Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственнй университет, 2019

УДК 537.311.4

Оригинальная статья

О СООТНОШЕНИИ ДИФFUЗНОЙ И БАЛЛИСТИЧЕСКОЙ СОСТАВЛЯЮЩИХ КОНТАКТНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ НА МИКРО- И НАНОМАСШТАБНОМ УРОВНЕ

В.В. Измайлов, М.В. Новоселова

ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

170026, Россия, Тверь, наб. А. Никитина, 22

iz2v@tvcom.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.153

Аннотация: Проанализировано соотношение диффузной и баллистической составляющих контактного электросопротивления, а также роль микро- и нанощероховатости контактирующих поверхностей в формировании электрического сопротивления контакта и его составляющих. В контактах неровностей нанощероховатости преобладает баллистическая составляющая сопротивления, в контактах неровностей микрошероховатости – диффузная.

Ключевые слова: электрический контакт, контактное сопротивление, диффузионное сопротивление, баллистическое сопротивление, микрошероховатость, нанощероховатость.

1. Введение

Контакт поверхностей двух соприкасающихся деталей является причиной дополнительного сопротивления потокам электрической и тепловой энергии через контактное соединение. Величина контактного сопротивления влияет на надёжность и эффективность самых разнообразных по устройству и назначению электроконтактных соединений – от миниатюрных слаботочных до мощных килоамперных. Вопросы повышения надёжности разнообразных электроконтактных соединений остаются актуальными и привлекают внимание исследователей и практиков во всем мире.

Настоящая статья продолжает публикации авторов, посвящённые исследованию контактных соединений и их проводимости [1, 2]. В ней представлены результаты исследования влияния параметров микро- и нанощероховатости контактирующих поверхностей на электрическое сопротивление контакта. Как и в предыдущей публикации [2], за рамками исследования остаются вопросы, связанные с влиянием поверхностных плёнок, в первую очередь оксидных, на проводимость контакта. Механизмы проводимости через тонкие неразрушенные диэлектрические плёнки принципиально отличаются от механизмов проводимости через малые площадки металлического контакта неровностей микро- и нанощероховатости, рассмотреть их в рамках одной статьи, не перегружая её, практически невозможно.

Одной из причин контактного сопротивления является наличие на поверхности контактирующих деталей отклонений от идеальной

геометрической формы, в первую очередь шероховатости, т. е. отклонений микромасштабного уровня. Миниатюризация современных электромеханических устройств, габаритные размеры которых могут быть порядка миллиметров и менее [3], выводит на первые роли отклонения формы меньшего масштаба так называемую субшероховатость или наношероховатость.

Малый размер площадок контакта выступов наношероховатости (порядка единиц или десятков нанометров в диаметре) приводит к тому, что существенную роль начинает играть баллистический характер транспорта носителей заряда (электронов) через контакт, тогда как на уровне микрошероховатости его можно не учитывать из-за сравнительно большого размера площадок контакта выступов микрошероховатости (единицы или десятки микрометров в диаметре).

Цель данной работы – проанализировать соотношение диффузной (максвелловской) и баллистической (шарвиновской) составляющих электросопротивления контакта поверхностей, имеющих отклонения от идеальной формы двух уровней: микро- и наношероховатость. Это позволит выявить основные факторы, влияющие на величину контактного электросопротивления, управляя которыми можно повысить надёжность и эффективность электроконтактных соединений.

2. Природа контактного электросопротивления на микро- и наномасштабном уровне

При протекании электрического тока через малую проводящую площадку, соединяющую два проводящих полупространства, разделённых слоем диэлектрика (точечный контакт), принято различать два механизма транспорта носителей заряда через контакт – диффузный и баллистический. Критерием преобладания того или иного механизма служит число Кнудсена для электронного газа $Kn = \lambda/a$, где λ – длина свободного пробега электронов, a – радиус круговой площадки контакта.

При $Kn \ll 1$ преобладает так называемый диффузный механизм транспорта электронов, а сопротивление контакта, имеющего форму круглого пятна радиуса a (сопротивление стягивания), описывается известной формулой Максвелла – Хольма [4]

$$R_d = \frac{\rho}{2a}, \quad (1)$$

где ρ – удельное электросопротивление материала контактирующих тел.

При $Kn \gg 1$ преобладает так называемый баллистический механизм транспорта носителей, а сопротивление круглого контактного пятна описывается формулой Шарвина [5, 6].

$$R_b = \frac{4\rho}{3\pi a} Kn. \quad (2)$$

В оригинальной статье [5] эта формула приводится в виде $R_b = \frac{p_F}{e^2 D^2 n}$, где p_F, e, n – импульс Ферми, заряд и концентрация электронов, $D = 2a$. К виду (2) её приводят в целях единообразия с формулой (1) [6].

