

# МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МСТ

УДК 621.38.049.77:627.793.3

К. А. Воротилов\*, д-р техн. наук, проф.,  
Л. С. Коханчик\*\*, канд. физ.-мат. наук,А. С. Сигов\*, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
\*Московский государственный институтрадиотехники, электроники и автоматики  
(технический университет),\*\*Институт проблем проблем технологии  
микроэлектроники и особо чистых материалов  
РАН (п. Черноголовка, Московская обл.)

## СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ ТИТАНАТА БАРИЯ-СТРОНЦИЯ: МИКРОСТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

*Обсуждается влияние условий кристаллизации на микроструктуру и электрофизические свойства тонких сегнетоэлектрических пленок титаната бария-стронция  $\text{Ba}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{TiO}_3$  (ТБС). Исследовалась пленки толщиной 0,2 мкм и менее, сформированные на подложках  $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Ti}/\text{Pt}$  методом химического осаждения из растворов алкоголятов соответствующих металлов. Показано, что микроструктура и электрофизические свойства пленок ТБС в значительной степени определяются используемыми составами, способами их нанесения и температурой последующего отжига.*

### Введение

Увеличение объемов обрабатываемой информации в устройствах микроэлектроники стимулирует поиск новых физических сред. Интеграция в микрозелектронные технологии активных диэлектрических материалов, таких как сегнето-, пиро- и пьезоэлектрики, позволяет создать устройства на новых физических принципах, получившие название интегрированных сегнетоэлектрических устройств (высокоскоростные энергонезависимые сегнетоэлектрические ЗУ (СЭЗУ), запоминающие устройства с произвольной выборкой высокой степени интеграции (ЗУПВ), микроэлектромеханические системы (МЭМС), приемники ИК-изображения, устройства нелинейной оптики и др.) [1, 2]. Развитие данного направления в микроэлектронике требует решения комплекса проблем в области физики и технологии сегнетоэлектрических пленок, а также технологии производства ИС. Сегнетоэлектрики являются сложными трех-, четырех-

более компонентными оксидными соединениями с достаточно высокой температурой кристаллизации, в процессе формирования которых необходимо обеспечить стехиометрический, фазовый состав, необходимый размер кристаллитов, их ориентацию и качество границ раздела.

Одним из методов формирования сегнетоэлектрических слоев, интенсивно развивающихся в последние годы, является метод химического осаждения из растворов, позволяющий точно контролировать стехиометрию формируемого покрытия. Однако диэлектрические свойства конденсаторных структур определяются не только составом, но и кристаллической структурой и границами раздела с электродами, что, в свою очередь, во многом зависит от используемых химических растворов и условий кристаллизации пленок [3, 4].

Ниже обсуждается влияние условий кристаллизации на микроструктуру и электрофизические свойства пленок  $\text{Ba}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{TiO}_3$  (ТБС). Исследовалось влияние используемого пленкообразующего раствора, режима термообработки, а также способа нанесения слоев. Помимо этого проведены исследования влияния поверхности, на которой происходит кристаллизация пленок ТБС, на результирующие структурные и электрофизические свойства пленок.

### Методика эксперимента

Пленки  $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$  с  $x = 0.3$  и толщиной порядка 0,2 мкм и менее получены путем нанесения исходных пленкообразующих растворов алкоголятов соответствующих металлов, а также растворов алкоголятов, модифицированных 2-этанолексановой кислотой. Подробное описание технологии нанесения растворов представлено в работах [4, 5]. Схематически различие в способе получения пленок из исходных растворов алкоголятов металлов и из растворов алкоголятов металлов, модифицированных 2-этанолексановой кислотой, иллюстрируется на рис. 1. Растворы наносились на подложки  $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Ti}/\text{Pt}$ , высушивались и отжигались в диапазоне температур 500–900 °C. Изучены различные режимы термообработки: быстрый термический отжиг и изотермический отжиг продолжительностью 20 мин и 4 ч, а также различные способы нанесения слоев пленкообразующих растворов: послойная кристаллизация и кристаллизация всего объема с промежуточной сушкой каждого слоя.

Микроструктуру пленок (размер зерна и плотность его укладки, морфологию и общее качество поверхности) исследовали методом растровой



Рис. 1. Схема приготовления исходных растворов для получения пленок

электронной микроскопии (РЭМ) в режиме вторичных электронов при ускоряющем напряжении 25 кэВ (микроскоп фирмы JEOL JSM-840A) без нанесения поверхностного металлического покрытия для стока зарядов. Несмотря на достаточно высокие значения используемых ускоряющих напряжений, накопления значительного заряда на поверхности не наблюдалось, что связано с малой толщиной диэлектрических пленок, легко пробиваемых пучком электронов [6], и с наличием проводящего нижнего слоя платины. Для обеспечения хорошего стока заряда по платине образцы тщательно обмазывали с краев проводящей kleющей пастой.

Некоторые пленки с особенно мелким зерном были исследованы с помощью сканирующего туннельного микроскопа.

Диэлектрическую проницаемость и другие электрофизические параметры измеряли на конденсаторных структурах, образованных нанесенными верхними электродами из никеля и общим платиновым электродом.

Особое внимание было уделено исследованию микроструктуры и диэлектрических свойств пленок, сформированных при наличии тонкого (~30 нм) подслоя того же материала, имеющего различную степень кристалличности. Для этого на подложки Si/SiO<sub>2</sub>/Ti/Pt наносился тонкий подслой из раствора алкоголятов металлов, который подвергался отжигу при различных условиях (при  $T_a = 500, 600, 700$  °C, длительность 20 мин, а также при 700 °C 1 мин 45 с и 240 мин). После этого проводилось нанесение основного слоя, кристаллизация которого осуществлялась при одинаковой для всех образцов температуре (при  $T_a = 700$  °C 20 мин). Основной слой наносился из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой; толщина основного слоя составляла около 120 нм. Схема данного эксперимента представлена на рис. 2 (см. третью сторону обложки).

## Экспериментальные результаты и обсуждение

### 1. Влияние состава исходного раствора и температуры отжига на микроструктуру и электрофизические свойства пленок ТБС

Известно, что состав исходного пленкообразующего раствора и температура кристаллизации могут значительно влиять на характеристики пленок ТБС [4, 5]. В связи с этим в данной работе проведено сравнительное исследование формирующейся микроструктуры и электрофизических свойств пленок, полученных из пленкообразующих растворов алкоголятов соответствующих металлов, а также из растворов алкоголятов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой и отжигаемых при различных температурах.

На рис. 3 представлены результаты исследования структуры поверхности пленок, полученных из различных исходных компонентов. Многослойные пленки ТБС (пять нанесений с промежуточной сушкой каждого слоя), полученные из растворов алкоголятов при  $T = 600$  °C, содержат много участков расслоения между отдельными слоями (рис. 3, a). Трещины, отслоение от подложки и большое количество других механических повреждений говорят о наличии в этих пленках высоких механических напряжений, инициирующих дефекты кристаллической структуры. Оценить размер кристаллитов в пленках из алкоголятов металлов по РЭМ-изображениям не удавалось из-за высокой плотности укладки зерен между макродефектами. Эти пленки имели относительно низкую диэлектрическую проницаемость (около 100) со слабо выраженной нелинейностью от напряжения смещения (рис. 4.). Отжиг таких пленок при  $T_a > 600$  °C приводил к закорачиванию конденсаторных структур.

На рис. 3, б, в представлены РЭМ-изображения пленок ТБС, полученных из растворов второго типа. Видно, что при использовании растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, образуется пленка, более плотная, чем в случае исходных растворов чистых алкоголятов. Были изучены пленки из модифицированных составов, полученные двумя способами: нанесением двух слоев (температура промежуточной сушки 500 °C) с последующей термообработкой всего объема при  $T = 700$  °C в течение 20 мин (см. рис. 3, б) и нанесением двух слоев с кристаллизацией каждого слоя при 700 °C, 20 мин (см. рис. 3, в). В целом эти методики обеспечивают формирование достаточно плотных и однородных пленок с размером зерна порядка 80 нм, хотя наиболее крупные кристаллиты могли достигать размера 100 нм и более. При послойной кристаллизации (см. рис. 3, в) пленки обнаруживают несколько более крупный размер зерна, чем в случае кристаллизации всего объема

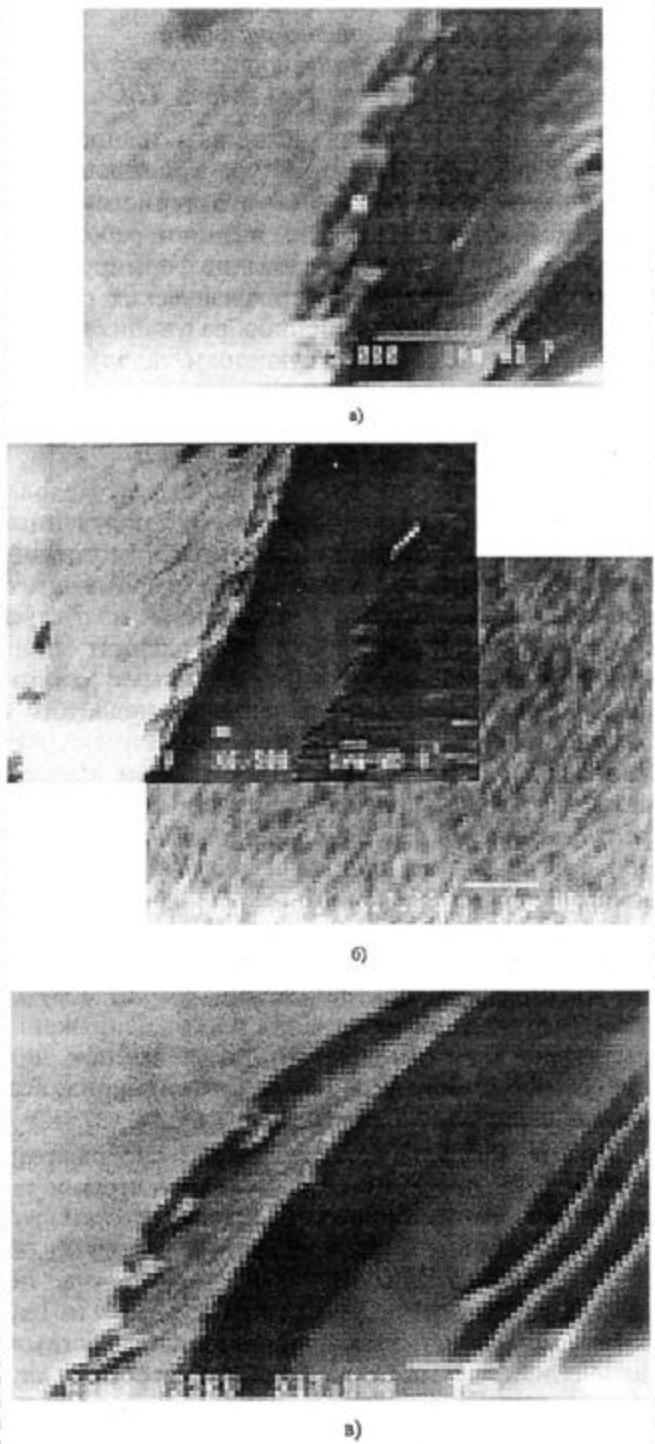


Рис. 3. РЭМ-изображения пленок ТБС:

*a* — пленка получена из растворов алкоголятов металлов (пять нанесений с промежуточной сушкой каждого слоя); *b* — пленка получена путем нанесения двух слоев из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой (температура промежуточной сушки 500 °С), с последующей термообработкой всего объема при  $T = 700$  °С 20 мин; *c* — пленка получена путем нанесения двух слоев из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, с кристаллизацией каждого слоя при 700 °С 20 мин

пленки (см. рис. 3, *c*). По-видимому, при послойной кристаллизации происходит увеличение размера кристаллитов за счет их роста по граням кристаллитов, образованных при кристаллизации первого слоя.

