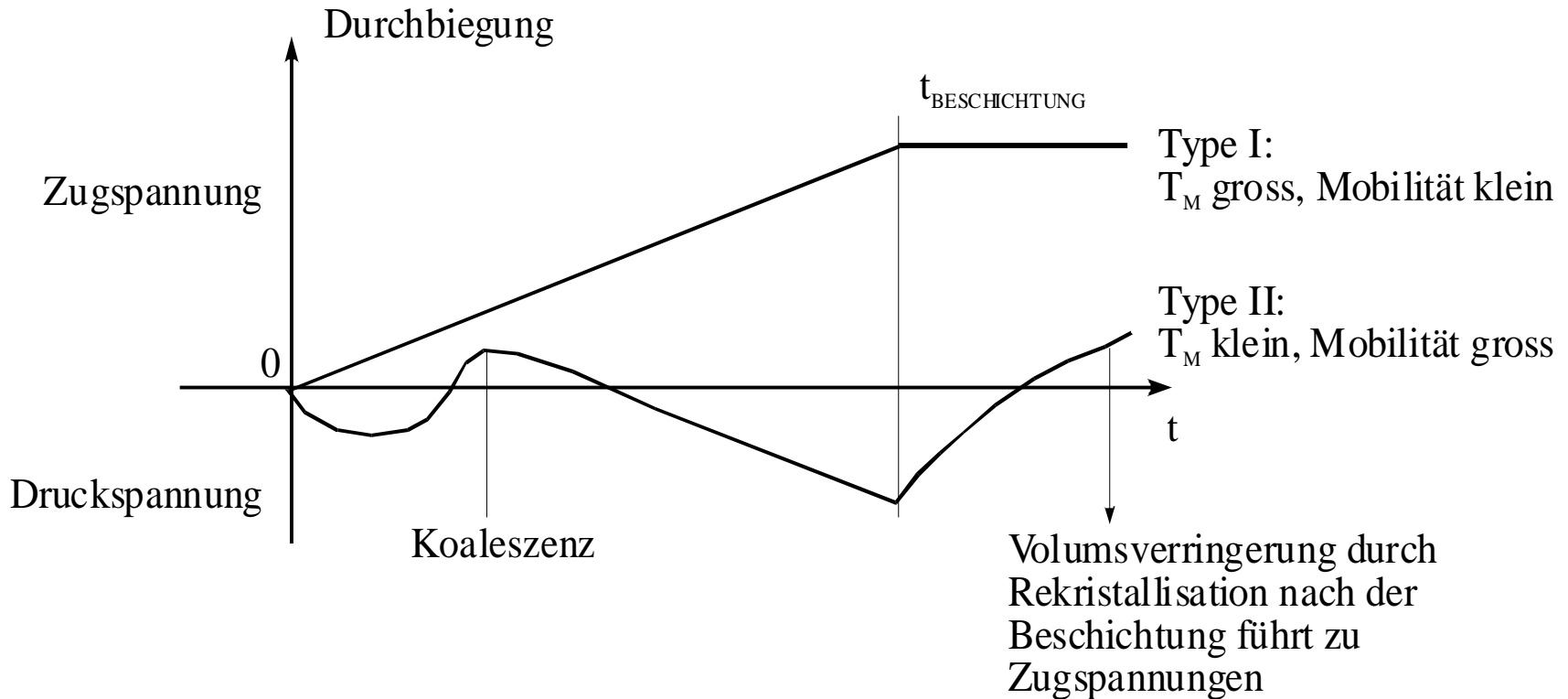


- Zugspannung
- Druckspannung
- Variabel



Wiederholung: Spannungen/Schichtwachstum

In-Situ-Messungen mittels Biegearmmethode:



Einfluss der Schichtdicke auf σ_l

Elektronische Eigenschaften

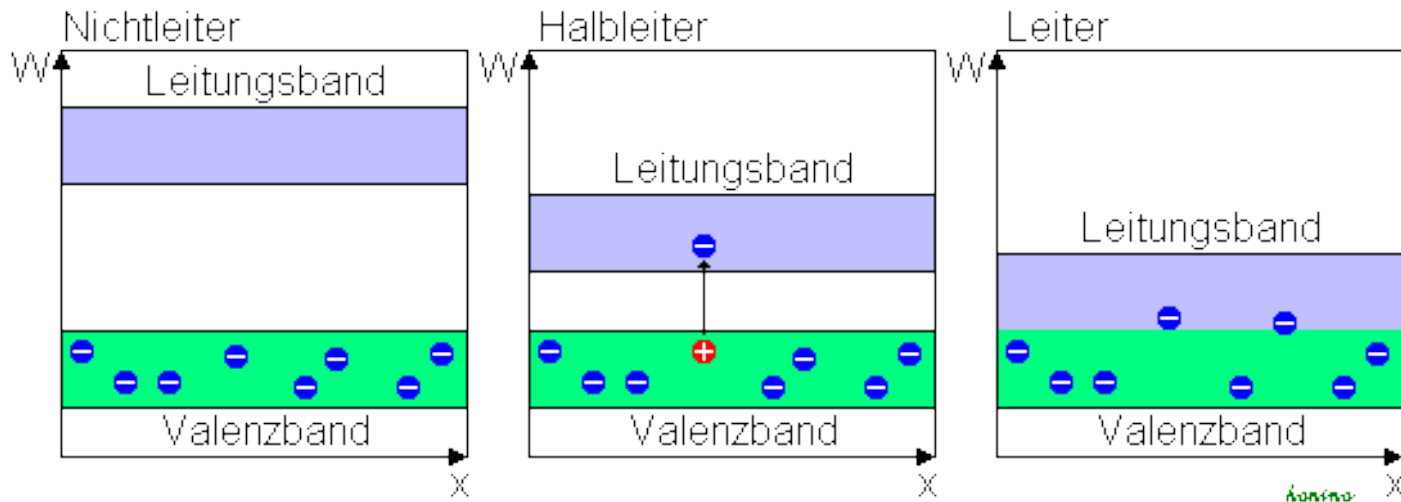
Die Eigenschaften des elektronischen Systems eines Materiales haben Einfluss auf:

