

# ЭЛЕМЕНТЫ МСТ И МИКРОСИСТЕМЫ

УДК 531.768 + 621.3.049.76

**Д. П. Лукьянов, д-р техн. наук, проф.,  
В. В. Лучинин, д-р техн. наук, проф.  
В. Ю. Скворцов, канд. техн. наук,  
Санкт-Петербургский государственный  
электротехнический университет "ЛЭТИ"**

## МИКРОАКСЕЛЕРОМЕТР НА ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ

*Рассмотрены принципы построения и основные технические характеристики микроакселерометра на поверхностных акустических волнах с частотной формой выходного сигнала. Приведены кинематическая схема акселерометра дифференциального типа, различные варианты топологии кристалла, возможные способы изготовления.*

### Введение

Акселерометры на поверхностных акустических волнах (ПАВ) представляют собой перспективный класс микроакселерометров фазового и особенно частотного типа, позволяющих реализовать высокий уровень конструктивной интеграции, обеспечить высокую устойчивость к внешним возмущениям, возможность существенного сокращения числа деталей и соединений между ними. Они обеспечивают возможность перекрытия без компенсации широкого рабочего диапазона (до  $10^5$  г) при частотной форме выходного сигнала.

Датчики механических величин на ПАВ обычно имеют чувствительные элементы с дифференциальным включением ПАВ-преобразователей. Для получения дифференциальной схемы традиционно используется размещение ПАВ-преобразователей на двух параллельных плоскостях подложки, чтобы преобразователи изменили свои параметры в равной степени, но с противоположными знаками [1]. Эта конструкция приводит к серьезному усложнению процесса изготовления. В данной статье рассматривается датчик с ПАВ-преобразователями, расположенными на одной рабочей плоскости подложки, что обеспечивает простую в технологическом отношении конструкцию. В этом случае один из ПАВ-преобразователей размещается в зоне, свободной от деформаций.

### Принцип действия и основы проектирования микроакселерометра

Твердотельные электронные устройства на ПАВ обычно представляют собой подложку из пьезоэлектрического материала, на одной или нескольких плоских поверхностях которой формируется периодическая встречно-штыревая структура проводящих электродов, предназначенная как для электрического возбуждения ПАВ, так и для их приема (обратного преобразования в электрический сигнал). При деформациях изгиба происходит изменение фазовой скорости ПАВ и шага периодической структуры.

Принцип действия акселерометров на ПАВ заключается в том, что выходной частотный сигнал вырабатывается в результате деформации подложки, на поверхности которой сформирован один или несколько ПАВ-преобразователей. Деформация происходит под действием усилия, созданного при ускорении инерционной массы. Обобщенная схема микроакселерометра, где ось чувствительности совпадает с нормалью к плоскости, в которой лежат ПАВ-преобразователи, показана на рис. 1 (см. третью сторону обложки). Консольная схема с изгибом пластины упругого подвеса имеет достаточно высокую чувствительность, но при этом снижаются жесткость и резонансная частота конструкции. Основным достоинством этой схемы является возможность реализации подвижной системы в интегральном виде. Роль упругого подвеса выполняет подложка с ПАВ-преобразователями. Придавая соответствующую конфигурацию подложке, можно формировать требуемую амплитудно-частотную характеристику (АЧХ) акселерометра. Консольная схема подвеса дает достаточно высокую линейность и позволяет реализовать простые и высокочувствительные преобразователи на широкий диапазон номинальных нагрузок [1].

Микроакселерометр (рис. 1, см. третью сторону обложки) представляет собой монолитную квазисимметричную конструкцию из двух консольных балок 1 с инерционными грузами 7 на конце каждой. На поверхности консольных балок 1 располагаются линии задержки (ЛЗ) на основе встречно-штыревых преобразователей (ВШП). Схема ЛЗ изображена на рис. 2 (см. третью сторону обложки). Балки 1 исполняют роль звукопроводов. Одна консоль является опорной (эталонной), и для того, чтобы избежать ее деформации под действием ускорения, она прикреплена с помощью перемычек 5

к рамочному корпусу 2. Система имеет два входных (3) и два выходных (4) ВШП для реализации схемы с частотным выходным сигналом  $\Delta f$ . На схеме показаны также токопроводы 6 для подвода и снятия сигналов. Ось чувствительности направлена перпендикулярно консольным балкам 1, плоскости корпуса 2 и совпадает с направлением оси  $z$ .

В основу построения чувствительных элементов на ПАВ положена зависимость их скорости от деформации подложки, которая в свою очередь зависит от ускорения. Изменение фазовой скорости ПАВ может оцениваться либо по фазовой задержке (пассивная схема) [1–3], либо по сдвигу частоты генератора с линией задержки в цепи обратной связи (активная схема). Предпочтительными являются автоколебательные схемы с частотным выходом, практически это схема усилителя с положительной обратной связью. В конечном счете, чувствительность микроакселерометра определяется задержкой ПАВ в замедляющей структуре.

Процесс преобразования физической величины в частоту выходного сигнала датчика на поверхностных акустических волнах можно представить в виде последовательности преобразований: измеряемая механическая величина преобразуется в деформацию упругого подвеса чувствительного элемента (пьезоэлектрическая подложка с ПАВ-устройством), что, в свою очередь, вызывает изменение фазочастотной характеристики этого устройства и приводит к изменению частоты колебаний автогенератора, содержащего в цепи образной связи ЛЗ.

В наиболее распространенных линиях с прямолинейной траекторией распространения ПАВ задержка сигнала определяется расстоянием между преобразователями и скоростью распространения ПАВ. Существующий набор материалов для пьезоэлектрических звукопроводов с учетом ограничений на их конечные линейные размеры и скорости распространения ПАВ позволяет оценить достижимые пределы задержки сигнала. Температурные коэффициенты задержки для данных материалов определяют температурную стабильность электрических параметров ЛЗ. В подавляющем большинстве случаев в ЛЗ с фиксированной задержкой сигнала используют *неаподизованные* входной и выходной преобразователи, полностью идентичные между собой; сквозная АЧХ определяется произведением АЧХ входного и выходного преобразователей.

### Расчет линии задержки

Порядок расчета ЛЗ определяется требованиями, предъявляемыми к ее основным электрическим параметрам. Например, если заданная задержка сигнала обеспечивается при использовании различных пьезоматериалов, выбор между ними проводится либо на основе энергетического критерия (обеспечения минимальных потерь на

фиксированной частоте генерации ПАВ), либо на основе критерия температурной стабильности параметров (в частности, температурной стабильности задержки).

Предположим, что материал звукопровода выбран из условия обеспечения максимальной температурной стабильности задержки сигнала. Одним из таких материалов является пьезокварц *ST*-резца ( $YXl/42,75^\circ$  или срез  $Y + 42,75^\circ$ ). В этом случае поток энергии направлен по волновому вектору. Кроме того, среди подложек из кварца наименьшей температурной зависимостью фазовой скорости распространения ПАВ  $V$  обладают подложки *ST*-резца с ориентацией  $YXl/42^\circ 45'$ . Характерные свойства этого материала приведены ниже.

Тип среза . . . . .	<i>ST</i>
Ориентация подложки и направление распространения . . . . .	$YXl/42^\circ 45'$
Фазовая скорость распространения $V$ , м/с . . . . .	3158
Относительное изменение фазовой скорости $\Delta V/V$ . . . . .	$5.8 \cdot 10^{-4}$
Угол $\Phi$ между направлением потока энергии и волновым вектором . . . . .	0
Затухание ПАВ для ориентации кварцевой подложки при 1 ГГц, $\text{дБ} \cdot \text{см}^{-1}$ . . . . .	6,7

Относительная разность  $\Delta V/V = (V_m - V)/V$  скоростей ПАВ на электрически закороченной (металлизированной) поверхности  $V_m$  и свободной поверхности  $V$  для волны в заданном направлении служит для определения коэффициента электромеханической связи

$$k_m = \sqrt{2\Delta V/V} = 0,034.$$

Дальнейшая последовательность расчетных операций определяется требуемыми электрическими параметрами ЛЗ. Если основным является обеспечение минимальных потерь на фиксированной частоте генерации ПАВ, то оптимальное число пар электродов  $N_{\text{опт}}$  во входном и выходном преобразователях для заданного пьезоматериала определяется как  $N_{\text{опт}} = \sqrt{\pi}/(2k_m)$  [1]. Для кварца *ST*-резца  $N_{\text{опт}} \approx 26$ .

При этом каждый из преобразователей может быть оптимально согласован в полосе  $\Delta f_{\text{п}} = 2f_0/N_{\text{опт}} \approx 0,05f_0$ , где  $f_0$  — центральная, или средняя, частота. При  $f_0 = 800$  МГц и  $\Delta f_{\text{п}} = 40$  МГц результирующая полоса пропускания ЛЗ с учетом перемножения АЧХ входного и выходного преобразователей составит  $\approx 0,035$  ( $\Delta f_{\text{п}} \approx 28$  МГц). Вносимые потери при этом минимальны.

Вместе с тем далеко не всегда требования к ЛЗ ограничены обеспечением заданной задержки сигнала и ее температурной стабильности. Расчет значительно усложняется в том случае, когда ширина полосы пропускания ЛЗ задана одновременно с требованием минимизации потерь.

Число электродов преобразователей (при идентичности конструкции входного и выходного пре-

образователей) выбирается в этом случае исходя из соотношения

$$N = 2f_0 a / \Delta f,$$

или, полагая, как и выше,  $f_0 = 800$  МГц, получим  $N = (2 \cdot 800 \cdot 0,7)/28 = 40$ , где  $\alpha = 0,6 \dots 0,8$  — коэффициент, учитывающий сужение полосы пропускания ЛЗ, соответствующей произведению АЧХ входного и выходного преобразователей.

Для обеспечения энергетического (электроакустического) согласования тракта в рабочей полосе частот в качестве звукопровода должен использоваться материал, оптимальное число пар электродов  $N_{\text{опт}}$  которого наиболее близко к  $N$ .

Если число электродов  $N$ , выбранное в соответствии с приведенным выше условием, больше оптимального для данного материала звукопровода, полоса пропускания электрической согласующей цепи шире полосы пропускания собственно преобразователя ( $Q_a < Q_s$ ), и наоборот. Для обеспечения энергетического согласования тракта в полосе пропускания отношение сопротивления нагрузки  $R_h$  (или генератора  $R_g$ ) к сопротивлению излучения выходного или входного преобразователей  $R_a(\omega_0)$  должно выбираться из условия

$$R_h/R_a(\omega_0) = Q_s(N)/Q_a(N),$$

где  $N$  — число электродов преобразователя  $Q_s$  — добротность электрической цепи;  $Q_a$  — добротность акустической цепи.

Период электродов преобразователя  $d$  (расстояние между двумя ближайшими штырями одной полярности) выбирается из соотношения  $d = V/f_0 = 3158/800 = 3,94$  мкм (рис. 2, см. третью сторону обложки). Ширина электродов  $a$  обычно равна четверти их периода ( $a = d/4$ ), т. е.  $a = 3,9475/4 = 0,98$  мкм. При этом протяженность одного преобразователя  $L_0 = (4N - 1)a = (4 \cdot 40 - 1)1 = 159$  мкм.

Минимальное значение апертуры преобразователя с учетом ограничения дифракционных искажений определяется из условия

$$W_{\min} \geq \sqrt{TV\lambda_0},$$

где  $\lambda_0$  — длина волны ПАВ на частоте генерации;  $T$  — время задержки.

Максимальное значение апертуры  $W_{\max}$  обычно ограничивается конечной шириной звукопровода  $D$ . При этом пределы изменения  $W$  весьма малы, поэтому требуемая степень рассогласования обеспечивается чаще всего за счет внешних цепей.

Предположим, что необходимо создать задержку сигнала  $T = 2$  мкс, тогда длина акустического пути  $L = VT = 3158 \cdot 2 \cdot 10^{-6} = 6,3$  мм. Вместе с тем  $L$  должна удовлетворять условию (для генератора с ЛЗ на ПАВ)  $L = N\lambda_0$ . Тогда при  $N = 26$  и  $\lambda_0 = 3,94$  мкм длина акустического пути  $L = 103$  мкм. При  $W = 110$  мкм  $D = W + 4a = 114$  мкм и  $S_t = D + 20 =$

= 134 мкм. Длина  $L$  ограничена размерами ПАВ-структуры и затуханием энергии ПАВ и не должна превышать  $L = 500\lambda = 2000$  мкм.

Изменение времени задержки ПАВ-структуры под воздействием инерционной силы вызывает относительное изменение частоты генератора  $\Delta f/f_0 = -\Delta T/T_0$ . В преобразователях механических величин значение  $\Delta T/T_0$  обычно доходит до 1 %.

### Оценка основных характеристик

Рассмотрим прогиб  $\varepsilon$  подвижного элемента микроакселерометра (рис. 3). После составления приближенного дифференциального уравнения изогнутой оси консольной балки и его интегрирования окончательно запишем

$$\varepsilon = z(x) = -\frac{Fx^2}{2EJ_y} \left[ x_C - \frac{x}{3} \right], \quad (1)$$

где  $F$  — сосредоточенная сила;  $E$  — модуль упругости;  $J_y$  — момент инерции сечения относительно оси  $y$ .

Определение прогиба по теореме Максвелла—Мора дает иную формулу:

$$\varepsilon = -\frac{F}{EJ_y} \left[ (x_C l_2 - l_2)x + (l_2 + l - x_C) \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} \right]. \quad (2)$$

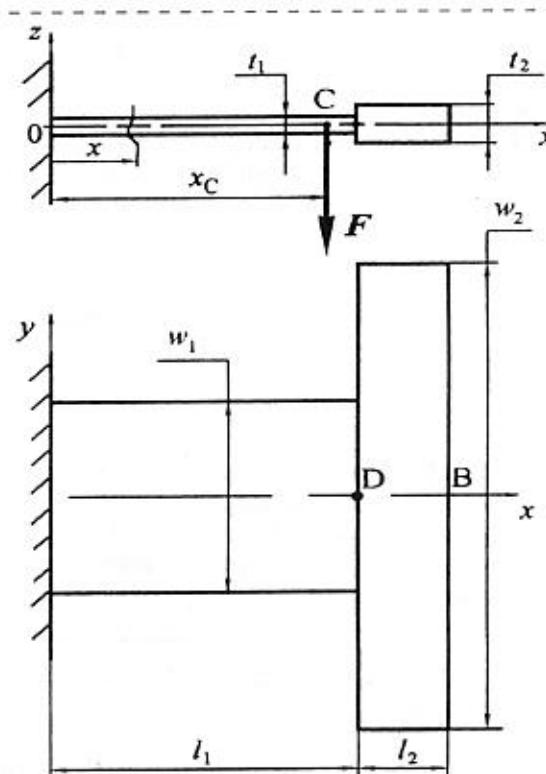


Рис. 3. Расчетная схема

Максимальным считается прогиб в точке  $D$  при  $x = l_1$ . Все геометрические размеры и другие параметры подвижного элемента приведены ниже.

Упругий подвес (длина $\times$ ширина $\times$ толщина), мм, $l_1 \times w_1 \times t_1$ .....	$1,9 \times 1,4 \times 0,02$
Инерционный груз (длина $\times$ ширина $\times$ толщина), мм, $l_2 \times w_2 \times t_2$ .....	$0,57 \times 3,4 \times 0,3$
Координаты центра масс $x_c$ ; $y_c$ , мм .....	2,08; 0
Осяевой момент инерции для сечения на участке $l_1(J_s)$ , м $^4$ .....	$9,33 \cdot 10^{-19}$
Объем подвижного элемента $V_{\text{под}}$ , м $^3$ .....	0,63
Плотность, кварц (кремний), $\rho$ , кг/м $^3$ .....	2649 (2328)
Модуль упругости (Si (100)), $E$ , Н/м $^2$ .....	$1,46 \cdot 10^{11}$
Масса подвижного элемента, кварц (кремний), $m$ , кг .....	$1,67 \cdot 10^{-6}$ ( $1,47 \cdot 10^{-6}$ )

В датчиках на основе ПАВ применяются пьезоэлектрические монокристаллы, однако в последнее время в связи с развитием технологии микроЭлектроники наиболее часто стали использовать слоистые материалы, позволяющие возбуждать ПАВ электрическим полем и в непьезоэлектрической среде. Особенно распространена комбинация пленки оксида цинка ( $ZnO$ ) и монокристаллического кремния. Однако наиболее перспективной представляется комбинация пленки AlN и кремния [4]. В этом случае для дополнительной температурной компенсации можно использовать свойства самих материалов, в частности, коэффициентов теплового расширения. В [4] показано, что при определенном соотношении толщин слоев AlN и Si достигается значительное уменьшение зависимости частоты акустической волны от изменения температуры в диапазоне 0...80 °C.

В случае учета только веса подвижного элемента  $G = mg$  наибольший статический прогиб по (1) для балки из кремния, ориентированной в плоскости (100), будет  $\epsilon_D = 2,77 \cdot 10^{-7}$  м, для кварца —  $\epsilon_D = 6,14 \cdot 10^{-7}$  м.

Найдем собственную частоту колебаний подвижного элемента микроакселерометра

$$\omega_0 = \sqrt{gc/G} = \sqrt{g/\epsilon_D} \approx 4 \text{ кГц (кварц)}, \quad (3)$$

где  $c$  — коэффициент пропорциональности, учитывающий упругость балки подвеса. Для кремния оказалось  $\omega_0 \approx 5,9$  кГц. В [5] на основе принципа Рэлея было получено другое выражение для расчета собственной частоты:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{EJ_y}{m_2 l_1^3}} \sqrt{\frac{6f^2 + 6f + 2}{8f^4 + 14f^3 + (21/2)f^2 + 4f + (2/3)}}, \quad (4)$$

где  $f = b/l_1$ ;  $m_2$  — инерционная масса. Расстояние  $b$  между концом консоли и центром инерционной массы будет  $l_2/2$ . Последнее уравнение дает лучшие

результаты при большем соотношении  $m_2/m_1$ , где  $m_1$  — масса консольной балки упругого подвеса. Более точное выражение можно получить из уравнения Эйлера с соответствующим числом граничных условий:

$$\frac{d^4 z(x)}{dx^4} = k^4 z(x), \quad (5)$$

где  $k^4 = \omega_0^2 \frac{\rho A_K}{E J_y}$ ;  $\rho$  — плотность материала консольной балки;  $A_K$  — площадь поперечного сечения консольной балки.

Границные условия для (5) имеют вид:

$$\begin{aligned} \text{при } x = 0 \quad &z(x) = 0, \quad z'(x) = 0; \\ \text{при } x = l_1 \quad &z''(x) = M_y/(E J_y), \quad z'''(x) = F_x/(E J_y). \end{aligned}$$

Однако эта методика дает длинное неявное уравнение, корни которого могут быть найдены только численными методами. Изгибающий момент  $M_y$  и сила  $F$ , действующая на подвес, могут быть приближенно рассмотрены в виде разложения в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} M_y &= m_2 \omega_0^2 [bz(l_1) + (4/3)b^2 z'(l_1) + \dots], \\ F &= -m_2 \omega_0^2 [z(l_1) + bz'(l_1) + (2/3)\alpha b^2 z''(l_1) + \dots]. \end{aligned}$$

Параметр  $\alpha = l_1/l_2$  можно не учитывать, когда момент инерции поперечного сечения инерционной массы намного больше, чем у консольной балки.

Корни уравнения Эйлера были определены численно с помощью метода Ньютона. В результате можно получить ряд собственных частот. Для подвижного элемента из кремния с ориентацией в плоскости (100) первая собственная частота была  $\omega_0 \approx 5,3$  кГц, вторая собственная частота —  $\omega_0 \approx 90,7$  кГц.

Сравнение результатов расчета собственной частоты с помощью уравнений (1)–(4) показано

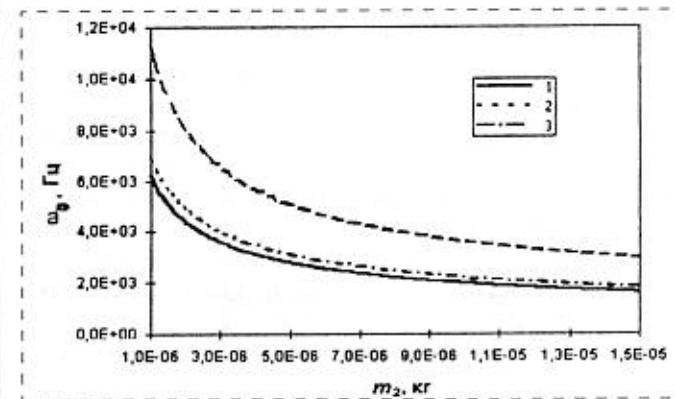


Рис. 4. Зависимость собственной частоты от изменения инерционной массы (кривая 1 — из уравнений (1) и (3); 2 — из (4); 3 — из (2) и (3))

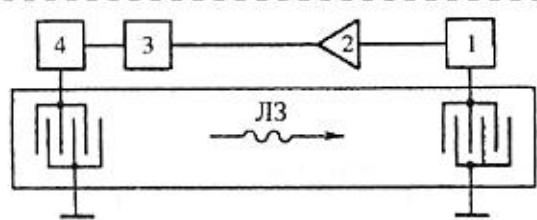


Рис. 5. Схема генератора с линией задержки на ПАВ

на рис. 4, где частота является функцией инерционной массы  $m_2$ .

Изменение частоты генератора  $f$  в зависимости от деформации подложки обычно выражается уравнением [7]

$$f = f_0(1 - \gamma\varepsilon),$$

где  $\gamma \approx 0,9$ .

Схема генератора показана на рис. 5, где 1, 4 — согласующие четырехполюсники; 2 — широкополосный усилитель; 3 — частотно-избирательная схема. При этом реализуются следующие параметры:  $f_0 = 800$  МГц, диапазон перестройки  $\Delta f \approx 28$  МГц.

В результате получается микроакселерометр на ПАВ с характеристиками, которые приведены ниже.

Чувствительность, квадри, Гц/g (Гц/м <sup>2</sup> )	440 (44,9)
Диапазон измерения ускорения, g (м/с <sup>2</sup> )	±15 (±147)
Нелинейность выходной характеристики, %	1
Рабочий диапазон температур, °С	10—30
Габаритные размеры, мм	6,6 × 4,6 × 0,5
Масса микроакселерометра, квадри (кремний), кг	$1,44 \cdot 10^{-5}$ ( $1,26 \cdot 10^{-5}$ )

Внешний вид предлагаемой конструкции микроакселерометра (без ПАВ-преобразователей и токоразводки) показан на рис. 6 (см. третью сторону обложки). Практическая реализация работы находится на стадии изготовления фотошаблонов. Базовые технологические операции нанесения AlN

на Si и травление кремния отработаны. В дальнейшем планируется создание полностью интегрального микроакселерометра, включая измерительные цепи формирования и обработки сигналов.

\*\*\*

Рассмотрен один из перспективных принципов построения микроакселерометров на пространственных замедляющих структурах.

Предлагаемые для использования ПАВ на частотах порядка 800...1000 МГц характеризуются весьма малыми длинами волн (микронный диапазон), что делает реальной постановку задачи обобщения принципов построения широкого класса микрочувствительных элементов от ультразвуковых на ПАВ до микрооптоэлектромеханических, использующих, например, брэгговские дифракционные структуры пассивного и активного типов.