Использование сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) позволило определить, что кристаллизация пленок ТБС начинается при температурах 550—600 °С. На рис. 5 (см. третью сторону обложки) представлены результаты СТМ-исследований рельефа поверхности после отжигов при  $T = 550$  и 650 °С в течение 20 мин. Можно видеть, что формируемая пленка при 650 °С мелкокристаллическая, размер зерна укрупняется по сравнению с пленкой, отжигаемой при  $T = 550$  °С, а наиболее крупные зерна при 650 °С достигают размеров 40—50 нм. Рост размеров кристаллитов с увеличением температуры отжига является, по-видимому, основной причиной увеличения диэлектрической проницаемости этих пленок.

Данные электрофизических измерений представлены на рис. 6, 7 (см. третью сторону обложки) и рис. 8. Измерение диэлектрической проницаемости пленок, полученных послойной кристаллизацией из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, показало существенное возрастание диэлектрической проницаемости при увеличении температуры кристаллизации от значений ~100 (отжиг при 550 °С) до ~320 после отжига при 800 °С (см. рис. 6, *a*).

Очевидно, что несмотря на мелкое, плотное и увеличивающееся с ростом температуры отжига зерно, причиной плохого качества пленок, полученных из алкоголятов металлов, являются высокие механические напряжения, приводящие к расслоению отдельных слоев и пленки от подложки в целом. Это обусловлено жестко связанный структурой металло-кислородного каркаса, образуемого в результате реакции поликонденсации с участием алкоголятов, подвергнутых гидролизу в исходном

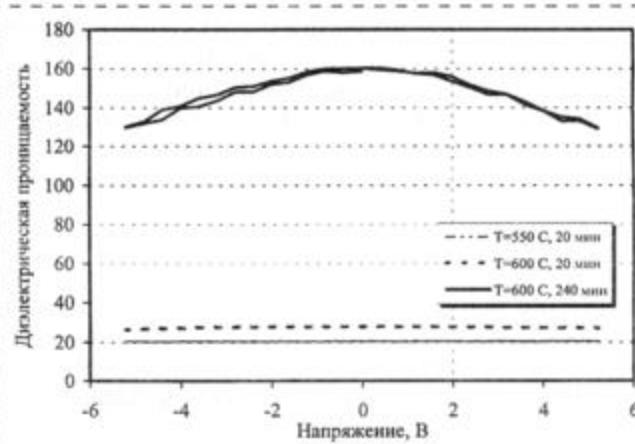


Рис. 4. Зависимость диэлектрической проницаемости от напряжения для пленок титаната бария-стронция, полученных при различной температуре из растворов алкоголятов металлов

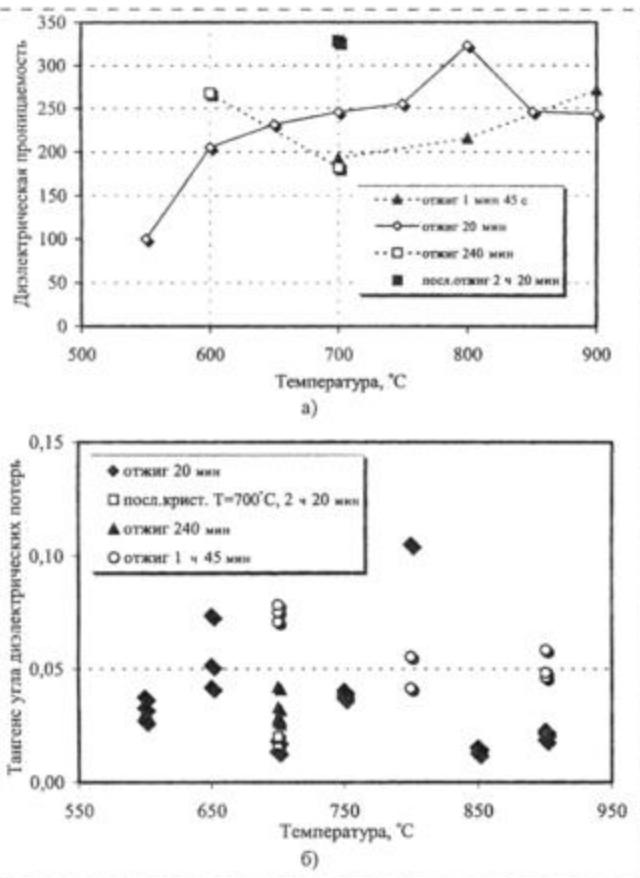


Рис. 8. Зависимость диэлектрической проницаемости (а) и тангенса угла диэлектрических потерь (б) от температуры отжига для пленок титаната бария-стронция, полученных при различной продолжительности отжига (быстрый термический отжиг, изотермический отжиг 20 мин, 240 мин), а также последовательности кристаллизации (послойный отжиг каждого из двух слоев)

растворе. В отличие от этого при модификации алкоголятами 2-этилгексановой кислотой образование металлокислородного каркаса происходит при более высоких температурах (более 300 °C) после пиrolитического разложения органической группы, что снижает механические напряжения в структуре пленок и обеспечивает условия роста кристаллитов в ненапряженной структуре [4, 5].

При сравнении микроструктуры видно, что размер зерна в пленках из модифицированных растворов примерно в 2 раза больше, чем в пленках из растворов чистых алкоголятами. Морфология поверхности, однородность и плотность этих пленок также значительно лучше качества, что в конечном итоге обеспечивает большие значения диэлектрической проницаемости пленок.

Известно, что с увеличением температуры отжига увеличивается движущая сила кристаллизации. Это приводит к укрупнению размера зерна кристаллитов и соответственно к улучшению диэлектрических характеристик. Однако увеличение  $T_a$  при использовании растворов алкоголятами без модификации 2-этилгексановой кислотой увеличивает механические напряжения, в результате по-

являются значительные макродефекты в пленке — трещины, вспученности, расслоения. Несмотря на некоторый рост зерна, большие утечки и закоротки приводят к невозможности использовать эти пленки в качестве конденсаторных структур. Сдвиг процессов формирования металлокислородного каркаса в область более высоких температур позволил улучшить диэлектрические качества пленок с модификацией 2-этилгексановой кислотой именно за счет снижения механических напряжений и беспрепятственного роста зерен кристаллитов при увеличении температуры кристаллизации.

Диэлектрическая проницаемость пленок ТБС существенно зависит как от толщины пленки, так и от размера зерна. Рост диэлектрической проницаемости с ростом размеров кристаллитов даже более существенен, чем с увеличением толщины всего слоя. Сравнение соотношения между размером зерна и диэлектрической проницаемостью в наших пленках, полученных при модификации раствора 2-этилгексановой кислотой, показывает хорошее соответствие с данными работы [7].

Электрофизические измерения (см. рис. 6, а, и 7) показывают, что метод послойной кристаллизации обеспечивает более высокие значения диэлектрической проницаемости по сравнению с объемной кристаллизацией пленок. Поскольку структурные параметры платины и пленок ТБС очень близки ( $a = 3,93 \text{ \AA}$  для ТБС и  $a = 3,923 \text{ \AA}$  для Pt) нам представляется, что это улучшение связано не только с устранением структурного несоответствия между подложкой и формирующейся кристаллической структурой пленки.

На рис. 6, б и 7 показано влияние продолжительности отжига на электрофизические свойства пленок. Быстрый термический отжиг в течение 1 мин 45 с приводит к формированию пленок со свойствами, сравнимыми с изотермическим отжигом, лишь при  $T_a = 800\text{--}900$  °C. Характерно, что пленки при этом имеют низкий коэффициент нелинейности и повышенный тангенс угла диэлектрических потерь (см. рис. 8, б). Однако уменьшение продолжительности отжига ведет к меньшему взаимодействию пленки с материалом подложки (пленки имеют больший показатель преломления, чем пленки, полученные при тех же температурах в условиях изотермического отжига).

Увеличение продолжительности отжига до 4 ч приводит к уменьшению значения диэлектрической проницаемости вследствие взаимодействия на границе раздела пленка—подложка (см. рис. 6, б, 7).

## 2. Влияние поверхности на процесс кристаллизации пленок ТБС

Для выяснения влияния степени кристалличности и однородности поверхности, используемой как подслой, на микроструктуру и электрофизическими свойства пленок ТБС мы использовали тонкие слои, сформированные из алкоголятами исход-

ных металлов, отожженные при разных температурах (см. рис. 2). Основная пленка наносилась из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой. Температура отжига основного слоя была одинаковой ( $700^{\circ}\text{C}$ , 20 мин), тогда как различная температура отжига подслоя позволяла менять степень его кристалличности.

На рис. 9, *a*—*g* (см. четвертую сторону обложки) представлены РЭМ-изображения изломов и плоской поверхности пленок ТБС, полученных с использованием подслоев различной степени кристалличности. На вставках показана структура подслоя до нанесения основного слоя. Электрофизические свойства пленок данной серии показаны на рис. 10.

При температуре отжига подслоя  $T_a = 500^{\circ}\text{C}$  подслой не кристаллизуется, пленка характеризуется высокой однородностью и плотностью (см. рис. 9, *a*). Основная пленка получается также однородной, плотной с гладкой поверхностью и с выраженной кристаллической структурой (средний размер зерна порядка 80 нм). Пленка, полученная в данных условиях, обладала наилучшими электрофизическими свойствами в этой экспериментальной серии (см. рис. 10).

При отжиге тонкого подслоя при  $T_a = 600^{\circ}\text{C}$  начиналась его кристаллизация. На РЭМ-изображении отчетливо просматриваются кристаллиты. Однако на вставках к рис. 9, *b* при небольшом РЭМ-увеличении видны крупные области, отличающиеся по эмиссии вторичных электронов, что, возможно, связано с образованием крупных участков из разных фаз: первовскитной и метастабильной промежуточной фазы, которая может формироваться из-за недостаточности движущей силы кристаллизации в тонких пленках. Формирование метастабильной фазы особенно характерно для тонких пленок ТБС при  $500$ — $600^{\circ}\text{C}$  [8]. Мелкие поры, так же как и составные неоднородности, могут существенно влиять на выход из образца вторичных электронов.

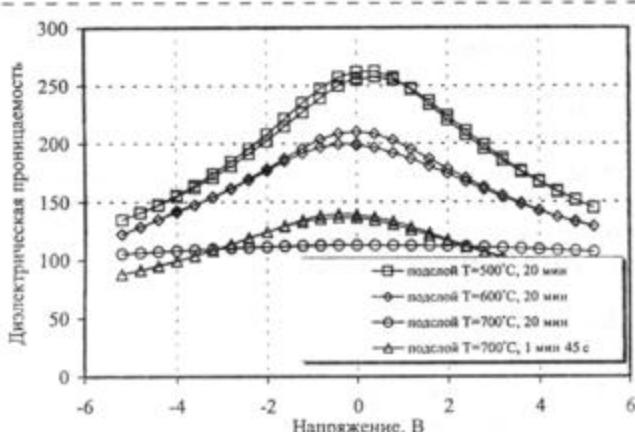


Рис. 10. Электрофизические свойства пленок ТБС, полученных с использованием подслоев различной степени кристалличности. Кривые *a*—*g* соответствуют условиям кристаллизации рис. 9

В результате, сформированная зеренная структура более мелкая по сравнению с предыдущей пленкой, общая морфология поверхности несколько хуже, излом — более рыхлый. Значение диэлектрической проницаемости и коэффициент нелинейности для пленок, полученных на таких структурно-неоднородных подслоях, ниже, чем в пленке, сформированной на полностью однородном аморфном подслое (см. рис. 9, *a*, *b*).