- + Leitfähigkeit**
- + Optische Eigenschaften**
- + Magnetische Eigenschaften**
- + Adsorption und Adhäsion**

Diese Eigenschaften werden bei Dünnschichtsystemen auch noch durch das hohe Verhältnis von Oberfläche zu Volumen modifiziert

Materialklassen und Leitfähigkeit

Verschiedene Materialklassen können mittels des **Bändermodelles** unterschieden werden. Im wesentlichen beschreibt es den **Übergang von kovalenter zu metallischer Bindung**.



Elektronische Bauteile und dünne Schichten

Mittels Dünnschichttechnologie können folgende elektronische Bauteile realisiert werden:

+ Leiterbahnen



+ Dünnschichtwiderstände



+ Kondensatoren



+ Dioden



+ Transistoren



+ MOSFETS



Elektrische Leitfähigkeit von Metallen

Makroskopische Beschreibung: Ohm'sches-Gesetz

$$I = \frac{U}{R}$$

I = Strom

U = Spannung

R = Widerstand

Mikroskopische Beschreibung: Drude-Gesetz

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{2m_e} \vec{E} = \sigma \cdot \vec{E}$$

j = Stromdichte

E = E-Feld

σ = Leitfähigkeit

n = Ladungsträgerzahl

e = Elementarladung

m_e = Elektronenmasse

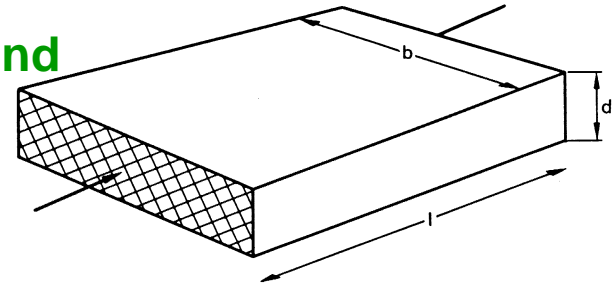
τ = mittlere Stosszeit

Flächenwiderstand

Geometrie und elektrischer Widerstand:

$$R = \rho \frac{l}{d \cdot b}$$

ρ = Spezifischer Widerstand



Eine wichtige Kenngrösse in der Dünnschichttechnik ist der Flächenwiderstand: bei $l=b$ (quadratische Grundfläche) gilt

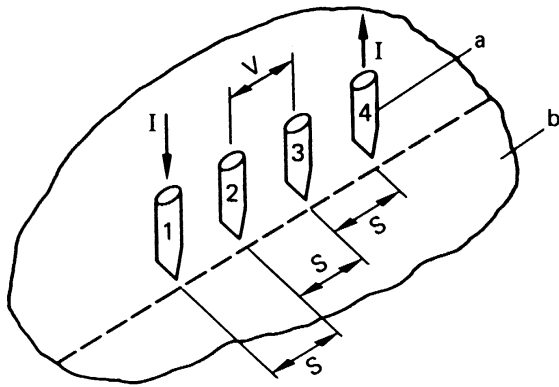
$$R = R_{\square} = \frac{\rho}{d}$$

unabhängig von der Grösse des Quadrates.

Messung des Flächenwiderstandes

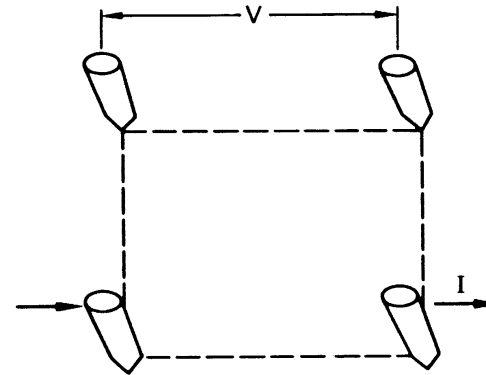
Vierpunktmethoden:

linear



$$R_{\square} = 4,532 \cdot \frac{U}{I}$$

quadratisch



$$R_{\square} = 9,06 \cdot \frac{U}{I}$$

- + Der Elektrodenabstand muss viel kleiner als die Schichtfläche sein.
- + Vorfaktoren resultieren aus der Elektrodengeometrie.
- + Vierpunktsonden werden üblicherweise kalibriert.

