

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ СТРУМОПЕРЕНЕСЕННЯ ТА ХВИЛЕУТВОРЕННЯ В ТОНКИХ ПЛІВКАХ

© Пеленський Р.А., 2005

Сформовано математичну модель процесів струмоперенесення та хвилеутворення в тонких плівках з урахуванням в приповерхневих областях подвійних шарів магнітних та електричних зарядів.

The mathematical model of the current transport and waveformation processes in thin film. Double electrical and magnetic layers of the near surface charge have been taken into account.

Вступ

Для розрахунку субмікронних та наноприладів найефективнішими методами є ті, що базуються на польових моделях електродинаміки плівкових середовищ. Тому дуже актуальною є проблема адекватного математичного опису процесів струмоперенесення та хвилеутворення в тонкоплівкових середовищах.

Дослідженнями у цій галузі займаються в усіх провідних електронних фірмах світу та університетах. Поширеним потоком досліджень охоплені теорія полів мікроелектронних структур, теорія поверхні, спінтронні процеси в плівках [1.2].

Завданням цих досліджень є врахування в польових моделях поруч з подвійним електричним шаром зарядів подвійного шару магнітних зарядів, встановлення взаємодії між цими шарами та їх впливу на процеси струмоперенесення та хвилеутворення в плівках.

У приповерхневих шарах тонких плівок утворюються подвійні шари електричних та магнітних зарядів. Утворюється діонна структура подвійних шарів заряду.

Пара електронів, що знаходяться на одному енергетичному рівні, має протилежні спіни ($\frac{1}{2}$ та $-\frac{1}{2}$). Кожний із електронів під час обертання випромінює спінову хвилю. На значній віддалі від електронів ці хвилі практично рівні за величиною, але знаходяться у протифазах. Тому вони себе взаємно компенсують. Це типовий приклад самокомпенсованих зустрічних полів.

У локальній області безмежного ізотропного середовища результуючий магнітний момент дорівнює нулю, результуюча спінова хвиля скомпенсована і магнітний монополь відсутній. Якщо з безмежного середовища в момент $t=0$ виокремити плівку, то почнеться нестационарний процес утворення на поверхні плівки розподіленого поверхневого магнітного заряду, що являє собою сукупність квантів магнетизму.

Якщо в утвореній тонкій плівці розглянути спіновий процес у циліндрі з основою, що збігається з площиною поверхні, то спінова хвиля, зумовлена розривом структури, буде підпорядкована рівнянню

$$\Delta\psi_c - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

У циліндричних координатах r, θ, z рівняння (1) набуває вигляду

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi_c}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial z^2} - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

Нестационарна спінова хвиля призведе до утворення на поверхні півки монополів магнетизму, захоплених на поверхневі магнітні рівні. В об'ємі півки індукується розподілений магнітний заряд.

Утворюється магнітне поле системи магнітних зарядів. Індукція магнітного поля \bar{B} пов'язана з магнітними зарядами g :

$$\bar{B} = [\nabla \times \bar{A}] + \frac{gr}{r^3} \quad (3)$$

Спінове поле є першопричиною утворення подвійного шару магнітних зарядів тонкої півки. В усталеному режимі спінове та зустрічне йому магнітне поля подвійного шару магнітних зарядів взаємно зрівноважуються. У тонкопівкових середовищах монополі Дірака [3] набуває практичного змісту. Виникнення поверхневого шару магнітних полів підпорядковане правилу Хунда [4]: умовою отримання мінімальної енергії в приповерхневому шарі структури є те з можливих станів електронів, при якому їх загальний спіновий момент максимальний, тобто стан з паралельною орієнтацією спінів ($\frac{1}{2}$ та $\frac{1}{2}$).

Кванти магнетизму взаємодіють між собою в 4700 разів сильніше, ніж кванти електрики.

Якщо в нульовий момент часу виокремити тонку півку з однорідного середовища, розпочинається дифузійний процес виходу частини вільних електронів на поверхню півки. Цей дифузійний процес підпорядкований дифузійному рівнянню

$$\Delta\chi + a \frac{\partial \chi}{\partial t} + b\chi = 0 \quad (4)$$

Вихід електронів з півки – енергозатратний процес, тому в рівнянні (4) присутній член $b\chi$. У цей самий час процес проходження спінової хвилі через півкове середовище можна вважати практично беззатратним.

Рівняння (1) обертального спінового поля для спінового потенціалу ψ_c нетрудно записати й у ще строгішій формі

$$\Delta\psi_c - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial t^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi_c = 0, \quad (5)$$

але на практичні результати це мало вплине.