Дальнейшее увеличение температуры отжига тонкого подслоя до  $T_a = 700^{\circ}\text{C}$  приводит к образованию подслоя хаотически неоднородного по контрасту изображения. Поверхность подслоя рельефна, на ней много мелких бугорков и мелких, по-видимому, составных, неоднородностей. Основная пленка также существенно неоднородна по контрасту: с рельефной поверхностью (мелкокристаллическая матрица с выпуклыми включениями отдельных кристаллитов или агломератов, достигающих ~1 мкм в диаметре, см. рис. 9, *c*). Это приводит к резкому снижению значения и полному исчезновению нелинейности диэлектрической проницаемости от напряжения (см. рис. 10). Уменьшение длительности отжига подслоя до 1 мин 45 с существенно не улучшило морфологию подслоя. Рельефность поверхности основной пленки и рыхлость при изломе свидетельствуют об ухудшении качества микроструктуры этой пленки, по сравнению с пленкой на рис. 9, *a*. Нелинейность диэлектрической проницаемости в этом случае сохранилась, но ее значение оставалось невысоким (см. рис. 10).

Таким образом, увеличение температуры отжига подслоя приводит к ухудшению микроструктурных характеристик основной пленки ТБС, возникновению рыхлости при изломе, рельефности поверхности, наличию неоднородных по составу включений, мелкокристаллическости. В результате, с ростом температуры ухудшаются электрофизические качества пленок: уменьшаются диэлектрическая проницаемость и нелинейность от напряжения.

Видимо усугубляющаяся мелкокристаллическость связана с ростом числа центров кристаллизации на поверхности подслоя. В результате, происходит уменьшение среднего размера кристаллитов в основной пленке при неоднородном их распределении. Напротив, если лимитирующей стадией при формировании основной пленки являлся процесс образования центров кристаллизации, размер сформированных кристаллитов увеличивался, и пленки обнаруживали более выраженные диэлектрические качества.

Ухудшение морфологии поверхности и снижение общей плотности пленок на подслоях, полученных при более высоких температурах отжига, возможно также связано с увеличением влияния диффузионных и окислительных процессов в системе металлизации и ТБС на результирующую структуру подслоя [9, 10].

## Заключение

Показано, что микроструктура и электрофизические свойства пленок ТБС, полученных методом химического осаждения из растворов на подложки  $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Ti}/\text{Pt}$ , в значительной степени определяются природой пленкообразующих trimеталлических комплексов и условиями их кристаллизации.

При использовании растворов алкоголятов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, формируемые пленки обладают более совершенной ненапряженной кристаллической структурой, чем при использовании растворов чистых алкоголятов, что связано с разными условиями формирования метал-кислородных связей в этих растворах. Пленки с более плотной зернистой структурой и более крупными размерами кристаллитов, без макрофотографий обладают значительно более высокими электрофизическими свойствами.

Послойная кристаллизация слоев при формировании пленок ТБС из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, приводит к более высокому микроструктурному совершенству, большим размерам зерна и большим значениям диэлектрической проницаемости пленок по сравнению с пленками, сформированными одноэтапной кристаллизацией.

Показано, что число центров кристаллизации на поверхности подложки также оказывает существенное влияние на свойства формируемых пленок. По мере уменьшения степени кристалличности подслоя (т. е. уменьшения числа центров кристаллизации на границе раздела) размер кристаллитов в пленке ТБС увеличивается и пленки обнаруживают более выраженные диэлектрические свойства.

*Исследования выполнены при частичной поддержке по грантам NWO 1604–1999, INTAS 75-2002, CRDF и Министерства образования РФ VZ-010-0.*

### Список литературы

1. Setter N., Waser R. Electroceramic materials // Acta Materialia. 2000. V. 48. P. 151–178.
2. Petrovsky V. I., Sigov A. S., Vorotilov K. A. Microelectronic applications of ferroelectric films // Integrated Ferroelectrics. 1993. V. 3. P. 59–68.
3. Vorotilov K. A., Yanovskaya M. I., Turevskaya E. P., Sigov A. S. Sol-gel derived ferroelectric thin films: avenues for control of microstructural and electric properties // J. Sol-Gel Science and Technology. 1999. V. 16. P. 109–118.
4. Vasiljev V. A., Vorotilov K. A., Yanovskaya M. I., Solovjeva L. I., Sigov A. S. // J. Sol-Gel Science and Technology. 1998. V. 13. P. 877.
5. Яновская М. И., Соловьев Л. И., Васильев В. А., Воротилов К. А., Сигов А. С., Медовой А. И. // Труды III международной конференции "Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применения". Александров, 1998. Т. 2. С. 452.
6. Volkov V. T., Kokhanchik L. S., Nosenko S. V., Matveev V. N. // Microelectronic Engineering. 1995. V. 29. P. 305.
7. Horikawa T., Mikami N., Makita T. et al. // Jpn. J. Appl. Phys. 1993. V. 32. P. 4126.
8. Noh D. Y., Lee H. H., Kang T. S., Je J. H. // Appl. Phys. Lett., 1998. V. 72. P. 2823.
9. Paek S., Won J., Lee K., Choi J., Park C. // Jpn. J. Appl. Phys. 1996. V. 35. P. 5757.
10. Жигалина О. М., Бурнистрова П. В., Васильев А. Л., Роддатис В. В., Воротилов К. А. // Известия РАН. Сер. физ. 2001. Т. 65. № 9. С. 1272.

УДК 539.219.3

**В. С. Аврутин, канд. физ.-мат. наук,  
М. Ю. Барабаненков, д-р физ.-мат. наук,  
А. Ф. Вяткин, д-р физ.-мат. наук,  
Н. Ф. Изюмская, канд. физ.-мат. наук,  
Н. Н. Лойко\*, канд. физ.-мат. наук,  
А. Н. Пустовит, канд. физ.-мат. наук,  
Институт проблем технологий микроэлектроники  
и особо чистых материалов РАН  
(п. Черноголовка, Московская обл.),  
\*Физический институт им П. Н. Лебедева**

## ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ СУРЬМЫ В ПСЕВДОМОРФНЫХ $\text{Si}/\text{SiGe}/\text{Si}(Sb)$ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ, ОТОЖЖЕННЫХ В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ\*

*Исследовано перераспределение Sb в трехслойной  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(Sb)$  структуре с напряженным слоем  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  при отжигах в различных атмосферах. Найденная энергия активации диффузии Sb в  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  оказалась значительно выше при отжиге в водороде, чем при отжиге в вакууме. Замедление диффузии Sb при отжиге в водороде объясняется снижением концентрации вакансий в материале, вызванным уменьшением потенциального барьера для аннигиляции пар Френкеля в присутствии водорода в решетке (что способствует ускоренному отжигу вакансий) и/или подавлением поверхностной генерации вакансий.*

### Введение

Известно, что термическая стабильность химических профилей является важным фактором в изготовлении приборов на основе гетероструктур SiGe/Si [1, 2]. Было показано [2], что диффузия даже в нанометровом масштабе может оказывать значительное влияние на их параметры. В связи с этим в последнее время большое внимание уделяется изучению диффузионных процессов в гетероструктурах SiGe/Si, в частности, диффузии сурьмы — важнейшей примеси *n*-типа, используемой в молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Недавно было продемонстрировано [3], что присутствие неравновесных ростовых точечных дефектов, а именно вакансий, оказывает большое влияние на коэффициенты диффузии Sb, которая диффундирует в SiGe по вакансационному механизму. В напряженных слоях  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0,1$  и  $0,2$ ) [4] и псевдоморфных гетероструктурах  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(Sb)$  [5, 6] наблюдалась ускоренная диффузия Sb. Значительное замедление диффузии Sb отмечалось в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  гетероструктурах ( $x = 0,1$  и  $0,2$ ), подвергнутых внедрению межузельных атомов в процессе окисления

\*Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 00-02-18039.

## Заключение

Показано, что микроструктура и электрофизические свойства пленок ТБС, полученных методом химического осаждения из растворов на подложки  $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Ti}/\text{Pt}$ , в значительной степени определяются природой пленкообразующих trimеталлических комплексов и условиями их кристаллизации.

При использовании растворов алкоголятов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, формируемые пленки обладают более совершенной ненапряженной кристаллической структурой, чем при использовании растворов чистых алкоголятов, что связано с разными условиями формирования металл-кислородных связей в этих растворах. Пленки с более плотной зернистой структурой и более крупными размерами кристаллитов, без макрофотографий обладают значительно более высокими электрофизическими свойствами.

Послойная кристаллизация слоев при формировании пленок ТБС из растворов, модифицированных 2-этилгексановой кислотой, приводит к более высокому микроструктурному совершенству, большим размерам зерна и большим значениям диэлектрической проницаемости пленок по сравнению с пленками, сформированными одноэтапной кристаллизацией.

Показано, что число центров кристаллизации на поверхности подложки также оказывает существенное влияние на свойства формируемых пленок. По мере уменьшения степени кристалличности подслоя (т. е. уменьшения числа центров кристаллизации на границе раздела) размер кристаллитов в пленке ТБС увеличивается и пленки обнаруживают более выраженные диэлектрические свойства.

*Исследования выполнены при частичной поддержке по грантам NWO 1604–1999, INTAS 75-2002, CRDF и Министерства образования РФ VZ-010-0.*

### Список литературы

1. Setter N., Waser R. Electroceramic materials // Acta Materialia. 2000. V. 48. P. 151–178.
2. Petrovsky V. I., Sigov A. S., Vorotilov K. A. Microelectronic applications of ferroelectric films // Integrated Ferroelectrics. 1993. V. 3. P. 59–68.
3. Vorotilov K. A., Yanovskaya M. I., Turevskaya E. P., Sigov A. S. Sol-gel derived ferroelectric thin films: avenues for control of microstructural and electric properties // J. Sol-Gel Science and Technology. 1999. V. 16. P. 109–118.
4. Vasiljev V. A., Vorotilov K. A., Yanovskaya M. I., Solovjeva L. I., Sigov A. S. // J. Sol-Gel Science and Technology. 1998. V. 13. P. 877.
5. Яновская М. И., Соловьев Л. И., Васильев В. А., Воротилов К. А., Сигов А. С., Медовой А. И. // Труды III международной конференции "Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применения". Александров, 1998. Т. 2. С. 452.
6. Volkov V. T., Kokhanchik L. S., Nosenko S. V., Matveev V. N. // Microelectronic Engineering. 1995. V. 29. P. 305.
7. Horikawa T., Mikami N., Makita T. et al. // Jpn. J. Appl. Phys. 1993. V. 32. P. 4126.
8. Noh D. Y., Lee H. H., Kang T. S., Je J. H. // Appl. Phys. Lett., 1998. V. 72. P. 2823.
9. Paek S., Won J., Lee K., Choi J., Park C. // Jpn. J. Appl. Phys. 1996. V. 35. P. 5757.
10. Жигалина О. М., Бурнистрова П. В., Васильев А. Л., Роддатис В. В., Воротилов К. А. // Известия РАН. Сер. физ. 2001. Т. 65. № 9. С. 1272.