Theorie der Leitfähigkeit

Drude-Theorie:

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{2m_e} \vec{E} = \sigma \cdot \vec{E}$$

j = Stromdichte

E = E-Feld

σ = Leitfähigkeit

n = Ladungsträgerzahl

e = Elementarladung

m_e = Elektronenmasse

τ = mittlere Stosszeit

Der zentrale Punkt der Drude-Theorie ist die

Mittlere Stosszeit τ

Die mittlere Stosszeit

Die mittlere Stosszeit τ errechnet sich aus der "Matthiessen-Regel":

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_G} + \frac{1}{\tau_K} + \frac{1}{\tau_V} + \dots$$

τ_G = Streuung an Gitteratomen

τ_K = Streuung an Korngrenzen

τ_V = Streuung an Verunreinigungen

Wesentlich für die Grösse der Leitfähigkeit ist also die Art und die Anzahl der Defekte, an denen Elektronen gestreut werden.

Auch Grenzflächen jeder Art stellen Defekte dar. Damit ergibt sich automatisch die Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Schichtdicke!

Leitfähigkeit und Transporttheorie

Für eine mathematisch korrekte und auch quantenmechanisch haltbare Berechnung der Leitfähigkeit von Festkörpern bzw. dünnen Schichten muss die **Boltzmann'sche Transporttheorie** angewendet werden.

Leitfähigkeit ohne E-Feld

Generelle Vorgangsweise zur Berechnung der Leitfähigkeit von Metallen:

Ausgangspunkt: Stromdichte

$$\vec{j}_e = -ne\vec{v} = -e\vec{v} \int_N \frac{dn}{V} = -e\vec{v} \frac{N}{V} = -ne\vec{v}$$

$$dn = 2 \cdot f_0(E) \cdot d\Phi$$

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_f/k_B T)}}$$

Fermi-Verteilung

$$d\Phi = \frac{d^3x d^3p}{h^3}$$

Phasenraumvolumen,

Anzahl der Zustände im

Phasenraumvolumenelement $d^3x d^3p$

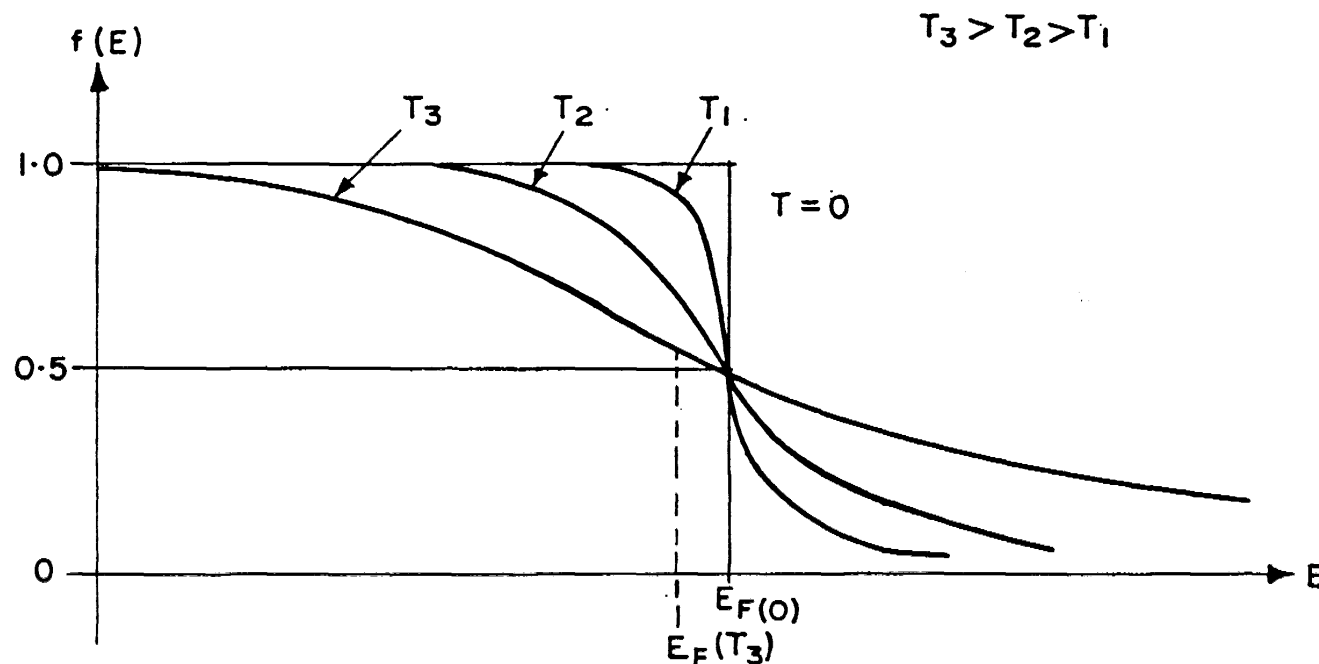
2

Spin-Zahl

Struktur der Fermi-Verteilung

Ungestörte Fermi-Verteilung:

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_f / k_B T)}}$$



Berechnung der Stromdichte I

Kein E-Feld bedeutet keine Störung der Fermi-Verteilung:

$$f_0(\vec{v}) = \frac{1}{1 + e^{\left[\left(\frac{mv^2}{2} - \frac{mv_f^2}{2} \right) / k_B T \right]}}$$

$$\begin{aligned} \vec{j}_e &= -e \int_{R, \vec{v}} \vec{v} \frac{dn}{V} = -2e \int_{R, \vec{v}} \vec{v} f_0(\vec{v}) \frac{d\Phi}{V} = \left| d\Phi = \left(\frac{m}{h} \right)^3 d^3x d^3v \right| = \\ &= -2e \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{V} \cdot \int_{\vec{R}} d^3x \int_{\vec{v}} \vec{v} f_0(\vec{v}) d^3v = -2e \left(\frac{m}{h} \right)^3 \int_{\vec{v}} \vec{v} f_0(\vec{v}) d^3v = 0 \end{aligned}$$

Berechnung der Stromdichte II

E-Feld bedeutet Störung der Fermi-Verteilung durch Stöße:

$$f(\vec{v}) \neq f_0(\vec{v})$$

Die Berechnung der gestörten Verteilungsfunktion $f(v)$ ist der Kern der Boltzmann'schen Transporttheorie!