#### Список литературы

1. Малов В. В. Пьезорезонансные датчики. 2-е изд., перераб. и доп., М.: Энергоатомиздат, 1989.
2. Лукьянов Д. П., Скворцов В. Ю. Микроакселерометры на периодических структурах // Навигация и управление движением. Материалы II научно-технической конференции молодых ученых, ГНЦ РФ "Электроприбор", 28—31 марта, С.-Петербург, 2000. С. 82—87.
3. Лукьянов Д. П., Скворцов В. Ю., Торопов Ю. А. Микроакселерометры на поверхностных акустических волнах // 1-я международная конференция по мекатронике и робототехнике, посвященная 100-летию со дня рождения Д. А. Завалишина (МИР'2000), 29 мая — 2 июня, С.-Петербург. Т. 2. Сб. трудов. СПб.: НПО Омега, 2000. С. 177—183.
4. AlN/silicon Lamb-wave microsensors for pressure and gravimetric measurement / A. Choujaa et al. // Sensors and Actuators. A. Physical. 1995. Vol. 46—47. P. 179—182.
5. Roylance L. M., Angell J. B. A batch-fabricated silicon accelerometer // IEEE Trans. Electron Devices, ED-26 (1979). P. 1911—1917.
6. Зеленка И. Пьезоэлектрические резонаторы на объемных и поверхностных акустических волнах: Материалы, технология, конструкция, применение: Пер. с чешск. М.: Мир, 1990.
7. Toda K. Characteristics of interdigital transducers for mechanical sensing and non-destructive testing // Sensors and Actuators. A. Physical. 1994. Vol. 44. N 3. P. 241—247.

**А. А. Гречников**, канд. хим. наук,  
**А. Н. Могилевский**, канд. техн. наук,  
Институт геохимии и аналитической химии  
им. В. И. Вернадского

## МЕТОД ПЬЕЗОРЕЗОНАНСНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРОВ ГЕПТИЛА В ПОЛЕВЫХ УСЛОВИЯХ

*Разработан новый метод определения содержания гептила (несимметричного диметилгидразина) в воздухе. Метод основан на использовании в качестве сенсора пьезоэлектрического резонатора со специальным сорбционным покрытием в сочетании с дополнительным селективным фильтром, задерживающим определяемое вещество и пропускающим мешающие компоненты. В качестве покрытия сенсора исследована поликарболовая кислота. Предел обнаружения сенсора составляет 0,3 мг/м<sup>3</sup>. Влияние мешающих веществ подавлено специально разработанным алгоритмом измерений.*

В настоящее время при определении содержания веществ в газовой фазе все более важную роль играют химические газовые сенсоры — миниатюрные высокочувствительные датчики, предназначенные для прямого, полностью автоматизированного определения содержания газов и паров в различных промышленных и природных объектах. Эти устройства, принадлежащие к новому и наиболее перспективному поколению газоаналитической техники, интенсивно развиваются во многих странах.

Под термином "химический сенсор" обычно понимают первичный преобразователь изменения концентрации определяемого вещества в соответствующий аналитический сигнал, удобный для передачи, дальнейшего преобразования, обработки и хранения. По характеру преобразования можно выделить следующие основные классы химических сенсоров [1]: потенциометрические, кондуктометрические, амперометрические, оптические, массо-чувствительные пьезорезонансные и термические. При анализе газовых сред особое место в этом ряду сенсоров занимают пьезорезонансные сенсоры (ПС), к несомненным достоинствам которых относятся:

- высокая массовая чувствительность, достигающая 100–1000 Гц/нг;
- цифровой характер преобразования измеряемой массы в выходной сигнал (обычно таким сигналом является частота) при высокой линейности преобразования и, соответственно, хорошее согласование выходного сигнала с совре-

менными средствами обработки измерительной информации;

- большой ресурс работы, определяемый в основном только временем службы сорбционного покрытия;
- работоспособность в широком диапазоне температур: от близких к точке Кюри (573 К для кварцевых сенсоров) до абсолютного нуля;
- низкое энергопотребление;
- малые габаритные размеры;
- сравнительно низкая стоимость.

ПС относятся к сенсорам сорбционного типа. Их работа основана на использовании высокочастотных акустических волн, распространяющихся в среде, обладающей пьезоэффектом. В процессе сорбционного взаимодействия таких сенсоров с определяемым веществом изменяются толщина (масса) сенсоров. Эти изменения вызывают эквивалентные изменения частоты, фазы и амплитуды колебаний, которые можно измерять стандартными методами. В твердотельном волноводе может быть возбуждено большое число разновидностей акустических волн, однако не все они представляют интерес с точки зрения применения в химических газовых сенсорах. В настоящее время наибольшее распространение получили ПС с двумя типами используемой акустической волны: сенсоры на основе объемных волн типа "сдвиг по толщине" (ОАВ-сенсоры) и сенсоры на основе поверхностных акустических волн Рэлея (ПАВ-сенсоры). Конструктивно ПС обычно представляют собой пластину из пьезоэлектрического материала ( $\alpha$ -кварц, ниобат или танталат лития и т. д.), на поверхности которой находятся металлические электроды для возбуждения акустических колебаний. Для обеспечения чувствительности и селективности анализа обычно используют специальное сорбирующее покрытие, которое наносят на электроды (ОАВ-сенсоры) или на область межэлектродного пространства (ПАВ-сенсоры).

Одним из наиболее актуальных применений химических газовых сенсоров является контроль за содержанием в воздухе веществ, оказывающих вредное воздействие на людей и животных. К числу приоритетных загрязнителей атмосферы относится несимметричный диметилгидразин (более известный как гептил) — основной компонент жидкого ракетного топлива (в частности, используемый в качестве горючего в ракетах-носителях класса "Протон", "Циклон" и "Рокот"). Гептил характеризуется как чрезвычайно токсичное вещество нервно-паралитического, удушающего и канцерогенного действия. Кроме гептила, находящегося в обращении, большое количество этого вещества, срок использования которого давно истек, в настоящее время остается в хранилищах в ожидании разработки надежных методов утилизации. Тем са-

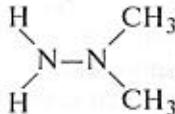
мым создана ситуация, когда ежегодно сотни тысяч людей подвержены риску заболевания из-за воздействия гептила и продуктов его распада в атмосфере. Для определения концентраций несимметричного диметилгидразина обычно применяются анализаторы на основе спектрофотометров или газовых хроматографов. Эти приборы достаточно дороги, сложны в эксплуатации, а также имеют большую массу, габариты и энергопотребление, что затрудняет, а часто и не позволяет проводить измерения на местности.

В настоящей статье приведены результаты исследований, цель которых — разработка нового метода определения паров несимметричного диметилгидразина в полевых условиях с применением массочувствительных пьезорезонансных сенсоров. Среди ряда задач, которые необходимо было решить для достижения поставленной цели, основными являются: создание сорбционного покрытия сенсора и разработка способа определения микр концентраций гептила в присутствии относительно высоких концентраций мешающих веществ (в частности, паров воды).

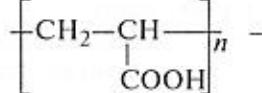
### Сорбционное покрытие пьезорезонансных сенсоров паров гептила

Природа сорбционного покрытия является одним из ключевых факторов, определяющих аналитические характеристики ПС. Особенность пьезорезонансного метода такова, что помимо определенных химических свойств (способности эффективно и селективно связывать анализируемый компонент газовой смеси), сорбент должен обладать и целым рядом специфических физических характеристик. Так, одно из важнейших требований к сорбентам — малость акустических потерь, вносимых в резонансную систему покрытием, — приводит к необходимости использовать только такие материалы, которые способны образовывать на поверхности сенсора тонкие, однородные по толщине пленки с высоким модулем упругости и хорошей адгезией к материалу поверхности ПС. Следовательно, при выборе покрытия сенсора паров гептила необходимо учитывать как особенности химического поведения несимметричного диметилгидразина, так и упругомеханические параметры сорбционного слоя.

Химические свойства гептила (структурная

формула  ) во многом определяются

наличием отрицательных зарядов на атомах азота и его способностью выступать в качестве донора электронов. Являясь достаточно сильным основанием, несимметричный диметилгидразин активно взаимодействует с неорганическими и органиче-

скими кислотами, образуя соли различного состава, которые вследствие наличия двух реакционных центров в молекуле могут быть и двойными. Поэтому связывание как замещенного, так и незамещенного азота можно осуществить, используя взаимодействие неподеленной пары электронов азота с протонами кислот, т. е. применяя чувствительные покрытия, содержащие кислотные функциональные группы. В качестве таких покрытий мы применяли полимерные карбоновые кислоты [2], которые не только активно взаимодействуют с аминами, но и обладают необходимыми упругомеханическими параметрами и хорошей адгезией к металлам и стеклам. В настоящей статье приведены результаты исследования сенсора, в качестве сорбционного покрытия которого использована поликарболовая кислота (ПАК) 

тический представитель класса поликарбоновых кислот.

В исследованиях использовали специально разработанные кварцевые пьезоэлектрические резонаторы объемных акустических волн типа "сдвиг по толщине" (AT-срез кварца) с частотой 16,5 МГц, работающие на первой механической гармонике. Конструктивно такой резонатор представляет собой кварцевый диск диаметром 8 мм и толщиной примерно 0,1 мм, на противоположные стороны которого нанесены металлические электроды диаметром около 4 мм. Использовали трехслойные электроды с наружным слоем, выполненным из золота. ПАК растворяли в воде, раствор наносили микропипеткой на каждый электрод и высушивали в атмосфере воздуха. Сенсор помещали во фторопластовую камеру и включали в схему высокочастотного генератора, частота которого, измеренная высокочастотным частотомером, заносилась в память ЭВМ. В качестве газа-носителя использовали атмосферный воздух. Требуемую концентрацию гептила и мешающих компонентов получали методом динамического разбавления потоков на газовом стенде. Температура во время экспериментов составляла  $20 \pm 2$  °C, относительная влажность воздуха  $46 \pm 5\%$ .

Как известно [3], зависимость изменения частоты ОАВ-сенсора от изменения его массы (вызванного, в частности, сорбией определяемого или мешающего вещества) описывается следующим выражением:

$$\Delta F = -\frac{F_0^2}{\rho N A_n} \frac{\Delta M}{M} = K \Delta M,$$

где  $\Delta F$  — изменение частоты сенсора;  $F_0$  — собственная частота колебаний сенсора;  $\rho$  — плотность пьезоматериала;  $N = F_0 d$  — частотный коэффи-

циент резонатора;  $d$  — резонансный размер (толщина резонатора);  $\Delta M$  — изменение массы сенсора;  $A_n$  — площадь, занимаемая сорбционным покрытием. Для сенсоров, использованных в данной работе (покрытие наносили на всю поверхность электродов), коэффициент  $K = -2,38 \text{ Гц}/\text{нг}$ .

Как показали эксперименты, продолжительность переходного процесса в ПС (время выхода на новое равновесное состояние) при ступенчатом воздействии гептилом превышает 1 ч, что делает неприемлемым использование в качестве отклика сенсора сдвиг частоты в результате сорбции. Поэтому концентрацию несимметричного диметилгидразина определяли по скорости изменения частоты на начальном участке переходной характеристики системы (кинетической кривой сорбции). Первые несколько минут после подачи гептила к сенсору частота уменьшается практически линейно во времени (в частности, за 10 мин отклонение от линейности не превышает 5 %), поэтому скорость измеряли как отношение разности двух частот сенсора, разделенных заранее заданным интервалом времени  $\Delta t$ , к величине  $\Delta t$ . В зависимости от требований к пределу обнаружения и быстродействию сенсора величину  $\Delta t$  можно выбирать любой в диапазоне линейности кинетической кривой сорбции. В настоящей работе все измерения проводили при  $\Delta t = 10 \text{ мин}$ .

Важным параметром, определяющим аналитические характеристики сенсора, являются масса чувствительного покрытия. На рис. 1 приведены экспериментально полученные зависимости величины отклика (кривая 1) и уровня частотного шума сенсора (кривая 2) от массы ПАК. В диапазоне масс покрытия от 7 до 80 мкг величина отклика пропорциональна массе, что свидетельствует об объемном характере сорбции. При дальнейшем

увеличении количества сорбента на резонаторе зависимость становится нелинейной. Это можно объяснить тем, что с ростом массовой нагрузки резонатора увеличиваются потери энергии колебаний на внутреннее трение в объеме покрытия, что, как известно [4], приводит к снижению массовой чувствительности сенсора. Экспериментально установлено, что максимально возможна масса ПАК соответствует изменению частоты сенсора на 330—350 кГц (2,0—2,1 % от рабочей частоты), ее превышение приводит к срыву колебаний генератора.

Очевидно, что значительная зависимость величины отклика от массы ПАК делает целесообразным использование большой массовой нагрузки резонатора. Однако с увеличением такой нагрузки возрастает и величина частотного шума сенсора. Учитывая приведенные на рис. 1 данные, можно прийти к выводу, что зависимость отношения сигнал/шум от массы ПАК имеет максимум. Масса покрытия, при котором достигается этот максимум, составляет примерно 75 мкг. Она может считаться оптимальной в условиях данного эксперимента. Отношение сигнал/шум сенсора с оптимальной массовой нагрузкой при концентрации гептила 5 мг/м<sup>3</sup> равно 4,7, т. е. согласно З $\sigma$ -критерию [5] предел обнаружения гептила при времени измерения 10 мин составляет примерно 0,3 мг/м<sup>3</sup>. Как показали эксперименты, концентрационная характеристика сенсора линейна в диапазоне концентраций 0,3—200 мг/м<sup>3</sup>.

В ходе взаимодействия ПАК с несимметричным диметилгидразином образуются достаточно прочные в химическом отношении солевые комплексы, что не дает возможности полностью десорбировать определяемое вещество при нормальной температуре: в потоке атмосферного воздуха за 10 мин десорбируется около 30 % связанного гептила. Однако емкость сорбционного слоя достаточно высока. Согласно полученным результатам покрытие позволяет провести не менее 330 анализов при концентрации паров несимметричного диметилгидразина на уровне 1 мг/м<sup>3</sup>, т. е. на уровне ПДК рабочей зоны [6]. Отработанный сорбент легко удаляется с резонатора в потоке дистиллированной воды.

Для оценки селективности сенсора изучено влияние таких распространенных мешающих веществ, как пары воды и углеводородов, входящих в состав автомобильных бензинов. Как показали эксперименты, циклогексан, *n*-гексан, *n*-октан, *n*-декан, бензол и толуол начинают оказывать влияние только при концентрациях выше 700 мг/м<sup>3</sup>. Необходимо особо отметить, что сорбция углеводородов на ПАК полностью обратима, а время установления сорбционного равновесия не превышает 1,8 мин. Как показано ниже, влияние этих веществ на результаты анализа можно исключить, используя специальный алгоритм измерения.

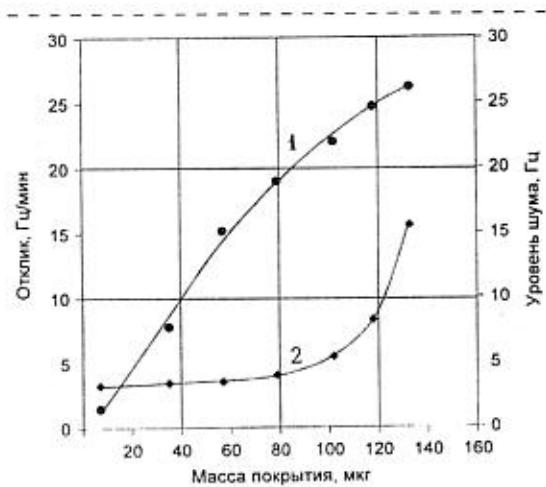


Рис. 1. Зависимость величины отклика (1) и уровня частотного шума (2) сенсора от массы сорбционного покрытия. Концентрация гептила 5 мг/м<sup>3</sup>

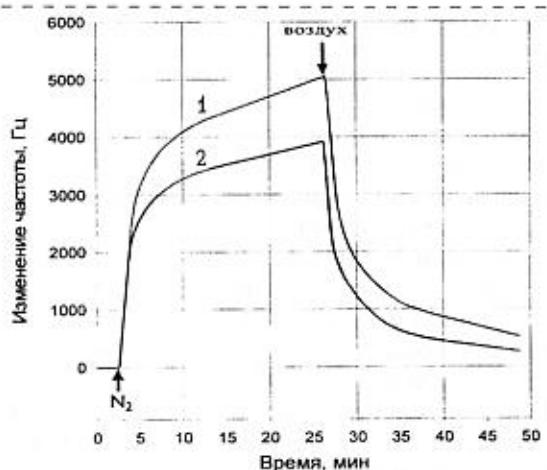


Рис. 2. Зависимости изменения частоты сенсора от времени при десорбции и сорбции паров воды:  
1 — масса ПАК 79 мкг; 2 — масса ПАК 35 мкг

Гораздо более существенное воздействие на параметры сенсора оказывают пары воды, что не удивительно, учитывая высокую гидрофильность всех поликарбоновых кислот. Нами установлено, что взаимодействие ПАК с парами воды представляет собой сложное явление, состоящее из двух процессов, которые характеризуются двумя отличающимися на два порядка постоянными времени. В качестве примера на рис. 2 приведены зависимости изменения частоты от времени при десорбции и сорбции паров воды: через параллельно расположенные в газовом тракте камеры с сенсорами, различающимися массой ПАК, вначале продували сухой азот, а затем — лабораторный воздух с относительной влажностью 42 %. Исходное (до начала воздействия азотом) значение относительной влажности также составляло 42 %. Из приведенных данных видно, что каждая из кривых сорбции и десорбции имеет два линейных участка, соответствующих различным значениям скорости процесса. Начальные скорости десорбции и сорбции для обеих масс близки, что свидетельствует в пользу поверхностного характера взаимодействия. На втором линейном участке скорость процесса значительно ниже и зависит от массы ПАК. Эта скорость, по-видимому, определяется скоростью диффузии молекул воды в объем (или из объема) покрытия. Следует отметить, что постоянная времени данного взаимодействия значительно превышает время измерения концентрации гептила (10 мин), и при проведении измерений в полевых условиях это взаимодействие должно проявляться в виде медленного дрейфа частоты сенсора. Таким образом, при разработке портативных анализаторов паров гептила необходимо принять специальные меры, позволяющие увеличить селективность анализа. Возможный вариант таких мер рассмотрен ниже.

### Определение концентраций паров несимметричного диметилгидразина в полевых условиях

С целью максимального учета влияния мешающих компонентов при измерениях в полевых условиях нами разработан способ пьезосорбционного определения газов и паров, основанный на применении пропускающего фильтра, селективно поглощающего определяемое вещество, в сочетании с временной селекцией сигнала и неоднократным измерением частоты [7]. Способ измерений включает три последовательных режима измерений газоанализатора:

(1) — предварительный продув анализируемой газовой смеси через пропускающий фильтр и камеру с сенсором. При этом определяемое вещество задерживается фильтром, а другие компоненты смеси проходят (в идеале — полностью) в камеру, где взаимодействуют с сорбционным покрытием сенсора;

(2) — режим сорбции, во время которого анализируемая газовая смесь подается непосредственно в камеру с сенсором (в обход фильтра). В этом режиме происходит взаимодействие сенсора с определяемым компонентом;

(3) — режим десорбции, во время которого анализируемая газовая смесь снова проходит через пропускающий фильтр и камеру с сенсором для десорбции определяемого вещества с покрытия, а также для очистки газового тракта.

Конкретный алгоритм измерения зависит от механизма взаимодействия покрытия с определяемым и мешающими компонентами. При определении содержания паров гептила частота сенсора в процессе измерения изменяется так, как изображено на рис. 3. Очевидно, что необходимо провес-

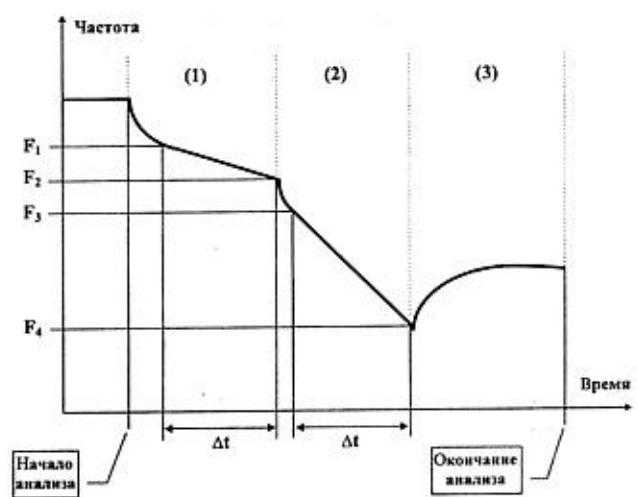


Рис. 3. Алгоритм измерения концентраций паров гептила в полевых условиях:

(1) — режим предварительного продува; (2) — режим сорбции; (3) — режим десорбции

ти четыре измерения частоты, т. е. дважды измерить скорость ее изменения. Первое измерение частоты сенсора  $F_1$  проводят в режиме предварительного продува через 2 мин после начала анализа (этого интервала времени достаточно для достижения сорбционного равновесия ПАК с мешающими веществами с малым временем сорбции, в частности, парами предельных и ароматических углеводородов). Второе измерение частоты  $F_2$  выполняют в этом же режиме через заданный интервал времени  $\Delta t$  после проведения первого. Разность  $F_2 - F_1$  определяется скоростью дрейфа частоты сенсора, вызванного воздействием компонентов с большим значением постоянной сорбции, в частности, паров воды. Третье  $F_3$  и четвертое  $F_4$  измерения частоты, разделенные интервалом времени  $\Delta t$ , проводят в режиме сорбции. Следует отметить, что если сорбент в фильтре не полностью пропускает вещества с малым временем сорбции, то второе измерение скорости изменения частоты  $(F_4 - F_3)/\Delta t$  необходимо проводить только после установления сорбционного равновесия покрытия с этими веществами в анализируемой атмосфере. После окончания четвертого измерения частоты осуществляют десорбцию определяемого вещества с ПАК. Аналитическим сигналом является  $[(F_4 - F_3) - (F_2 - F_1)]/\Delta t$ . Такой алгоритм позволяет практически полностью устраниТЬ влияние мешающих компонентов с малым временем сорбции и вычесть из полученного отклика сигнал, обусловленный дрейфом сенсора. Концентрация гептила  $C$  определяется следующим выражением:

$$C = |F_4 - F_3 - F_2 + F_1| / (\Delta t b_A),$$

где  $b_A$  — концентрационная чувствительность сенсора. В условиях нашего эксперимента при  $\Delta t = 10$  мин концентрация может быть выражена соотношением  $C = |F_4 - F_3 - F_2 + F_1| / 320$ ,

где размерности  $[C] = [\text{мг}/\text{м}^3]$ ,  $[F_i] = [\text{Гц}]$ ,  $i = \overline{1,4}$ .

При определении содержания паров гептила фильтр с селективным сорбентом при продуве через него анализируемой смеси должен без остатка поглощать несимметричный диметилгидразин и, по возможности, полностью пропускать пары углеводородов и воды. Среди ряда изученных нами гидрофобных сорбентов при средних значениях относительной влажности (30—70 %) этим требованиям наиболее полно удовлетворяют пятиводный сульфат меди и сульфокатионит КУ-2.

На основе разработанного сенсора и предложенного способа определения создан макетный образец пьезосорбционного анализатора паров гептила. Габаритные размеры прибора  $23 \times 30 \times 12$  см, масса около 4 кг, потребляемая мощность не более 10 Вт. Блок управления анализатором выполнен на однокристальной микроЭВМ, что позволяет оператору реализовать различные режимы измерения чисто программными средствами и изменять в широких пределах параметры анализатора.

