



Universidad de Chile
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Departamento de Ingeniería Mecánica

Metalurgia General – ME42A

Resistividad Inducida Superficialmente en Películas Metálicas Delgadas en una Superficie Rugosa Fractal

Alumnos: Hugo Muñoz
Paula Urrutia

Profesor: Rodrigo Palma

Semestre Otoño 2006

Índice

Objetivos.....	1
Introducción.....	2
Marco Teórico.....	3
• Fabricación de las películas.....	6
• Influencia del grosor de la película.....	7
• Validez de la Regla de Mathiessen.....	9
Conclusiones.....	11
Anexos.....	12
• Physical Review: B66, 205401(2002)	13
• Journal of Physics:Condensed Matter 15 (2003)	22
Bibliografía.....	30

Objetivos

- Analizar el comportamiento de la resistividad eléctrica en películas metálicas delgadas.
- Determinar los parámetros principales que gobiernan las teorías sobre transporte electrónico por medio de scattering superficial y del grueso (volumétrico).
- Exponer las violaciones a la regla de Mathiessen, en los rangos correspondientes.

Introducción

La disminución incesante del tamaño de los componentes que conforman los circuitos integrados, predicho en la década de los 60 por Gordon Moore, ha llevado a los investigadores e ingenieros a analizar los efectos que tiene el tamaño de los componentes de los circuitos sobre la resistividad eléctrica. Cuando el tamaño de alguna dimensión de un componente llega a niveles donde la granularidad inherente de la materia a escala atómica es un factor considerable, se alcanza un punto denominado “efecto del tamaño cuántico” en el cual las teorías clásicas del comportamiento electrónico dejan de ser válidas.

El comportamiento de la resistividad en escalas nanométricas escapa de la teoría clásica, entrando de completamente al mundo de la mecánica cuántica. Por décadas los trabajos teóricos se han centrado en la teoría de Fuchs-Sondheimer (FS), en que el movimiento del electrón es modelado por la ecuación de transporte de Boltzmann (BTE), en donde los efectos de la superficie rugosa se incorporan en las condiciones de borde. Esta solución se conoce como inadecuada para muestras muy delgadas y de alta pureza donde el espesor de la película t es mucho menor que el camino libre medio l en el grueso, esto es debido a que no reproduce los efectos cuánticos de tamaño (QSE).

En las últimas dos décadas se han desarrollado un número importante de teorías cuánticas de transporte que superan estas limitaciones. Estas permiten el cálculo del aumento de resistividad debido al scattering electrón-superficie en una película metálica limitada por una superficie rugosa. El trabajo de Palasantzas y Barnas (PB) calcula la resistividad de calcula suponiendo que solo rugosidad de superficie contribuye al scattering electrónico, sin embargo, es sabido que el scattering en el grueso esta siempre presente y es necesario considerarla. La inclusión del scattering en el grueso dentro de la descripción teórica de los efectos de tamaño, que se originan cuando los electrones colisionan con una superficie rugosa, permite adicionalmente estimar el error que se produce en el cálculo de resistividad cuando se ignora el scattering en el grueso. Recientemente se ha publicado una versión modificada del formalismo de Sheng, Xing y Wang (mSXW), que permite el cálculo de la resistividad inducida por scattering superficial de electrones en una película metálica delgada de grosor arbitrario.

Estas teorías buscan dar ecuaciones que posibiliten la predicción de la resistividad eléctrica en función de parámetros que caracterizan componentes de circuitos de dimensiones nanométricas como la amplitud r.m.s de rugosidad δ , la longitud de correlación lateral ξ , el camino libre medio del grueso l y el grado de irregularidad de la superficie representado por el exponente de rugosidad H .

Adicionalmente se presenta evidencia sobre la violación de la regla de Mathiessen, la cual contempla la resistividad de la película como la suma de la resistividad superficial y del grueso.

Marco Teorico

Sheng, Xing, y Wang publicaron un cálculo de efectos de tamaño aplicable a películas de grosor arbitrario t . El cálculo se realiza determinando la función de Green $G_0(k_{\parallel})$, correspondiente a un gas de electrones libres, confinados entre dos superficies planas paralelas en $z = 0$ y $z = t$, en ausencia de scattering de electrones en el grueso y en ausencia de scattering electrón-superficie.