При $Kn \sim 1$ (переходный режим) сопротивление контакта рассчитывается как своего рода суперпозиция двух механизмов [7]

$$R = R_b + \gamma R_d, \quad (3)$$

где коэффициент γ зависит от числа Кнудсена и может быть рассчитан по аппроксимирующей формуле [6]

$$\gamma = \frac{1 + 0,83Kn}{1 + 1,33Kn}. \quad (4)$$

В работе [8] для коэффициента γ используется другое выражение

$$\gamma = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} e^{-Kn \cdot x} dx. \quad (5)$$

В этом случае при $Kn \rightarrow 0$ $\gamma \rightarrow 1$, а при $Kn \rightarrow \infty$ $\gamma \rightarrow 0$. В переходном режиме при $Kn = 1$ $\gamma = 0,5$.

Сравнение величин коэффициента γ , рассчитанных по формулам (4) и (5), приведено на рис. 1.

Рис. 1. Значения коэффициента γ : 1 – расчет по формуле (4), 2 – расчет по формуле (5).

3. Методика моделирования и параметры модельных контактных соединений

Для достижения поставленной цели использовались аналитические и численные методы моделирования контактных соединений с неровностями

двух масштабных уровней – микро- и наношероховатостью. Аналитические расчёты основаны на теоретических методиках описания процессов контактного взаимодействия, содержащихся в предыдущих работах авторов [1, 9], методика численного моделирования описана в работе [10].

Надо заметить, численное моделирование остается единственным средством описания процессов контактного взаимодействия при малых номинальных площадях контакта и малых контактных нагрузках, так как из-за небольшого числа контактирующих выступов (единицы, максимум десятки) статистические закономерности, лежащие в основе аналитических моделей контакта, теряют смысл. При сравнительно больших номинальных площадях контакта численное и аналитическое моделирование дает близкие результаты (расхождение не превышает 20 %).

Эквивалентная схема двухуровневого электрического контакта приведена в работе [2]. Характеристики контактирующих поверхностей, использованные при моделировании, приведены в Таблицах 1 и 2.

Таблица 1. Параметры микро- и наношероховатости контактирующих поверхностей

№ модели	Микрошероховатость		Наношероховатость		A_n , мм ²
	R_p , мкм	r_{max} , мкм	R_p , нм	r_{max} , нм	
1	0,1	3000	10	200	9
2	0,5	3000			
3	0,1	300			
4	0,1	3000			0,1

Обозначения: R_p – высота наибольшего выступа профиля, r_{max} – максимальный радиус кривизны вершин выступов, A_n – номинальная (геометрическая) площадь контакта.

Таблица 2. Физико-механические свойства контактирующих деталей

Материал	H_μ , МПа	H_n , МПа	E , ГПа	ρ , мкОм·м	E_F , эВ	n , м ⁻³
Золото	700	2500	77	0,023	5,5	$5,9 \cdot 10^{28}$ ($8,7 \cdot 10^{28}$)

Обозначения: H_μ и H_n – твердость микро- и наноиндентирования, E – модуль Юнга, ρ – удельное электросопротивление, E_F – энергия Ферми, n – концентрация носителей заряда (в скобках – величина, рассчитанная из постоянной Холла [11]).

Для вычисления критерия Кнудсена требуется знание длины свободного пробега носителей заряда. Ее можно оценить по величине удельного сопротивления на основании теории Зоммерфельда

$$\lambda = \frac{m^* v_F}{\rho n e^2}, \quad (6)$$

где m^* и v_F – эффективная масса и скорость Ферми электрона. Принимая

для золота $m^* \approx (1...1,5)m$ [11, 12] (m – масса свободного электрона) и выразив величину v_F из энергии Ферми, по формуле (6) получаем $\lambda \approx 36$ нм.

По результатам моделирования средний радиус единичных площадок контакта в диапазоне номинальных давлений $p_n = 0,01...1$ МПа изменялся в пределах $a = 2,3...4,5$ мкм для микрошероховатости и $a = 11,2...12,4$ нм для наношероховатости. Соответствующие значения критерия Кнудсена для микрошероховатости $Kn = 0,008...0,016$; для наношероховатости $Kn = 2,9...3,2$. В связи с этим баллистическая составляющая сопротивления рассчитывалась только для контакта выступов наношероховатости. Значения коэффициента γ при расчёте суммарного сопротивления наношероховатости вычислялись по формуле (4).