Die Boltzmann-Gleichung

Beschreibung der Änderung von f durch Stöße

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{v}, t)}{dt} = \left(\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{A}} \right)_{\text{coll}}$$

Formulierung für geladene Teilchen

$$\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{A}} + \vec{\nabla}_r f \underbrace{\frac{d\vec{r}}{dt}}_v + \vec{\nabla}_v f \underbrace{\frac{d\vec{v}}{dt}}_{a=\vec{F}/m=-\frac{e\vec{E}}{m}} = \left(\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{A}} \right)_{\text{coll}}$$

$$\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{A}} + \vec{v} \vec{\nabla}_r f - \frac{e\vec{E}}{m} \vec{\nabla}_v f = \left(\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{A}} \right)_{\text{coll}}$$

Stöße und Relaxation

Ansatz für den Kollisionsterm:

$$f(t) - f_0 = C \cdot e^{-t/\tau}$$

Dieser Ansatz liefert:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = - \frac{f(t) - f_0}{\tau}$$

Das bedeutet: Nach der Störung von f_0 durch einen Stoss nähert die gestörte Funktion f wiederum exponentiell an f_0 an.

Die gestörte Verteilungsfunktion f

Ansatz:

$$f = f_0 + A \quad \text{A...Störterm, unabhängig von } v$$

Einsetzen in die Boltzmann-Gleichung:

$$\vec{v} \vec{\nabla}_r (f_0 + A) - \frac{eE}{m} \frac{\partial (f_0 + A)}{\partial v_x} = -\frac{1}{\tau} (f_0 + A - f_0)$$

$$A = \frac{eE}{m} \tau \frac{\partial f_0}{\partial v_x}$$

$$f = f_0 + \frac{eE}{m} \tau \frac{\partial f_0}{\partial v_x}$$

Die Ableitung von f_0 nach v hat einen wesentlichen Einfluss auf die Berechnung der Stromdichte j !

Berechnung der Stromdichte III

Berechnung der Stromdichte mit f anstatt f_0 :

$$f = f_0 + \frac{eE}{m} \tau \frac{\partial f_0}{\partial v_x}$$

Einsetzen in den Ausdruck für j :

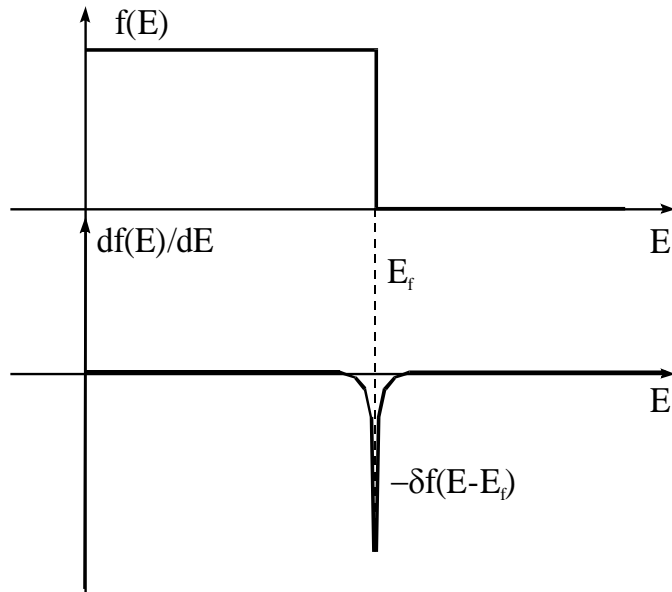
$$\vec{j}_e = -ne\vec{v} = -e \int \vec{v} \frac{dn}{V} = |dn = 2 \cdot f(\vec{v}) d\Phi| = -2e \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{V} \int_{\vec{R}, \vec{v}} \vec{v} f(\vec{v}) d^3x d^3v$$

Berechnen von j_x :

$$j_x = -2e \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{V} \int_{\vec{R}} d^3x \underbrace{\int_{\vec{v}} f_0(\vec{v}) v_x d^3v}_{=0} - \frac{2e^2 E}{m} \left(\frac{m}{h} \right)^3 \tau \frac{1}{V} \int_{\vec{R}} d^3x \int_{\vec{v}} v_x \frac{\partial f_0}{\partial v_x} d^3v =$$
$$= \left| \frac{1}{V} \cdot \int_{\vec{R}} d^3x = 1 \right| = \underbrace{-2e^2 E \frac{m^2}{h^3}}_C \tau \int_{\vec{v}} v_x \frac{\partial f_0}{\partial v_x} d^3v$$