La teoría SXW utiliza la función de Green (cuando k_z , vector de onda real, es reemplazado por q_z , vector de onda imaginario), y el formalismo de transporte de Kubo para calcular la reflectividad $R(k_{\parallel})$ y el cambio de conductividad σ_F/σ_B en términos de $R(k_{\parallel})$, obteniendo:

$$R(k_{\parallel}) = \left(\frac{1 - k_z Q(k_{\parallel})}{1 + k_z Q(k_{\parallel})} \right)^2$$

$$1 - \frac{\sigma_F}{\sigma_B} = \frac{3}{2} \frac{\ell}{t} \frac{1}{X_0 N_c} \sum_{n=1}^{N_c} u_n (1 - u_n^2) \frac{(1 - R(u_n))(1 - E_d(u_n))}{1 - R(u_n)E_d(u_n)}$$

con $Q(k_{\parallel})$ autoenergía

$$u_n = q_n/k_F = \cos \theta_n = (n\pi)/(tk_F)$$

$$X_c = (tk_F)/\pi$$

$N_c = \text{int}(X_c)$ representa el número de subbandas ocupadas, donde $\text{int}(x)$ es la parte entera de x

$$X_0 = \frac{3}{2} \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{N_c}{X_c} \right)^2 \left(1 + \frac{1}{N_c} \right) \left(1 + \frac{1}{2N_c} \right) \right]$$

$$E_d(u_n) = \exp\left(-\frac{t}{u_n \ell}\right)$$

Aquí $\sigma_F = (\rho_F)^{-1}$ es la conductividad de la película, y $\sigma_B = (\rho_B)^{-1}$ es la conductividad en el grueso, i.e. la conductividad que se debiera medir *en ausencia de scattering electrón-superficie*:

$$\sigma_B = \left(\frac{nq^2 \ell}{\hbar k_F} \right)$$

donde n representa la concentración de portadores y q la carga del electrón.

Aunque la teoría SXW posee la característica de ser la única teoría cuántica de transporte que reproduce el formalismo clásico de FS en el caso de películas gruesas y sucias (elevada concentración de impurezas tiene por efecto la reducción del camino libre medio), el uso de la aproximación de ruido blanco restringe severamente el poder predictivo de la teoría. Para remover esta limitante se ha publicado recientemente una versión modificada de la teoría SXW (mSXW), donde se calcula la auto-energía del electrón debido al scattering electrón-superficie, para una representación Gaussiana y una representación exponencial de la función de autocorrelación, efectuando la convolución indicada en la ecuación:

$$Q(k_{\parallel}) = -\text{Im} \int \frac{d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2} F(k_{\parallel} - q_{\parallel}) [VG(q_{\parallel})]$$

En el caso de una función de autocorrelación exponencial:

$$f(x,y) = \delta^2 \exp[-\sqrt{x^2 + y^2} / \xi]$$

la auto-energía resulta ser:

$$Q(k_{\parallel}) = \frac{2\delta^2 \xi^2}{t} \sum_{n=1}^{N_c} \left(\frac{n\pi}{t} \right)^2 \frac{E[\pi/2, r^2(k_{\parallel}, q_n)]}{[1 + \xi^2 (k_{\parallel} - q_n)^2] \sqrt{1 + \xi^2 (k_{\parallel} + q_n)^2}}$$

Al introducir conceptos de Auto-similaridad*, finalmente obtendremos:

$$Q(H, k_{\parallel}) = \frac{\pi \delta^2 \xi^2}{t} \sum_{n=1}^{N_c} \left(\frac{n\pi}{t} \right)^2 \frac{F(1+H, 1/2, 1; z)}{\left[1 + A \xi^2 (k_{\parallel} + q_n)^2 \right]^{1+H}}$$

El cálculo bosquejado procede de primeros principios, sin invocar ni una ecuación clásica de transporte (como la BTE) ni ninguna otra ecuación cuántica de transporte. Está simplemente basada en la teoría de respuesta lineal de Kubo, que relaciona la conductividad con la función de Green, y en la ecuación de Dyson como método para evaluar los efectos del scattering de electrones por una superficie rugosa, mediante el cálculo de la autoenergía del electrón originada en el proceso de scattering electrón-superficie rugosa.

* Se dice que una superficie es autosimilar cuando los parámetros estadísticos que la caracterizan son conservados ante un reescalamiento apropiado del espacio de coordenadas. Representa la manifestación en la naturaleza del comportamiento fractal estricto.

Fabricación de las películas

Las muestras son preparadas para minimizar la contribución de la resistividad creciente por scattering de electrones en la superficie rugosa del sustrato. El sustrato debe estar bien clivado para minimizar el scattering de electrones en la superficie rugosa y la rugosidad es reducida a los pasos de clivaje, es por esta razón que la deposición es sobre un sustrato cristalino con una constante de red similar a la película delgada y con recocido, pudiendo así realizar muestras de CoSi_2 sobre Si (111) con la misma orientación que el sustrato, en un rango de 1 a 110 nm. Además las muestras deben ser tales que la dimensión lateral L característica de los granos sea por lo menos un orden mayor que el espesor del film (t [nm]).