Диапазон номинальных давлений $p_n = 0,01...1$ МПа не ориентирован на конкретное контактное соединение, а выбран с целью полноты теоретического анализа. В конкретном изделии диапазон изменения p_n обычно не превышает одного порядка величины. При номинальной площади контакта $0,1 \text{ мм}^2$ диапазон номинальных давлений $p_n = 0,01...1$ МПа соответствует диапазону контактных нагрузок $1...10$ мН, характерному для микроэлектромеханических устройств. При $p_n < 0,01$ МПа контакт становится ненадежным, так как контактирует буквально несколько выступов.

4. Результаты моделирования и их обсуждение

Результаты моделирования показали следующее. Контактное сопротивление, обусловленное наношероховатостью, практически полностью определяется баллистической составляющей R_b (см. формулу (3)): её доля для всех модельных соединений (см. Таблицу 1) составляет 70...80 % во всем диапазоне контактных давлений.

Соотношение составляющих контактного сопротивления, обусловленных микро- и наношероховатостью, зависит от нагрузки на контакт и формы выступов микрошероховатости. В контакте поверхностей с относительно малым радиусом вершин выступов (№ 3 в Таблице 1) при малых нагрузках сопротивление, обусловленное наношероховатостью, может в два раза превосходить сопротивление, связанное с микрошероховатостью (см. рис. 2 в). С ростом нагрузки это соотношение меняется в пользу сопротивления микрошероховатости. На величину этого соотношения влияет критерий шероховатости R_p / r_{max} (см. рис. 2 а - 2 в).

Общее контактное сопротивление, как и его составляющие, практически обратно пропорционально номинальной площади контакта при тех же параметрах микро- и наношероховатости (см. рис. 2 а, 2 г).

Рис. 2. Зависимость составляющих контактного сопротивления от номинального давления для контактных пар из Таблицы 1: а – № 1, б – № 2, в – № 3, г – № 4. Линия 1 – диффузное контактное сопротивление нанощероховатости, линии 2 и 3 – полное контактное сопротивление нанощероховатости и микрошероховатости соответственно.

5. Заключение

Величины контактного сопротивления, приведённые на рис. 2, следует рассматривать как оценочные, поскольку, как отмечалось выше, оценочный характер носят величины эффективной массы электрона и длины свободного пробега. Однако качественные результаты несомненны.

1. Основной вклад в контактное сопротивление на микроуровне вносит диффузная составляющая, на наноуровне – баллистическая.

2. При малых контактных нагрузках сопротивление, обусловленное

наношероховатостью, может быть сопоставимо с сопротивлением, обусловленным микрошероховатостью, особенно для гладких поверхностей.

Библиографический список:

1. **Измайлов, В.В.** Влияние нанотопографии поверхностей на характеристики дискретного контакта твердых тел / В.В. Измайлов, М.В. Новоселова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2016. – Вып. 8. – С. 139-144.
2. **Измайлов, В.В.** Влияние нанотопографии поверхностей на электрическое сопротивление дискретного контакта твердых тел / В.В. Измайлов, М.В. Новоселова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2017. – Вып. 9. – С. 210-216.
3. **Косых, А.В.** Микроэлектромеханические системы: учебное пособие / А.В. Косых, А.Н. Лепетаев, А.И. Одинец. – Омск: ОмГТУ, 2016. – 247 с.
4. **Braunovic, M.** Electrical contacts: Fundamentals, Applications and Technology / M. Braunovic, V.V. Konchits, N.K. Myshkin. – Boca Raton: CRC Press, 2007. – 646 p.
5. **Шарвин, Ю.В.** Об одном возможном методе исследования поверхности Ферми / Ю.В. Шарвин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1965. – Т. 48. – № 3. – С. 984-985.
6. **Nikolić, B.** Electron transport through a circular constriction / B. Nikolić, P.B. Allen // Physical Review B. – 1999. – V. 60. – I. 6. – P. 3963-3969.
7. **Wexler, G.** The size effect and the non-local Boltzmann transport equation in orifice and disk geometry / G. Wexler // Proceedings of the Physical Society. – 1966. – V. 89. – I. 4. – P. 927-941.
8. **Mikrajuddin, A.** Size-dependent electrical constriction resistance for contacts of arbitrary size: from Sharvin to Holm limits / A. Mikrajuddin, F.G. Shi, H.K. Kim, K. Okuyama // Materials Science in Semiconductor Processing. – 1999. – V. 2. – I. 4. – P. 321-327.
9. **Измайлов, В.В.** Контакт твердых тел и его проводимость: монография / В.В. Измайлов, М.В. Новоселова. – Тверь: ТГТУ, 2010. – 112 с.
10. **Измайлов, В.В.** Числовое и аналитическое моделирование дискретного контакта деталей машин / В.В. Измайлов, С.А. Чаплыгин // Интернет-журнал «НАУКОВЕДЕНИЕ». – 2014. – № 6 (25). – 13 с. – Режим доступа: <http://naukovedenie.ru/PDF/10TVN614.pdf>. – 30.06.2019.
11. **Kittel, C.** Introduction to solid state physics: 8th ed. / C. Kittel. – New York: John Wiley & Sons, 2005. – 704 p.
12. **Абрикосов, А.А.** Основы теории металлов: учебное руководство / А.А. Абрикосов. – М.: Наука, 1987. – 520 с.