#### Список литературы

- Мясоедов Б. Ф., Давыдов А. В. Химические сенсоры: возможности и перспективы // Журн. аналит. химии. 1990. Т. 45, № 7. С. 1259—1278.
- Могилевский А. Н., Гречников А. А., Строганова Н. С. и др. Сенсор паров несимметричного диметилгидразина. Патент РФ № 2114423 от 27.06.1998 г. Б. И. № 18.1998.
- Sauerbrey G. Verwendung von Schwingquarzen zur Wagung dünner Schichten und zur Mikrowagung // Zeitschr. für Physik. 1959. Bd. 155. P. 206—222.
- Meeea V., Bucur R. V. The mechanism of the interaction of thin films with resonating quartz crystal substrates: the energy transfer model // Thin Solid Films. 1979. Vol. 60. P. 73—84.
- Kaiser H., Specker H. Berwertung und vergleich von analysenverfahren // Z. Anal. Chem. 1956. Bd. 149. P. 46—56.
- Химическая энциклопедия. Т. 1 // М.: Советская энциклопедия. 1990.
- Могилевский А. Н., Гречников А. А., Майоров А. Д. Анализатор паров и газов. Патент РФ № 2117275. Б. И. № 22.1998.

# ПРИМЕНЕНИЕ МСТ

УДК 621.38:622.276.34:531.746

**Г. И. Чесноков, канд. техн. наук,  
В. И. Галкин, канд. техн. наук,  
Д. В. Галкин, канд. техн. наук,  
АООТ "Московский институт электромеханики  
и автоматики"**

## КОНТРОЛЬ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОРИЕНТАЦИИ СТВОЛОВ СКВАЖИН ГИРОСКОПИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

*Представлены алгоритмы определения углов пространственной ориентации скважины в процессе движения измерительного блока гирокомпьютерного инклинометра бесплатформенного типа. Рассмотрены и проанализированы различные способы построения кинематических уравнений на предмет минимизации времени, затрачиваемого на их решение. Показан рабочий алгоритм наиболее перспективного многошагового построения с использованием параметров Родрига—Гамильтона в кватернионной форме записи угловых поворотов измерительного блока.*

### Введение

Применение гирокомпьютерных инклинометров для определения пространственной ориентации скважин в нефтегазодобывающей промышленности позволяет осуществлять строительство скважин в условиях магнитных аномалий с использованием обсадных труб из магнитомягких материалов. Это существенно расширяет возможности промышленной добычи нефти и газа, снижает затраты на строительство скважин.

АООТ "Московский институт электромеханики и автоматики" (АООТ "МИЭА"), используя свой научно-технический потенциал по созданию инерциальных навигационных систем для аэрокосмической отрасли, разрабатывает малогабаритные высокоточные гирокомпьютерные инклинометры бесплатформенного типа [1, 2], позволяющие реализовать наиболее эффективные способы построения скважин на основе кустового, наклонного и горизонтального бурения. Примером таких разработок является гирокомпьютерный инклинометр "ГИД" [2], измерительный блок которого представлен на рис. 1 (см. четвертую сторону обложки).

Важнейшей технической характеристикой современных инклинометров является оперативность получения и обработки информации. Разра-

батываемые в АООТ "МИЭА" гирокомпьютерные инклинометры позволяют определять угловое положение скважины в процессе движения измерительного блока, что приводит к максимальному сокращению времени промера скважины. Достигается это за счет использования специальных расчетных алгоритмов. Ниже изложены особенности разработанных алгоритмов, показаны различные варианты их реализации.

### 1. Исходные положения

Измерительный блок гирокомпьютерного инклинометра бесплатформенного типа в общем случае состоит из трех двухстепенных гирокомпьютеров, работающих в режиме датчиков угловых скоростей (ДУС), и трех линейных акселерометров. На рис. 2 (см. четвертую сторону обложки) показана структурная схема измерительного блока и система координат, используемая для определения углового положения ствола скважины. Местоположение измерительного блока в скважине определяется по длине каротажного кабеля.

В качестве базовой системы координат, относительно которой определяется угловое положение скважины, принят географический сопровождающий трехгранник  $XYZ$ , в котором ось  $Z$  направлена по местной вертикали к центру Земли, ось  $X$  лежит в плоскости горизонта и направлена на север, а ось  $Y$  направлена на восток.

Угловое положение оси ствола скважины в точке ее замера, задаваемое системой координат  $X'Y'Z'$ , определяется двумя углами: зенитным углом  $\theta$  — углом отклонения ствола скважины относительно местной вертикали и азимутальным углом  $\alpha$  — углом отклонения апсидальной плоскости ствола скважины от плоскости местного меридиана.

Система координат измерительного блока  $X_1$ ,  $Y_1$ ,  $Z_1$  связана с осями чувствительности гирокомпьютеров и акселерометров. В расчетах принято, что однотипные оси чувствительности гирокомпьютеров и акселерометров совпадают друг с другом и лежат в точке измерения положения оси ствола скважины  $M$ .

Основной особенностью определения пространственной ориентации скважины с помощью бесплатформенного измерительного блока является отсутствие жесткой связи между измерительным блоком и скважиной, т. е. измерительный блок может поворачиваться вокруг оси скважины  $Z'$  на угол  $\phi$ . Этот угол в геодезии принято называть углом установки отклонителя или углом поворота инклинометра.

Для определения углового положения скважины в процессе движения измерительного блока разработаны кинематические уравнения, учитывающие вышеуказанную особенность. При этом принято допущение, что скоростью движения измерительного блока, перпендикулярной местной вертикали, можно пренебречь. Исследовано несколько способов представления кинематических уравнений: через измеряемые углы, через направляющие косинусы, через параметры Родрига—Гамильтона.

## 2. Представление кинематических уравнений через измеряемые углы

Такое представление уравнений является наиболее простым и очевидным. Используя принятые системы координат и находя проекции векторов угловых скоростей на измерительные оси трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  при его поворотах относительно базового трехгранника  $XYZ$  на интересующие нас углы  $\alpha, \theta, \phi$  (рис. 1), получим три дифференциальных уравнения [3]:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\alpha} &= \omega_z - \omega_x \cos \alpha \operatorname{ctg} \theta + \\ &+ (\omega_{x1} \cos \phi + \omega_{y1} \sin \phi) / \sin \theta; \\ \dot{\phi} &= -\omega_x \cos \alpha / \sin \theta + \\ &+ (\omega_{x1} \cos \phi + \omega_{y1} \sin \phi) \operatorname{ctg} \theta - \omega_{z1}; \\ \dot{\theta} &= -\omega_x \sin \alpha + \omega_{x1} \sin \phi - \omega_{y1} \cos \phi, \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

где  $\omega_{x1}, \omega_{y1}, \omega_{z1}$  — проекции угловой скорости вращения измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  в инерциальном пространстве, измеряемые гироскопами;  $\omega_x = \Omega_3 \cos \psi$  — горизонтальная составляющая скорости вращения Земли;  $\omega_z = -\Omega_3 \sin \psi$  — вертикальная составляющая скорости вращения Земли;  $\Omega_3$  — угловая скорость вращения Земли;  $\psi$  — широта местности в точке замера скважины.

Решая полученные уравнения относительно  $\alpha, \theta$  и  $\phi$ , найдем искомые углы ориентации скважины и инклинометра. Однако, несмотря на кажущуюся простоту полученных уравнений, их решение представляет собой весьма трудоемкую задачу из-за нелинейности уравнений, необходимости в каждый момент времени определять тригонометрические функции, из-за неопределенности решений при  $\theta$ , равном нулю.

В теории бесплатформенных инерциальных систем, к которым относится и рассматриваемый инклинометр, наибольшее распространение получили кинематические уравнения, использующие

методы направляющих косинусов и параметры Родрига—Гамильтона. Получаемые при этом уравнения линейны и не вырождаются ни при каких углах поворота инклинометра.

## 3. Определение углов ориентации скважины через направляющие косинусы

В этом случае запись кинематических уравнений осуществляется через матрицу направляющих косинусов, которая связывает угловое положение измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  относительно сопровождающего географического трехгранника  $XYZ$  следующим образом:

$$|X_1Y_1Z_1|^T = A|XYZ|^T, \quad (3.1)$$

где  $A$  — матрица направляющих косинусов, записываемая для рассматриваемого случая в следующем виде [4]:

$$A = \begin{vmatrix} (\cos \phi \cos \theta \cos \alpha + \sin \phi \sin \alpha) & (\cos \phi \cos \theta \sin \alpha - \sin \phi \cos \alpha) & (\cos \phi \sin \theta) \\ (\sin \phi \cos \theta \cos \alpha - \cos \phi \sin \alpha) & (\sin \phi \cos \theta \sin \alpha + \cos \phi \cos \alpha) & (\sin \phi \sin \theta) \\ -\sin \theta \cos \alpha & -\sin \theta \sin \alpha & \cos \theta \end{vmatrix} \quad (3.2)$$

или через ее элементы:

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}. \quad (3.3)$$

Как видно из (3.2), (3.3), зная элементы  $a_{ki}$  матрицы  $A$ , углы наклона скважины и угол поворота инклинометра легко определить из следующих соотношений:

$$\begin{aligned} \alpha &= \arctg \frac{a_{32}}{a_{31}}; \quad \theta = \arctg \frac{\sqrt{a_{13}^2 + a_{23}^2}}{a_{33}}; \\ \phi &= \arctg \frac{a_{23}}{a_{13}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

При поворотах измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  относительно сопровождающего трехгранника  $XYZ$  в результате движения измерительного блока внутри скважины элементы матрицы  $A$  являются функциями времени  $a_{ki} = f(t)$ . Естественно, функциями времени являются и определяемые углы  $\alpha, \theta, \phi$ .

Связь матрицы направляющих косинусов с вектором скорости вращения измерительного трехгранника относительно географического сопровождающего трехгранника устанавливается кинематическим уравнением Пуассона [5]:

$$\dot{A} = -\hat{\Omega}_1 A, \quad (3.5)$$

где  $A = A(t)$  — матрица направляющих косинусов в функции времени;  $\hat{\Omega}_1$  — кососимметрическая матрица вектора угловой скорости вращения измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  относительно сопровождающего трехгранника  $XYZ$ .

Поскольку гироскопы измеряют абсолютную угловую скорость измерительного блока в инерциальном пространстве, то выражение (3.5) удобнее записать в виде

$$\dot{A} = -\hat{\omega}_1 A + A \hat{\omega}, \quad (3.6)$$

где  $\hat{\omega}_1$  — кососимметрическая матрица абсолютной угловой скорости вращения измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  в инерциальном пространстве;  $\hat{\omega}$  — кососимметрическая матрица абсолютной угловой скорости вращения географического сопровождающего трехгранника  $XYZ$  в инерциальном пространстве, определяемая при принятых допущениях скоростью вращения Земли.

Матричное уравнение (3.6) содержит девять скалярных дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{a}_{11} = a_{21}\omega_z - a_{31}\omega_y - a_{12}\omega_x; \\ \dot{a}_{12} = a_{22}\omega_z - a_{32}\omega_y + a_{11}\omega_x + a_{13}\omega_z; \\ \dot{a}_{13} = a_{23}\omega_z - a_{33}\omega_y - a_{12}\omega_x; \\ \dot{a}_{21} = -a_{11}\omega_z + a_{31}\omega_x - a_{22}\omega_x; \\ \dot{a}_{22} = -a_{12}\omega_z + a_{32}\omega_x + a_{21}\omega_z + a_{23}\omega_x; \\ \dot{a}_{23} = -a_{13}\omega_z + a_{33}\omega_x - a_{22}\omega_x; \\ \dot{a}_{31} = a_{11}\omega_y - a_{21}\omega_x - a_{32}\omega_z; \\ \dot{a}_{32} = a_{12}\omega_y - a_{22}\omega_x + a_{31}\omega_z + a_{33}\omega_x; \\ \dot{a}_{33} = a_{13}\omega_y - a_{23}\omega_x - a_{32}\omega_x. \end{array} \right\} \quad (3.7)$$

Значения угловых скоростей  $\omega_x$ ,  $\omega_y$ ,  $\omega_z$  определяются по показаниям гироскопов, а  $\omega_x$ ,  $\omega_z$  являются горизонтальной и вертикальной составляющими скорости вращения Земли. Решая полученную систему уравнений (3.7) численными методами, находим значения элементов матрицы в каждый момент времени, а по ним, используя соотношения (3.4), — и искомые углы ориентации скважины.

Недостатками такого способа решения задачи является большой объем вычислений, что накладывает ограничения на скорость обработки информации в реальном масштабе времени. Более эффективным в этом отношении является использование параметров Родрига—Гамильтона.

#### 4. Определение углов ориентации скважины через параметры Родрига—Гамильтона

Кинематические уравнения движения измерительного блока в этом случае записываются в кватернионной форме [6]:

$$\dot{\Lambda} = 1/2\Lambda \cdot \Omega_1, \quad (4.1)$$

где  $\Lambda$  — кватернион, описывающий поворот измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  относительно базового сопровождающего трехгранника  $XYZ$ :

$$\Lambda = \lambda_0 + i_1\lambda_1 + i_2\lambda_2 + i_3\lambda_3, \quad (4.2)$$

$\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  — параметры Родрига—Гамильтона;  $\Omega_1$  — вектор угловой скорости трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  относительно трехгранника  $XYZ$ .

Так как гироскопы измеряют абсолютную угловую скорость трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  в инерциальном пространстве, то результирующий кватернион  $\Lambda$  следует записать в виде произведения двух кватернионов:  $R$  — кватерниона поворота измерительного трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  в инерциальном пространстве и  $Q$  — кватерниона поворота географического сопровождающего трехгранника  $XYZ$  в этом же пространстве:

$$\Lambda = Q \cdot R. \quad (4.3)$$

Способ нахождения  $R$  и  $Q$ , а следовательно, и  $\Lambda$  зависят от формы представления первичной информации — в виде угловых скоростей или в виде квазикоординат. Рассмотрим оба эти случая.

При представлении первичной информации в виде угловых скоростей для определения кватернионов  $R$  и  $Q$  и соответствующих им параметров Родрига—Гамильтона необходимо решить частные кинематические уравнения:

$$\begin{aligned} \dot{R} &= 1/2R \cdot \omega_1; \\ \dot{Q} &= 1/2\omega \cdot Q. \end{aligned} \quad (4.4)$$

В скалярном виде эти уравнения запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned} 2\dot{r}_0 &= -r_1\omega_x - r_2\omega_y - r_3\omega_z; \\ 2\dot{r}_1 &= r_0\omega_x + r_2\omega_z - r_3\omega_y; \\ 2\dot{r}_2 &= r_0\omega_y - r_1\omega_z + r_3\omega_x; \\ 2\dot{r}_3 &= r_0\omega_z + r_1\omega_y - r_2\omega_x; \\ 2\dot{q}_0 &= -\omega_x q_1 + \omega_z q_3; \\ 2\dot{q}_1 &= \omega_x q_0 + \omega_z q_2; \\ 2\dot{q}_2 &= -\omega_x q_3 - \omega_z q_1; \\ 2\dot{q}_3 &= -\omega_x q_2 - \omega_z q_0. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Решение этих уравнений позволит найти значения параметров Родрига—Гамильтона  $q_0, q_1, q_2, q_3$  и  $r_0, r_1, r_2, r_3$ , а через них, используя соотношение (4.3), — и значения  $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ , необходимые для определения элементов матрицы направляющих косинусов:

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= q_0r_0 - q_1r_1 - q_2r_2 - q_3r_3; \\ \lambda_1 &= q_0r_1 + q_1r_0 + q_2r_3 - q_3r_2; \\ \lambda_2 &= q_0r_2 - q_1r_3 + q_2r_0 + q_3r_1; \\ \lambda_3 &= q_0r_3 + q_1r_2 - q_2r_1 + q_3r_0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

В ряде случаев информация с датчиков угловых скоростей выдается в форме так называемых *квазикоординат*:

$$\delta_i = \int_0^{\Delta t} \omega_i d\tau, \quad (4.7)$$

где  $\omega_i$  — угловая скорость измерительного блока;  $\Delta t$  — временной интервал интегрирования  $\omega_i$ ;  $\delta_i$  — квазикоордината углового поворота измерительного блока за время  $\Delta t$ .

В этом случае кватернионы удобнее находить через приращение вектора истинного поворота  $\Delta\chi$ . Расчет вектора истинного поворота выполняют через квазикоординаты в одношаговом или многошаговом режимах. В одношаговом режиме приращение вектора истинного поворота эквивалентно квазикоординате за рассматриваемый интервал времени. В более точном многошаговом режиме, когда приращение вектора истинного поворота определяется за несколько шагов измерений, его связь с квазикоординатами имеет более сложную форму [7]. Например, для четырехшагового режима она имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta\chi = & \sum_{n=1}^4 \delta(n) + \frac{2}{3} [P(1)\delta(2) + P(3)\delta(4)] + \\ & + \frac{1}{2} [P(1) + P(2)][\delta(3) + \delta(4)] + \\ & + \frac{1}{30} [P(1) - P(2)][\delta(3) - \delta(4)], \end{aligned} \quad (4.8)$$

где  $\Delta\chi = [\Delta\chi_{x1}, \Delta\chi_{y1}, \Delta\chi_{z1}]^T$ ;  $\delta = [\delta_{x1}, \delta_{y1}, \delta_{z1}]^T$ ;  $n = 1, 2, 3, 4$  — номер шагов;  $P(n)$  — кососимметрическая матрица, элементами которой являются квазикоординаты:

$$P(n) = \begin{vmatrix} 0 & -\delta_{z1}(n) & \delta_{y1}(n) \\ \delta_{z1}(n) & 0 & -\delta_{x1}(n) \\ -\delta_{y1}(n) & \delta_{x1}(n) & 0 \end{vmatrix}. \quad (4.9)$$

Для определения кватерниона  $R$  через  $\Delta\chi$  используется следующее выражение:

$$R = \cos \frac{|\Delta\chi|}{2} + \frac{\Delta\chi}{|\Delta\chi|} \sin \frac{|\Delta\chi|}{2}, \quad (4.10)$$

где  $\Delta\chi = i_1 \Delta\chi_{x1} + i_2 \Delta\chi_{y1} + i_3 \Delta\chi_{z1}$ ;  $|\Delta\chi|^2 = \Delta\chi_{x1}^2 + \Delta\chi_{y1}^2 + \Delta\chi_{z1}^2$ , откуда параметры Родрига—Гамильтона определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} r_0 &= \cos \frac{|\Delta\chi|}{2}; \quad r_1 = \frac{\Delta\chi_{x1}}{|\Delta\chi|} \sin \frac{|\Delta\chi|}{2}; \\ r_2 &= \frac{\Delta\chi_{y1}}{|\Delta\chi|} \sin \frac{|\Delta\chi|}{2}; \quad r_3 = \frac{\Delta\chi_{z1}}{|\Delta\chi|} \sin \frac{|\Delta\chi|}{2}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Аналогичным образом находятся параметры Родрига—Гамильтона и для кватерниона  $Q$ . Параметры Родрига—Гамильтона результирующего кватерниона  $\Lambda$  рассчитываются с помощью системы уравнений (4.6).

Зная параметры Родриго—Гамильтона результирующего кватерниона, значения элементов  $a_{ki}$  матрицы направляющих косинусов можно определить, используя известные соотношения [5]:

$$\left. \begin{aligned} a_{11} &= \lambda_0^2 + \lambda_1^2 - \lambda_2^2 - \lambda_3^2; \\ a_{12} &= 2(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_0\lambda_3); \\ a_{13} &= 2(\lambda_1\lambda_3 - \lambda_0\lambda_2); \\ a_{21} &= 2(\lambda_1\lambda_2 - \lambda_0\lambda_3); \\ a_{22} &= \lambda_0^2 + \lambda_2^2 - \lambda_1^2 - \lambda_3^2; \\ a_{23} &= 2(\lambda_2\lambda_3 + \lambda_0\lambda_1); \\ a_{31} &= 2(\lambda_1\lambda_3 + \lambda_0\lambda_2); \\ a_{32} &= 2(\lambda_2\lambda_3 - \lambda_0\lambda_1); \\ a_{33} &= \lambda_0^2 + \lambda_3^2 - \lambda_1^2 - \lambda_2^2. \end{aligned} \right\} \quad (4.12)$$

По результатам вычислений  $a_{ki}$ , используя соотношение (3.4), находят искомые углы ориентации скважины и измерительного блока  $\theta, \alpha, \phi$ .

Исследования алгоритмов, основанных на использовании параметров Родрига—Гамильтона, показали, что с их помощью можно сократить время расчета углов ориентации скважины на (30—50) % по сравнению с матрицей направляющих косинусов, особенно при использовании квазикоординат, так как в этом случае отпадает необходимость решать дифференциальные уравнения.

На рис. 3 в качестве примера показан рабочий четырехшаговый алгоритм, реализующий идею использования параметров Родрига—Гамильтона в кватернионной форме записи на базе представления первичной информации в виде квазикоординат. Он имеет ряд особенностей, обеспечивающих его практическую реализацию и необходимую точность расчетов.

Перед запуском алгоритма необходимо определять начальный нулевой кватернион  $\Lambda_0$ . Определяется это следующим образом. В режиме выставки, когда измерительный блок стоит неподвижно, рассчитываются начальные углы ориентации скважины  $\theta_0, \alpha_0, \phi_0$ . Для этого используется аналитическая связь (3.1) между показаниями гироскопов и акселерометров по измерительным осям  $X_1 Y_1 Z_1$  и значениями проекций скорости вращения Земли  $\Omega_3$  и ускорения силы тяжести  $g$  на базовые оси сопровождающего географического трехгранника  $XYZ$ . После соответствующих преобразований уравнения (3.1) с учетом (3.2) выражения для определен-

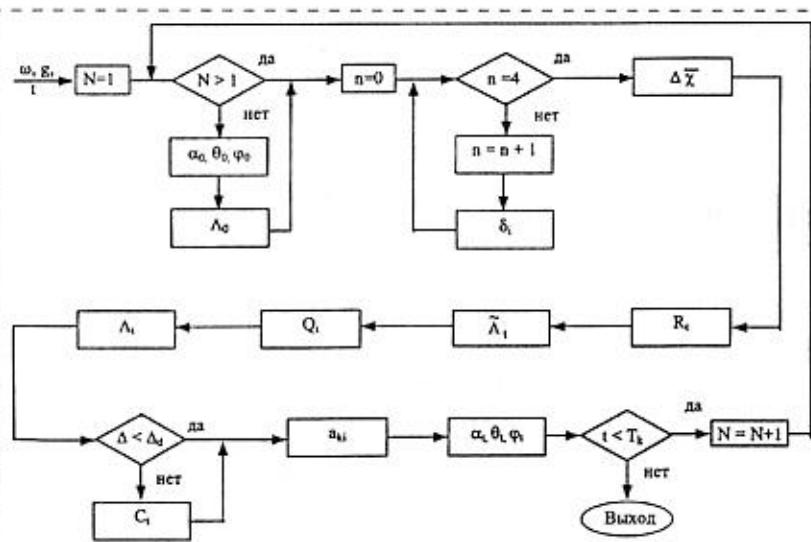


Рис. 3. Структурная схема рабочего алгоритма

ния начальных углов ориентации могут быть представлены в следующем виде [4]:

$$\theta_0 = \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{g_{x1}^2 + g_{y1}^2}}{g_{z1}}, \quad \varphi_0 = \operatorname{arctg} \frac{g_{y1}}{g_{x1}}; \quad (4.13)$$

$$\alpha_0 = \operatorname{arctg} \frac{g(\omega_{x1}g_{y1} - \omega_{y1}g_{x1})}{(\omega_{x1}g_{x1} + \omega_{y1}g_{y1})g_{z1} - \omega_{z1}(g_{x1}^2 + g_{y1}^2)}.$$

По начальным углам ориентации рассчитываются параметры Родрига—Гамильтона нулевого кватерниона  $\Lambda_0$ , а затем и сам кватернион:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_0 &= \cos \frac{\alpha_0}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\varphi_0}{2} + \sin \frac{\alpha_0}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\varphi_0}{2}; \\ \lambda_1 &= \cos \frac{\alpha_0}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\varphi_0}{2} + \sin \frac{\alpha_0}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\varphi_0}{2}; \\ \lambda_2 &= -\cos \frac{\alpha_0}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\varphi_0}{2} + \sin \frac{\alpha_0}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\varphi_0}{2}; \\ \lambda_3 &= -\cos \frac{\alpha_0}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\varphi_0}{2} + \sin \frac{\alpha_0}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\varphi_0}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (4.14)$$

С целью сведения к минимуму ошибок вычислений кватерниона  $\Lambda_t$ , результирующего поворота определяется и учитывается отклонение нормы кватерниона от единицы:

$$\Delta = 1 - (\lambda_0^2 + \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2). \quad (4.15)$$

Полученное в результате расчетов значение  $\Delta$  сравнивается с допускаемым отклонением  $\Delta_d$ . Если  $\Delta < \Delta_d$ , то в дальнейших расчетах используется кватернион  $\Lambda_t$ . Если же  $\Delta > \Delta_d$ , то определяется новый нормированный кватернион  $C_t$ , который и используется в дальнейших расчетах при определении углов  $\alpha, \theta, \varphi$ :

$$C_t = \frac{\Lambda_t}{\sqrt{1 - \Delta}}. \quad (4.16)$$

В представленном алгоритме кватернион  $\tilde{\Lambda}_t$  обновленного положения трехгранника  $X_1Y_1Z_1$  является произведением кватерниона  $\Lambda_{t-1}$  результирующего поворота трехгранника, полученного на предыдущем шаге измерений, на кватернион  $R_t$  поворота трехгранника текущего шага измерений.