Influencia del grosor de la película

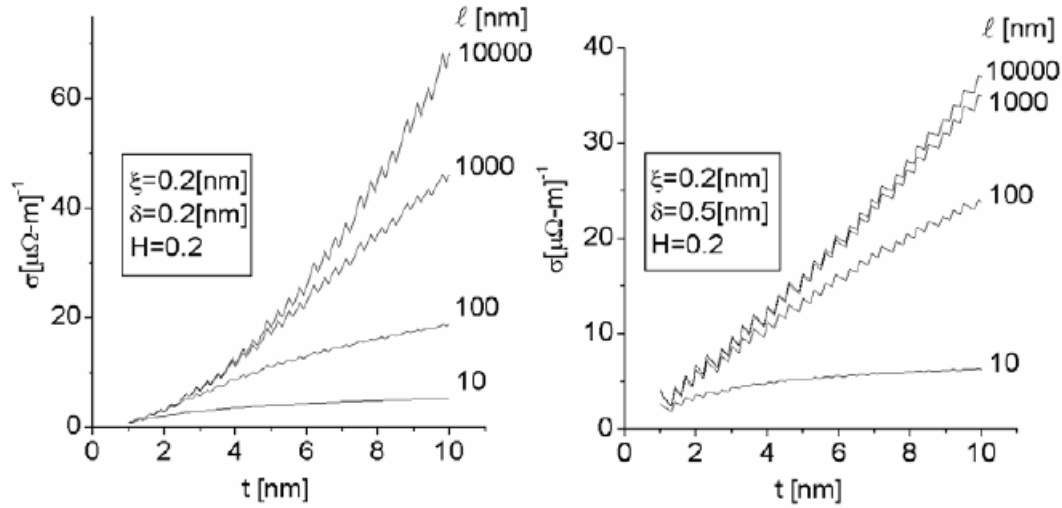


FIG 1.- Conductividad de una película caracterizada por una longitud de correlación lateral $\xi = 0.2$ nm, y un exponente de rugosidad $H = 0.2$, graficada versus el espesor de la película t , para diferentes caminos libres medios en el grueso, y diferentes amplitudes r.m.s. de rugosidad δ . Fuente: Physical Review, R.C. Muñoz et al (Ref. [1]).

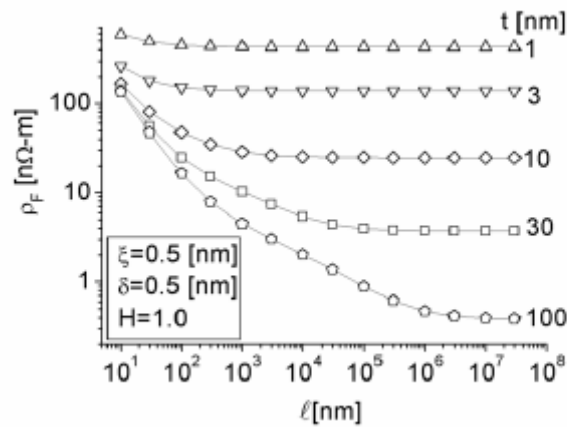


FIG 2.- Resistividad de una película metálica delgada limitada por una superficie autosimilar caracterizada por $\delta = \xi = 0.5$ nm, $H = 1.0$, graficada como función del camino libre medio en el grueso l , para diferentes espesores. Fuente: Physical Review, R.C. Muñoz et al (Ref. [1]).

En la Fig 2. se puede ver claramente que la resistividad de la película disminuye con el aumento del camino libre medio, para caminos libres medio de algunas decenas de nm. A medida que el camino libre medio se hace mas grande, la resistividad de la película decrece cada vez menos con el aumento del camino libre medio, hasta que finalmente se nivela, para caminos libres medios grandes, de tal modo que aumentos mas allá de un cierto valor en el camino libre medio no produce cambios adicionales en la resistividad de la película. Esta nivelación de la resistividad a medida que el camino libre medio aumenta, define la resistividad ρ_s de la película limitada solamente por scattering electrón-superficie.