УДК 539.219.3

В. С. Аврутин, канд. физ.-мат. наук,  
М. Ю. Барабаненков, д-р физ.-мат. наук,  
А. Ф. Вяткин, д-р физ.-мат. наук,  
Н. Ф. Изюмская, канд. физ.-мат. наук,  
Н. Н. Лойко\*, канд. физ.-мат. наук,  
А. Н. Пустовит, канд. физ.-мат. наук,  
Институт проблем технологий микроэлектроники  
и особо чистых материалов РАН  
(п. Черноголовка, Московская обл.),  
\*Физический институт им П. Н. Лебедева

## ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ СУРЬМЫ В ПСЕВДОМОРФНЫХ $\text{Si}/\text{SiGe}/\text{Si}(\text{Sb})$ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ, ОТОЖЖЕННЫХ В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ\*

*Исследовано перераспределение Sb в трехслойной  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(\text{Sb})$  структуре с напряженным слоем  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  при отжигах в различных атмосферах. Найденная энергия активации диффузии Sb в  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  оказалась значительно выше при отжиге в водороде, чем при отжиге в вакууме. Замедление диффузии Sb при отжиге в водороде объясняется снижением концентрации вакансий в материале, вызванным уменьшением потенциального барьера для аннигиляции пар Френкеля в присутствии водорода в решетке (что способствует ускоренному отжигу вакансий) и/или подавлением поверхностной генерации вакансий.*

### Введение

Известно, что термическая стабильность химических профилей является важным фактором в изготовлении приборов на основе гетероструктур SiGe/Si [1, 2]. Было показано [2], что диффузия даже в нанометровом масштабе может оказывать значительное влияние на их параметры. В связи с этим в последнее время большое внимание уделяется изучению диффузионных процессов в гетероструктурах SiGe/Si, в частности, диффузии сурьмы — важнейшей примеси *n*-типа, используемой в молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Недавно было продемонстрировано [3], что присутствие неравновесных ростовых точечных дефектов, а именно вакансий, оказывает большое влияние на коэффициенты диффузии Sb, которая диффундирует в SiGe по вакансационному механизму. В напряженных слоях  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0,1$  и  $0,2$ ) [4] и псевдоморфных гетероструктурах  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(\text{Sb})$  [5, 6] наблюдалась ускоренная диффузия Sb. Значительное замедление диффузии Sb отмечалось в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  гетероструктурах ( $x = 0,1$  и  $0,2$ ), подвергнутых внедрению межузельных атомов в процессе окисления

\*Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 00-02-18039.

покрывающего слоя Si [7]. Приведенные данные указывают на возможность контролировать диффузию Sb в гетероструктурах SiGe/Si путем подбора условий термообработки. В данной статье описано влияние условий отжига на диффузию Sb в псевдоморфной гетероструктуре  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(\text{Sb})$ , выращенной методом МЛЭ.

### Изготовление образцов и методы исследования

Гетероструктура  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(\text{Sb})$  (рис. 1) была выращена на подложке  $\text{Si}(100)$  КДБ-12 методом МЛЭ. Сначала осаждался буферный слой нелегированного Si, затем слой Si (150 нм), легированный Sb до  $6 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , выращивался при температуре подложки 400 °C. После этого рост прерывался и температура увеличивалась до 750 °C на 2–3 мин для того, чтобы уменьшить поверхностную сегрегацию Sb (как видно на рис. 2, такой отжиг недостаточен для полного устранения поверхностного пика Sb, однако увеличение температуры или времени отжига может привести к диффузионному уширению профиля Sb). Затем температура подложки снижалась до 600 °C и выращивались псевдоморфный нелегированный слой  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  толщиной 30 нм и покровный слой Si толщиной 60 нм. Скорость роста составляла около 0,1 нм/с. Толщины слоев были подобраны таким образом, чтобы избежать релаксации упругих напряжений в гетероструктуре в ходе последующих отжигов. После этого пластина была разрезана на образцы размерами 1 × 1 см.

Были применены три способа отжига полученных образцов:

- термический отжиг в вакуумной печи ( $10^{-6}$  мм рт. ст.);
- термический отжиг в водороде при атмосферном давлении;
- нагрев излучением в водороде при атмосферном давлении.

В последнем случае в качестве источника излучения использовалась Хе-лампа мощностью 3 кВт ( $\lambda = 0,28\text{--}1,00$  мкм), при этом 9 % мощности приходилось на длины волн 0,28–0,40 мкм, 35 % — на 0,40–0,80 мкм и 24 % — на 0,80–1,00 мкм. Образ-

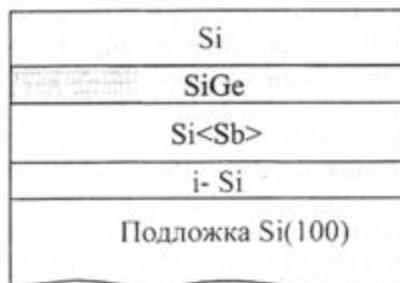


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой структуры  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(\text{Sb})/\text{Si}(001)$

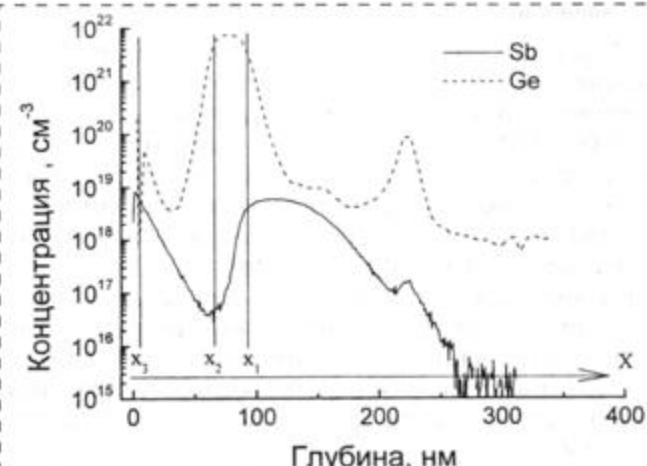


Рис. 2. ВИМС-профили распределения Sb по глубине в неотожженной гетероструктуре  $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}(\text{Sb})/\text{Si}(001)$ , границы слоев обозначены  $x_1$ ,  $x_2$  и  $x_3$

цы отжигались при различных температурах в диапазоне от 860 до 960 °C. Верхняя граница температурного интервала выбиралась из условия стабильности  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  слоя таким образом, чтобы уширение профиля Ge было незначительно, а нижняя была выбрана так, чтобы получить заметные изменения в распределении Sb. Времена отжига составляли от 3 до 180 мин (в зависимости от температуры). Точность определения температуры составляла  $\pm 2$  °C во всем используемом температурном интервале. Упругие напряжения и концентрация Ge в слое определялись методом двухкристальной рентгеновской дифракции. Дефектное травление и исследование полученной гетероструктуры под микроскопом с приставкой Номарского подтвердили отсутствие дислокаций в эпитаксиальных слоях.

Профили распределения Sb и Ge по глубине изучались методом вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) на микроанализаторе Cameca IMS-4f. При одновременном измерении профилей Sb и Ge использовался первичный пучок ионов  $\text{O}_2^+$  с энергией 5,5 кэВ, а регистрировались ионы  $^{70}\text{Ge}^+$  и  $^{123}\text{Sb}^+$ . Затем для более точного расчета эффективного коэффициента диффузии профиль распределения сурьмы снимался отдельно с большей чувствительностью с использованием первичного пучка ионов  $\text{Cs}^+$  с энергией 12 кэВ, а анализировались вторичные ионы  $^{28}\text{Si}^{121}\text{Sb}^-$ . Чтобы разделить вторичные ионы  $^{28}\text{Si}^{121}\text{Sb}^-$  и фон  $^{73}\text{Ge}^{76}\text{Ge}^-$ , использовалось разрешение по массе 4200. В обоих случаях первичный пучок сканировался по площади  $250 \times 250$  мкм, а вторичные ионы собирались с центральной части этой площадки размером  $50 \times 50$  мкм. Разрешение по глубине на переднем крае профиля был не хуже, чем 1,4 нм для Sb и 3,8 нм

для Ge. Для определения концентрации Sb из данных ВИМС использовался эталон Si(Sb), предварительно откалиброванный путем измерения сопротивления. Калибровка ВИМС профилей по глубине проводилась с помощью измерения глубин кратеров на профилометре Taylor-Hobson Talystep.

## Результаты и обсуждение

На рис. 2 показаны распределения Ge и Sb по глубине в неотожженной структуре, полученные методом ВИМС. Как уже упоминалось, пик Sb на поверхности образца вызван поверхностной сегрегацией Sb во время роста. ВИМС-профиль Sb, измеренный после отжига при температуре 900 °C в течение 15 мин в вакууме, показан на рис. 3. На рисунке видно, что отжиг привел к заметному перераспределению Sb и ее накоплению в слое Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub>. Поверхностный пик Sb уменьшился при отжиге из-за ее испарения. При выбранных условиях отжига (как в вакууме, так и в водороде) профиль Ge оставался практически неизменным.

Для определения коэффициента диффузии Sb в SiGe из данных ВИМС была разработана математическая модель, описывающая перераспределение Sb в многослойной структуре с частично прозрачными границами раздела [5]. Запишем уравнения диффузии для моделирования перераспределения Sb в слоистой структуре, состоящей из полубесконечного слоя ( $i = 1$ ,  $x \geq x_1$ , где  $x$  — пространственная координата, начало координат находится на внешней поверхности структуры, см. рис. 2) и двух конечных слоев ( $i = 2$  для  $x_2 \leq x \leq x_1$  и  $i = 3$  для  $x_3 = 0 \leq x \leq x_2$ , см. рис. 2). Исходное распределение Sb задается уравнением  $C_i(x, t=0) = C_j(x)$ . Здесь  $t$  — время отжига, а  $i$  —

номер слоя. Изменение исходных профилей  $C_i(x, t)$  со временем описывается уравнениями

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} J_i(x, t) = \frac{D_i}{2} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}; \quad J_i(x, t) = -D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} J_i(x_i, t) &= J_{i+1}(x_i, t), \\ J_3(x_3 = 0, t) &= v C_3(x_3 = 0, t), \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $D_i$  — удвоенный коэффициент диффузии Sb в  $i$ -м слое. Прозрачность поверхности гетероструктуры ( $x_3 = 0$ ) характеризуется коэффициентом  $v$ , имеющим размерность скорости. На бесконечности мы полагаем естественное условие  $C_1(\infty, t) = 0$ . Введем безразмерные переменные  $\eta = x/L$ ,  $\xi = D_{av}t/L^2$  и  $y_i = C_i/C_{max}^0$ , где  $L$  — типичный масштаб диффузионной задачи;  $3D_{av} = D_1 + D_2 + D_3$ ;  $C_{max}^0$  — максимальная концентрация примеси в Si(Sb) слое перед отжигом. Тогда решение уравнений диффузии может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \check{y}_i(\eta, \xi) &= \sum_{j=1}^3 \frac{1}{l_j \sqrt{\pi}} \int_{\eta_j}^{\eta_{j-1}} d\gamma \check{y}_j^0 \left\{ \exp(-(\varepsilon_{ji}^+)^2) + \right. \\ &\quad \left. + \exp(-(\varepsilon_{ji}^-)^2) - k l_3 \sqrt{\pi} \exp[(k l_3/2)^2 + k l_3 \varepsilon_{ji}^+] \times \right. \\ &\quad \left. \times \operatorname{erf}(\varepsilon_{ji}^+ + k l_3/2) \right\}, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\langle D_i \rangle = D_1/D_{av}$ ,  $D_{ij}^2 = \langle D_i \rangle / \langle D_j \rangle$ ,  $\check{y}_i = y_i (\langle D_i \rangle)^{1/2}$ ,  $k = L v / D_3$ ,  $l_i^2 = 4 \langle D_i \rangle \xi$  и  $\eta_0 = \infty$ . Переменные  $\varepsilon_{\pm j i}$  характеризуют вклад  $j$ -го слоя в решение для  $i$ -го слоя. Например, переменные  $\varepsilon_{\pm 1/2}$  (слой SiGe) описываются уравнениями

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12}^+ l_1 &= \gamma \eta_1 + D_{12}(\eta_1 + \eta - 2\eta_2) + 2D_{13}\eta_2, \\ \varepsilon_{12}^- l_1 &= \gamma \eta_1 + D_{12}(\eta_1 - \eta); \\ \varepsilon_{22}^+ l_2 &= \gamma + \eta/2 + 2D_{23}\eta_2, \quad \varepsilon_{22}^- l_2 = \gamma - \eta, \\ \varepsilon_{32}^\pm l_2 &= \pm \gamma + \eta_2 + D_{32}(\eta - \eta_2). \end{aligned} \quad (4)$$

Эти выражения справедливы в областях  $\check{y}_i = \check{y}_i(\eta_i \leq \eta \leq \eta_{i-1}, \xi)$ , где  $\eta_0 = \infty$ . Из подгонки расчетных профилей под экспериментальные распределения примеси по глубине были определены эффективные коэффициенты диффузии Sb в слое Si и напряженном слое Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub>.