Berechnung der Stromdichte IV

Lösung von $\int_{\vec{v}} v_x \frac{\partial f_0}{\partial v_x} d^3 v$:



$$\int_{\vec{v}} v_x \frac{\partial f_0}{\partial v_x} d^3 v = \left| d^3 v = 4\pi v^2 dv \right| = \int_{\vec{v}} v_x \frac{\partial f_0}{\partial v_x} 4\pi v^2 dv =$$

$$\left| \frac{\partial f_0}{\partial v_x} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial v_x} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot m v_x \right| = 4\pi m \int_{\vec{v}} v_x^2 \underbrace{\frac{\partial f_0}{\partial E}}_{-\delta(E-E_f)} v^2 dv$$

Nach einigen weiteren Umformungen (Anhang) erhält man:

$$j = \frac{8\pi e^2 \tau m^2 v_f^3}{3h^3} E = \sigma E$$

Vergleich: Drude-Modell/Transporttheorie

Drude:

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{2m_e} \vec{E} = \sigma \cdot \vec{E}$$

Boltzmann:

$$\vec{j} = \frac{8\pi e^2 \tau m_e^2 v_f^3}{3h^3} \vec{E} = \sigma \vec{E}$$

$$n = \frac{1}{V} \int dn =$$

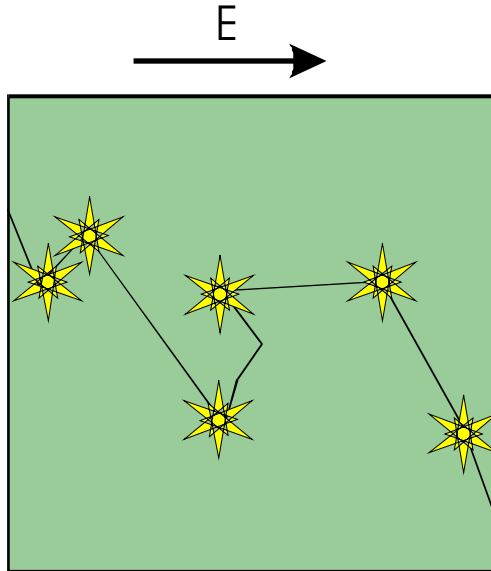
$$= \frac{1}{V} \int_{\vec{R}, \vec{v}} 2f_0 \left(\frac{m}{h} \right)^3 d^3x d^3v = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{v_f m}{h} \right)^3$$

$$\mathbf{j}_{Drude} = 1/2 \mathbf{j}_{Boltzmann}$$

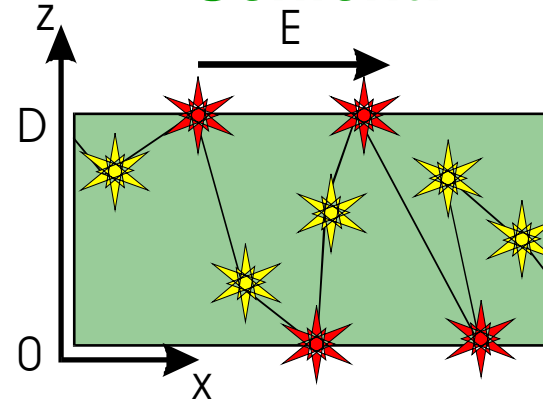
$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m_e} \vec{E} = \sigma \cdot \vec{E}$$

Transporttheorie für dünne Schichten

Bulk:



Schicht:



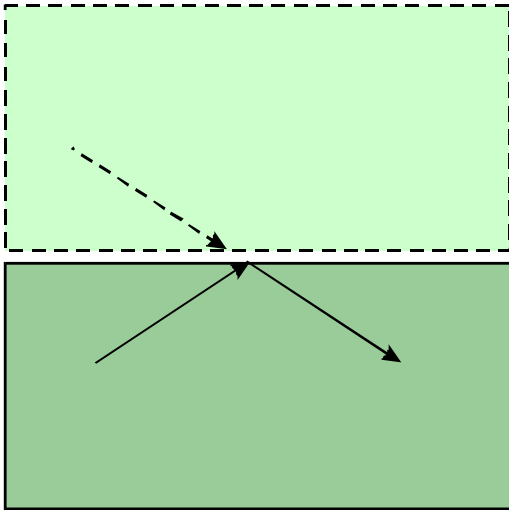
$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_G} + \frac{1}{\tau_K} + \frac{1}{\tau_V}$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_G} + \frac{1}{\tau_K} + \frac{1}{\tau_V} + \frac{1}{\tau_I}$$

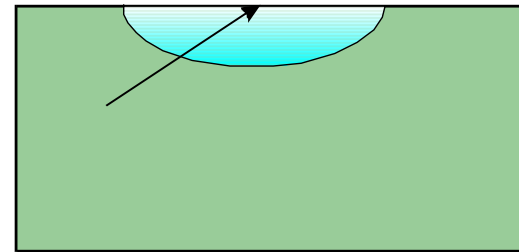
Die Grenzflächen bei $z=0$ und $z=D$ stellen zusätzliche Elektronenstreucentren dar!

Streuung an Grenzflächen

Spekular:



Total diffus:



Spekulare Reflexion ändert die Leitfähigkeit im Vergleich zum Bulk nicht!

Der Realfall ist eine Überlagerung aus spekulärer und diffuser Streuung.