### Выводы

1. Получены расчетные алгоритмы для определения углов пространственной ориентации скважины с помощью гироскопического инклинометра бесплатформенного типа в процессе движения его измерительного блока.

2. Исследования полученных алгоритмов показали, что наиболее перспективным с точки зрения скорости обработки информации является алгоритм, построенный на базе параметров Родрига—Гамильтона с представлением исходных для расчетов данных в виде квазикоординат.

3. По мнению авторов, рассмотренные в настоящей статье алгоритмы представляют практический интерес не только для разработчиков гироскопических инклинометров бесплатформенного типа, но и для разработчиков бесплатформенных измерительных устройств иного назначения, когда при определении ориентации объекта измерительное устройство может свободно перемещаться внутри этого объекта.

### Список литературы

1. А. с. № 1827541. Измерительный блок инклинометра / В. И. Галкин, Е. А. Измайлов, А. А. Маслов. — Б. И., № 26, 1993.
2. Галкин В. И., Измайлов Е. А., Жилин В. Б., Суминов В. М., Галкин Д. В. Гироскопический инклинометр "ГИД" // Гирoscopия и навигация. 1997. № 4. С. 26—33.
3. Галкин Д. В. Разработка и исследование информационно-вычислительной системы гироскопического инклинометра для диагностики и активного контроля пространственного положения ствола скважин: Автореф. дисс. на соиск. учен. ст. к. т. н. М.: Моск. авиационно-технол. ин-т. РГТУ им. К. Э. Циолковского, 1999. 26 с.
4. Суминов В. М., Галкин Д. В. Математическая модель метрологической системы гироскопического инклинометра // Научно-технический сборник "Стандартизация и унификация авиационной техники". М.: НИИСУ, 1997. С. 39—47.
5. Ишлинский А. Ю. Ориентация, гироскопы и инерциальная навигация. М.: Наука, 1976.
6. Бранец В. Н., Шмыглевский И. П. Применение кватернионов в задачах ориентации твердого тела. М.: Наука, 1973.
7. Панов А. П. Математические основы теории инерциальной навигации. Киев: Наукова думка, 1995.
8. Чесноков Г. И., Галкин В. И., Галкин Д. В. Контроль пространственной ориентации стволов скважин гироскопическим инклинометром в процессе движения измерительного блока // Материалы VII Санкт-Петербургской международной конференции по интегрированным навигационным системам (29—21 мая, 2000 г.). М., 2000. С. 51—59.

**М. В. Чичинадзе, д-р техн. наук,  
Г. В. Попов, канд. техн. наук,  
Ю. Б. Люсин, канд. техн. наук, ЦНИИ "Дельфин"**

## ПРОБЛЕМЫ ПОДЗЕМНОЙ НАВИГАЦИИ

Подземная навигация обеспечивает технологию бурения скважин сложного профиля, проходку туннелей. Она имеет ряд специфических особенностей, главным образом в части условий эксплуатации, которые определяют архитектуру системы: состав, алгоритмы, тип чувствительных элементов. Показывается, что применение и разработка таких систем имеет существенный экономический эффект.

### Причины создания систем подземной навигации (СПН)

В 90-е годы в нефте- и газодобывающей промышленности началось активное внедрение бурения скважин сложного профиля, а также безлюдных технологий проходки стволов туннелей и шахт. Применение этих технологий позволяет существенно повысить экономическую эффективность добычи нефти и газа: дебит скважины увеличивается до 20 раз, себестоимость добычи снижается в 5 раз. Это достигается за счет уменьшения сетки скважин на месторождении, сокращения сроков строительства, вовлечения в добычу "нерентабельных" (при прежних технологиях) залежей.

Очевидно, что технология бурения таких скважин требует соответствующего оборудования и применения определенных методов, которые должны обеспечить:

- непрерывный контроль положения движущегося бурового агрегата в пространстве под землей;
- сравнение фактического положения агрегата с расчетным, полученным по данным геофизической разведки;
- оценку состояния аппаратурой агрегата в процессе бурения и контроль технологических параметров процесса бурения.

Решение этих задач потребовало создания новых систем управ-

ления и контроля процессом бурения, т. е. создания систем подземной навигации и управления движением бурового агрегата.

### Оценка состояния рынка

Ведущие позиции занимают фирмы США "Schlumberger", "Barker Higher", которым принадлежит 70 % объема продаж, также "Sperry Sun" и "Sandif Lab". Эти фирмы создали телеметрические системы измерения параметров в процессе бурения (системы MWD), начиная от отдельных приборов ("Sperry Sun") до полного комплекса ("Schlumberger").

В России созданы опытные образцы отдельных составляющих СПН, в том числе:

- гироинклинометры на основе динамически настраиваемых гироскопов (ДНГ) (НИИ ПМ им. В. И. Кузнецова, ЦНИИ "Дельфин"), ТВГ (МИЭА), ВОГ (Пермское производственное объединение);
- системы беспроводного канала связи: гидравлического (ВНИИ ПИ "Морнефтегаз"), электромагнитного (ОАО "Курс", Томский политехнический институт), акустомеханического (АКИН РАН);
- системы датчиков геофизического контроля ВНИИ АА.

Однако из-за отсутствия целевого финансирования полученные результаты в производство не внес-

дрены, и рынок России фактически отдан иностранным фирмам.

### Особенности эксплуатации и архитектуры СПН

Условия эксплуатации СПН, существенно отличающиеся от условий эксплуатации морских, воздушных, наземных и космических систем навигации, следующие:

- температура (+120...-150 °C);
- вибрации основания с частотой 10—500 Гц при ускорении до 10 g;
- многократные удары с перегрузкой до 20 g;
- магнитное поле до 400 А/м;
- движение с остановками каждые 20—25 мин.

Особенности архитектуры СПН для буровых агрегатов определяются конструкцией (диаметром) буровой колонны и должны обеспечить размещение СПН в составной трубе диаметром от 45 мм до 127 мм, длиной не более 5 м.

### Задачи, состав и требования к точности СПН

Задачи, решаемые СПН, перечислены выше. Исходя из необходимости их приборного обеспечения состав СПН должен быть следующим.

Часть СПН, размещаемая непосредственно в движущемся буровом устройстве под землей, включает:

- гироинклинометр на основе БИНС;
- систему внешней коррекции на основе датчиков геофизической информации;
- передающее устройство беспроводного канала связи;
- систему датчиков технологической информации;
- систему электропитания.

Наземная часть аппаратуры СПН состоит из:

- пульта отображения и контроля траектории движения;
- приемного устройства канала связи;
- пульта отображения технологической информации;

- аппаратуры связи и электро- питания.

СПН должна вырабатывать следующий объем информации с предельными погрешностями:

- азимут не более  $1^\circ$ , зенитный угол не более  $0.5^\circ$ ;
- координаты места ( $X, Y, Z$ ) не более  $\pm 1.5$  м;
- пройденное расстояние не более  $\pm 1.5$  м.

**П р и м е ч а н и е.** Система может работать или в географической или в условной системе координат, где за "нуль" отсчета принимается точка устья скважины с известными географическими координатами ( $\phi_\xi, \lambda_\xi$ ) и "нулевым" заглублением в поверхность Земли.

Для обеспечения внешней коррекции от геофизических датчиков последние должны вырабатывать следующую информацию:

$\gamma$ -каротаж ... до  $100 \text{ мкР/ч} \pm 5\%$ ;  
 $n^\circ$ -каротаж ... до  $10 \text{ поток/с} \pm 10\%$ ;

$R$ -каротаж ... до  $2000 \text{ Ом} \cdot \text{м} \pm 10\%$ .

Обеспечив работу с такими погрешностями, СПН позволяет агрегату двигаться с пласти толщиной не менее 3 м, сохраняя постоянную производительность.

### Элементная база и алгоритм работы СПН

Требования к точности СПН в сочетании с методом ZUPT-коррекции в силу остановки движения на 1–2 мин каждые 8 мин для наращивания бурильной колонны соответствуют гироскопам и акселерометрам средней точности:  $\Delta\omega_i = 10^{-2} {}^\circ/\text{ч}$ ,  $\Delta a_i = 10^{-4} \text{ g}$ .

Выбор типа основных элементов определяется их соответствием условиям эксплуатации и габаритам агрегата. В этих условиях наи-

более приемлемыми гироскопами являются волоконно-оптические (ВОГ), твердотельные вибрационные (ТВГ), ДНГ и кварцевые маятниковые акселерометры, хотя даже они полностью не отвечают условиям эксплуатации СПН.

Алгоритмы СПН соответствуют обычным алгоритмам БИНС. Особенность лишь в том, что малая скорость передачи информации по беспроводному каналу связи (гидравлическому или электромагнитному) заставляет формировать фильтр Кальмана непосредственно в составе БИНС.

### Основные проблемы и их решение

Итак, в настоящее время сложилась концепция построения систем СПН, ясны требования к ним, требуемая архитектура и состав. Фирмами России созданы отдельные узлы (приборы) СПН.

Однако нерешенными остаются следующие проблемы:

- не подтверждена испытаниями эксплуатационная надежность гироскопических чувствительных элементов (ЧЭ) и управляющей электроники в реальных условиях эксплуатации;
- не разработан быстродействующий канал беспроводной связи;
- не разработаны малогабаритные турбогенераторы;
- отсутствуют единая программа взаимодействия между исполнителями и общее программное обеспечение.

Решение этих проблем возможно только объединением усилий фирм-разработчиков России, например, под эгидой российской Академии навигации и управления движением.

### Выводы

Создание и внедрение систем подземной навигации оправдано технически, экономически и экологически; оно, требуя начальных существенных затрат, дает быстрый и существенный экономический эффект за счет  $n$ -кратного увеличения добычи сырья и сокращения сроков проходки (бурения).

Созданная для целей традиционной навигации элементная база как по чувствительным элементам, так и по электронике в значительной степени не может быть использована для целей подземной навигации в силу особых условий эксплуатации; в этих жестких условиях наиболее близки им динамически настраиваемые и волоконно-оптические гироскопы, кварцевые акселерометры.

Основой системы подземной навигации должна быть БИНС, дополненная системой внешней коррекции на базе геофизических датчиков, беспроводного канала связи и электронных карт геологических изысканий.

В настоящее время полномасштабная система навигации разработана и внедрена в опытную эксплуатацию фирмой "Schlumberger" (США); составные части подземной системы навигации, а именно гироинклинометры, системы геофизических датчиков, беспроводные каналы связи созданы и проверены в ряде фирм России (НИИ ПМ, ЦНИИ "Дельфин", АКИН, НИИ АА и др.).

### Список литературы

1. Чичинадзе М. В., Попов Г. В., Люсин Ю. Б. Подземная навигация: проблемы и пути решения // Материалы VII Санкт-Петербургской международной конференции по интегрированным навигационным системам (29–31 мая, 2000 г.). М., 2000. С. 97–99.

О. А. Рябушкин, канд. физ.-мат. наук,  
 В. А. Сабличков, д-р физ.-мат. наук,  
 М. С. Поволоцкий, Е. И. Лонская, А. О. Волков,  
 Институт радиотехники и электроники РАН  
 (E-mail: roa228@ire216.msk.su)

## ОПТИЧЕСКАЯ МОДУЛЯЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ РЧ ПОЛЯ И ТОКА

*Предлагаются новые методы оптической модуляционной спектроскопии для исследования полупроводников и полупроводниковых гетероструктур. Эти методы основаны на влиянии переменного электрического тока (или бесконтактного прикладываемого РЧ поля) или СВЧ поля с переменной интенсивностью на отражение зондирующего света. Такое влияние позволяет изучать встроенные и индуцированные электрические поля, эффекты электронно-дырочного взаимодействия в различных слоях полупроводниковых структур.*

Оптические модуляционные методы исследования полупроводниковых гетероструктур (фотоотражение, электроотражение, фототермическая и фотопроакустическая спектроскопия и т. д.) вызывают большой интерес, так как они обладают такими важными преимуществами, как бесконтактность, возможность использования *in-situ*, высокая чувствительность. Однако при их разработке и использовании возникает серьезная проблема, связанная с тем, что измеряемые в этих методах отклики несут интегральную информацию о структуре и свойствах нескольких физически различных слоев, расположенных под поверхностью исследуемого образца. Проблема состоит в интерпретации измерений и количественном определении искомых параметров, относящихся к слоям гетероструктуры, таких как состав слоев, толщины, встроенные электрические поля, концентрация электронов, подвижность. В методах фототермической диагностики эта задача решается, например, путем исследования зависимости откликов от частоты модуляции света. При этом изменяется длина тепловой волны и таким образом происходит сканирование образца вглубь. Однако в структурах с субмикронными размерами слоев это оказывается невозможным из-за необходимости использовать слишком

высокие частоты. Методики дифференциального фотоотражения также не решают проблему.

В настоящей статье рассматривается другая возможность решения указанной проблемы с использованием детального анализа спектров отражения. Для этого проводится количественное исследование спектров и устанавливается связь формы спектра электроотражения (ЭО) со свойствами слоев гетероструктуры GaAs/AlGaAs. Провести такой анализ в случае широко используемого метода фотоотражения очень затруднительно (особенно при низких температурах) из-за вклада фотолюминесценции в измеряемый сигнал. Преимущество предлагаемого подхода состоит еще и в том, что применяются различные способы модуляции электрических полей, реализующие селективное воздействие на слои гетероструктуры. Радиочастотное (РЧ) электрическое поле, модулирующее отражение, создается как в геометрии плоского конденсатора, в который помещается исследуемая структура, так и путем пропускания переменного тока вдоль слоя двумерных электронов. В последнем случае измеряемый отклик непосредственно связан с проводимостью электронов. Для проведения количественного анализа спектров требуется значительное уменьшение интенсивности зондирующего света, что позволяет избавиться от искажения внутренних полей за счет фотоиндированных носителей заряда.

**Эксперимент.** Для исследования спектров ЭО была разработана установка, схематически показанная на рис. 1. Исследуемый образец помещается между пластинами плоского конденсатора. Нижняя пластина (*E*) сплошная, а верхняя (*C*, *D*) имеет два гребенчатых электрода, расположенных на тонкой кварцевой пластине и разделенных зазором. К пластинам прикладывается переменное напряжение радиочастотного (РЧ) диапазона (с частотой  $f = 0,1 \div 30$  МГц), модулированное по амплитуде:  $U = U_0(1 + \sin(\Omega t))\sin(2\pi f t)$ . Амплитуда на-

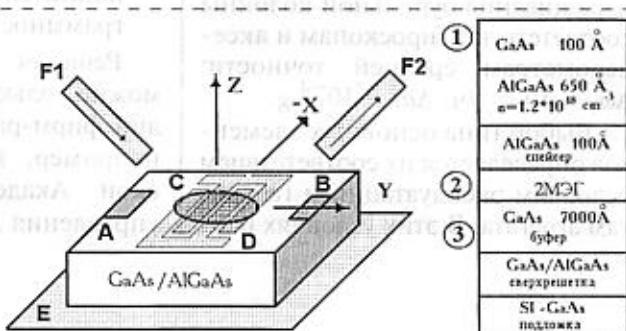


Рис. 1. Схема расположения гетероструктуры, электродов (*A*, *B*) для тока, гребенчатого конденсатора (*C*, *D*), плоского электрода *E* и оптических волокон *F1*, *F2* для зондирующего света. Состав гетероструктуры показан на схеме справа

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 00-02-16655).

пржения порядка  $1-10^2$  В, а частота модуляции  $10^2-10^4$  Гц. Период гребенки 100 мкм.

Используются два варианта включения электродов:

- продольная конфигурация поля, при которой напряжение прикладывается между гребенчатыми электродами *C* и *D*;
- поперечная конфигурация, при которой напряжение прикладывается между соединенными электродами *C* и *D* и нижней пластиной *E*.

При исследованиях спектров отражения зондирующий луч света подводился к образцу с помощью световода *F1*, а отраженный свет принимался световодом *F2*. Интегральная по спектру интенсивность зондирующего света изменялась в диапазоне  $10^{-5}-1$  Вт/см<sup>2</sup>. Измерения проводились методом синхронного детектирования на частоте модуляции  $\Omega$ . Использование РЧ поля позволяло вводить его в образец без помощи контактов и достигать высокой чувствительности. Кроме того, полосковая конфигурация электродов дает возможность использовать сверхвысокие частоты и исследовать вклад быстрых электронных процессов в формирование оптического отклика.

**Спектры электроотражения.** Спектр ЭО в РЧ поле [для краткости — спектр РМО (радиочастотное модуляционное отражение)] при поперечной конфигурации поля измерялся на образцах со структурой, показанной на рис. 1. Результаты приведены на рис. 2. Достаточно сложный вид спектра в области энергий  $\hbar\omega$  вблизи ширины запрещенной зоны GaAs ( $E_g$ ) указывает на вовлеченность нескольких процессов модуляции диэлектрической проницаемости образца, происходящей на глубине формирования оптического отражения. Эта глубина порядка обратного коэффициента по-

глощения света при  $\hbar\omega \sim E_g$ , которая для GaAs составляет  $\sim 1$  мкм, т. е. сравнима с толщиной буферного слоя GaAs, который составлял  $\sim 0,7$  мкм. Таким образом, регистрируемый сигнал РМО обусловлен изменением низкочастотной (НЧ) составляющей внутреннего электрического поля во всех частях гетероструктуры под действием РЧ поля [1]. Мы установили, что наблюдаемые спектры определяются в основном двумя следующими процессами:

- осцилляции в спектре при  $\hbar\omega > 1,51$  эВ обусловлены эффектом Франца—Келдыша в области сильного поля в буферном слое GaAs и в защитном 'cap'-слое GaAs;
- резкие линии при  $\hbar\omega < E_g$  связаны с экситонным эффектом в буферном слое GaAs. Электронно-дырочное кулоновское взаимодействие, как известно [2, 3], вносит вклад в диэлектрическую проницаемость. Изменение этого вклада под действием электрического поля приводит к резким особенностям в модуляционных спектрах, которые наблюдаются при достаточно малом (по сравнению с полем экситона  $E_x \sim e/a_x^2$ , где  $a_x$  — экситонный радиус) поле. Поле  $E_x \sim 10^3$  В/см и, следовательно, такой экситонный эффект может быть обусловлен только той частью буферного слоя GaAs, в котором поле невелико, т. е. вдали от области сильного поля и вблизи к сверхрешетке, отделяющей буферный слой от подложки.

Наблюдаемый спектр вблизи края поглощения GaAs может быть достаточно хорошо описан, если предположить, что оптическое отражение гетероструктуры в наблюдаемой спектральной области определяется тремя слоями (см. рис. 1):

(1) защитный слой GaAs; (2) область сильного поля в буферном слое GaAs, в котором локализуется двумерный электронный газ (2 МЭГ); (3) область буферного слоя со слабым полем, где модуляция диэлектрической функции связана с экситонными состояниями. Встроенные электрические поля в этих слоях считаются однородными.

Отклик РМО от слоистой структуры рассчитывался согласно теории Аспнеса [4]. Учитывалась модуляция диэлектрической функции за счет эффекта Франца—Келдыша в слоях 1 и 3. Вклады от защитного слоя и области сильного поля в GaAs-буфере рассчитывались с учетом вкладов легких и тяжелых дырок. Вклад экситонных состояний в буферном слое рассчитывался в соответствии с теорией Тангуе [2, 3], причем учитывалась модуляция только основного и первого возбужденного экситонных состояний. На рис. 2 приведены спектры отражения, рассчитанные согласно этой многослойной модели гетероструктуры [5]. Как видно на рисунке, модельные спектры хорошо согласуются

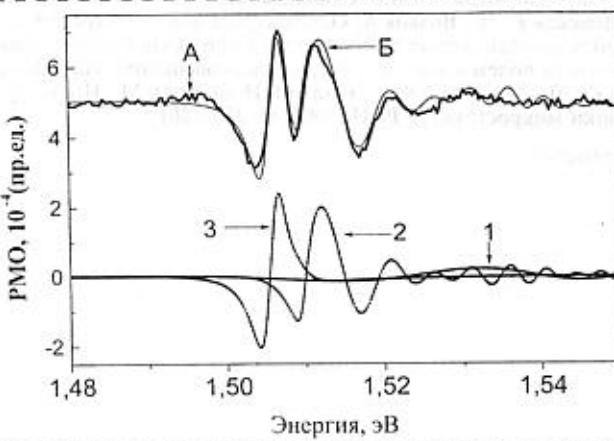


Рис. 2. Спектр РМО для гетероструктуры. Верхний спектр: *A* — эксперимент, *B* — моделирование с учетом всех трех слоев; нижний спектр — вклады слоев *1*, *2*, *3* в полный спектр. Спектры *A* и *B* смешены для удобства на пять единиц вверх по шкале интенсивности

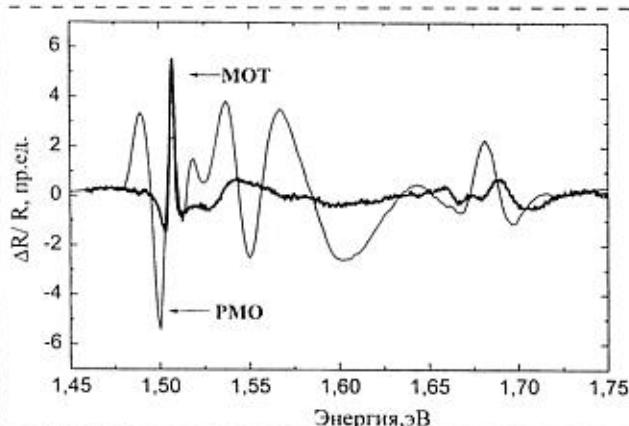


Рис. 3. Сравнение экспериментально измеренного спектра РМО от гетероструктуры со сверхрешеткой в буферном слое GaAs со спектром отражения, модулированного током (МОТ)

с экспериментальными. Таким образом, наблюдаемые спектры имеют ясную физическую природу и допускают количественное описание в рамках достаточно простой физической модели.

**Спектры электроотражения, индуцированного током.** Для выяснения того, какие области спектра отражения связаны с электронами проводимости в квантовой яме, были исследованы спектры отражения при пропускании переменного тока вдоль гетероструктуры. Ток оказывает селективное воздействие на электроны, разогрев которых приводит к модуляции электрического поля в смежных слоях, что и должно проявляться в спектрах отражения [6, 7]. Измерения проводились на структурах, отличающихся от приведенной на рис. 1 наличием дополнительного слоя сверхрешетки, который расположен на расстоянии 225 Å от основной гетерограницы. Амплитуда электрического поля, порождающего переменный ток, не превышала 100 В/см, сила тока ~50 мА. Спектры отражения, модулированного током, для этого образца представлены на рис. 3.