На рис. 4 приведен ВИМС-профиль Sb в образце, подвергнутом фотонному отжигу в водороде при температуре 900 °C в течение 180 мин. Видно,

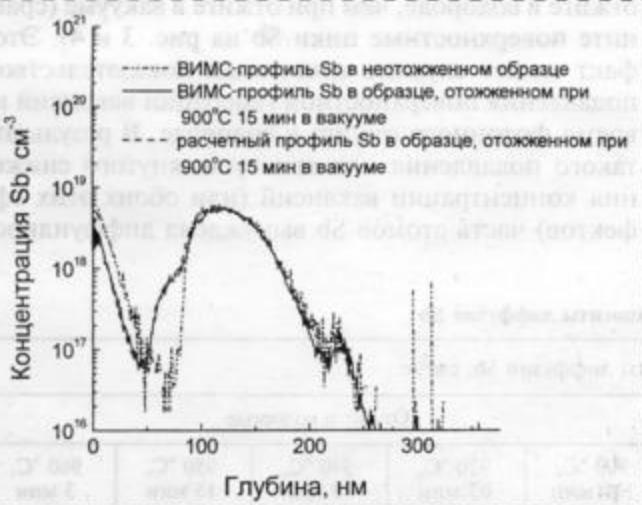


Рис. 3. ВИМС-профили распределения Sb по глубине в гетероструктуре Si/Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub>/Si(Sb)/Si(001), измеренные до и после отжига в вакууме при 900 °C в течение 15 мин. Показан также расчетный профиль в отожженном образце

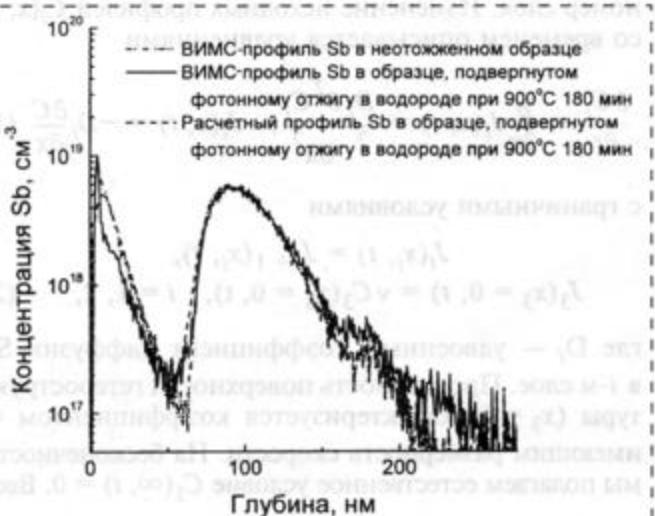


Рис. 4. ВИМС-профили распределения Sb по глубине в гетероструктуре Si/Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub>/Si(Sb)/Si(001), измеренные до и после фотонного отжига в водороде при 900 °C в течение 180 мин. Показан также расчетный профиль в отожженном образце

что в отличие от отжига в вакууме, отжиг в водороде приводит лишь к незначительному изменению профиля примеси (сравните с рис. 3). В таблице даны условия отжигов и рассчитанные коэффициенты диффузии Sb в Si и напряженном Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub>. По данным таблицы были построены аппениусовские зависимости коэффициента диффузии Sb в образцах, отожженных в вакууме и водороде (рис. 5). Для отжига в вакууме была найдена энергия активации диффузии Sb в напряженном Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub>:  $E_a = (3,9 \pm 0,1)$  эВ. Эта величина хорошо согласуется с литературными данными для энергии активации диффузии Sb в Si<sub>0,8</sub>Ge<sub>0,2</sub> и Si<sub>0,9</sub>Ge<sub>0,1</sub> [4] и Si [8]. В случае фотонного отжига в водороде в диапазоне температур от 900 до 940 °C коэффициенты диффузии Sb значительно ниже, чем при отжиге в вакууме (см. таблицу и рис. 5). Термический отжиг в атмосфере водорода приводит практически к тем же результатам, что и фотонный отжиг. Следовательно, не облучение ультрафиолетовым светом, а именно водород ответственен за замедление диффузии сурьмы. Можно

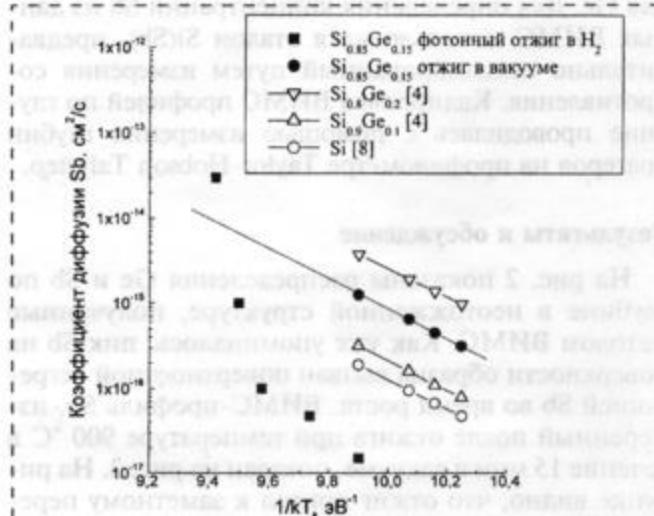


Рис. 5. Зависимость коэффициента диффузии Sb в напряженном Si<sub>0,85</sub>Ge<sub>0,15</sub> от обратной температуры (коэффициенты диффузии Sb, рассчитанные в данной работе, приведены также в таблице)

предположить, что коэффициент диффузии Sb уменьшается вследствие более низкой концентрации вакансий в образцах, отожженных в водороде. Как было показано в [9], водород, растворенный в решетке кремния, значительно уменьшает потенциальный барьер для аннигиляции пар Френкеля и, следовательно, способствует отжигу вакансий. Таким образом, при отжиге в атмосфере водорода последний, растворяясь в кремнии, понижает концентрацию вакансий. Для прояснения механизма этого эффекта необходимы дальнейшие исследования.

Следует также отметить, что Sb испаряется с поверхности образца гораздо менее интенсивно при отжиге в водороде, чем при отжиге в вакууме (сравните поверхностные пики Sb на рис. 3 и 4). Этот факт может служить косвенным доказательством подавления поверхностной генерации вакансий во время фотонного отжига в водороде. В результате такого подавления или вышеупомянутого снижения концентрации вакансий (или обоих этих эффектов) часть атомов Sb вынуждена дифундиро-

#### Условия отжига и коэффициенты диффузии Sb

Диффузия в	Коэффициенты диффузии Sb, см <sup>2</sup> /с									
	Отжиг в вакууме				Отжиг в водороде					
	860 °C, 180 мин	870 °C, 90 мин	880 °C, 90 мин	900 °C, 15 мин	900 °C, 180 мин	920 °C, 63 мин	940 °C, 33 мин	950 °C, 15 мин	960 °C, 3 мин	
Si	$2,4 \cdot 10^{-17}$	$3,4 \cdot 10^{-17}$	$4,8 \cdot 10^{-17}$	$9,5 \cdot 10^{-17}$	—	$2,4 \cdot 10^{-17}$	$3,4 \cdot 10^{-17}$	—	—	
Si <sub>0,85</sub> Ge <sub>0,15</sub>	$3,2 \cdot 10^{-16}$	$4,5 \cdot 10^{-16}$	$6,5 \cdot 10^{-16}$	$1,3 \cdot 10^{-15}$	$1,5 \cdot 10^{-17}$	$4,7 \cdot 10^{-17}$	$1 \cdot 10^{-16}$	$1 \cdot 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-14}$	

вать по механизму, отличному от вакансационного. Более высокая энергия активации диффузии Sb при отжиге в водороде подтверждает это предположение. Необходимо также отметить, что при отжиге в водороде не наблюдается единой энергии активации во всем исследованном температурном интервале (рис. 5). В диапазоне температур от 900 до 940 °C  $E_a = (5,8 \pm 0,1)$  эВ, что значительно превышает энергию активации диффузии Sb в образцах, отожженных в вакууме. При температурах, больших 940 °C,  $E_a$  значительно выше. Этот результат нельзя объяснить увеличением вклада ошибок во времени и/или температуры отжига. Можно предположить, что при высоких температурах (950 и 960 °C) на диффузию Sb оказывает значительное влияние какой-то дополнительный процесс, например термическое травление поверхности.

Следует также отметить, что отжиг в вакууме при температурах выше 900 °C приводил к сильно размытию профиля распределения германия, чего не наблюдалось при отжиге в водороде. Это позволяет нам сделать вывод, что диффузия германия также ускоряется за счет потока вакансий, образующихся на внешней поверхности образца при отжиге в вакууме. Рассчитанные коэффициенты диффузии Sb в Si и  $Si_{0,85}Ge_{0,15}$  приведены в таблице. Из таблицы видно, что коэффициент диффузии в напряженном слое  $Si_{0,85}Ge_{0,15}$  заметно выше, чем в Si при любых условиях отжига. При отжиге в водороде коэффициенты диффузии значительно ниже, чем при отжиге в вакууме. Таким образом, можно сделать вывод, что при отжиге в вакууме поток вакансий с внешней поверхности эпитаксиальной структуры приводит к существенному ускорению диффузии Sb, а также Ge.

\*\*\*

Исследовано перераспределение сурьмы в трехслойной  $Si/Si_{0,85}Ge_{0,15}/Si(Sb)$  структуре с напряженным слоем  $Si_{0,85}Ge_{0,15}$  при отжигах в различных условиях: термический отжиг в вакуумной печи, термический отжиг в водороде при атмосферном давлении и нагрев излучением в водороде. Разработана математическая модель, описывающая диффузию в многослойной системе с учетом влияния границ раздела. Из подгонки расчетных профилей под экспериментальные распределения были определены эффективные коэффициенты диффузии Sb в напряженном  $Si_{0,85}Ge_{0,15}$ . Найдена энергия активации диффузии сурьмы в напряженном  $Si_{0,85}Ge_{0,15}$  для отжига в вакууме —  $(3,9 \pm 0,1)$  эВ,

что находится в хорошем согласии с литературными данными по диффузии сурьмы в слоях SiGe других составов и Si. В то же время энергия активации при отжиге в водороде оказалась значительно выше. Замедление диффузии Sb при отжиге в водороде объяснено снижением концентрации вакансий в материале, вызванным уменьшением потенциального барьера для аннигиляции пар Френкеля в присутствии водорода в решетке (что способствует ускоренному отжигу вакансий) и/или подавлением поверхностной генерации вакансий. Подтверждением последнего предположения служит обнаруженный нами факт, что Sb испаряется с поверхности образца гораздо менее интенсивно при отжиге в водороде, чем при отжиге в вакууме.