References:

1. **Izmailov, V.V.** The influence of surfaces nanotopography on characteristics of solids discrete contact / V.V. Izmailov, M.V. Novoselova // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2016. – I. 8. – P. 139-144. (In Russian).
2. **Izmailov, V.V.** Influence of the surface nanotopography on the electrical resistance of a discrete contact of solids / V.V. Izmailov, M.V. Novoselova // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2017. – I. 9. – P. 210-216. (In

Russian).

3. **Kosykh, A.V.** Microelectromechanical systems: a training manual / A.V. Kosykh, A.N. Lepetaev, A.I. Odinets. – Omsk: OmGTU, 2016. – 247 p. (In Russian).
4. **Braunovic, M.** Electrical contacts: Fundamentals, Applications and Technology / M. Braunovic, V.V. Konchits, N.K. Myshkin. – Boca Raton: CRC Press, 2007. – 646 p.
5. **Sharvin, Yu.V.** A Possible Method for Studying Fermi Surfaces / Yu. V. Sharvin // Soviet Physics –The Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1965. – V. 21. – No. 3. – P. 655-656.
6. **Nikolić, B.** Electron transport through a circular constriction / B. Nikolić, P.B. Allen // Physical Review B. – 1999. – V. 60. – I. 6. – P. 3963-3969.
7. **Wexler, G.** The size effect and the non-local Boltzmann transport equation in orifice and disk geometry / G. Wexler // Proceedings of the Physical Society. – 1966. – V. 89. – I. 4. – P. 927-941.
8. **Mikrajuddin, A.** Size-dependent electrical constriction resistance for contacts of arbitrary size: from Sharvin to Holm limits / A. Mikrajuddin, F.G. Shi, H.K. Kim, K. Okuyama // Materials Science in Semiconductor Processing. – 1999. – V. 2. – I. 4. – P. 321-327.
9. **Izmailov, V.V.** Contact of solids and its conductivity: monograph / V.V. Izmailov, M.V. Novoselova. – Tver: TGTU, 2010. – 112 p. (In Russian).
10. **Izmailov, V.V.** Numerical and analytical simulation of machine parts discrete contact / V.V. Izmailov, S.A. Chaplygin // Internet-zhurnal «NAUKOVEDENIE». – 2014. – № 6 (25). – 13 p. – Access mode: <http://naukovedenie.ru/PDF/10TVN614.pdf>. – 30.06.2019. (In Russian).
11. **Kittel, C.** Introduction to solid state physics: 8th ed. / C. Kittel. – New York: John Wiley & Sons, 2005. – 704 p.
12. **Abrikosov, A.A.** Fundamentals of metal theory: a training manual / A.A. Abrikosov. – M.: Nauka, 1987. – 520 p. (In Russian).

Original paper

ON THE RATIO OF DIFFUSIVE AND BALLISTIC COMPONENTS OF ELECTRICAL CONTACT RESISTANCE ON MICRO- AND NANOSCALE LEVELS

V.V. Izmailov, M.V. Novoselova

Tver State Technical University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.153

Abstract: The ratio of diffusive and ballistic components has been analyzed of a contact electrical resistance as well as a role of the micro- and nanoroughness of contact surfaces in a generation of an electrical contact resistance and its components. In a contact of nanoroughness asperities a ballistic component of a resistance dominates, whereas in a contact of microroughness asperities a diffusive one.

Keywords: *electrical contact, contact resistance, diffusive resistance, ballistic resistance, microroughness, nanoroughness.*

Измайлов Владимир Васильевич – д.т.н., профессор кафедры прикладной физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Новоселова Марина Вячеславовна – к.т.н., доцент кафедры прикладной физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Vladimir V. Izmailov – Dr. Sc., Professor, Department of Applied Physics, Tver State Technical University

Marina V. Novoselova – Ph. D., Docent, Department of Applied Physics, Tver State Technical University

Поступила в редакцию/received: 03.08.2019; после рецензирования/revise: 07.10.2019; принята/accepted 02.11.2019.