Для сравнения приведено два спектра. Один (обозначенный РМО) получен при воздействии РЧ

поля в поперечной конфигурации. РЧ поле эффективно модулирует состояния в квантовых ямах сверхрешетки в буферном слое GaAs. Это приводит к возникновению особенностей в спектре РМО в области энергий 1,55 эВ в отличие от спектра РМО на рис. 2. Другой (обозначенный МОТ) получен в режиме пропускания переменного тока при отсутствии РЧ поля. Как видно, спектры сильно различаются. На спектре МОТ отсутствуют особенности, обусловленные экситонными состояниями в буферном слое GaAs, которые ярко проявляются в спектре РМО. Однако возникает узкий пик вблизи запрещенной зоны GaAs. И, наконец, осцилляции в области энергий края поглощения AlGaAs (~1,67 эВ), обусловленные эффектом Франца—Кельдиша в сильно легированном слое AlGaAs, имеют более сложную структуру, явно указывающую на неоднородность встроенного поля в этом слое. Таким образом, основные изменения в спектре отражения при пропускании тока происходят в тех его областях, которые обусловлены проводящими слоями структуры.

#### Список литературы

1. Рябушкин О. А., Сабликов В. А. // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т. 67. № 23. С. 233.
2. Tanguy Ch. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 4090.
3. Tanguy Ch. // Appl. Phys. 1996. V. 80. P. 4626.
4. Aspnes D. A. Modulation spectroscopy Electric field effects on the dielectric function of semiconductors, Handbook on Semiconductors, V. 2. Volume editor M. Balkansky, Optical Properties of Solids. (North-Holland Publishing Company, 1980).
5. Ryabushkin O. A., Sablikov V. A. Proceedings of the ICO-NO'98. XVI International Conference on Coherent and Nonlinear Optics, Moscow, 29 June — 3 July 1998. Proceedings of the SPIE V. 3732. P. 137.
6. Рябушкин О. А., Лонская Е. И. IV Российской конференция по физике полупроводников "Полупроводники-99". 1999. 25–29 октября: Тез. докл. С. 68.
7. Рябушкин О. А., Лонская Е. И. Международная конференция молодых ученых и специалистов "Оптика-99". 1999. Санкт-Петербург, 19–20 октября: Тез. докл. С. 45.
8. Рябушкин О. А., Сабликов В. А., Поволоцкий М. С., Лонская Е. И., Волков А. О. Спектроскопия электроотражения полупроводниковых гетероструктур при воздействии радиочастотным полем и током // Материалы совещания "Нанофотоника" (20–23 марта 2000 г., Нижний Новгород). М.: Институт физики микроструктур РАН, 2000. С. 258–261.

# Моделирование объектов МСТ

УДК 681.2:510.67

И. А. Обухов, канд. физ.-мат. наук, ИМАШ РАН

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ПРИБОРОВ

*Описаны модели, позволяющие рассчитывать статические характеристики квантовых приборов на основе резонансно-туннельных структур и получать результаты, близкие к экспериментальным.*

### Введение

В настоящее время приборы, созданные на основе резонансно-туннельных структур (РТС), такие как резонансно-туннельные диоды (РТД), уже перестали быть экзотическими и находят постоянно расширяющуюся сферу применения в устройствах СВЧ и КВЧ диапазонов [1]. Практически промышленной является и технология производства этих приборов.

Однако далеко не все проблемы, с которыми столкнулись разработчики первых РТС, решены до конца. Некоторые из них касаются не только собственного РТС, но являются отражением общих проблем понимания принципов функционирования квантовых приборов и, по-видимому, решение их будет актуальным еще длительное время.

К таковым относится и проблема адекватного описания статических характеристик приборов. Коротко, она состоит в том, что на основе простейших представлений квантовой механики и кинетической теории невозможно дать сколько-нибудь удовлетворительное описание вольт-амперных характеристик (ВАХ) приборов. Результаты расчетов и экспериментальные данные различаются в несколько раз, а часто и на целые порядки (рис. 1).

Анализ большого массива данных показывает, что подобная ситуация является типичной практически для всех общезвестных моделей, с ней сталкивались и сталкиваются до сих пор все исследовательские группы во всех центрах.

В статье приведены результаты работы по построению модели переноса заряда, позволяющей решить некоторые из проблем адекватного описания ВАХ РТД и других квантовых приборов и дос-

таточно долго использовавшейся для практических расчетов. Модель была разработана еще в период создания первых советских РТД (конец 80-х — начало 90-х годов) [2—4]. Работа была инициирована Ю. С. Тиходеевым, руководившим коллективом, создавшим первые в СССР РТД.

Прежде чем перейти к изложению модели, заметим, что адекватное описание характеристик квантовых приборов имеет, как минимум, две существенные составляющие:

- описание собственно квантового транспорта при ненулевых температурах;
- описание взаимодействия классических и квантовых областей приборов, функционирующих на квантовых принципах.

Ниже будут предложены возможные пути решения обеих этих проблем.

### Модель переноса заряда в РТС

Для расчета ВАХ РТД нами были перепробованы практически все опубликованные модели [5,6]. Однако ни одна из них не позволяла получить правильное значение силы тока долины РТД, которая при измерениях всегда оказывалась в несколько (иногда в десятки и сотни) раз больше, чем теоретическое значение (см. рис. 1). Этот результат не зависел от топологии и имел место как для диодов на  $n^+$ -подложке, так и для диодов на полуизолирующей подложке.

Анализ экспериментальных данных позволял утверждать, что неверное теоретическое значение

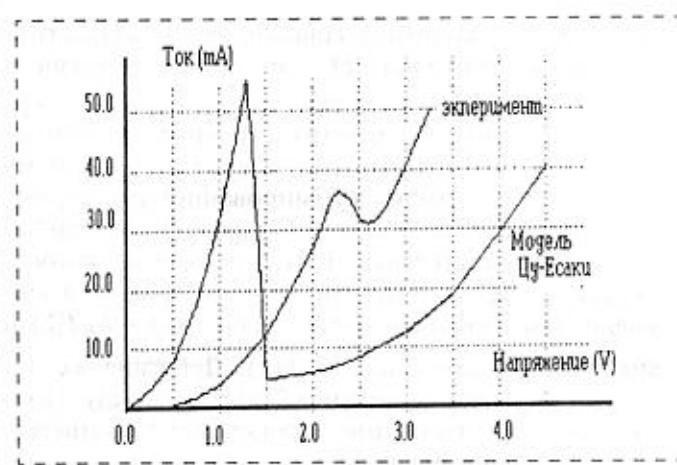


Рис. 1. Типичные экспериментальная и расчетная ВАХ для AlGaAs РТД на полуизолирующей подложке

силы тока долины не является следствием неучета в расчетах какого-либо частного явления, а указывает на существенную неполноту описания переноса заряда в рамках традиционно используемых моделей. Как показали расчеты ряда авторов (см., например, [6]), применение более сложных моделей, основанных на формализме матрицы плотности, мало что меняет в лучшую сторону.

Это позволило предположить, что дело не в аппарате, а в неумении адекватно описывать ряд весьма существенных в реальной ситуации факторов.

Одним из таких факторов является случайное взаимодействие, обусловленное рассеянием носителей заряда на фонах, примесях, дефектах решетки и т. д., точные параметры которых неизвестны. Напомним, что в кинетической теории именно такого рода рассеянием обусловлено наличие электрического сопротивления [7].

Была предпринята попытка построить модель переноса заряда, учитывающую как квантовый характер протекающих процессов, так и наличие случайного взаимодействия. Полагалось, что действие последнего приводит к процессам случайного рассеяния частиц, не описываемого детерминированными уравнениями, к которым относится и уравнение Шредингера с некоторым детерминированным потенциалом  $U$ .

Случайное взаимодействие  $U^{st}$  может быть включено в потенциал уравнения Шредингера  $U^{tot}$  обычным образом:

$$U^{tot} = U + U^{st}.$$

При этом, однако, неясно, как решать получившееся уравнение?

Мы предположили, что при наличии  $U^{st}$  каждое квантовое  $\lambda$ -состояние электронов, определяемое обычной стационарной теорией как

$$\{(\hbar^2/2)\partial^k(m^{*-1})\partial_k - (E(\lambda) - U)\}\Psi(\lambda) = 0 \quad (1)$$

(здесь  $\hbar$  — постоянная Планка,  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $E(\lambda)$  и  $\Psi(\lambda)$  — энергия и волновая функция электрона,  $\partial^k$  — означает дифференцирование по пространственным координатам и по повторяющимся верхнему и нижнему индексам происходит суммирование) с детерминированным потенциалом  $U$ , представляет собой как бы самостоятельную фазу некоторого квантового газа [8], характеризуемую, как это принято в термодинамике, своими температурой  $\Theta(\lambda) = k_B T(\lambda)$  и химическим потенциалом  $F(\lambda)$ . Действие же  $U^{st}$  сводится к "перемешиванию" частиц между фазами. Это "перемешивание" происходит в соответствии с уравнениями баланса потоков в различных фазах, которые в простейшем случае, когда все  $\Theta(\lambda)$  равны друг другу и равны температуре окру-

жающей среды (решетки), выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \partial n(\lambda)/\partial t + (\nabla, i(\lambda)) = & -(\gamma/\hbar)\Sigma_{\lambda'}(F(\lambda) - \\ & - F(\lambda'))\{n(\lambda)\Gamma_{\lambda\lambda'} + n(\lambda')\Gamma_{\lambda'\lambda}\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $n(\lambda) = \rho(\lambda)f(s(\lambda))$  — средняя плотность электронов в  $\lambda$ -фазе;  $\rho(\lambda) = \Psi^*(\lambda)\Psi(\lambda)$  — микроскопическая плотность;  $i(\lambda) = j(\lambda)f(s(\lambda))$  — средний поток (здесь и далее трехмерные векторы выделены полужирным);  $j(\lambda) = i\hbar/2m^*(\Psi^*(\lambda)\nabla\Psi(\lambda) - (\nabla\Psi^*(\lambda))\Psi(\lambda))$  — микроскопический поток;  $\nabla$  — оператор градиента;  $\gamma$  — некоторая положительная безразмерная постоянная, характеризующая интенсивность переходов между состояниями;  $\Gamma_{\lambda\lambda'}$  и  $\Gamma_{\lambda'\lambda}$  — выражаются через квантовомеханическую вероятность переходов между  $\lambda$ - и  $\lambda'$ -состояниями, обусловленными случаем взаимодействием:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\lambda\lambda'} = & W_{\lambda\lambda'}/\Sigma_{\lambda'}, \quad \Gamma_{\lambda'\lambda} = W_{\lambda'\lambda}/\Sigma_{\lambda}, \\ W_{\lambda\lambda'} = & |\langle \lambda | V | \lambda' \rangle|^2, \quad U^{st} = V \chi^{st}, \end{aligned}$$

$V$  — некоторый известный потенциал, отвечающий за тот или иной вид случайного взаимодействия, а  $\chi^{st}$  — случайная функция;

$$f(s(\lambda)) = (\exp(s(\lambda)) + 1)^{-1}$$

— функция распределения, причем

$$\begin{aligned} s(\lambda) = & \beta(E(\lambda) - F(\lambda) + \tau(\lambda)(v(\lambda), \nabla F)), \\ \beta = & \Theta^{-1}, \quad v(\lambda) = j(\lambda)/\rho(\lambda), \\ (\tau(\lambda))^{-1} = & (2\pi/\hbar)\Sigma_{\lambda} W_{\lambda\lambda'} \delta(E(\lambda) - E(\lambda')). \end{aligned}$$

Легко убедиться, что, согласно (2), суммарный поток электронов сохраняется:

$$\partial N(\lambda)/\partial t + (\nabla, I(\lambda)) = 0,$$

где  $N = \Sigma_{\lambda} n(\lambda)$ ,  $I = \Sigma_{\lambda} i(\lambda)$ .

В случае, когда исследуется перенос заряда в полупроводниковой гетероструктуре, детерминированный потенциал  $U$  имеет вид

$$U = U^{ext} - e\phi,$$

где  $U^{ext}$  — внешний потенциал, обусловленный возможным разрывом зон;  $e$  — заряд электрона;  $\phi$  — самосогласованный электростатический потенциал, который является решением уравнения Пуассона:

$$\epsilon\Delta\phi = e(N - N_{DA}), \quad (3)$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость;  $\Delta = (\nabla, \nabla)$ ;  $N_{DA}$  — концентрация примеси.

Границные условия для уравнений (2), которые по сути являются уравнениями для химических потенциалов  $F$ , даются равенствами на контактах:

$$F = -eV_i,$$

где  $V_i$  — напряжение на  $i$ -м контакте. Границные значения потенциала  $\phi$  на этих же контактах находятся из условия электронейтральности

$$N - N_{DA} = 0.$$

Нормальная производная  $\phi$  полагается равной нулю на всех границах, переносом заряда через которые можно пренебречь.

Для определения волновых функций  $\lambda$ -состояний полагается, что падающие волны в контактных областях имеют единичную амплитуду, а поток не прерывен. Кроме того, предполагается, что волновые функции электронов равны нулю на тех границах, перенос заряда через которые отсутствует.

Полная плотность тока  $J$  вычисляется суммированием плотностей токов в каждом из электронных состояний:

$$J = -eI = -e\sum_{\lambda} i(\lambda). \quad (4)$$

Система уравнений (1)–(4) и граничные условия полностью определяют задачу о переносе заряда в приборах. Она позволяет вычислять статические ВАХ приборов, а также анализировать неодномерные и нестационарные эффекты в структурах с квантовыми свойствами.

Обратим внимание на самые существенные отличия предлагаемой модели от обычно используемых методов.

Первое — это то, что каждое электронное состояние рассматривается как самостоятельная термодинамическая фаза и характеризуется поэтому своим химическим потенциалом  $F(\lambda)$ . Кинетика переходов электронов из одной фазы в другую описывается уравнениями (2), которые являются релаксационными и имеют в качестве устойчивого атTRACTора состояние равновесия между фазами:

$$F(\lambda) = F(\lambda') \text{ для всех } \lambda \text{ и } \lambda'.$$

При этом следует ясно осознавать, что данные переходы, регулируемые разностями химических потенциалов, являются не чем иным, как переходами электронов между различными состояниями, вызванными случайным взаимодействием. Термодинамический язык является только способом численного описания кинетики этих переходов, поскольку динамику со случайным взаимодействием обычно принято сводить к термодинамике [9].

Второе — это наличие "полевого члена", пропорционального  $\nabla F$ , в аргументе функции распределения. Такой вид  $f$  не является новостью, однако с учетом различных  $F(\lambda)$  для разных  $\lambda$  он позволяет связать воедино квантовое и классическое описание переноса заряда. Действительно, формула (4) содержит и стандартный дрейфово-диффузийный ток, и "квантовый" ток, обусловленный несимметрией функций распределения состояний с одинаковыми энергиями, но разными  $F$ . Для ил-

люстрации разложим  $f$  по степеням  $\tau$  и подставим результат в (4):

$$\begin{aligned} J \approx & -e\sum_{\lambda} p(\lambda) v(\lambda) \{f(s_0(\lambda)) + \\ & + \tau(\lambda) \beta(v(\lambda), \nabla F(\lambda)) f'(s(\lambda))\}; \\ s_0(\lambda) = & \beta(E(\lambda) - F(\lambda)), \quad f' = \partial f(s)/\partial s. \end{aligned}$$

Второй член в выражении для  $J$  полностью совпадает с обычным соотношением для тока в дрейфово-диффузийной модели. Первый член исчезает в классическом случае, поскольку для каждого  $\lambda$  в сумме содержится состояния с противоположными  $v(\lambda)$  и равными  $E(\lambda)$ , а все  $F(\lambda)$  в классической теории равны между собой по определению.

В нашей ситуации  $F(\lambda)$  могут быть различны для различных  $\lambda$  и это приводит к дополнительному "квантовому" току, который, впрочем, идентичен току, описываемому известной формулой Цу—Есаки [10].

В общем виде приведенная здесь модель достаточно сложна для численной реализации и качественных оценок. Проведенные нами расчеты показали, что в случае РТС на основе AlGaAs гетероструктур перенос заряда может быть достаточно хорошо описан в рамках одномерного приближения в предположении, что существуют только две электронные фазы: "правых" и "левых" электронов, т. е. электронов, попадающих в структуру из правой и левой контактных областей соответственно. Результаты некоторых расчетов показаны на рис. 2 и 3.

Чтобы понять, какие факторы позволили столь хорошо описать экспериментальную ситуацию, выпишем уравнение для тока, получающееся из (4) после суммирования по импульсам, перпендикулярным направлению переноса:

$$J = (4\pi em^*\Theta/(2\pi\hbar)^3) \int dE T(E) \times \ln[(1 + \exp\{-s_l\})/(1 + \exp\{-s_r\})], \quad (5)$$

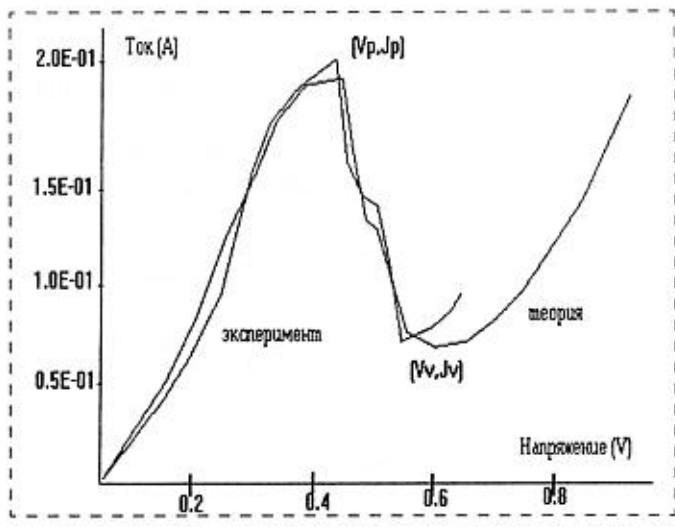


Рис. 2. Типичные ВАХ РТД на хорошо проводящей  $n^{+}$ -подложке

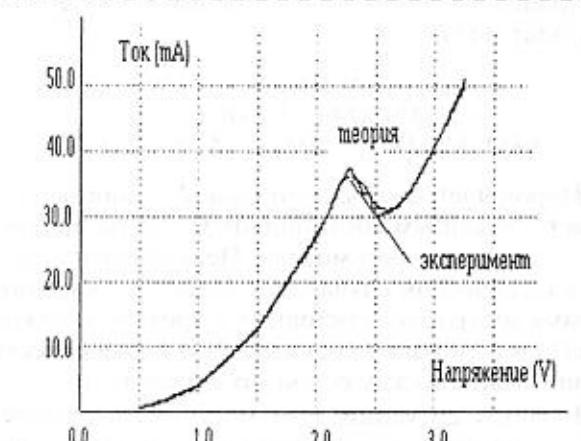


Рис. 3. Типичные ВАХ РТЛ из полихлорирующей подложки

где  $s_{l,r} = \beta(E - F_{l,r} + \tau v_{l,r} dF_{l,r}/dx)$ , а интеграл по энергиям берется от максимального из значений потенциала  $U$  на левом или правом контактах и до бесконечности.

Если приблизительно считать, что  $F_{l,r} = -eV_{l,r}$  и  $\tau = 0$ , то из (5) получим формулу Цу-Есаки [10]. Однако, в отличие от нее, выражение (5) является локальным, явно содержит полевой вклад и, кроме того, неявно содержит релаксационный ток, обусловленный неравновесностью между "левыми" и "правыми" электронами.

До тех пор, пока резонансный уровень в РТС "работает", полевой член и вклад релаксации оказываются несущественными. Но как только приложенное напряжение искажает потенциальный рельеф настолько, что резонанс исчезает, важнейшими становятся именно эти вклады.

При реальных высотах барьеров (порядка 1 эВ) наблюдаемые высокие токи долины невозможно объяснить надбарьерной проводимостью. Но если принять во внимание, что полевые вклады в (5) и в числителе, и в знаменателе логарифма направлены на повышение силы тока, то экспериментальные значения силы токов долины становятся легко объяснимыми.

Исчезновение резонансного уровня приводит к резкому увеличению градиентов  $F_{l,r}$  и их разности  $F_- = F_r - F_l$  в области барьера. Большие градиенты химических потенциалов приводят к возникновению дополнительных "квазидрейфово-диффузионных" токов.

Дополнительно, из-за резкого возрастания разности  $F_-$  существенным становится релаксационный ток, обусловленный переходами "правых" электронов в "левые", что также ведет к существенному увеличению силы тока в области падающего участка ВАХ РТС. Именно этим процессом и обусловлено, на наш взгляд, образование часто наблюдаемой "полочки" на этом участке ВАХ (см. рис. 2 и 3).

## Взаимодействие классических и квантовых областей РТД

Одним из первых, кто обратил внимание на принципиальную важность учета взаимодействия классических и квантовых областей приборов, был О. Т. Гаврилов. Им же были выполнены и первые исследования этого взаимодействия для РТД [11–13].

Неоспоримым является то, что какими бы квантовыми явлениями не определялись характеристики микроструктур, в конечном счете в качестве среды, через которую эти структуры взаимодействуют с другими структурами, устройствами и пр., выступают макроскопические области. Во многих случаях эти макроскопические области играют роль не просто "приемщиков" и "передатчиков" сигналов, но и существенно влияют на характеристики самих микроструктур, например, путем искажения потенциального рельефа.

Это влияние может иметь "катастрофические" последствия, т. е. приводить к таким искажениям выходных характеристик, которые делают приборы на основе микроструктур неработоспособными. Кроме того, с этим влиянием могут быть связаны новые эффекты, пригодные для использования в электронных устройствах [12].

Предложенная выше модель позволяет описывать квантовые и классические области приборов в рамках единого формализма. Однако реализация такого описания требует значительных затрат программистского труда и существенных вычислительных ресурсов. Работы в этом направлении были начаты в 90-е годы, но не закончены. Единое описание было реализовано только в рамках одномерного приближения, чего совершенно недостаточно для решения прикладных задач.

По этой причине О. Т. Гавриловым был параллельно развит "гибридный" подход, в рамках которого квантовые и частично классические области РТС описывались на основе приведенной выше модели в одномерном приближении, а подложка

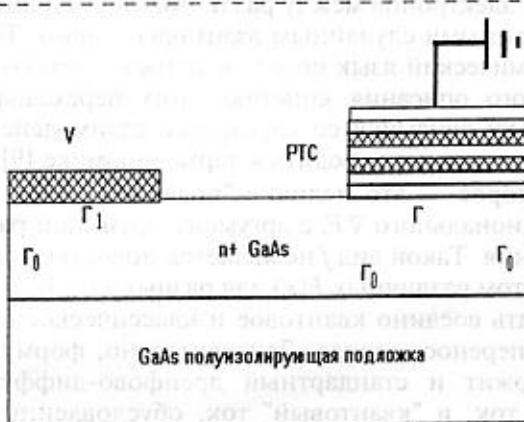


Рис. 4. РГД на полумозолирующей подложке

описывалась исключительно классически на основе уравнений

$$j = \rho \nabla F / e, (\nabla, \rho \nabla F) = 0 \quad (6)$$

и граничных условий (рис. 4):

$$F(\Gamma_1) = -eV, (v, j)_\Gamma = j_{rs}(F(\Gamma)), (v, j)_{\Gamma_0} = 0. \quad (7)$$

Здесь  $j$  — плотность тока в подложке;  $\rho$  — проводимость подложки;  $v$  — внешняя нормаль к границе;  $j_{rs}(F(\Gamma))$  — плотность тока РТС, вычисленная на основе одномерной модели и взятая на некоторой фиктивной границе  $\Gamma$  между РТС и подложкой. Существенно, чтобы на этой границе электроны уже можно были бы считать равновесными (в смысле равенства их химических потенциалов). Заметим, что уравнения (6) учитывают и дрейфовую и диффузионную составляющие плотности тока.