Se observa claramente que el camino libre medio necesario para definir ρ_s es dependiente del espesor; aumenta con el aumento del espesor de la película. El resultado nuevo e interesante mostrado en la Fig. 2, es que cuando la película es más gruesa que algunas decenas de nm, el camino libre medio necesario para definir ρ_s alcanza dimensiones macroscópicas. En el peor caso, para una película de espesor $t = 100$ nm, el aumento del camino libre medio de $l = 3.0 \times 10^7$ nm hasta $l = 1.0 \times 10^8$ produce una disminución de la resistividad de la película menor que el 0.15%. Por lo tanto, se escoge el valor del peor caso $l = 3.0 \times 10^7$ nm para calcular ρ_s para los espesores $1 \leq t \leq 100$ nm.

Validez de la Regla de Mathiessen

La Regla de Mathiessen establece que la sumatoria de la resistividad superficial ρ_s y la resistividad en el grueso ρ_B es igual a la resistividad medida en la película delgada de metal ρ_F cuando ambos mecanismos de scattering están presentes. Cabe notar que la resistividad ρ_s inducida por scattering electrón-superficie en ausencia de scattering en el grueso, y con la resistividad ρ_B debida a scattering en el grueso en ausencia de scattering electrón-superficie.

Esta regla es un poderoso instrumento que se utiliza ampliamente a varios mecanismos de scattering en sólidos cristalinos: scattering por fonones acústicos, scattering por fonones ópticos, scattering por impurezas neutras y scattering por impurezas ionizadas en el caso de semiconductores cristalinos; scattering electrón-impureza, scattering electrón-electrón y scattering electrón-fonón en el caso de metales cristalinos.

Para evaluar la validez de la regla de Mathiessen se graficó en la Fig.3a la cantidad

$$\Delta\rho/\rho_F = [\rho_F - (\rho_s + \rho_B)]/\rho_F$$

que debiera ser cero para todo espesor si la regla de Mathiessen es satisfecha.

La resistividad aparente inducida por scattering electrón-superficie $\rho_s' = \rho_F - \rho_B$ (es decir, la resistividad debido a scattering superficial que sería estimada asumiendo la validez de la regla de Mathiessen) ha sido usada en la literatura como medida de la resistividad inducida por scattering superficial de electrones ρ_s . Por tanto, parece interesante mostrar el cuociente ρ_s/ρ_s' graficado versus el espesor de la película (cuociente entre la resistividad verdadera inducida por scattering superficial ρ_s y la resistividad aparente, dictada por la regla de Mathiessen, inducida por scattering superficial ρ_s'); Esto se despliega en la Fig. 3b. Si la regla de Mathiessen se cumpliera para todo espesor, entonces el cuociente debiera ser la unidad independiente del espesor de la película. El grado en que el cuociente ρ_s/ρ_s' se aleja de la unidad refleja la crudeza con que se viola la regla de Mathiessen.

El motivo por el cual la regla de Mathiessen es violada parece estar relacionada con la naturaleza cuántica del scattering electrón-superficie donde la dualidad onda-partícula del electrón se torna dominante. Así una teoría cuántica de transporte puede describir el scattering de un electrón a través de una superficie rugosa, tomando en cuenta la importancia de identificar los estados ocupados por el electrón, considerando de esta manera los efectos cuánticos del tamaño (QSE).

El resultado destacable mostrado en Fig. 3 es que tanto la resistividad de la película ρ_F como la resistividad inducida por scattering superficial ρ_s predicha por la teoría, son tales que la regla de Mathiessen es violada. Para $10 \text{ nm} < t < 100 \text{ nm}$, la resistividad de la película excede en alrededor de un 20 a un 30 % la suma $\rho_s + \rho_B$. La resistividad limitada por superficie aparente ρ_s' no es idéntica a ρ_s y de hecho, ρ_s' es aproximadamente un orden de magnitud más grande que ρ_s , excepto en películas ultra delgadas $t < 5 \text{ nm}$.

Sin embargo, la validez de la regla de Mathiessen se recupera (en cierto porcentaje) cuando se contabiliza sobre un alto número de estados cuantizados del electrón, es decir, cuando el espesor de la película delgada tiene unos cuantos cientos de nanómetros.