#### Список литературы

1. Prinz E. J., Garone P. M., Schwartz P. V., Xiao X. and Sturm J. C. The Effect of Base Dopant Outdiffusion and Undoped  $Si_{1-x}Ge_x$  Junction Spacer Layers in  $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$  Heterojunction Bipolar Transistors // IEEE Electron. Device Lett. 1991. V 12. N 2. P. 42–44.
2. Kenig U. and Hersener J. Needs of Low Thermal Budget Processing in SiGe Technology // Solid State Phenomena, 1996. V. 47–48. P. 17–32.
3. Bonar J. M., McGregor B. M. and Willoughby A. F. W. and Paine A. D. N. // Si Front-End Processing — Physics and Technology of Dopant-Defect Interactions. Symposium. V. 288, PA, USA: Mater Res. Soc., 1999. P. 103.
4. Kuznetsov A. Yu., Cardenas J., Schmidt D. C., Svensson B. G., Hansen J. L. and Larsen A. N. Sn-enhanced diffusion in strained  $Si_{1-x}Ge_x$ : Dependence on biaxial compression // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. N 11. P. 7274–7277.
5. Аврутин В. С., Барабаненков М. И., Вяткин А. Ф., Изюмская Н. Ф., Пустовит А. Н. Ускоренная диффузия сурьмы в напряженных гетероэпитаксиальных кремний-германиевых транзисторных структурах // Материалы Всероссийского совещания "Наноструктуры на основе кремния и германия", Н. Новгород. 1998. С. 147–150.
6. Аврутин В. С., Барабаненков М. Ю., Вяткин А. Ф., Изюмская Н. Ф., Пустовит А. Н. и Лойко Н. Н. Влияние потока точечных дефектов на диффузию Sb в напряженных  $Si/SiGe/Si(Sb)$  гетероэпитаксиальных структурах // Тез. докл. Второй Российской конференции "Кремний-2000", Москва, 9–11 февраля 2000 г. С. 196.
7. Kuznetsov A. Yu., Grahn J., Cardenas J., Svensson B. G., Lundsgaard-Hansen J. and Nylandsted-Larsen A. Effect of Injection of Si Self-Interstitials on Sb Diffusion in  $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$  Heterostructures // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. N 20. P. R13355–R13358.
8. Dowsett M. G., Barlow R. D., Fox H. S., Kubiak R. A. A. and Collins R. Secondary Ion Mass Spectrometry Depth Profiling of Boron, Antimony and Germanium Deltas in Silicon and Implications for Profile Deconvolution // J. Vac. Sci. Technol. B. 1992. V. 10. P. 336–341.
9. Пинчук В. М., Назаров А. Н., Лысенко В. С., Яничук Т. В. Влияние водорода на процесс аннигиляции пар Френкеля в кремнии. Квантово-химическое исследование // ФТП, 1996. Т. 30. Вып. 12. С. 2133–2142.

В. Ю. Тополов, д-р физ.-мат. наук,  
С. В. Глушанин,  
Ростовский государственный университет

## НОВЫЕ 1—3-КОМПОЗИТЫ И ОСОБЕННОСТИ ИХ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ\*

*Предложены модели пьезоактивных 1—3-композитов "сегнетопьезокерамические бруски — сегнетопьезокерамика" и "сегнетопьезокерамические бруски — полимер". Разработаны алгоритмы усреднения электромеханических свойств и проанализированы концентрационные зависимости эффективных пьезоэффициентов  $d_{ij}^*$ ,  $e_{ij}^*$  и  $g_{ij}^*$ . Установлена доминирующая роль матрицы в формировании пьезоэлектрических свойств рассматриваемых композитов.*

### Введение

Пьезоактивные композиты представляют несомненный интерес для различных приложений акустики, твердотельной электроники и пьезотехники. Сфера применения пьезокомпозитов в качестве элементов электромеханических преобразователей, сенсоров, актиоаторов, активных элементов пьезотехники и микросистемной техники непрерывно расширяется и тесно связана с уникальными физическими свойствами этих материалов. Существенная зависимость физических свойств пьезокомпозитов от взаимного расположения и объемной концентрации компонентов (микроструктуры) [1, 2] обуславливает проведение исследований, ограничивающихся, как правило, конкретной связью композита. Связность  $\alpha$ — $\beta$  двухкомпонентного композита характеризуется [3] целыми числами  $\alpha, \beta = 0, \dots, 3$ , определяющими число осей прямоугольной системы координат  $X_1X_2X_3$ , вдоль которой первый ( $\alpha$ ) и второй ( $\beta$ ) компоненты расположены непрерывно. Среди материалов с  $\beta = 3$  наиболее исследованными являются 1—3-композиты "сегнетопьезокерамика (СПК) — полимер" [4—6], пьезоактивные стержни которых окружены пьезопассивной матрицей (а в ряде случаев матрицей с низкой пьезоактивностью) и расположены параллельно оси поляризации  $OX_3$ . Цель настоящего сообщения — развитие модельных представлений и прогнозирование пьезоэлектрических свойств новых 1—3-композитов, содержащих вместо вышеупомянутых стержней систему протяженных в направлении  $OX_1$  брусков (параллелепипедов).

\*Работа выполнена при частичной поддержке по теме 11.01.02Ф НИР РГУ.

### 1—3-композиты "СПК-1—СПК-2"

Пьезоактивные композиты "СПК-1—СПК-2" остаются малоисследованными материалами. В работе [7] проанализированы особенности пьезоэлектрических свойств 2—2-композитов, компоненты которых представляют собой различные СПК со структурой типа перовскита. От слоистой структуры типа 2—2 нетрудно перейти к оригинальной структуре типа 1—3, отличительной чертой которой являются СПК бруски (в дальнейшем СПК-1). Эти бруски пронизывают композитный образец вдоль оси  $OX_1$  (см. заштрихованные области на рис. 1), причем их основания параллельны плоскости  $(X_1OX_2)$ , а объемная концентрация  $m = nt$  задается двумя параметрами:  $n = |KJ|/|AJ|$  и  $t = |KL|/|KD|$ . Рассматриваемый 1—3-композит поляризуется электрическим полем  $E \parallel OX_3$ . Усреднение упругих, пьезо- и диэлектрических констант его компонентов осуществляется по аналогии с описанной в работе [9] процедурой с учетом граничных условий для механических и электрических полей. Эти условия на границе раздела компонентов  $x_j = \text{const}$  предполагают непрерывность [10] трех нормальных компонентов тензора механических напряжений  $\sigma_{jv}$  ( $v = 1, 2, 3$ ), трех тангенциальных компонентов тензора механических деформаций  $\xi_{ru}$  ( $r \neq u, j \neq v$ ), нормального компонента вектора электрического смещения  $D_j$  и двух тангенциальных компонентов вектора напряженности электрического поля  $E_k$  ( $k \neq j$ ), где  $j, k, r, u$  могут быть равны 1, 2 или 3. В результате усреднения определяется матрица эффективных электромеханических констант композита

$$\|C^*\| = \|C^*(n, t)\| = \begin{pmatrix} \|s^{*E}\| & \|d^{*T}\| \\ \|d^*\| & \|\varepsilon^{*\sigma}\| \end{pmatrix},$$

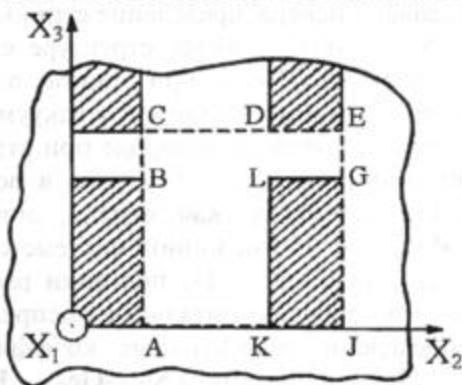


Рис. 1. Сечение 1—3-композита "СПК бруски — матрица" плоскостью  $(X_1OX_3)$ . Штриховкой показаны сечения СПК брусков. Квадрат ACEJ представляет собой грань элементарной ячейки Банно [8], выбираемой для дальнейшего усреднения электромеханических свойств в соответствии с процедурой [9]

где  $\|s^{*E}\|$  — матрица упругих податливостей, измеренных при  $E = \text{const}$ ;  $\|d^*\|$  — матрица пьезомодулей;  $\|\epsilon^{*\sigma}\|$  — матрица диэлектрических проницаемостей, измеренных при  $\sigma = \text{const}$ , а верхний индекс т обозначает транспонирование. Анализ элементов матриц  $\|s^{*E}\|$ ,  $\|d^*\|$  и  $\|\epsilon^{*\sigma}\|$  позволяет сделать вывод о том, что исследуемый композит (рис. 1) описывается точечной группой симметрии  $mm2$ . Ниже мы остановимся на некоторых примерах концентрационных зависимостей пьезоэффициентов  $d_{3j}^*(n, t)$  и  $e_{3j}^*(n, t)$ , характеризующих отклик композита вдоль оси поляризации  $OX_3$ , где матричные элементы  $e_{3j}^*$  определяются из соотношения [11]

$$\|e\| = \|d\| \|s^{*E}\|^{-1}.$$

Концентрационные зависимости  $d_{3j}^*(n, t)$  и  $e_{3j}^*(n, t)$  (рис. 2, а—в) рассчитаны с использованием соответствующих нормальной температуре экспериментальных данных по СПК ПКР-7М (состав на основе Pb (Zr, Ti)O<sub>3</sub> из группы "пьезоэлектрическая керамика ростовская") [12] и модифицированного PbTiO<sub>3</sub> [13], а также по эластомеру [14]. Несмотря на существенные различия между электромеханическими свойствами данных СПК можно говорить о доминирующей роли матрицы в формировании пьезоэлектрических свойств изображенного на рис. 1 композита. Это проявляется, например, в том, что пьезоэффициенты  $d_{3j}^*(n, t)$  и  $e_{3j}^*(n, t)$  изменяются в достаточно узких интервалах при  $0 < n \leq 0,5$ . Равенство  $\text{sgn } e_{3j}^*(n, t) = \text{sgn } e_{3j}^*(0, 0)$  выполняется для  $j = 1; 2$  до  $t \approx 0,5$  и  $t \approx 0,9$  для матрицы из модифицированного PbTiO<sub>3</sub> и ПКР-7М соответственно.