Решение краевой задачи (6), (7) существенно улучшает соответствие между теорией и экспериментом. Это наглядно продемонстрировано на рис. 5, где изображены экспериментальная и расчетные ВАХ РТД до учета влияния подложки и после этого учета.

Следует отметить, что, как показал анализ [11—13], взаимодействие РТС с подложкой, отнюдь, не сводится к тривиальному эффекту нагрузочного сопротивления. Необычный вид второго из граничных условий (7) приводит к двум интересным следствиям:

- распределение нормальной составляющей плотности тока на границе  $\Gamma$  имеет нестандартный для решений уравнения Лапласа вид (рис. 6);
- при определенных соотношениях между проводимостью РТС на участках ВАХ с отрицательной дифференциальной проводимостью, проводимостью подложки и геометрическими размерами структуры задача (6), (7) может иметь неединственное решение [11] и даже бесконечный спектр собственных решений [12].

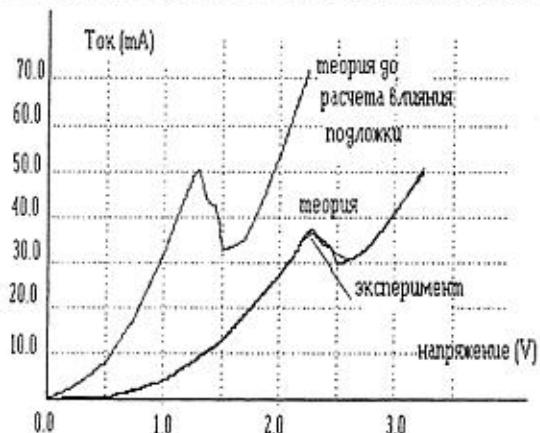


Рис. 5. Теоретические и экспериментальная ВАХ РТД на полуизолирующей подложке

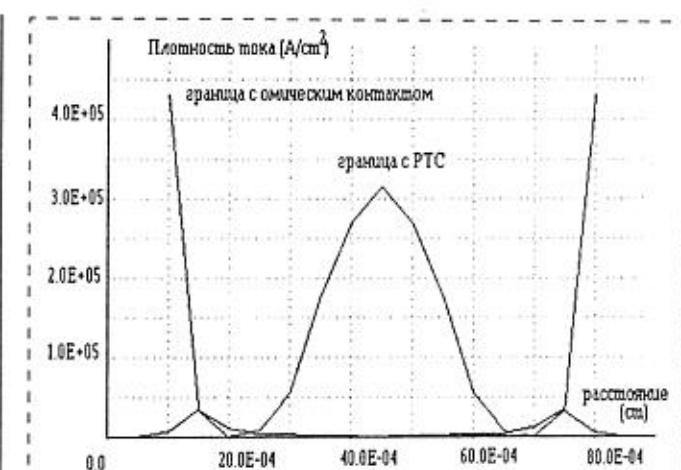


Рис. 6. Распределение нормальной составляющей плотности тока вдоль границы между РТС и  $n^+$ -подложкой

Первая из отмеченных особенностей означает, что далеко не вся площадь "контакта" между РТС и подложкой "работает" в одинаковом режиме. Кая-то часть соответствует участкам ВАХ РТС с отрицательной проводимостью, другая — участкам ВАХ с положительной проводимостью. Все это приводит к нетривиальной зависимости ВАХ РТД от проводимости подложки, ее топологии и площадей контактных областей. Этот вывод был подтвержден экспериментальными исследованиями [13].

Вторая особенность делает возможным использование подложки РТД для весьма необычных приборных решений. В частности, она может выступать в качестве резонатора электромагнитных колебаний СВЧ и КВЧ диапазонов [12].

Построенная модель позволяет оценивать влияние подложки на характеристики приборов и конструктировать РТД с заранее заданными свойствами.

\*\*\*

В статье приведены некоторые результаты работ по моделированию характеристик РТС и РТД, проведенных в период создания этих структур и приборов в СССР и России.

Показано, какие факторы существенным образом влияют на наблюдаемые в эксперименте характеристики приборов. Продемонстрировано, что построенные модели позволяют описывать статические характеристики РТД адекватно эксперименту.

#### Список литературы

1. Nanotechnology Research Directions // IWGN Workshop Report (January, 1999) / M. C. Roco, R. S. Williams and P. Alivisatos, Kluwer Academic Publishers.
2. Obukhov I. A. The new model of charge transport in quantum devices // Proceeding of NANO-II. Part C. Moscow, 1993. P. 889—896.

3. Obukhov I. A. Resonant-tunneling diode theory and modeling // Proceeding of NANOMEETING-95, Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Minsk, 1995. P. 271–272.
4. Obukhov I. A. The local models of charge transport // Proceeding of NANOMEETING-95, Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Minsk, 1995. P. 273–276.

5. Frontiers in Nanoscale Science of Micron // Submicron Devices, NATO ASI Series, E-328 / Edited by Antti-Pekka Jauho and Eugenia V. Buzaneva, Kluwer Academic Publishers.

6. Kluksdahl N. C., Kriman A. M. et al Phys. Rev. B. V. 39, 1989. P. 772.

7. Гринвуд Д. Кинетическое уравнение в теории электропроводности металлов // Вопросы квантовой теории необратимых процессов / Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., 1961. С. 201–224.

8. Петров Н., Бранков Й. Современные проблемы термодинамики. М.: Мир, 1986. 286 с.
9. Ренке Г. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.
10. Tsu R., Esaki L. Appl. Phys. Lett. V. 22, 1973. P. 562.
11. Gavrilov O. T., Obukhov I. A., Dianov S. A. The classical regions influence on characteristics of Resonant-Tunneling Diode // Proceeding of NANO-II, Part. C. Moscow, 1993. P. 860–870.
12. Gavrilov O. T., Kvatkevich I. I., Obukhov I. A., Matveev Yu. A. Interaction of a resonant tunnel diode with the substrate through a distributed interface // Tech. Phys. Lett. V. 22. 1996. P. 311–312.
13. Гаврилов О. Т., Квяткевич И. И., Обухов И. А. Влияние классических областей на характеристики резонансно-тунNELьного диода // Материалы 7-й Крымской Микроволновой Конференции. Севастополь, 1997. С. 401–403.

УДК 536:535.82

С. Ш. Рехвиашвили,

Институт прикладной математики  
и автоматизации КБНЦ РАН, г. Нальчик

## РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИКИ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ

*В рамках термодинамического подхода рассмотрено контактное взаимодействие в атомно-силовом микроскопе (АСМ). Показано, что гистерезис, наблюдаемый при зондировании образца в вертикальном направлении, обусловлен термодинамическим циклом "поверхностная энергия — работа". Проведен расчет силы взаимодействия между образцом и иглой АСМ, имеющей форму параболоида вращения. Найдены флуктуации основных термодинамических величин. Обсуждается роль электрокапиллярных сил.*

### Введение

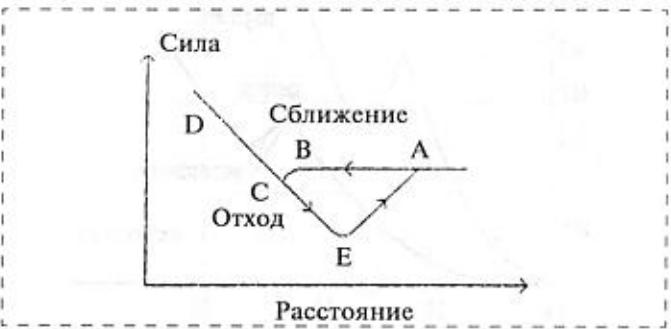
В последнее время число экспериментальных и теоретических работ, посвященных физике и химии микроконтактов, значительно возросло. В частности, много внимания уделяется таким явлениям, как адгезия и смачивание, трение и адсорбция. Сформировались целые научные направления — микроконтактные электрохимия, трибология, оптика и литография. Все это в значительной степени обусловлено появлением мультимодовых сканирующих зондовых микроскопов (СЗМ) нового поколения.

Целью настоящей статьи является термодинамическое описание некоторых характерных явлений, имеющих место в системе зонд—образец СЗМ. Сразу отметим, что здесь используются методы равновесной термодинамики, которые, вообще говоря, применимы для бесконечно медленных

(обратимых) процессов. На самом же деле степень необратимости процессов, происходящих в системе зонд—образец СЗМ, может оказаться настолько значительной, что настоящее описание приведет к существенным ошибкам. Тем не менее, термодинамический подход представляется достаточно информативным, поскольку позволяет, во-первых, выявить общие связи, существующие между различными свойствами контакта, и, во-вторых, выяснить особенности разных равновесных изменений, состояния системы, в частности, определить работу процесса.

### Термодинамический цикл в системе зонд—образец

В данном разделе мы обсудим экспериментальные работы [1–5]. Авторы измеряли зависимость силы взаимодействия иглы атомно-силового микроскопа (АСМ) с поверхностью образца. Сканирование проводилось в вертикальном направлении при приближении и отдалении иглы от поверхности. Соответствующие кривые имели характерный гистерезис (см. рисунок), площадь петли которого зависела от конкретных экспериментальных условий. При сверхвысоком вакууме гистерезис, как правило, не наблюдался. В настоящий момент от-



Зависимость силы взаимодействия от расстояния, измеряемая при подводе и отводе иглы от образца

3. Obukhov I. A. Resonant-tunneling diode theory and modeling // Proceeding of NANOMEETING-95, Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Minsk, 1995. P. 271–272.
4. Obukhov I. A. The local models of charge transport // Proceeding of NANOMEETING-95, Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Minsk, 1995. P. 273–276.

5. Frontiers in Nanoscale Science of Micron // Submicron Devices, NATO ASI Series, E-328 / Edited by Antti-Pekka Jauho and Eugenia V. Buzaneva, Kluwer Academic Publishers.

6. Kluksdahl N. C., Kriman A. M. et al Phys. Rev. B. V. 39, 1989. P. 772.

7. Гринвуд Д. Кинетическое уравнение в теории электропроводности металлов // Вопросы квантовой теории необратимых процессов / Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., 1961. С. 201–224.

8. Петров Н., Бранков Й. Современные проблемы термодинамики. М.: Мир, 1986. 286 с.
9. Ренке Г. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.
10. Tsu R., Esaki L. Appl. Phys. Lett. V. 22, 1973. P. 562.
11. Gavrilov O. T., Obukhov I. A., Dianov S. A. The classical regions influence on characteristics of Resonant-Tunneling Diode // Proceeding of NANO-II, Part. C. Moscow, 1993. P. 860–870.
12. Gavrilov O. T., Kvatkevich I. I., Obukhov I. A., Matveev Yu. A. Interaction of a resonant tunnel diode with the substrate through a distributed interface // Tech. Phys. Lett. V. 22. 1996. P. 311–312.
13. Гаврилов О. Т., Квяткевич И. И., Обухов И. А. Влияние классических областей на характеристики резонансно-тунNELьного диода // Материалы 7-й Крымской Микроволновой Конференции. Севастополь, 1997. С. 401–403.

УДК 536:535.82

С. Ш. Рехвиашвили,

Институт прикладной математики  
и автоматизации КБНЦ РАН, г. Нальчик

## РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИКИ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ

*В рамках термодинамического подхода рассмотрено контактное взаимодействие в атомно-силовом микроскопе (АСМ). Показано, что гистерезис, наблюдаемый при зондировании образца в вертикальном направлении, обусловлен термодинамическим циклом "поверхностная энергия — работа". Проведен расчет силы взаимодействия между образцом и иглой АСМ, имеющей форму параболоида вращения. Найдены флуктуации основных термодинамических величин. Обсуждается роль электрокапиллярных сил.*

### Введение

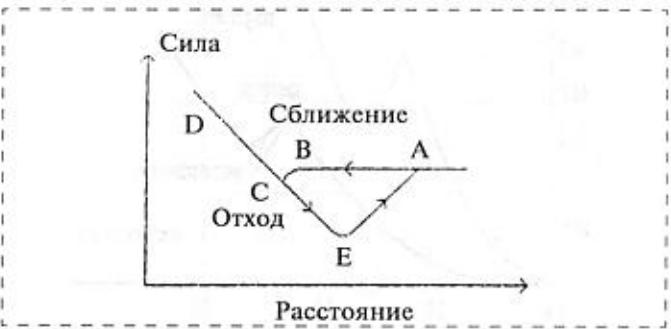
В последнее время число экспериментальных и теоретических работ, посвященных физике и химии микроконтактов, значительно возросло. В частности, много внимания уделяется таким явлениям, как адгезия и смачивание, трение и адсорбция. Сформировались целые научные направления — микроконтактные электрохимия, трибология, оптика и литография. Все это в значительной степени обусловлено появлением мультимодовых сканирующих зондовых микроскопов (СЗМ) нового поколения.

Целью настоящей статьи является термодинамическое описание некоторых характерных явлений, имеющих место в системе зонд—образец СЗМ. Сразу отметим, что здесь используются методы равновесной термодинамики, которые, вообще говоря, применимы для бесконечно медленных

(обратимых) процессов. На самом же деле степень необратимости процессов, происходящих в системе зонд—образец СЗМ, может оказаться настолько значительной, что настоящее описание приведет к существенным ошибкам. Тем не менее, термодинамический подход представляется достаточно информативным, поскольку позволяет, во-первых, выявить общие связи, существующие между различными свойствами контакта, и, во-вторых, выяснить особенности разных равновесных изменений, состояния системы, в частности, определить работу процесса.

### Термодинамический цикл в системе зонд—образец

В данном разделе мы обсудим экспериментальные работы [1–5]. Авторы измеряли зависимость силы взаимодействия иглы атомно-силового микроскопа (АСМ) с поверхностью образца. Сканирование проводилось в вертикальном направлении при приближении и отдалении иглы от поверхности. Соответствующие кривые имели характерный гистерезис (см. рисунок), площадь петли которого зависела от конкретных экспериментальных условий. При сверхвысоком вакууме гистерезис, как правило, не наблюдался. В настоящий момент от-



Зависимость силы взаимодействия от расстояния, измеряемая при подводе и отводе иглы от образца

существует удовлетворительная трактовка явления гистерезиса силы. Так, некоторыми авторами предполагается, что его причиной является "неустойчивое сканирование", которое наблюдается в области минимума потенциальной энергии. Действительно, известно, что наличие потенциальной ямы при взаимодействии зонда с поверхностью твердого тела может приводить к скачкам кантилевера [6]. Вместе с тем данная модель кажется несостоятельной, по крайней мере, по двум причинам:

- расстояние от поверхности, на котором происходит "прилипание" зонда, может составлять 20–50 нм, в то время как равновесное расстояние при взаимодействии зонда с чистой поверхностью находится в интервале 0,2–0,3 нм;
- с помощью данного механизма невозможно объяснить слабо выраженный или полностью отсутствующий гистерезис для твердых поверхностей в вакууме.

Более приемлемым является предположение о действии капиллярных сил, возникающих при наличии тонкой жидкой прослойки (адсорбата) в атмосферных условиях. Важно отметить, что аналогичные силы могут возникать и в вакууме, когда имеет место так называемое "ковалентное смачивание" контакта.

Будем полагать, что между кончиком острия и поверхностью имеется адсорбированная водяная пленка. Выражение для внутренней энергии изолированной пленки имеет вид

$$dU = TdS - pdV + \sigma d\omega - Fdz, \quad (1)$$

где  $T$  — температура;  $S$  — энтропия;  $p$  — давление;  $V$  — объем;  $\sigma$  — поверхностное натяжение пленки;  $\omega$  — площадь;  $F$  — упругая сила, возникающая при деформации пленки;  $z$  — деформация. Для системы с постоянным давлением и температурой можно записать

$$dG = d(U - TS + pV) = \sigma d\omega - Fdz, \quad (2)$$

где  $G$  — термодинамический потенциал Гиббса. При термодинамическом равновесии  $dG = 0$ , поэтому формулу (2) можно переписать в следующем виде:

$$\sigma d\omega = Fdz. \quad (3)$$

Выражение (3) представляет собой условие термодинамического цикла, при котором происходит превращение работы, совершаемой зондом АСМ, в поверхностную энергию слоя и наоборот. На диаграмме состояния этот процесс будет изображаться замкнутой кривой (см. рисунок).

Рассмотрим это явление более подробно. На первом этапе происходит приближение иглы к поверхности (действуют силы Казимира и Ван-дер-Ваальса). После касания пленки (точка  $B$  на рисунке) происходит частичное смачивание кончика зонда. При этом появляется дополнительная со-

ставляющая сила, обусловленная гидрофильным притяжением. Эта сила совершаает механическую работу по "затягиванию" зонда в область контакта (участок  $BC$ ). При дальнейшем увеличении силы прижима происходит касание поверхности образца (участок  $CD$ ; для твердых поверхностей его наклон определяется жесткостью кантилевера). Далее, во время возврата сканирующая система АСМ совершает работу по разъединению контакта (участок  $CE$ ). При последующем увеличении расстояния происходит полный отрыв зонда (участок  $EA$ ) и система возвращается в исходное состояние. Площадь, заключенная внутри замкнутой кривой на рисунке, очевидно, будет равна работе данного цикла

$$W = \int_{A \rightarrow C} F dz - \int_{C \rightarrow A} F dz.$$

Для дальнейших расчетов предположим, что взаимодействие является гидрофобным. Смещение зонда на  $dz$  приводит к изменению площади контакта на  $d\omega$ . Для параболической игры сила взаимодействия и контактная жидкость определяются следующими выражениями:

$$F = \sigma \frac{d\omega}{dz} = 2\pi\sigma \sqrt{R^2 + 2zR}; \quad (4a)$$

$$K = \frac{dF}{dz} = 2\pi\sigma \frac{R}{\sqrt{R + 2z}}, \quad (4b)$$

где  $R$  — радиус кривизны кончика острия.

Отметим некоторые важные особенности формул (4a), (4b). Сила адгезии (отрыва) оказывается равной  $F(0) = 2\pi R\sigma$  (для  $H_2O \sigma = 0,07 \text{ Дж}/\text{м}^2, R = 20 \text{ нм}, F(0) = 8,8 \text{ нН}$ ), что совпадает с аналогичным соотношением, полученным Дерягиным с соавторами. Контактная жесткость в момент касания пленки  $K(0) = 2\pi\sigma$  (для предыдущего примера  $K(0) = 0,44 \text{ Н}/\text{м}$ ). Зная силу отрыва и контактную жесткость, можно определить критическую амплитуду смещения кантилевера (параметр прилипания):

$$\varepsilon_0 = \frac{R}{n+1}, \quad (5)$$

где  $n$  показывает, во сколько раз жесткость кантилевера отличается от контактной жесткости ( $n = K_c/K(0)$ , где  $K_c$  — жесткость кантилевера). Заметим, что для мягких кантилеверов и жестких контактов  $n \rightarrow 0$ , т. е.  $\varepsilon_0 \rightarrow R$ . В этом случае выражение (5) удобно использовать для определения радиуса кривизны острия.

Наконец отметим, что в системе "зонд—образец" СЗМ возможны и другие термодинамические циклы, связанные, например, с явлениями теплопередачи, адсорбции и т. п. В этом можно легко убедиться, если при измерении силовых кривых в АСМ-ячейке изменять давление или температуру

ру. Измеренные зависимости  $F(z)$  будут иметь более сложную форму.

### Флуктуации основных термодинамических параметров

В лучших конструкциях АСМ уровень разрешения достигает приблизительно 1 пН по силе и 1 пм по расстоянию (в вертикальном направлении). Считается, что основными причинами снижения разрешающей способности являются электрические и механические дрейфы, а также тепловые флуктуации кантелеера. Детальный анализ флуктуаций кантелеера проведен, например, в [7]. Мы покажем, что существуют и другие принципиальные ограничения, связанные с флуктуациями таких параметров, как сила взаимодействия, перемещение, площадь контакта и поверхностное натяжение.

Определим минимальную механическую работу, которую может совершить деформированная жидккая прослойка:

$$\begin{aligned} W_{\min} = \Delta G - \sigma \Delta \omega + F \Delta z &= \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2 G}{\partial \omega^2} (\Delta \omega)^2 + \right. \\ &+ 2 \frac{\partial^2 G}{\partial \omega \partial z} \Delta \omega \Delta z + \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} (\Delta z)^2 \left. \right] = \frac{1}{2} \left[ \Delta \omega \Delta \left( \frac{\partial G}{\partial \omega} \right)_z + \right. \\ &\left. + \Delta z \Delta \left( \frac{\partial G}{\partial z} \right)_{\omega} \right] = \frac{1}{2} [\Delta \omega \Delta \sigma - \Delta F \Delta z]. \end{aligned} \quad (6)$$

Вероятность соответствующего термодинамического состояния найдем с помощью выражения (6) и распределения Гиббса, которое записывается в следующем виде:

$$f \approx \exp \left( -\frac{W_{\min}}{kT} \right). \quad (7)$$

С помощью формулы (7) можно вычислить флуктуации всех интересующих нас величин. Рассмотрим два основных случая.

1. В качестве независимых переменных выбираются  $\Delta z$  и  $\Delta \sigma$ . Запишем через указанные переменные выражения для полных дифференциалов площади контакта и силы взаимодействия:

$$\begin{aligned} \Delta \omega &= \left( \frac{\partial \omega}{\partial z} \right) \Delta z + \left( \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} \right) \Delta \sigma; \\ \Delta F &= \left( \frac{\partial F}{\partial z} \right) \Delta z + \left( \frac{\partial F}{\partial \sigma} \right) \Delta \sigma. \end{aligned}$$

После подстановки этих выражений в формулу (6) и последующих несложных преобразований получим выражение для минимальной работы:

$$W_{\min} = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} \right) (\Delta \sigma)^2 - \left( \frac{\partial F}{\partial z} \right) (\Delta z)^2 \right]. \quad (8)$$

С учетом (7) и (8) окончательно получим вероятность термодинамического состояния:

$$f \approx \exp \left( -\frac{(\Delta \sigma)^2}{2kT} \left( \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} \right) \right) \exp \left( \frac{(\Delta z)^2}{2kT} \left( \frac{\partial F}{\partial z} \right) \right). \quad (9)$$

Из формулы (9) следует, что выбранные переменные статистически независимы, т. е. имеет место следующее равенство:  $\langle \Delta \sigma, \Delta z \rangle = 0$ . Сравнивая полученное выражение с нормальным распределением  $f \approx \exp(-x^2/2\langle x^2 \rangle)$ , находим флуктуации поверхностного натяжения и перемещения:

$$\langle (\Delta \sigma)^2 \rangle = -kT \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \omega} \right)_z; \quad (10a)$$

$$\langle (\Delta z)^2 \rangle = kT \left( \frac{\partial F}{\partial z} \right)_{\sigma}^{-1}. \quad (10b)$$

Знак “-” в выражении (10a) означает, что  $(\partial \sigma / \partial \omega) < 0$ .