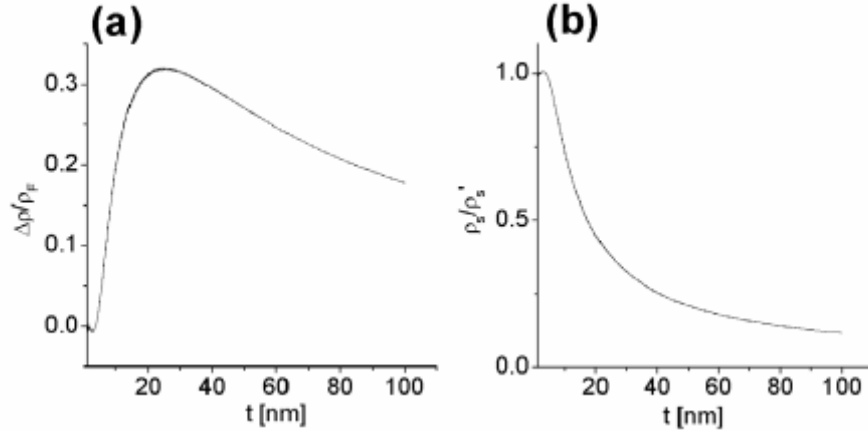


Fig. 3. (a) $\Delta\rho/\rho_F = [\rho_F - (\rho_S + \rho_B)]/\rho_F$ graficada en función del espesor de la película t , para una película limitada por una superficie fractal. La función de autocorrelación superficial está descrita por $\delta = \xi = 0.5$ nm y el exponente de rugosidad $H = 1.0$; ρ_F fue calculada con $l = 100$ nm; ρ_S fue calculada con $l = 3.0 \times 10^7$ nm. (b) Cuociente entre la resistividad real inducida por scattering superficial ρ_s y la resistividad aparente $\rho_s' = \rho_F - \rho_B$ inducida por scattering superficial graficada versus el espesor de la película, para una película limitada por una superficie fractal. La función de autocorrelación superficial esta descrita por $\delta = \xi = 0.5$ nm y un exponente de rugosidad $H = 1.0$; ρ_F fue calculada con $l = 100$ nm; ρ_S fue calculada con $l = 3.0 \times 10^7$ nm. Fuente: Physical Review, R.C. Muñoz et al (Ref. [1]).

De esta manera, este es un tema que debe ser considerado en para los actuales y futuros diseños de la arquitectura de microprocesadores, que se encuentran llegando a los límites donde la regla de Mathiessen deja de ser válida.

Conclusiones

La creciente necesidad de mayor capacidad de procesos ha llevado a la industria de semiconductores a una continua miniaturización de los componentes que conforman los circuitos integrados. No obstante, esta carrera por la miniaturización tiene un límite infranqueable dado por la inherente granularidad de la materia a escala atómica. Sin embargo, los problemas asociados a éste escalamiento aparecen en escena antes de encontrarnos con la estructura atómica de la materia y vienen dados por los efectos de tamaño. Como ya se mostrara en los resultados anteriores de este trabajo, la resistividad de las estructuras de escala nanométrica puede apartarse considerablemente de la calculada con el modelo simplista de resistividad de los metales, que no considera los efectos cuánticos del tamaño.

La teoría propuesta por el formalismo mSXW permite el cálculo de la resistividad de una película metálica delgada limitada por una superficie fractal en función de la amplitud r.m.s de la rugosidad δ , de la longitud de correlación lateral ξ , del camino libre medio en el grueso l , y del grado de irregularidad de la superficie representado por el exponente de rugosidad H . Mediante estos parámetros es posible visualizar los efectos que tienen sobre la resistividad para scattering de superficie.

Adicionalmente, se mostró que existe una violación a la regla de adición de Mathiessen para el caso de películas metálicas delgadas. Para películas gruesas $5 \text{ nm} < t < 100 \text{ nm}$, la resistividad de la película excede en un 20% a 30% el valor dictado por la regla de Mathiessen, mientras que para películas delgadas $t < 5 \text{ nm}$ la resistividad de la película real coincide con la esperada por la regla de Mathiessen. De igual manera se tienen resultados para la resistividad aparente inducida por scattering superficial de electrones (estimada asumiendo la validez de la regla de Mathiessen), donde se excede en un orden de magnitud la verdadera resistividad inducida por scattering superficial, excepto en el caso de películas ultra finas $t < 5 \text{ nm}$. Por lo tanto, la resistividad en películas delgadas para espesores $5 \text{ nm} < t < 10 \text{ nm}$ deber ser calculada cuidadosamente, pues es necesario considerar los efectos cuánticos de tamaño.

El cálculo de la resistividad se torna altamente importante al considerar los efectos que tiene sobre los microprocesadores, donde la resistividad produce una cota a la velocidad de los procesos y un aumento en el consumo de potencia, siendo este último una limitante al empaquetar más y más componentes y sus interconexiones en menores áreas.

Anexos

Bibliografía

[1] R.C. Muñoz et al, Physical Review: Surface-induced resistivity of thin metallic films bounded by a rough fractal surface ,B66, 205401(2002)

[2] R.C. Muñoz et al, Journal of Physics:Condensed Matter 15 (2003): Surface-induced resistivity of CoSi_2 films and violations of Mathiessen's rule.