Die Stromdichte für dünne Schichten

Ansatz:

$$f = f_0 + A \quad \text{A...Störterm, } A=A(z)$$

Analoge Rechnung zu vorher ergibt (Anhang):

$$j = \underbrace{-2e\left(\frac{m}{h}\right)^3 \tau \int \vec{v} \left(f_0 + \frac{eE}{m} \frac{\mathcal{A}_0}{\partial v_x} \right) d^3v}_{j_0} + \underbrace{2e\left(\frac{m}{h}\right)^3 \tau \int \vec{v} \frac{eE}{m} \frac{\mathcal{A}_0}{\partial v_x} \cdot e^{-\frac{z}{\tau v_z}} d^3v}_{\text{zu lösen für } z=0 \rightarrow z=D}$$

Aus dieser Gleichung für j muss noch der Mittelwert von $z=0$ bis $z=D$ gebildet werden, um die Leitfähigkeit einer Schicht der Dicke D zu ermitteln.

Die Stromdichte für dünne Schichten I

Total diffuse Reflexion:

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{8k} + \frac{3k}{4} \left(1 - \frac{k^2}{12} \right) \int_k^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx + \left(\frac{3}{8k} - \frac{5}{8} - \frac{k}{16} + \frac{k^2}{16} \right) e^{-k}$$

Teilweise gerichtete Reflexion (Anteil p):

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3(1-p)}{8k} + \frac{3}{4k} (1-p)^2 \sum_{n=0}^{\infty} p^{n-1} \left[E_1(kn) \left(k^2 n^2 - \frac{k^4 n^4}{12} \right) + e^{kn} \left(\frac{1}{2} - \frac{5kn}{6} - \frac{k^2 n^2}{12} + \frac{k^3 n^3}{12} \right) \right]$$

$$E_1(k) = \int_k^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx$$

$$k = D/\lambda_0,$$

λ_0 = mittlere freie Weglänge der Elektronen im Metall

λ_0 = ca. 10 – 40 nm bei Raumtemperatur

Leitfähigkeit dünner Schichten I

Vereinfachungen

Total diffuse Reflexion:

$$k \gg 1$$

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{8k}$$

$$0 < k \ll 1$$

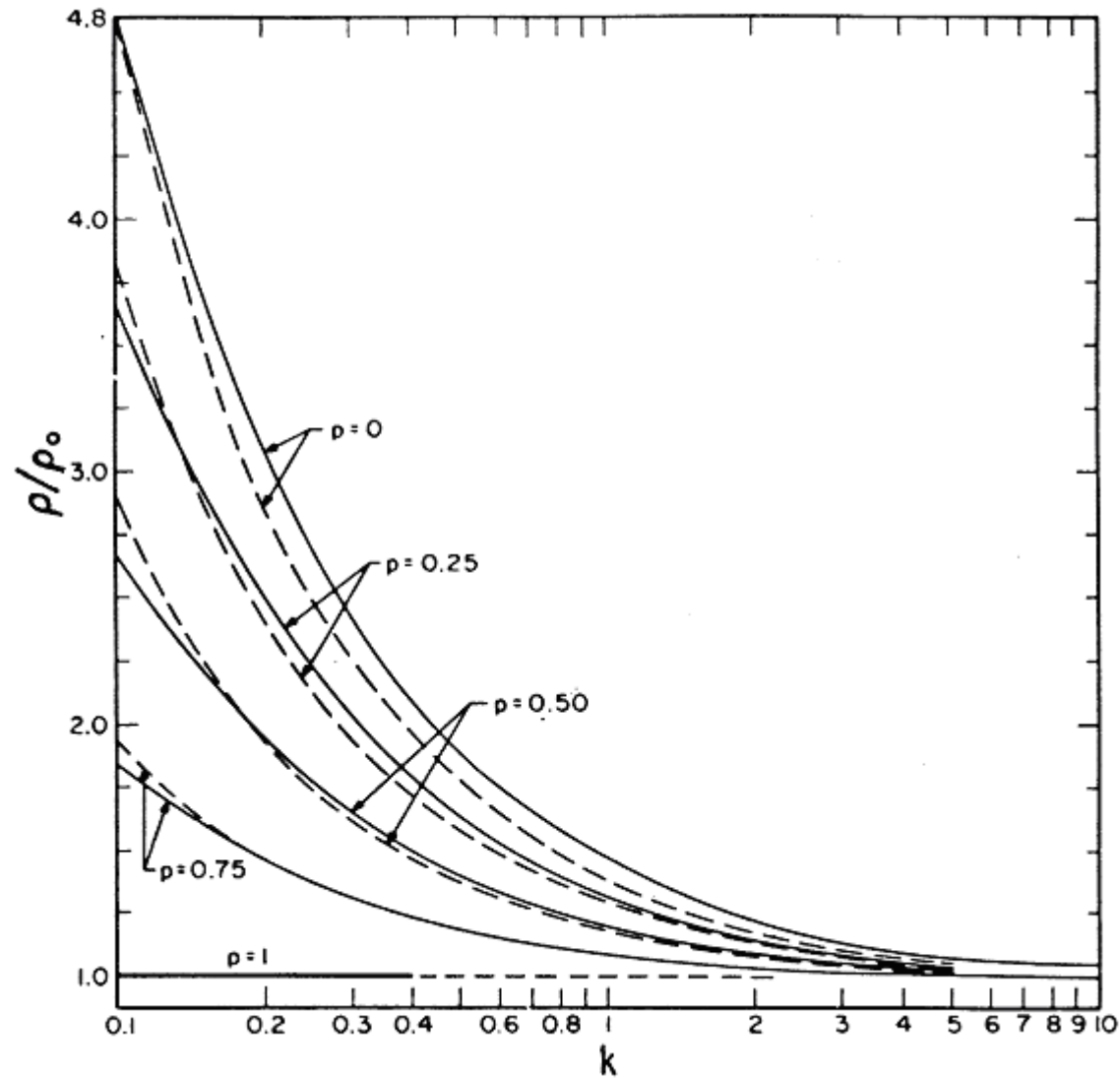
$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{3k}{4} \ln \frac{1}{k}$$