2. В качестве независимых переменных выбираются  $\Delta \omega$  и  $\Delta F$ , которые также являются статистически независимыми, т. е. выполняется следующее условие:  $\langle \Delta \omega, \Delta F \rangle = 0$ . Аналогичные рассуждения приводят к следующим выражениям для флуктуаций площади контакта и силы взаимодействия:

$$\langle (\Delta \omega)^2 \rangle = -kT \left( \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} \right)_F^{-1}; \quad (11a)$$

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle = -kT \left( \frac{\partial F}{\partial z} \right)_{\omega}^{-1}. \quad (11b)$$

Проведем числовые оценки. Для этого рассмотрим отрыв кантелеера. Из выражений (4a), (4b), (10b) и (11b) при  $z = 0$  находим средние квадратичные отклонения перемещения и силы:

$$\langle \Delta z \rangle = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\sigma}}; \quad (12a)$$

$$\langle \Delta F \rangle = \sqrt{2\pi\sigma kT}. \quad (12b)$$

Для  $\text{H}_2\text{O}$  при  $T = 300$  К имеем:  $\langle \Delta z \rangle = 0,1$  нм;  $\langle \Delta F \rangle = 0,043$  нН.

Из формул (12a), (12b) следует, что в точке  $z = 0$  (на поверхности пленки) средние квадратичные отклонения перемещения и силы не зависят от размеров зонда. Выше нами было показано, что сила отрыва пропорциональна радиусу кривизны  $R$ . Это означает, что для ультраострых зондов ( $R < 10$  нм) роль флуктуаций будет возрастать.

### Электрокапиллярность

Хорошо известно, что поверхностное натяжение электролита в сильной степени зависит от приложенного напряжения и концентрации заряжен-

ных ионов [9]. Предположим, что между образцом и иглой АСМ имеется разность потенциалов. Выражение для потенциала Гиббса принимает следующий вид:

$$dG = \sigma d\omega - F dz - Q d\phi, \quad (13)$$

где  $Q$ ,  $\phi$  — суммарный заряд ионов и разность потенциалов. Из условий термодинамического равновесия находим силу отрыва:

$$F(0) = \left( \sigma \frac{d\omega}{dz} - Q dE \right) \Big|_{z=0} = 2\pi R \left( \sigma - \frac{C\phi^2}{2} \right), \quad (14)$$

где  $E$ ,  $C$  — напряженность поля и удельная емкость контакта ( $[C] = \Phi/m^2$ ). Отметим, что формулу (14) можно также получить, если в выражение (4а) вместо поверхностного натяжения подставить решение уравнение Липпмана.

Из полученного выражения видно, что максимальному поверхностному натяжению соответствует нулевое напряжение на электродах. При разности потенциалов  $\phi = \sqrt{2\sigma/C}$  сила отрыва равна нулю. Таким образом, с помощью АСМ можно изучать электрокапиллярные явления, а следовательно, и процессы адсорбции.

\*\*\*

В настоящей статье впервые описан термодинамический метод для анализа процессов в системе "зонд—образец" АСМ. Предполагалось, что между гидрофобной иглой и образцом имеется адсорбированная водяная пленка. Были получены выражения для силы взаимодействия, контактной жесткости и флуктуаций основных параметров.

Другими теоретическими вопросами, не затронутыми в статье, являются термодинамика сверхвысоковакуумной АСМ и магнитной силовой микроскопии (МСМ). Для описания взаимодействия твердых поверхностей в вакууме необходимо рассматривать гиббсовский слой, который образуется на границе раздела зонд—образец. Основные трудности описания взаимодействия в МСМ связаны с тем, что магнитное поле иглы может вносить существенные искажения в "истинное" распределение магнитных сил на поверхности образца. В общем случае при перемещении в магнитном поле с напряженностью  $H$  кантилевера намагниченностью  $J$  площадь петли магнитомеханического гистерезиса  $W = \oint F dz = \oint J dH$ .

#### Список литературы

1. Radmacher M., Cleveland J., Fritz M., Hansma H. // Biophys. J. 1994. V. 66. N 6. P. 2159–2165.
2. Baselt D. R., Baldeschwieler J. D. // J. Appl. Phys. 1994. V. 76. N 1. P. 33–38.
3. Van der Werf K. O., Putman C. A. J., De Groot B. G. Greve J. // Langmuir. 1994. V. 10. P. 1195–1197.
4. Radmacher M., Fritz M., Allersema M., Schmidt C., Hansma P. // SPIE. 1995. V. 2384. P. 136–143.
5. Повстугар В. И., Быстров С. Г., Михайлова С. С. // Материалы Всероссийского совещания "Зондовая микроскопия-99" Институт физики микроструктур РАН. Н. Новгород, 10–13 марта 1999. С. 306–309.
6. Ishizaka Tatsuya, Sagawara Yasahiro, Kumagai Kozo et al. // Jap. Appl. Phys. Pt. 2. 1990. V. 29. N 7. P. 1196–1198.
7. Butt Hans-Jurgen, Jaschke Mansfred // Nanotechnology. 1995. V. 6. N 1. P. 1–7.
8. Рехвиашвили С. Ш. Термодинамика контактного взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // Материалы совещания "Зондовая микроскопия-2000" (28 февраля – 2 марта 2000 г., Нижний Новгород). М., 2000. С. 113–119.

# МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МСТ

УДК 62.4

**Р. З. Бахтизин, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
Физический факультет Башгосуниверситета, г. Уфа,  
К.-К. Щуе, Ч.-Ж. Щуе, Ю. Хасегава,  
Т. Сакурай, проф., Институт проблем  
материаловедения университета Тохоку, Япония**

## УПРАВЛЕНИЕ ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНЫМ РОСТОМ ПЛЕНОК GaN НА АТОМНОМ УРОВНЕ

*Методами молекулярно-лучевой эпитаксии в сочетании с обработкой в высокочастотном разряде в азотной плазме на 6Н-SiC(0001) подложках выращивались тонкие пленки GaN. Для очистки поверхности SiC использовался новый двухступенчатый метод, включающий высокотемпературную обработку в атмосфере водорода и травление в потоке Si в условиях сверхвысокого вакуума. С использованием сканирующей туннельной микроскопии (STM) и дифракции быстрых электронов на отражение в условиях сверхвысокого вакуума *in situ* была исследована серия упорядоченных сверхструктур на поверхности эпитаксиальной пленки GaN(0001). На основе сопоставления STM-изображения с атомным разрешением и результатов первоначальных расчетов полной энергии предложена модель адатома, описывающая образование основных структур  $2 \times 2$  и  $4 \times 4$ . Обнаружено, что структурная фаза  $5 \times 5$  состоит из линейной цепочки неравномерно расположенных из-за релаксации решетки атомов Ga вдоль направления [1120].*

### Введение

Исследования свойств нитридов элементов группы III (AlN, GaN и InN) и их сплавов, представляющих собой широкозонные ( $E_g$  перекрывает диапазон 1,9–6,2 эВ) полупроводники с прямыми оптическими переходами, позволили заключить, что они являются наиболее перспективными материалами для изготовления светодиодов и лазерных диодов, излучающих во всей видимой и ультрафиолетовой (240–620 нм) областях спектра. Интерес к изучению этих материалов в значительной степени возрос после технологического прорыва в создании голубых светодиодов и лазерных диодов, совершенном Накамурой [1]. Высокая радиацион-

Работа выполнялась при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (РФФИ) и Федеральной Программы "Поверхностные Атомные Структуры" Министерства науки и технологий РФ (Проект № 3.4.99).

ная и химическая стойкость нитридов, а также хорошая теплопроводность и термическая стабильность наряду с высокой подвижностью носителей тока делают их перспективными и для изготовления высокочастотных приборов, способных работать в агрессивных средах при высоких температурах [2].

Однако реализация этих потенциальных преимуществ долгое время сдерживалась значительными трудностями в получении соответствующих материалов. Большие значения энергии связи (2,2 эВ для GaN) являются причиной высокой температуры плавления нитридов, что создает серьезные препятствия для получения кристаллов из расплава как объемных материалов. Поэтому их выращивают в виде тонких эпитаксиальных пленок, но и в этом случае возникают серьезные проблемы, связанные с отсутствием подходящей подложки. Из-за малости ковалентного радиуса N (всего 0,7 Å) параметр решетки у кристаллов нитридов значительно меньше, чем у других полупроводниковых соединений группы III–V, так что дальнейший прогресс в этом направлении определяется успехами в осуществлении контролируемого гетероэпитетаксиального роста. Эпитетаксиальный рост — это типичный поверхностный процесс, поэтому исследование структуры растущей поверхности является задачей первостепенной важности, позволяющей оптимизировать технологические условия для получения высококачественных пленок нитридов [3].

GaN кристаллизуется в структурах двух типов: стабильной гексагональной фазе (решетка вюрцита) и метастабильной кубической фазе (решетка типа цинковой обманки). Гексагональная эпитетаксиальная пленка GaN, выращенная вдоль полярной оси подложки, всегда проявляет полярность: образуется либо поверхность (0001), т. е. Ga-полярная (с атомами Ga в наружном слое), либо поверхность (0001) — N-полярная (с атомами N в наружном слое). Полярность поверхности оказывает непосредственное влияние на ее атомную структуру и процессы роста. С точки зрения соответствия решеток и коэффициентов теплового расширения одной из лучших подложек для выращивания гексагональной фазы GaN является базовая плоскость политипа 6Н карбида кремния (6 означает число слоев в одном периоде последовательности расположения двойных слоев Si—C).

Для понимания детального механизма начальных стадий роста пленок нитридов нами были исследованы атомные структуры на Ga-полярной поверхности GaN, выращенной на SiC(0001)-подложке.

## Методика эксперимента

Эксперименты проводили в сверхвысоковакуумном (с базовым давлением  $5 \times 10^{-11}$  Торр) сканирующем туннельном микроскопе (СТМ), расположенным на линии с камерой молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в пределах единой вакуумной системы [4]. Сканирующие зонды изготавливались из монокристаллической вольфрамовой проволоки с ориентацией [111]. Качество зонда-острия контролировалось на атомном уровне с помощью встроенного полевого ионного микроскопа [5]. В качестве подложек использовали пластины 6H-SiC обеих ориентаций, (0001) и (000 $\bar{1}$ ), с выступающими атомами Si и C соответственно (*n*-тип,  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , Cree Res. Corp.). К сожалению, благодаря исключительной твердости и химической стойкости карбид кремния с трудом поддается какой бы то ни было обработке. Так, высокотемпературный прогрев в сверхвысоком вакууме не удаляет окислы и примеси с поверхности, а приводит к обеднению приповерхностного слоя Si и ее графитизации. Для удаления окислов предлагалось обрабатывать поверхность SiC пучками Si или Ga [6] (при этом образуются летучие соединения SiO и Ga<sub>2</sub>O) либо подвергать травлению в HF [7]. К сожалению, оба метода не позволяют устранять механические повреждения. В то же время травление в водороде не является селективным и позволяет получать зеркально-гладкие поверхности, а в качестве продуктов реакции дает летучие углеводороды и исходный Si [8], но, как показали СТМ исследования, структура поверхности при этом остается неупорядоченной и необходима дополнительная ее обработка [9]. Мы разработали двухступенчатый метод подготовки поверхности SiC, включающий:

- 15-минутную очистку в ультразвуковой ванне, заполненной ацетоном;
- 20-минутное травление в печи в потоке атомарного водорода (20 %) и аргона (80 %) при атмосферном давлении и температуре 1600 °C;
- ≥ 8-часовое обезгаживание при 650 °C в вакууме ( $\sim 10^{-10}$  Торр);
- 10 циклов *in situ* травления кремнием, которое состояло в нанесении нескольких слоев Si при 850 °C, затем проведение серии вспышек при 1000 °C в потоке Si в вакууме ( $\sim 10^{-9}$  Торр). Такой подход позволил поочистить атомарно-чистую поверхность SiC и вырастить на ней высококачественные пленки GaN.

Пленки GaN выращивали *in situ* методом МЛЭ с использованием высокочастотного разряда в азотной плазме. Процесс роста начинался с нитрилизации атомарно-чистой поверхности SiC (0001), за которой следовало нанесение при 750 °C буферного слоя AlN толщиной 150 Å, позволяющего уменьшить рассогласование решеток (несоответствие между решетками GaN и AlN составляет 2,6 %, а между Al и SiC — 1 %). Затем температуру под-

ложки понижали до 650 °C и пленку GaN выращивали в условиях обогащения Ga со скоростью ~1000 Å/ч. Парциальное давление азота в процессе роста составляло  $10^{-4}$ — $10^{-5}$  Торр. Рост прекращали путем выключения источника азотной плазмы, после чего наносили еще два монослоя Ga при температуре роста и образец быстро охлаждали до нормальной температуры. Для такой поверхности наблюдалась картина 1 × 1 дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО). Фазу 2 × 2 получали после нанесения на поверхность при нормальной температуре монослоя Ga и отжига при 200 °C в течение 10 мин (реконструкция 2 × 2 соответствует стабильному фронту роста, при котором получаются наиболее качественные пленки GaN). Дальнейший отжиг при 350—400 °C приводил к появлению поверхностных фаз 4 × 4 и 5 × 5. Реконструкции  $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ , 10 × 10, ... получали подобным же образом после нанесения на поверхность со структурой 1 × 1 от одного до двух монослоев Ga (в порядке возрастания).

## Результаты и их обсуждение

**Поверхность SiC(0001).** Изображение поверхности большой площади исходной пластины 6H-SiC(0001), полученное на воздухе с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ), приведено на рис. 1, *a* (см. вторую сторону обложки). Благодаря присутствию естественного оксида на поверхности не наблюдается каких-либо топографических особенностей и не проявляется ступенчатая структура. Механические царапины, образовавшиеся в результате полировки образца, отображаются в виде темных прожилок, беспорядочно расположенных по поверхности. Среднее квадратичное значение высоты неоднородностей ~60 Å.

Травление в потоке Si должно приводить к десорбции окислов кремния из-за образования летучей монооксида, что позволяет избежать графитизации вследствие обеднения приповерхностной области кремнием при более высоких температурах отжига. На СТМ-изображении заполненных состояний поверхности, подвергнутой такой обработке (рис. 1, *b*, см. вторую сторону обложки), можно отчетливо наблюдать двумерные островки SiC (обозначены стрелками *D*), ямки (стрелка *E*), а также канавки в виде извилистых темных линий (стрелка *F*), образовавшиеся благодаря полировке. Заметим, что в областях, которые соответствуют макроскопическим царапинам (темные полосы на рис. 1, *a*, см. вторую сторону обложки), сканирование становилось нестабильным; это позволяет предположить, что такие области не подвергались воздействию пучка Si. СТМ-изображение высокого разрешения на рис. 1, *c* (см. вторую сторону обложки) показывает, что несмотря на образование локально упорядоченных областей со структурой 3 × 3 поверхность, обработанная в потоке Si, в це-

лом состоит из террас нерегулярной формы, разделенных беспорядочно ориентированными ступеньками различной высоты. Можно было предполагать, что травление при более высоких температурах ( $> 1100^{\circ}\text{C}$ ) ускорит процесс разложения SiC и тем самым будет способствовать удалению царапин, но изменений в морфологии поверхности нами обнаружено не было.

После высокотемпературного травления в водороде ситуация кардинально меняется. На АСМ-изображении, приведенном на рис. 1, *г* (см. вторую сторону обложки), сразу видны преимущества водородного травления: теперь поверхность характеризуется равномерно распределенными террасами (светлые полосы), разделенными прямыми ступенями (темные прожилки на изображении), которые простираются по крайней мере на 10 мкм в направлении [10\bar{1}0]. Ширина террас в вертикальном направлении равна 0,4 мкм, а среднеквадратичное значение разницы в высотах неоднородностей не превышает 15 Å (в 4 раза меньше прежней величины), что явно свидетельствует об улучшении морфологии поверхности. Однако исследование этой поверхности в СТМ показало, что и ее структура оказывается неупорядоченной, а отжиг в сверхвысоком вакууме лишь иногда приводил к образованию локально упорядоченных доменов со структурой  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , как об этом сообщалось в [9], подтверждая необходимость дальнейшей обработки.

СТМ-изображения заполненных состояний поверхности образца после травления в водороде и обработки в потоке Si показали, что она состоит из чистых и плоских террас, разделенных прямыми ступенями, ориентированными вдоль направления [10\bar{1}0], причем на поверхности отсутствовали как макро-, так и микроцарапины. Высота всех ступеней составляла ~15 Å и соответствовала высоте единичной ступени политипа 6Н. Изображение такой поверхности с атомным разрешением, полученное в режиме заполненных состояний и демонстрирующее реконструкцию  $3 \times 3$ , которая не изменялась даже в ходе нанесения небольшого количества Al, приведено на рис. 1, *д* (см. вторую сторону обложки). Хорошо видно, что Al образует двумерный островок. Отжиг при температуре 700 °C приводил к десорбции всего количества Al и свидетельствовал о низкой его реакционной способности по отношению к Si. Изменяя концентрацию Si в потоке, можно было получить и реконструкцию  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , что согласуется с результатами исследований других авторов [10]. Наблюдавшаяся нами атомарно-чистая поверхность SiC по качеству вполне сопоставима с хорошо изученными поверхностями Si и GaAs и свидетельствует об эффективности двухступенчатого метода подготовки образцов.

**Поверхность GaN(0001).** На рис. 2 показана морфология поверхности GaN, образованной

сразу после завершения процедуры выращивания; она характеризуется явно выраженной структурой террас—ступень, причем высота ступеней ≈ 2,55 Å и соответствует высоте двойного слоя гексагонального GaN вдоль полярной оси *c*, а протяженность гладких участков достигает 0,5 мкм, что бесспорно доказывает преимущества SiC-подложки и необходимость использования AlN-буферного слоя. Согласно условиям приготовления и наблюдавшейся картине  $1 \times 1$  ДБЭО, такая быстро охлажденная поверхность должна соответствовать объемной  $1 \times 1$ -Га структуре. Однако, несмотря на гладкую морфологию, на увеличенном изображении этой же поверхности (рис. 2, *б*) упорядоченная структура не наблюдается. Видно много темных дыр диаметром ≈ 10 Å (указанны стрелками), хаотично расположенных по поверхности, что свидетельствует о незавершенности формирования полного монослоя Ga.

**Структурные фазы  $2 \times 2$  и  $4 \times 4$ .** Типичное СТМ-изображение заполненных состояний фазы  $2 \times 2$  (рис. 3, *а*) характеризуется регулярно расположенным рядами ярких точек, отстоящих друг от друга на расстояние 6,4 Å вдоль обоих направлений плотной упаковки; ниже (рис. 3, *б*) показано изображение фазы  $4 \times 4$ , которая образуется благодаря отсутствию каждого второго ряда ярких точек в структуре  $2 \times 2$ . Фазу  $4 \times 4$  приготавлили путем отжига фазы  $2 \times 2$  при 350–400 °C в течение 5 мин, что предполагает частичную десорбцию Ga с поверхности, следовательно, фаза  $4 \times 4$  менее обогащена Ga, чем фаза  $2 \times 2$ . В работах [11–13] приведены теоретически предсказанные модели структуры  $2 \times 2$ , в зависимости от выбора которых яркие точки на изображениях можно рассматривать как результат туннелирования из атомов Ga наружного слоя, оборванных связей N или других заполненных поверхностных состояний. Модель N-атома мы сразу исключаем, поскольку маловероятно, чтобы поверхность была обогащена азотом в использованных нами условиях приготовления, но этим условиям соответствует модель Ga-атома, и мы связываем яркие точки на изображении с туннелированием из атомов Ga наружного слоя [14].

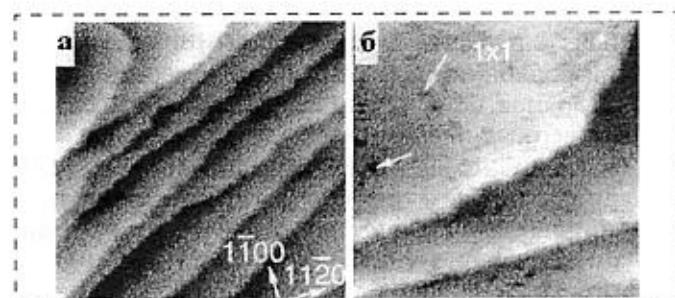


Рис. 2. СТМ-изображения заполненных состояний атомарно-чистой поверхности GaN(0001)-1x1 сразу после завершения процесса роста,  $V_s = -2,8$  В,  $I_t = 8,0 \times 10^{-11}$  А; площадь сканирования 1500 Å × 1500 Å (*а*) и 250 Å × 250 Å (*б*)

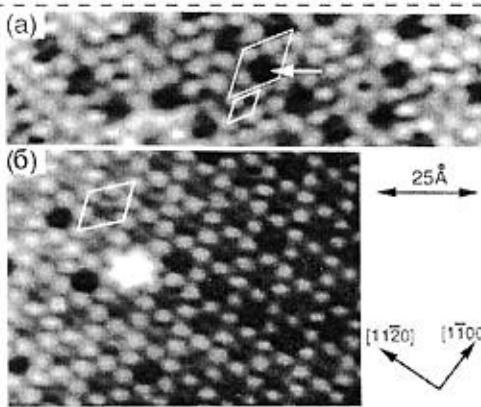


Рис. 3. СТМ-изображения заполненных состояний поверхности GaN(0001):  
а — фазы  $2 \times 2$ ,  $V_s = -3,0$  В; б — фазы  $4 \times 4$ ,  $V_s = -2,8$  В

Согласно работе [13] структура с Ga-адатомом оказывается стабильной лишь в ограниченной области значений химического потенциала Ga, а в условиях меньшего содержания Ga становится предпочтительной модель Ga-вакансии, поэтому было интересно выяснить, как она согласуется с СТМ-изображением фазы  $2 \times 2$ . В этой структуре 3/4 электрона от каждой оборванной связи Ga переходит к трем оборванным связям атома азота 2-го слоя. В нашей вакансационной модели, приведенной ниже, остающиеся атомы Ga структуры  $1 \times 1$  релаксируют вниз на  $\approx 0,4$  Å, а атомы N 2-го слоя поднимаются вверх. Заполненные поверхностные состояния, образованные от атомов N, в этом случае становятся доступными для анализа в СТМ и должны доминировать при туннелировании в режиме заполненных состояний. Таким образом, сделать выбор корректной модели, основываясь лишь на анализе СТМ-изображений, не представляется возможным.

Для решения проблемы мы выполнили первоосновные расчеты полной энергии для этих моделей в рамках формализма функционала плотности. В процессе вычислений плотности заряда последний рассматривался как сумма вкладов от состояний валентной зоны, расположенных на 2 эВ ниже наивысшей занятой молекулярной орбитали, что согласуется с условиями проведения СТМ-исследований ( $V_s \leq -3,0$  В). Отметим хорошее совпадение наблюдавшихся СТМ-изображений с результатами расчетов по модели Ga-адатома, а распределение заряда, вычисленное по модели Ga-вакансии, оказалось пространственно расщепленным и противоречило экспериментальным результатам (рис. 4, а—в). Расчетное значение теплоты образования GaN ( $\Delta H_{\text{GaN}} = 1,4$  эВ) также хорошо согласуется с экспериментальным значением 1,14 эВ, поэтому относительную стабильность различных структур определяли как функцию химического потенциала Ga в области термодинамически разрешенных значений:

$$\mu_{\text{Ga}}(\text{объемный}) - \Delta H_{\text{GaN}} \leq \mu_{\text{Ga}} \leq \mu_{\text{Ga}}(\text{объемный}).$$

На рис. 4, г видно, что наиболее стабильные структуры — это те, которые описываются моделями Ga-адатома и N-адатома в условиях обогащения Ga и N соответственно (прямые 1, 2).