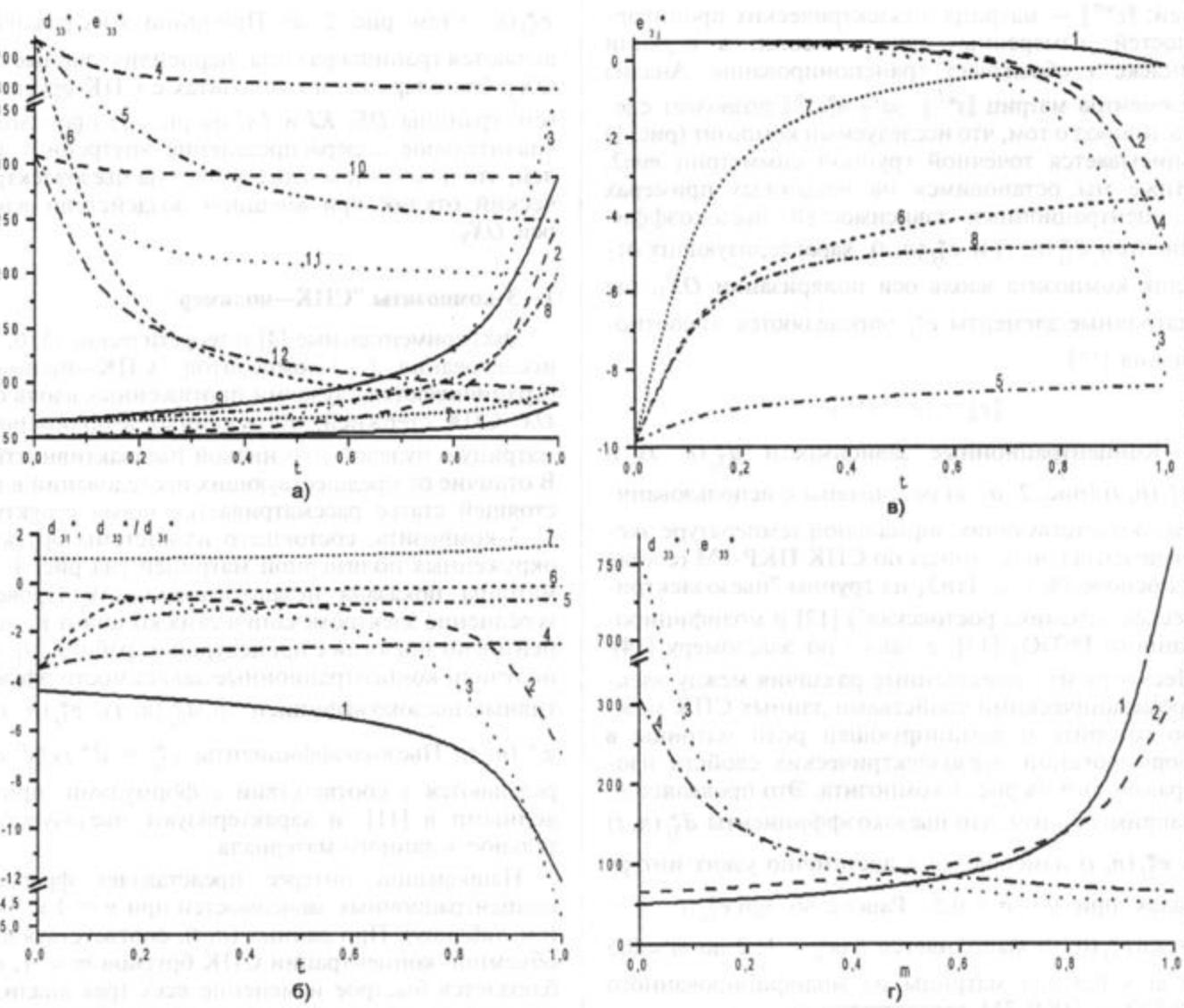
Еще одним подтверждением доминирующей роли матрицы является то, что несмотря на симметрию композита  $mm2$  в обоих случаях соотношения  $d_{32}^*(n, t)/d_{31}^*(n, t) \approx 1$  и  $e_{32}^*(n, t)/e_{31}^*(n, t) \approx 1$  справедливы в широких интервалах  $(n, t)$ . Наконец, в случае более жесткой матрицы (т. е. из модифицированного PbTiO<sub>3</sub>) и  $n = \text{const}$  изменения пьезоэффициентов  $d_{3j}^*(n, t)$  и  $e_{3j}^*(n, t)$  становятся наиболее заметными при  $t \rightarrow 1$ , тогда как более мягкая матрица (ПКР-7М) способствует подобным изменениям лишь при  $t \ll 1$ . Последнее положение остается справедливым и при переходе к традиционной структуре типа 1—3 "цилиндрические стержни — матрица". Кривые  $d_{33}^*(m)$  и  $e_{33}^*(m)$ , которые рассчитаны по формулам [7] для 1—3-композитов, содержащих цилиндрические стержни, параллельные оси  $OX_3$  ( $m$  — объемная концен-

трация этих стержней, рис. 2, г), отличаются по конфигурации от вышеупомянутых кривых  $d_{33}^*(n, t)$  и  $e_{33}^*(n, t)$  (см. рис. 2, а). Причиной этих различий являются границы раздела, перпендикулярные оси  $OX_3$ : благодаря им в композитах с СПК брусками (см. границы  $DE$ ,  $KJ$  и  $LG$  на рис. 1) происходит значительное перераспределение внутренних полей, что в конечном итоге влияет на пьезоэлектрический отклик при внешнем воздействии вдоль оси  $OX_3$ .

### 1—3-композиты "СПК—полимер"

Экспериментальные [4] и теоретические [5, 6, 14] исследования 1—3-композитов "СПК—полимер" ограничиваются случаями протяженных вдоль оси  $OX_3$  СПК стержней, погруженных в полимерную матрицу с нулевой или низкой пьезоактивностью. В отличие от предшествующих исследований в настоящей статье рассматривается новая структура 1—3-композита, состоящего из системы брусков, окруженных полимерной матрицей (на рис. 1 эта матрица показана незаштрихованной). Проводя усреднение электромеханических констант компонентов по аналогии с процедурой из работы [9], мы получили концентрационные зависимости эффективных пьезоэффициентов  $d_{3j}^*(n, t)$ ,  $e_{3j}^*(n, t)$  и  $g_{3j}^*(n, t)$ . Пьезоэффициенты  $g_{3j}^* = d_{3j}^*/e_{33}^{*\sigma}$  определяются в соответствии с формулами, приведенными в [11], и характеризуют пьезочувствительность данного материала.

Наибольший интерес представляет фрагмент концентрационных зависимостей при  $n \ll 1$  и  $t \rightarrow 1$  (см. таблицу). При данных  $(n, t)$ , соответствующих объемной концентрации СПК брусков  $t \ll 1$ , наблюдается быстрое изменение всех трех анализируемых типов пьезоэффициентов. Такое изменение является следствием перераспределения внутренних механических и электрических полей в присутствии мягкого пьезопассивного полимера. При  $t \rightarrow 1$  и возрастании  $n$  значения пьезомодулей  $d_{3j}^*(n, t) \rightarrow d_{3j}^{(FC)}$ , а отношение  $d_{32}^*(n, t)/d_{31}^*(n, t) \rightarrow 1$ . Последнее соотношение свидетельствует о слабом влиянии границ типа  $AB$  (см. рис. 1) на формирование пьезоэлектрических свойств композита, а поведение  $d_{3j}^*(n, t)$ ,  $e_{3j}^*(n, t)$  и  $g_{3j}^*(n, t)$  — о своеобразном проявлении доминирующей роли матрицы. Эта роль в данном случае сводится к тому, что пьезопассивная матрица заметно "сдерживает" пьезоактивность 1—3-композита при  $t \leq 0,99$  и  $n \leq 0,10$ . Как следует из таблицы,  $d_{3j}^*(n, 1)/d_{3j}^*(n, 0,99) \approx 10$  ( $j = 1; 2; 3$ ),  $e_{3j}^*(n, 1)/e_{3j}^*(n, 0,99) \approx 2$  ( $j = 1; 2$ ) и  $e_{33}^*(n, 1)/e_{33}^*(n, 0,99) \approx 10$ , т. е. переход от связности



**Рис. 2. Концентрационные зависимости эффективных пьезоэффициентов  $d_{3j}^*(n, t)$  (в пКл/Н),  $e_{3j}^*(n, t)$  (в Кл/м<sup>2</sup>) и отношения  $d_{32}^*(n, t)/d_{31}^*(n, t)$ , рассчитанные для 1–3-компонентов "брюски из ПКР-7М – СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub>", "брюски из СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> – ПКР-7М" (а–б), "стержни из ПКР-7М – СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub>", "стержни из СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> – ПКР-7М" (в):**

а – кривые 1–3, 7–9 построены для композита "брюски из ПКР-7М – СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub>", а кривые 4, 5, 6, 10, 11, 12 – для композита "брюски из СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> – ПКР-7М"; 1 и 4 –  $d_{33}^*(0,1, t)$ ; 2 и 5 –  $d_{33}^*(0,5, t)$ ; 3 и 6 –  $d_{33}^*(0,9, t)$ ; 7 и 10 –  $10e_{33}^*(0,1, t)$ ; 8 и 11 –  $10e_{33}^*(0,5, t)$ ; 9 и 12 –  $10e_{33}^*(0,9, t)$ ;

б – кривые 1–3, 7 построены для композита "брюски из ПКР-7М – СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub>", а кривые 4–6 – для композита "брюски из СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> – ПКР-7М"; 1 –  $d_{31}^*(0,1, t)$ ; 2 –  $10^{-1}d_{31}^*(0,5, t)$ ; 3 –  $10^{-1}d_{31}^*(0,9, t)$ ; 4 –  $10^{-2}d_{31}^*(0,1, t)$ ; 5 –  $10^{-2}d_{31}^*(0,5, t)$ ; 6 –  $10^{-2}d_{31}^*(0,9, t)$ ; 7 –  $d_{32}^*(0,5, t)/d_{31}^*(0,5, t)$ ;

в – кривые 1–4 построены для композита "брюски из ПКР-7М – СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub>", а кривые 5–8 – для композита "брюски из СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> – ПКР-7М"; 1 и 5 –  $e_{31}^*(0,1, t)$ ; 2 и 6 –  $e_{31}^*(0,5, t)$ ; 3 и 7 –  $e_{31}^*(0,9, t)$ ; 4 и 8 –  $e_{32}^*(0,5, t)$ ;

г – кривые 1 и 2 построены для композита "стержни из ПКР-7М – СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub>", а кривые 3 и 4 – для композита "стержни из СПК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> – ПКР-7М"; 1 и 3 –  $d_{33}^*(m)$ ; 2 и 4 –  $10e_{33}^*(m)$ .

Расчетные концентрационные зависимости эффективных пьезоэффициентов  $d_{3j}^*(n, t)$  (в нКл/Н),  $e_{3j}^*(n, t)$  (в Кл/м<sup>2</sup>) и отношений  $g_{3j}^*(n, t) / g_{3j}^{(FC)}$  1–3-композита "брюски из ПКР-7М — эластомер"