Дифузійне поле півкової структури зумовлене дифузцією електронів на нижчі енергетичні рівні. Процес відбувається до тих пір, поки електричне поле утвореного подвійного шару електричних зарядів і дифузійне поле себе взаємно не урівноважують [5]. Під час побудови подвійного електричного шару зарядів напруженість електричного поля \bar{E} виражається так:

$$\bar{E} = -\frac{\partial \bar{A}}{\partial t} - \nabla \varphi \quad (6)$$

З співвідношень (3) та (6) випливає взаємозв'язок між електричними та магнітними шарами зарядів. У присутності члена ($\bar{E}\bar{B}$) магнітний заряд індукує електричний і навпаки.

Тонкопівкові структури – це системи з електричними та магнітними зарядами. Їх називають дайонами або діонами. Для розподілених у півковому середовищі з питомою об'ємною густиною

ρ_M + магнітних зарядів і ρ_E електричних зарядів і потенціалами дифузійного χ та спінового ψ_c полів як першопричини виникнення подвійних шарів зарядів повинно виконуватись рівняння взаємності Максвелла, яке в цьому випадку приймає вигляд

$$\frac{\partial \rho_M}{\partial \chi} = \frac{\partial \rho_E}{\partial \psi_c} \quad (7)$$

Рівняння електродинаміки для суцільних середовищ з розподіленими електричними і магнітними зарядами можна записати в формі

$$[\nabla \bar{H}] = \bar{\delta} + \frac{\partial \bar{D}}{\partial t}, \quad (8)$$

$$[\nabla \bar{E}] = -\frac{\partial \bar{B}}{\partial t}, \quad (9)$$

$$\nabla \cdot \bar{B} = \rho_M, \quad (10)$$

$$\nabla \bar{D} = \rho_E. \quad (11)$$

Процеси в діонному середовищі можна описати за допомогою інтегральних рівнянь. При цьому мусить бути врахована та обставина, що під час змін магнітного заряду системи перебудовується її електрична система і навпаки. Тобто рівняння спінового та зарядового континуумів взаємопов'язані

$$R_M \frac{dq_M}{dt} + \frac{q_M}{C_M} + \nu \frac{dq}{dt} = U_M, \quad (12)$$

$$R \frac{dq}{dt} + \frac{q}{C} + \nu \frac{dq_M}{dt} = U. \quad (13)$$

У цих рівняннях q_M та q – магнітний та електричний заряди подвійних шарів плівки, R_M та R – магнітний та електричний опори подвійних магнітного та електричного шарів відповідно, C_M та C – магнітна та електрична ємності подвійних шарів, ν – коефіцієнт взаємності між магнітними та електричними зарядовими континуумами. Він безрозмірний, якщо розглядається вся плівка, і має розмірність m^2 під час записування рівнянь (12) – (13) для одиниці площі.

Для якісного розгляду процесів хвилеутворення [5,6] розглядається спрощена модель, що базується на врахуванні малих відхилень від стану рівноваги. Для зменшення трудоемності обчислень від векторних рівнянь (8) – (11) доцільно перейти до рівнянь потенціалів. Крім того, аналізується процес хвилеутворення в середовищах монополярних приладів.

До співвідношення (3) та (6), що пов'язують векторні величини з потенціалами, додамо рівняння для вектора густини струму

$$\bar{\delta} = -\lambda \nabla(\varphi + \chi)_\lambda - \lambda \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} \quad (14)$$

де λ – питома електропровідність середовища.

З урахуванням формули (3) рівняння закону електромагнітної індукції (9) переписується у вигляді

$$[\nabla \bar{E}] = -\left[\nabla \frac{\partial \bar{A}}{\partial t}\right] - \frac{\partial g \bar{r}}{\gamma^2 \partial t} \quad (15)$$

Домноживши вираз (8) на μ_a , отримуємо

$$[\nabla \bar{B}] = \mu_a \bar{\delta} + \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} \quad (16)$$

З урахуванням (3), (6) та (14) отримуємо

$$[\nabla[\bar{A}]] + [\nabla \frac{\bar{g}r}{r^3}] = -\mu_a \lambda \nabla \varphi - \mu_a \lambda \nabla \chi - \mu_a \lambda \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} - \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial t^2} - \mu_a \varepsilon_a \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (17)$$

З використанням відомого у векторному аналізі перетворення

$$[\nabla[\nabla \bar{A}]] = \nabla(\nabla \bar{A}) - \nabla^2 \bar{A} \quad (18)$$

Отримуємо на основі (17) рівняння векторного магнітного потенціалу

$$\nabla^2 \bar{A} - \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial t^2} - \mu_a \lambda \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = \nabla(\nabla \bar{A}) + \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial}{\partial t} \nabla \varphi + \mu_a \lambda \nabla(\chi + \varphi) + [\nabla \frac{\bar{g}r}{r^3}] \quad (19)$$

Вектор \bar{A} , введений за допомогою співвідношення (3), визначений з точністю до градієнта деякої скалярної функції. Внаслідок цього значення $\nabla \bar{A}$ можна задати довільно, і тоді рівняння (19) можна розбити на два рівняння:

$$\nabla^2 \bar{A} - \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial t^2} - \mu_a \lambda \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = \mu_a \lambda \nabla(\chi + \varphi) + [\nabla \frac{\bar{g}r}{r^3}] \quad (20)$$

$$\nabla \bar{A} + \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \quad (21)$$

Рівняння (21) – умова калібрування векторного магнітного потенціалу.