Вернемся к фазе  $4 \times 4$ . На СТМ-изображениях можно видеть отдельные ячейки  $4 \times 4$  (выделены ромбиком), образовавшиеся благодаря отсутствию некоторых ярких точек (указано стрелкой), причем во время отжига от 200 до 300 °C фазы  $2 \times 2$  и  $4 \times 4$ , как правило, сосуществуют (см. рис. 3). Переход к фазе  $4 \times 4$ , сопровождаемый потерей части атомов/адатомов Ga, позволил предположить, что фаза  $4 \times 4$  формируется благодаря десорбции Ga с поверхности  $2 \times 2$ . Для фазы  $4 \times 4$  мы разработали модель отсутствующего адатома (рис. 4, в), которая хорошо согласуется с экспериментом, а ее теоретический анализ показал, что в пределах области разрешенных значений химического потенциала Ga ( $-0,72 \leq \mu_{\text{Ga}} \leq 0,00$  эВ) фаза  $4 \times 4$  энергетически предпочтительнее остальных структур, за исключением модели Ga-адатома структуры  $2 \times 2$  (рис. 4, г,

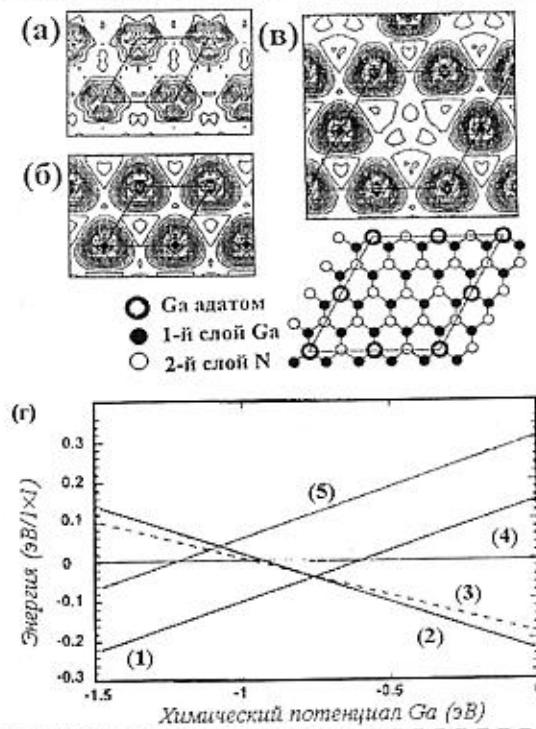


Рис. 4. Распределения плотности поверхности поверхности заряда, рассчитанные для грани GaN(0001):  
а — реконструкция  $2 \times 2$ , модель Ga-вакансии; б — реконструкция  $2 \times 2$ , модель Ga-адатома; в — реконструкция  $4 \times 4$ , модель отсутствующего Ga-адатома (локальная плотность состояний вычислялась путем интегрирования вкладов от уровней валентной зоны, расположенных на 2 эВ ниже зоны НМО, на высоте 1,3 Å от внешнего поверхностного слоя); г — зависимость энергии формирования поверхности от химического потенциала Ga, рассчитанная для грани GaN(0001) относительно объемной структуры GaN-1 × 1: 1 — модель N-адатома, реконструкция  $2 \times 2$ ; 2 — модель Ga-адатома, реконструкция  $4 \times 4$ ; 3 — модель отсутствующего Ga-адатома, реконструкция  $4 \times 4$ ; 4 — для структуры  $1 \times 1$ -Ga; 5 — модель Ga-вакансии, реконструкция  $2 \times 2$

прямые 2 и 3). В условиях меньшего содержания Ga обе модели становятся сравнимыми по энергии, а так как фазы  $4 \times 4$  и  $2 \times 2$  близки по структуре, можно полагать, что энергия активации для соответствующего фазового перехода будет невелика. В модели фазы  $4 \times 4$  вакансии во внешнем слое атомов Ga располагаются в треугольной решетке, а электростатическое отталкивание между заряженными атомами Ga стабилизирует такую конфигурацию.

**Фаза  $5 \times 5$ .** Условия приготовления фазы  $5 \times 5$  мало отличаются от тех, что использовались в случае фазы  $4 \times 4$ ; это позволяет предположить, что поверхностные стехиометрии в обоих случаях должны быть почти идентичны. В ходе исследования структуры  $5 \times 5$  на картинах ДБЭО наблюдалась резкая, но прерывистая линия вдоль направления [1100], а когда электронный пучок падал вдоль оси [1100], возникал сильный фон. На типичном СТМ-изображении фазы  $5 \times 5$ , где она существует с фазой  $4 \times 4$  (рис. 5, см. вторую сторону обложки), можно видеть главную особенность ее структуры: равномерно расположенные линейные цепочки, распространяющиеся вдоль оси [1120]. Расстояние между цепочками в направлении [0110] оказалось равным 15,8 Å и соответствует пяти постоянным решеткам грани GaN(0001). На изображении высокого разрешения (рис. 5, б) видно, что в действительности каждая цепочка образуется последовательностью пар точек (т. е. каждая линия является дублетом). Сами точки отстоят друг от друга в зависимости от периодичности расположения на расстоянии 6,4 Å (2×), 9,6 Å (3×) или ~7 Å (2,5×) [множитель "×" показывает число периодов], причем преобладают точки, разделенные промежутком ~7 Å (их почти 50 %), что в результате приводит к одномерному беспорядку вдоль направления [1120]. Таким образом, структура  $5 \times 5$  не имеет даже элементарной ячейки, такой как фазы  $2 \times 2$  и  $4 \times 4$ , и не принадлежит семейству сверхструктур " $N \times N$ ", поэтому целесообразно описывать ее как структуру " $5 \times 2,5$ ". Согласно результатам измерения профиля сканирования вдоль белой линии, контраст фазы  $5 \times 5$  лишь на 0,15 Å превосходит контраст фазы  $4 \times 4$ . Основываясь на модели структуры  $4 \times 4$  (отсутствующего Ga-атома), условиях приготовления фазы  $5 \times 5$  и анализе СТМ-изображений, мы разработали ее геометрическую модель. Яркие точки на изображении высокого разрешения связаны с туннелированием из заполненных состояний атомов Ga, а наблюдавшаяся (не вполне упорядоченная) структура может быть объяснена так называемыми Пайерловскими искажениями решетки атомов, расположенных на участках  $T_4$ . Известно, что в квазидиодномерном случае система может понижать свою энергию путем релаксации решетки, ведущей к образованию стабильной полупроводниковой зонной структуры [15, 16]. Наблюдавшаяся нерав-

номерность в распределении положений атомов вдоль цепочки в таком случае будет результатом релаксации атомов, занимающих участки  $T_4$ , что отражено на предлагаемой нами модели фазы  $5 \times 5$ . Этот одномерный беспорядок хорошо объясняет появление сильного фона на картинах ДБЭО при падении электронного луча в направлении [1100].

### Заключение

Двухступенчатый метод, включающий 20-минутное высокотемпературное травление в водороде и 10 циклов обработки в потоке Si в условиях сверхвысокого вакуума, является эффективным методом очистки поверхности SiC. В зависимости от условий обработки на атомарно-чистой поверхности 6H-SiC(0001) наблюдаются структурные фазы  $3 \times 3$  или  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ .

Описанные технологические подходы позволили получить высококачественные пленки GaN(0001), а модель Ga-атома — объяснить все три исследованные реконструкции поверхности.

Как димеризация, так и отсутствие атомов в их регулярных положениях в решетке, которые обычно наблюдаются на поверхностях традиционных полупроводниковых соединений III—V, не являются основным механизмом минимизации энергии в GaN. Хотя модель Ga-атома предполагает очень сильную связь в соединении Ga-N, включающую как ковалентную, так и ионную составляющие, важную роль в стабилизации наблюдаемых структур играет и отталкивание между заряженными атомами. В этом контексте представленная схема оказывается более общей и может быть применена для других широкозонных полупроводников.

### Список литературы

1. Nakamura Sh., Fasol G. The Blue Laser Diodes (GaN based light emitters and lasers). Berlin—Heidelberg: Springer. 1977. 175 p.
2. Henini M. III-Vs Review, 12, N 5, 28 (1999).
3. Herman M. A., Sitter H. Molecular Beam Epitaxy: Fundamental and Current Status. New-York, Berlin—Heidelberg: Springer-Verlag, 1996. 382 p.
4. Бахтизин Р. З., Сакурай Т., Хашинуме Т., Щуе К.-К. УФН, 167, 1227 (1997).
5. Бахтизин Р. З., Пак Ч., Хашинуме Т., Сакурай Т. ЖЭТФ, 108, 977 (1995).
6. Kaplan R. Surf. Sci., 215, 111 (1986).
7. Starke U. J. Appl. Phys., 89, 175 (1995).
8. Burk A. A. and Rowland L. B. J. Cryst. Growth, 167, 586 (1996).
9. Owman F., Hallin C., Mårtensson P., Janzen E. J. Cryst. Growth, 167, 391 (1996).
10. Li L. and Tsong I. S. T. Surf. Sci., 351, 141 (1996).
11. Northrup J. E., Di Felici R. J. Neugebauer. Phys. Rev. B55, 13878 (1997).
12. Rapcewich K., Nardelli M. B. and Bernholc J. Phys. Rev. B56, R12725 (1997).
13. Fritsch J., Sankey O. F., Schmidt K. E. J. B. Page. Phys. Rev. B57, 15360 (1998).
14. Chen C. J. Introduction to Scanning Tunneling Microscopy (N.-Y.—Oxford: Oxford University Press, 1993). P. 121.
15. Peierls R. E. Quantum Theory of Solids. (Oxford: Clarendon Press, 1955). P. 113.
16. Eric Drexler K. Nanosystems (Molecular Machinery, Manufacturing and Computation). New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore: A Wiley-Interscience Publication. 1992. 556 p.

УДК 620.186

**И. В. Закурдаев, С. Ю. Садофеев, М. В. Байзер,**  
Рязанская государственная радиотехническая  
академия,  
**М. М. Рзаев, Физический институт**  
им. П. Н. Лебедева РАН

## САМООРГАНИЗАЦИЯ УПРУГОНАПРЯЖЕННОЙ ПЛЕНКИ ГЕРМАНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ

*Исследованы структурные изменения поверхности пленок с использованием дифракции быстрых электронов (ДБЭ), а также воздушных вариантов сканирующей туннельной (STM) и атомно-силовой микроскопии (ACM).*

В последние годы возрос интерес к процессу самоорганизации упругонапряженной пленки германия на поверхности кремния в связи с проблемой создания полупроводниковых структур с квантовыми точками из традиционных для микроэлектроники материалов. При этом возникает проблема формирования совершенных по структуре островков предельно малых размеров, которая успешно решается для гетероструктур на основе соединений  $A_3B_5$ , например, образование массивов квантовых точек в системе InAs/GaAs (001) [1, 2]. Однако в системе Ge/Si(001) пока не удается получить ансамбли нанокластеров с хорошей однородностью по размерам, либо размеры образующихся островков значительно превышают необходимые для формирования квантовых точек [3].

При расчете конечного размера островка в основном рассматриваются энергетические характеристики процесса: минимизация свободной энергии пленки за счет образования островков, имеющих форму, близкую к равновесной, а изменение формы островков, как правило, связывается с анизотропией упругих сил в напряженной кристаллической пленке [4]. Однако в процессах самоорганизации большое значение могут иметь процессы направленного массопереноса [5]. В этом случае при расчете размера островка необходимо знать движущую силу, вызывающую массоперенос, и степень выраженности анизотропии поверхности диффузии. Расчет силы наиболее корректно проводить по наблюдениям образования эшелонов ступеней, так как теоретически этот процесс для разных случаев рассмотрен наиболее полно [5–7].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 99-02-17795).

Среди характерных особенностей рассматриваемой гетероэпитаксиальной системы можно выделить очень быстрый переход от стадии псевдоморфного двумерного к трехмерному росту при превышении пленкой критической толщины, обычно равной 5–6 монослоям (ML). С учетом последнего обстоятельства были проведены исследования развития ступенчатой структуры германия на поверхности кремния при минимально низких температурах эпитаксии ( $T_s = 200$  °C), позволяющих продлить время формирования островковой структуры.

Экспериментальные образцы были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках КЭФ-4.5 (001), отклоненных на 0,5° к направлению (011). После стандартной операции очистки поверхности подложки от слоя естественных оксидов выращивали 200 нм буферного слоя кремния при температуре 800 °C. Вслед за этим подложка охлаждалась до заданной температуры и наносилась пленка германия толщиной 6,4 ML, 10 ML и 15 ML при скорости осаждения 0,02 нм/с.

Наблюдения с помощью STM и ACM проводились на сканирующем туннельном микроскопе "Скан-8" и сканирующем зондовом микроскопе Solver P4-SPM-MDT соответственно.

Наблюдение начальной стадии развития неровностей на поверхности кремния, покрытого упругонапряженной пленкой германия, позволило установить следующее:

- на начальном этапе самоорганизации (кластеризации) пленки германия при низкой температуре эпитаксии  $T_s < 350$  °C наблюдается развитие ступенеподобной структуры с характерными размерами  $h \leq 2$  нм и  $d \approx (6,5 \pm 14)$  нм;
- средняя скорость роста ступеней составляет  $v \approx 10^{-8}$  см/с и более чем в  $10^2$  раз превышает скорость развития "естественной шероховатости" при той же относительной температуре ( $T \approx 0,2 T_{пл}$ ) [8];
- период следования ступеней зависит от толщины пленки и времени формирования пленки как  $d \sim h$  и  $d \sim t$  соответственно.

Оценим в первом приближении минимально достижимый размер островка исходя из кинетических особенностей направленного массопереноса. В [7] приведена сила, действующая на ступени на поверхности упругонапряженной пленки:

$$F = \alpha \ln L, \quad (1)$$

где  $\alpha = \epsilon^2 h^2 / M$ ;  $\epsilon$  — объемное напряжение;  $h$  — высота ступени;  $M$  — модуль упругости;  $L$  — среднее расстояние между ступенями в равновесном состоянии.

Оценим величину  $\alpha$ . Приняв  $h = 1$  нм,  $\epsilon = 10^4$  Н/см<sup>2</sup> и  $M = 10^7$  Н/см<sup>2</sup> [9], получаем  $\alpha = 10^{-13}$  Н.

Основным моментом проведенных оценок является возможность рассчитать силу, вызывающую направленный дрейф атомов германия. Наиболее точно силу, действующую на атом при направленном массопереносе, вызывающем образование ступеней, можно получить из опытов по электропереносу. В случае переходных металлов  $F = 10^{-17}$  Н [10], в случае полупроводников, например кремния,  $F = 5 \cdot 10^{-16}$  Н [11]. Одновременное наблюдение развития "естественной шероховатости" и образования структуры под действием электрических сил позволило установить, что сила, вызванная градиентом химического потенциала, приводящая к развитию "естественной шероховатости", сравнима с силой электропереноса [8], т. е. в случае полупроводников ее можно оценить как  $F \approx 10^{-16}$  Н. Процесс самоорганизации упругонапряженных пленок протекает значительно активнее, чем в рассмотренных случаях. Поскольку при фиксированной температуре скорость массопереноса пропорциональна действующей силе, в рассматриваемом случае образование ступеней со скоростью  $v \sim 10^{-8}$  см/с при  $T = 200$  °C возможно при  $F > 10^{-14}$  Н. Расчет по соотношению (1) дает  $F = \alpha \ln L = 2 \cdot 10^{-13}$  Н для  $L = 20$  (размер периода ступеней по отношению к межатомному расстоянию).

На основании общих соотношений термодинамики необратимых процессов в работах [5, 8] получены одинаковые соотношения для оценки периода самоорганизующихся неровностей:

$$\lambda = 2\pi \left[ \frac{D_s \gamma \omega}{\left( \frac{\partial D_s}{\partial \theta} \right) F} \right]^{1/2}, \quad (2)$$

где  $\frac{\partial D_s}{\partial \theta}$  — параметр, учитывающий изменение коэффициента поверхностной диффузии на искривленной поверхности;  $\theta = \frac{\partial z}{\partial x}$  — угол отклонения поверхности неровности от средней плоскости ( $z = 0$ );  $\omega$  — объем атома.

При выводе формулы (2) было показано [5, 8], что развитие самоорганизующихся неровностей возможно, если направление градиента коэффициента поверхностной диффузии противоположно вектору внешней силы, т. е. величина  $\left( \frac{\partial D_s}{\partial \theta} \right) F$  имеет отрицательное значение. В противоположном случае действия внешней силы и силы, вызванной

для пленки давлением, складываются, что приводит к нивелированию (разглаживанию) поверхности. Развитие ступенчатой структуры на поверхности пленки германия на начальной стадии образования островков приводит к усилению структурной анизотропии [диффузия атомов преобладает вдоль фронта ступеней, т. е. по направлениям (110)]. Именно с этим фактором можно связать наблюдавшие авторами [12] образование протяженных  $Ge_{1-x}Si_x$  волнообразных островков на поверхности Si(100).

Вернемся к соотношению (2) и оценим величину  $\lambda$  минимально достижимого размера островков германия с учетом диффузионной кинетики. Беря минимальное значение  $D_s / (\partial D_s / \partial \theta) \approx 1$ ,  $\omega = 10^{-23}$  см<sup>3</sup>,  $\gamma = 10^{-2}$  Н/см [9] и силу  $F = 10^{-13}$  Н, получаем  $\lambda \approx 60$  нм, что достаточно хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемыми результатами. Из формулы (2) видно, что уменьшение размера островка возможно за счет увеличения силы  $F$  или подбора кристаллографической ориентации подложки (уменьшение коэффициента поверхностной диффузии атомов при увеличении ее анизотропии). Качественно влияние обоих факторов наблюдали авторы [12].

#### Список литературы

- Алферов Ж. И. // ФТП. 1998. Т. 32. № 1. С. 3.
- Леденцов Н. Н., Устинов В. М., Шукин В. А., Копьев П. С., Алферов Ж. И., Бимберг Д. // ФТП. 1998. Т. 32. № 4. С. 385.
- Пчеляков О. П., Болховитянин Ю. Б., Соколов Л. В., Никифоров А. И., Фойхтлендер Б. // Материалы совещания "Нанофотоника". Н. Новгород, 15–18 марта 1999. С. 15.
- Tersoff J. and Rump R. M. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 2782.
- Гегузин Я. Е., Кагановский Ю. С. Диффузионные процессы на поверхности кристалла. М.: Энергоатомиздат, 1984. 128 с.
- Марченко В. И., Паршин А. Я. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. Вып. 1(7). С. 257.
- Tersoff J., Phang Y. H., Zhang Zhenyu, Lagally M. G. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 2730.
- Закурдаев И. В., Шунпе Г. Н. Процессы массопереноса и изменения структуры поверхности кристаллов. Ч. 2. Вып. 11(1965). М.: ЦНИИ "Электроника", 1983. С. 64.
- Баранский П. И., Ключков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника: Справочник. Киев, 1975. 704 с.
- Закурдаев И. В. // Известия АН СССР. Серия физическая. 1976. Т. 40. № 8. С. 1554.
- Tokumoto H., Miki K., Morita Y., Sato T., Iwatsuki M., Suzuki M., Fukuda T. // Ultramicroscopy. 1992. V. 42–42. P. 816.
- Teichert C., Phang Y. H., Petekolas L. J., Bean J. C. and Lagally M. G. // Surface Diffusion: Atomistic and Collective Processes. NATO-ASI Series, Plenum Press, New York. 1997. P. 297.
- Закурдаев И. В., Садофеев С. Ю., Байзэр М. В. Исследование процесса самоорганизации упругонапряженной пленки германия на поверхности кремния // Материалы совещания "Зондовая микроскопия-2000" (28.02 – 02.03.2000, Нижний Новгород). С. 163–165.

# Страница РФФИ

*В этом номере мы продолжаем публикацию аннотационных отчетов, полученных в инициативных научных проектах в области математики, информатики, механики и поддержанных РФФИ по итогам конкурса 1997 г. (начало см. в № 1, 2001 г.). Данные по исполнителям проектов можно найти в "Информационном бюллетене РФФИ" № 5 за 1997 г.*

## АННОТАЦИОННЫЕ ОТЧЕТЫ ПО ТЕМАМ РФФИ

### Синергетическая теория и принципы построения самоорганизующихся биомеханических систем для исследования движений человека

Номер проекта: 97-01-00718-а

Год предоставления отчета: 1997

Разработана классификация существующих методов и средств идентификации биомеханических движений человека, в основу которой положена теория Н. А. Бернштейна о построении движений.

Разработана синергетическая концепция исследования поддержания вертикальной позы человеком с помощью методов компьютерной стабилографии. Предложены подходы по выявлению межуровневых взаимодействий. Сформулированы требования к конфигурации стабилографической системы, позволяющие изучать взаимодействие младших уровней (А и В).

Создано программно-методическое обеспечение, ориентированное на исследование межуровневых взаимодействий, а также на коррекцию, выработку и закрепление (тренаж) навыков поддержания вертикальной позы с учетом возрастных особенностей пациентов.

Проведен анализ кинематических схем существующих стабилографических платформ. Найдены подходы на базе синергетической теории управления к синтезу стабилонализатора как многосвязной управляемой платформы на качающемся основании для генерации многомерных тестовых воздействий.

По результатам экспериментальных исследований проведен анализ значимых составляющих основной и дополнительной погрешностей стабилографических измерений. Предложены методы снижения (компенсации) этих погрешностей.

Разработан и изготовлен экспериментальный образец исследовательского компьютерного стабилонализатора, позволяющего реализовать разработанную концепцию исследования вертикальной позы человека в положении стоя и сидя. Этот стабилонализатор обеспечивает синхронный съем и ввод в ПЭВМ как биомеханических, так и физиологических сигналов, в частности, фотоплетизмограммы, внешнего дыхания и интегральных миограмм по нескольким отведениям.

### Моделирование процесса деформирования, исследование прочности активных композитов, армированных волокнами и слоями из материалов со свойством памяти формы

Номер проекта: 97-01-00607-а

Год предоставления отчета: 1997

Разработана термодинамическая модель деформирования материалов с памятью формы (МПФ), получена система определяющих уравнений, описывающая явление ориентированного превращения, в том числе новые уравнения для описания фазовых превращений. Найдены соотношения, определяющие модули упругости МПФ в зависимости от параметра процесса. На основе введенных и обоснованных ранее критерии корректности прикладных вариантов теорий разработана математическая модель деформирования изгибаемых панелей из МПФ в рамках уточненной корректной теории изгиба, построен алгоритм численного решения задачи изгиба в несвязной постановке. Выполнены исследования контактных напряжений в задаче о контакте слоя из МПФ с ортотропным слоем и в задаче о кручении слоистого цилиндра с МПФ в несвязной постановке. Предложен вариант инкрементального метода численного решения связных нелинейных задач для МПФ. Создан алгоритм и программы тестовых вариантов реализации МКЭ на основе неполиномиальных конечных элементов, не приводящих к сдвиговому запиранию (на основе модели типа Тимошенко). Развит численный метод оптимизации на основе формул для быстрого автоматического дифференцирования.

### Математическое моделирование и анализ динамики неконтактного подвеса чувствительных элементов систем навигации и управления движением

Номер проекта: 97-01-00212-а

Год предоставления отчета: 1997

Теоретически решена задача создания полого ротора электростатического гироскопа (ЭСГ) с такой формой внешней поверхности, которая после раскрутки до рабочей угловой скорости приобретет форму, наиболее близкую к сферической, — процедура асферизации ротора. Найдено необходимое для обработки ротора равномерное давление, которое обеспечивает решение этой задачи. Найдено асимптотическое решение, позволяющее получить формулы для нахождения отклонений внешней поверхности ротора от идеальной сферы в рабочем режиме.

Обсуждены проблемы создания ЭСГ со сплошным ротором для бескарданных инерциальных систем ориентации, а также задачи, связанные с оценкой влияния различных источников погрешностей ЭСГ в условиях космического полета.

Исследовано влияние вязкоупругости материала на нутационные колебания ЭСГ. Найдена постоянная времени, характеризующая продолжительность демпфирования нутационных колебаний.

Выполнен статический анализ многоуровневой иерархической структуры элементов операционной среды компьютера и ее сопоставление с многоуровневой системой управления, отдельные уровни которой могут принимать самостоятельно решения по соответствующим задачам управления динамическими процессами.