Teilweise gerichtete Reflexion (anteil p):

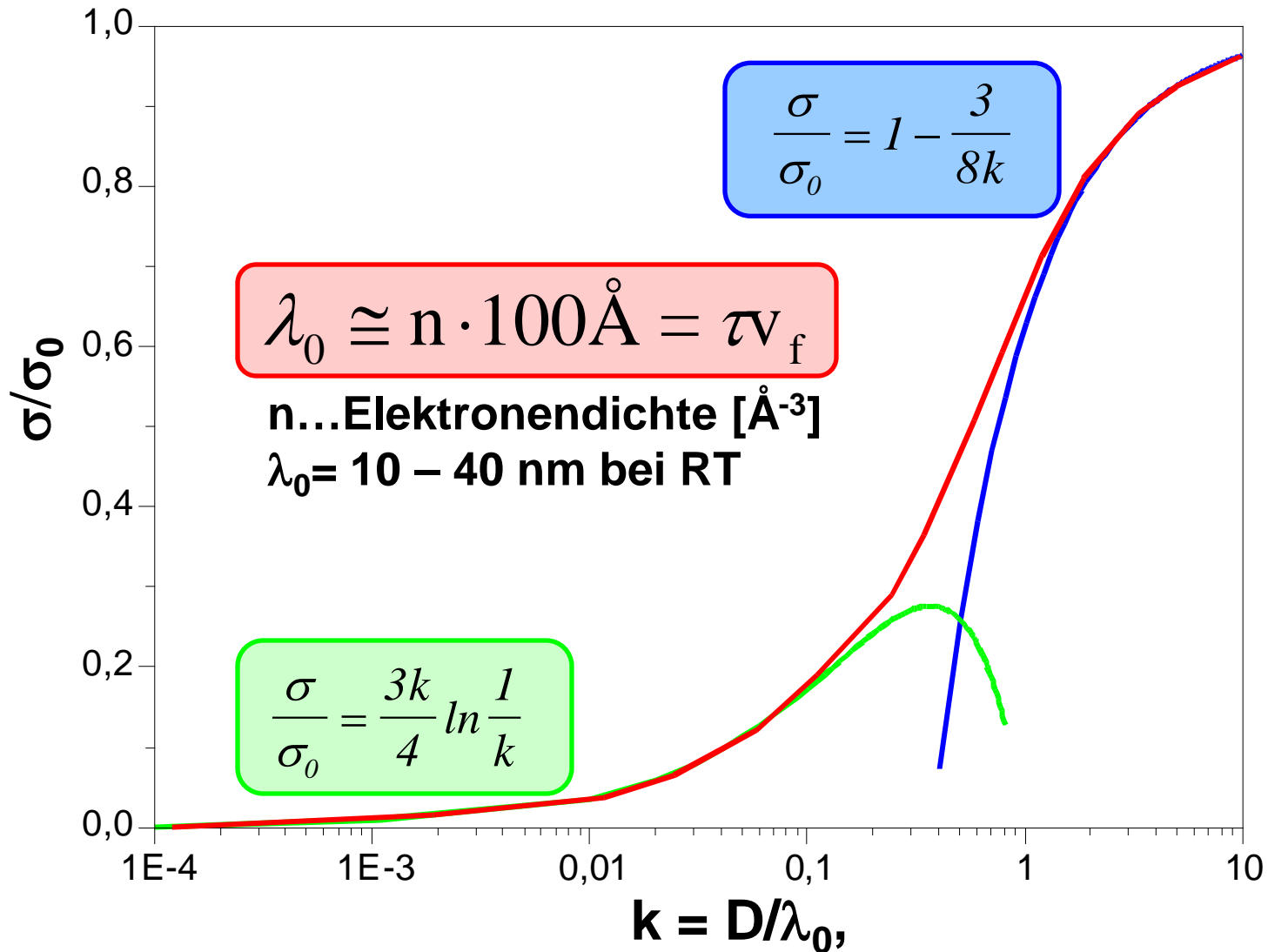
$$k \gg 1$$

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{8k} (1 - p)$$

Leitfähigkeit dünner Schichten II

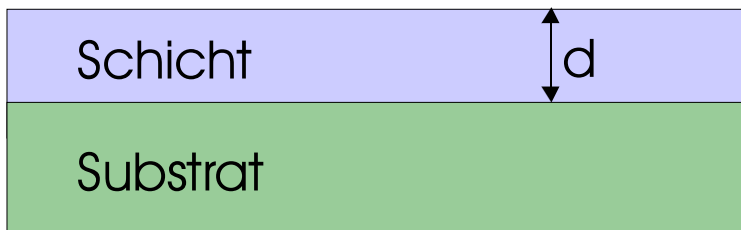


Leitfähigkeitsnäherungen

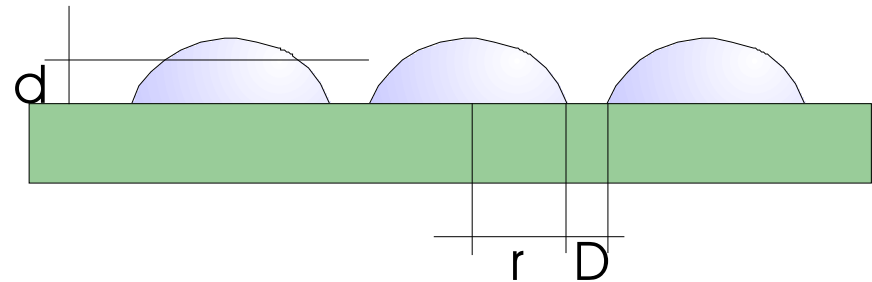


Reale Dünnschichtsysteme

Ideal:



Real:



Experiment:

$$\sigma_{\text{dis}} \ll \sigma_{\text{kont}}$$

$$\sigma \propto e^{-A/k_B T}$$

$$\sigma = \sigma(E)$$

$$\sigma = \sigma(r, D)$$

Begründung:

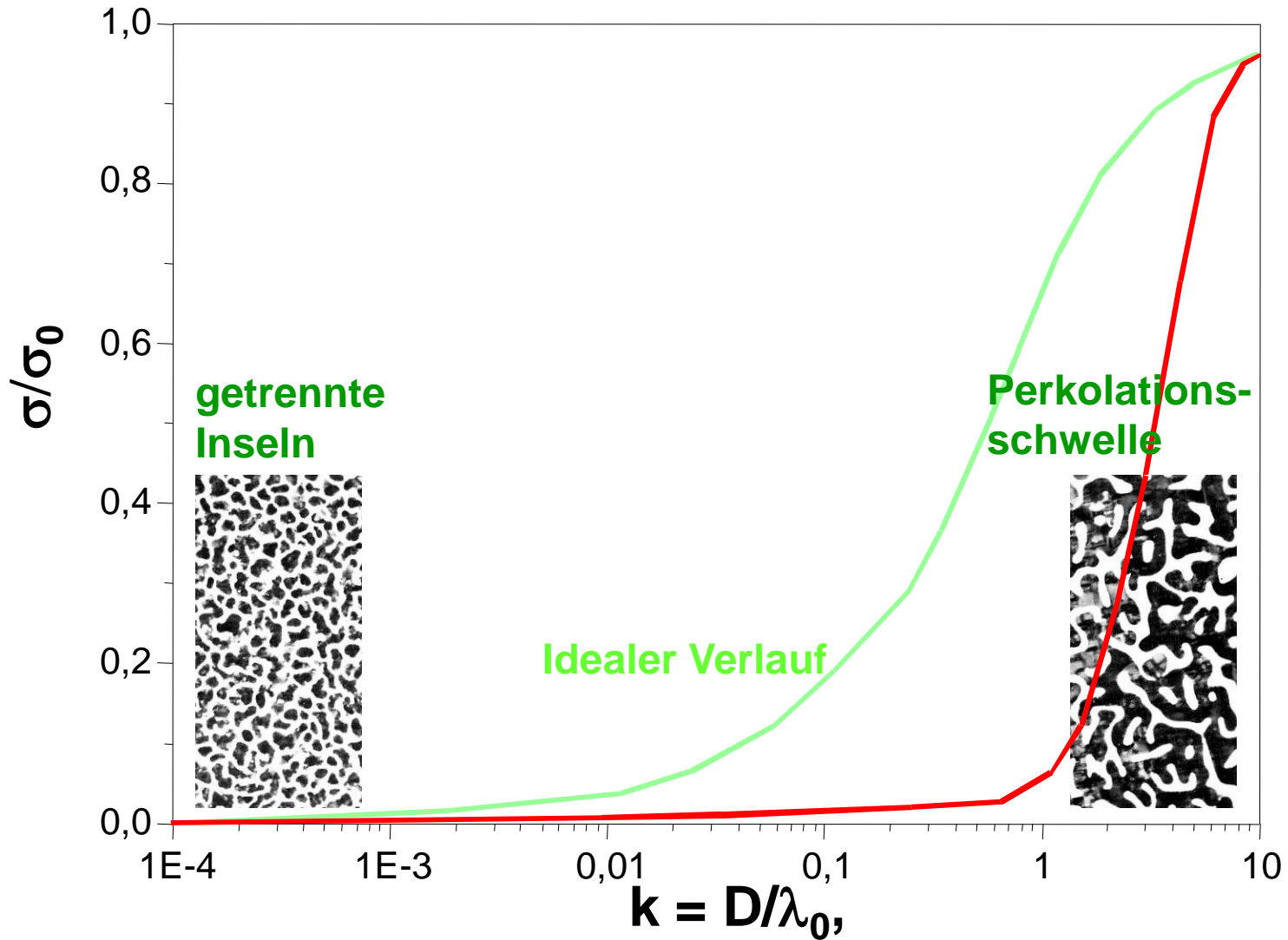
Diskontinuität

Thermische Emission

Feldemission

Tunneleffekt

Leitfähigkeit und Schichtdicke - Real



Anwendung: Dünnschichtwiderstände I

Widerstandsbereich:

100 Ω_{\square} – 100 M Ω_{\square}

Abgedeckt durch:

- + Schichtdickenvariation**
- + Materialwahl**

Voraussetzungen:

- + geringer Temperaturkoeffizient**
- + geringe Kosten (Schüttgut!)**

Anwendung: Dünnschichtwiderstände II