Використовуючи матеріальне рівняння

$$\bar{D} = \varepsilon_a \bar{E}, \quad (22)$$

на основі (11) та (6), отримуємо

$$\varepsilon_a \nabla \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} + \varepsilon_a \nabla^2 \varphi = -\rho_e \quad (23)$$

з врахуванням (21) отримуємо

$$\nabla^2 \varphi - \mu_a \varepsilon_a \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -\frac{\rho_e}{\varepsilon_a} \quad (24)$$

У рівняннях хвилеутворення (20) та (24) фігурують розподілені у плівковому середовищі магнітні та електричні заряди.

Під час роботи приладів у плівковому середовищі виникають великі перепади температур, що приводить до розігрівання електронного газу. У температурному відношенні плівкове середовище стає двоконтинуумним. Можуть складатись умови, сприятливі для коливань електронного газу [6,7,8]. У середовищі виникають теплові хвилі

$$\nabla^2 T - \frac{1}{k\nu(T)} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - \frac{1}{k} \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (25)$$

де T – температура локальної області плівки, k та ν – коефіцієнти теплових властивостей середовища.

Енергія розігрітого газу виступає в ролі теплового заряду. Якщо цей тепловий заряд вимірювати в Джоулях, то тепловий потенціал повинен бути безрозмірною величиною.

Таким у тонкоплівковому середовищі в активному навантаженому режимі можливе виникнення різних типів хвильових процесів – електромагнітних, теплових, спінових.

Висновки

При розриві суцільного середовища виникає спінове поле, яке виносить на поверхню тонкої плівки магнітні монополі з утворенням на поверхні розподіленого поверхневого шару магнітних зарядів і розподіленого в об'ємі плівки магнітного заряду протилежної полярності.

Між подвійним електричним шаром зарядів та шаром магнітних зарядів існує взаємозв'язок, при змінах в одному шарі проходить перебудова іншого.

1. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. – М.: 1967, – 368 с.
2. Хуцишвили Г.Р. Спиновая диффузия // УФН, 1965, т.87, в.2, – с. 211 – 254.
3. Монополь Дирака. – М.: Мир, 1970. – 332 с.
4. Ярив А. Квантовая электроника и нелинейная оптика. – М.: Сов.радио, 1973. – 455 с.
5. Pelenskyj R. Contradirectional fields. Proceeding of the XIII International Symposium on Theoretical Electrical Engineering “ISTET’ 05” July 4-7, 2005, Lviv, Ukraine, p.73-74.
6. Барыбин А.А. Волны в тонкопленочных полупроводниковых структурах с горячими электронами. – М.: Наука, 1986. – 228 с.
7. Пеленский Р.А. Уравнения потенциалов пограничного слоя электропроводной среды // Электронное моделирование, 1981, №3. – С.92–94.
8. Атья А., Хитчин Н. Геометрия и динамика магнитных монополей. – М.: Мир, 1991. – 148 с.

Grzegorz Bład, Dariusz Klepacki, Jerzy Potencki
Rzeszów University of Technology,

NONLINEAR DISCRETE ELEMENTS IN ELECTRO-THERMAL MODEL OF THICK-FILM MULTILAYER STRUCTURE

© Bład G., Klepacki D., Potencki J., 2005

The complexity of heat exchange mechanisms and difficulties in accurate determination of their coefficients make the thermal analysis a complicated problem at the beginning of the design process. In reality, only numerical calculations and specialised simulation programs can solve the systems of differential equations with very complicated boundary and initial conditions. The paper presents some aspects of describing of thermal model of the thick-film microcircuits with equivalent models (based on RC elements).

Комплексність механізму теплообміну і складності під час визначення коефіцієнтів процесу роблять тепловий аналіз однією з важливих проблем при розробці електронних приладів. Насправді тільки числові методи і спеціальні програми моделювання можуть розв'язати системи диференціальних рівнянь з ускладненими крайовими і початковими умовами. Наведено кілька аспектів опису теплової моделі товстоплівкових мікросхем з еквівалентними моделями на базі RC елементів.

Introduction

Temperature plays a very important role in proper operation of microelectronic circuits. It determines exploitation parameters and – in the most cases – life of circuit or whole system. From this reason, taking into consideration the thermal problems is strongly recommended on the beginning of design process.

The thick-film microcircuits are very complicated objects to their formal description from point of view of heat transfer. The complexity of heat exchange mechanism makes the mathematical analysis only approximation of the real-world conditions. In reality, only numerical calculations can solve the systems of differential equations with very complicated boundary and initial conditions.