$n$	$t$	$d_{31}^*$	$d_{32}^*$	$d_{33}^*$	$10^3 e_{31}^*$	$10^2 e_{32}^*$	$10^2 e_{33}^*$	$g_{31}^*/g_{31}^{(FC)}$	$g_{32}^*/g_{31}^{(FC)}$	$g_{33}^*/g_{31}^{(FC)}$
0,01	0,90	-2,49	-0,0139	2,46	-2,06	-0,0620	0,0676	6,54	0,0365	2,97
	0,91	-2,79	-0,102	2,86	-2,30	-0,0690	0,0836	7,25	0,265	3,42
	0,92	-3,16	0,0228	3,39	-2,60	0,0770	0,106	8,13	0,586	3,99
	0,93	-3,65	-0,415	4,09	-2,97	-0,0870	0,138	9,22	1,05	4,76
	0,94	-4,29	-0,702	5,08	-3,46	-0,100	0,186	10,6	1,73	5,78
	0,95	-5,20	-1,16	6,54	-4,12	-0,118	0,264	12,5	2,80	7,27
	0,96	-6,56	-1,94	8,85	-5,07	-0,144	0,400	15,2	4,51	9,42
	0,97	-8,82	-3,43	12,9	-6,55	-0,184	0,675	19,2	7,48	13,0
	0,98	-13,3	-6,73	21,4	-9,16	-0,254	1,36	25,9	13,2	19,2
	0,99	-25,8	-17,2	46,8	-14,9	-0,410	3,93	39,4	26,2	32,7
1,00	-229	-20,4	479	-31,2	-0,850	37,5	77,0	68,6	73,8	
0,05	0,90	-3,28	-1,47	4,96	-10,3	-0,324	0,338	6,49	2,91	4,51
	0,91	-3,65	-1,76	5,67	-11,5	-0,358	0,418	6,96	3,35	4,97
	0,92	-4,11	-2,12	6,57	-13,0	-0,399	0,529	7,51	3,87	5,51
	0,93	-4,70	-2,61	7,74	-14,9	-0,452	0,689	8,13	4,51	6,16
	0,94	-5,48	-3,27	9,33	-17,3	-0,521	0,930	8,86	5,28	6,92
	0,95	-6,58	-4,21	11,6	-20,6	-0,615	1,32	9,75	6,24	7,85
	0,96	-8,20	-5,66	14,9	-25,4	-0,749	2,00	10,8	7,46	9,07
	0,97	-10,9	-8,08	20,6	-32,8	-0,957	3,37	12,1	9,03	10,6
	0,98	-16,1	-12,9	31,7	-45,8	-1,33	6,78	13,8	11,1	12,5
	0,99	-30,7	-26,7	63,1	-74,5	-2,13	19,7	16,1	13,9	15,2
1,00	-318	-299	683	-15,6	-4,43	187	19,1	18,0		18,9
0,10	0,90	-3,39	-2,21	5,92	-20,6	-0,680	0,676	5,13	3,34	4,12
	0,91	-3,67	-2,54	6,70	-23,0	-0,750	0,836	6,83	3,63	4,40
	0,92	-4,24	-2,96	7,68	-26,0	-0,840	1,06	5,67	3,97	4,73
	0,93	-4,84	-3,51	8,95	-29,8	-0,950	1,38	5,99	4,35	5,09
	0,94	-5,63	-4,25	10,6	-34,6	-1,10	1,86	6,34	4,78	5,50
	0,95	-6,75	-5,28	13,0	-41,3	-1,30	2,64	6,75	5,28	5,99
	0,96	-8,40	-6,83	16,5	-50,8	-1,58	4,00	7,19	5,85	6,51
	0,97	-11,1	-9,40	22,4	-65,6	-2,02	6,75	7,71	6,52	7,15
	0,98	-16,4	-14,4	33,8	-91,7	-2,80	13,6	8,30	7,29	7,85
	0,99	-31,3	-28,7	66,0	-149	-4,50	39,3	8,99	8,23	8,72
1,00	-334	-318	722	-313	-9,35	375	9,80	9,34		9,71

Примечание. Вследствие трансверсальной изотропии (предельная группа симметрии  $\sigma\sigma\sigma$  [11]) СПК характеризуется ненулевыми пьезоэффициентами  $g_{31}^{(FC)} = g_{32}^{(FC)} \neq g_{33}^{(FC)}$  и  $g_{15}^{(FC)} = g_{24}^{(FC)}$ .

1—3 к 2—2 (прорастание брусков через весь образец и  $|BC| = |DL| = |EG| = 0$ ) приводит к резкому увеличению пьезоэффициентов  $d_{3j}^*$  и  $d_{33}^*$ .

В отличие от  $d_{3j}^*(n, t)$  и  $e_{3j}^*(n, t)$  пьезоэффициенты  $g_{3j}^*(n, t)$  изменяются в более узких интервалах, что обусловлено прежде всего сравнительно медленным ростом  $\varepsilon_{33}^*(n, t)$  при возрастании  $n$  или  $t$ . Тем не менее информация о концентрационных зависимостях  $g_{3j}^*(n, t)$  при  $n \ll 1$  и  $t \rightarrow 1$  представляет практический интерес. Именно в данной области ( $n, t$ ) наблюдается значительное возрастание пьезочувствительности композита по сравнению с пьезочувствительностью СПК компонента (см. отношения  $g_{3j}^*(n, t) / g_{3j}^{(FC)}$  из таблицы).

## Заключение

Предложенные в настоящей работе модели новых 1—3-композитов "СПК бруски—СПК" и "СПК бруски—полимер" и результаты расчетов их эффектив-

тивных пьезоэффициентов свидетельствуют об оригинальном концентрационном поведении пьезоэлектрических свойств этих композитов. Микро-геометрия рассматриваемых композитов является главным фактором, приводящим к доминирующей роли матрицы, а также влияющим на пьезоактивность, пьезочувствительность и анизотропию электромеханических свойств. Представленные результаты носят предсказательный характер и позволяют прогнозировать особенности пьезоэлектрических свойств низкосимметричных 1—3-композитов в целях их дальнейшего практического применения.

Авторы признателны д-ру техн. наук А. Е. Паничу и д-ру физ.-мат. наук, проф. А. В. Турику (РГУ, Ростов-на-Дону) за постоянный интерес к тематике исследований.

## Список литературы

- Хороши Л. П., Маслов Б. П., Лещенко П. В. Прогнозирование эффективных свойств пьезоактивных композитных материалов. Киев: Наук. думка, 1989. 208 с.

2. Newnham R. E. Composite electroceramics // International Encyclopedia of Composites. 1990. Vol. 6. Ed. S. M. Lee. New York, NY, VCH. P. 158–173.
3. Newnham R. E. Molecular mechanisms in smart materials // MRS Bull. 1997. Vol. 22. No 5. P. 20–34.
4. Taunaumang H., Guy I. L., Chan H. L. W. Electromechanical properties of 1–3 piezoelectric ceramic / piezoelectric polymer composites // J. Appl. Phys. 1994. Vol. 76. No 1. P. 484–489.
5. Jensen H. Determination of macroscopic electromechanical characteristics of 1–3 piezoceramic / polymer composites by a concentric tube model // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr. 1991. Vol. 38. No 6. P. 591–594.
6. Levassort F., Topolov V. Yu., Lethiecq M. A comparative study of different methods of evaluating effective electromechanical properties of 0–3 and 1–3 ceramic / polymer composites // J. Phys. D: Appl. Phys. 2000. Vol. 33. No 16. P. 2064–2068.
7. Тополов В. Ю., Турник А. В., Глушанин С. В. Немонотонные концентрические зависимости пьезоэлектрических свойств и их анизотропии в композитах типа 2–2 // Тр. Междунар. научно-практической конф. "Фундаментальные проблемы пьезоэлектрического приборостроения" ("Пьезотехника-99"), 14–18 сент. 1999 г., Ростов-на-Дону, Азов. Т. 1 / Под ред. А. Е. Панича. Ростов-на-Дону. 1999. С. 178–186.
8. Banno H. Theoretical equations for dielectric, elastic and piezoelectric constants of diphasic composite changing its connectivity from 3–0 to 0–3 via 3–3 ISAF'94: Proc. Ninth IEEE Internat. Symp. Applications of Ferroelectrics, University Park, PA, USA, August 7–10. 1994. Piscataway, NJ, 1995. P. 186–189.
9. Glushanin S. V., Topolov V. Yu. Features of electromechanical properties of piezoactive composites with elements of connectivity 1–1 // J. Phys. D: Appl. Phys. 2001. Vol. 34. No 16. P. 2518–2529.
10. Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. 2-е изд. М.: Наука, 1979. 640 с.
11. Желудев И. С. Физика кристаллических диэлектриков. М.: Наука, 1968. 464 с.
12. Данцигер А. Я., Разумовская О. Н., Резниченко Л. А. и др. Высокоэффективные пьезокерамические материалы: Справ. Ростов-на-Дону: Книга. 1994. 32 с.
13. Ikegami S., Ueda I., Nagata T. Electromechanical properties of PbTiO<sub>3</sub> ceramics containing La and Mn // J. Acoust. Soc. Am. 1971. Vol. 50. No 4. Pt. I. P. 1060–1066.
14. Греков А. А., Крамаров С. О., Куприянов А. А. Эффективные свойства трансверсально-изотропного пьезокомпозита с цилиндрическими включениями // Механика композитных материалов. 1989. № 1. С. 62–69.

## Конструирование и моделирование МСТ

УДК 004.896

**И. М. Макаров**, акад. РАН,  
**В. М. Лохин**, д-р техн. наук, проф.,  
**С. В. Манько**, д-р техн. наук, доц.,  
**М. П. Романов**, д-р техн. наук, доц.,  
**А. А. Белькович**, **И. Б. Гарцеев**, **С. В. Киор**,  
 Московский государственный институт  
 радиотехники, электроники и автоматики  
 (технический университет)

### ДИСТАНЦИОННОЕ УПРАВЛЕНИЕ СЛОЖНЫМИ ДИНАМИЧЕСКИМИ ОБЪЕКТАМИ НА ОСНОВЕ СОВРЕМЕННЫХ СЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Часть II\*

Рассматриваются принципы построения и опыт разработки системы дистанционного управления сложными динамическими объектами на основе современных сетевых технологий. Обсуждаются результаты экспериментов по дистанционному управлению манипуляционным роботом по каналам Internet.

Возможности современных информационных технологий, основанных на применении таких языков программирования как Java и VRML, позволили обеспечить организацию режима дистанционного управления непосредственно с Internet-

страницы без предварительного скачивания программы на компьютер удаленного пользователя. Важно, что реализация подобного режима основана на использовании того же протокола передачи данных с сохранением их формата. Основные отличия соответствующего программного обеспечения, структура которого представлена на рис. 1, связаны с изменением клиентской части.

В ее состав входят три основных элемента:

- Java-программа, отвечающая за обеспечение интерфейса, а также прием и отправку данных;
- VRML-программа, отвечающая за отображение трехмерной модели управляемого устройства;



Рис. 1. Обобщенная структура комплекса программных средств для дистанционного управления учебной ГПС по каналам Internet

\*Часть I см. в № 5, 2002 г.

2. Newnham R. E. Composite electroceramics // International Encyclopedia of Composites. 1990. Vol. 6. Ed. S. M. Lee. New York, NY, VCH. P. 158–173.
3. Newnham R. E. Molecular mechanisms in smart materials // MRS Bull. 1997. Vol. 22. No 5. P. 20–34.
4. Taunaumang H., Guy I. L., Chan H. L. W. Electromechanical properties of 1–3 piezoelectric ceramic / piezoelectric polymer composites // J. Appl. Phys. 1994. Vol. 76. No 1. P. 484–489.
5. Jensen H. Determination of macroscopic electromechanical characteristics of 1–3 piezoceramic / polymer composites by a concentric tube model // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr. 1991. Vol. 38. No 6. P. 591–594.
6. Levassort F., Topolov V. Yu., Lethiecq M. A comparative study of different methods of evaluating effective electromechanical properties of 0–3 and 1–3 ceramic / polymer composites // J. Phys. D: Appl. Phys. 2000. Vol. 33. No 16. P. 2064–2068.
7. Тополов В. Ю., Турник А. В., Глушанин С. В. Немонотонные концентрические зависимости пьезоэлектрических свойств и их анизотропии в композитах типа 2–2 // Тр. Междунар. научно-практической конф. "Фундаментальные проблемы пьезоэлектрического приборостроения" ("Пьезотехника-99"), 14–18 сент. 1999 г., Ростов-на-Дону, Азов. Т. 1 / Под ред. А. Е. Панича. Ростов-на-Дону. 1999. С. 178–186.
8. Banno H. Theoretical equations for dielectric, elastic and piezoelectric constants of diphasic composite changing its connectivity from 3–0 to 0–3 via 3–3 ISAF'94: Proc. Ninth IEEE Internat. Symp. Applications of Ferroelectrics, University Park, PA, USA, August 7–10. 1994. Piscataway, NJ, 1995. P. 186–189.
9. Glushanin S. V., Topolov V. Yu. Features of electromechanical properties of piezoactive composites with elements of connectivity 1–1 // J. Phys. D: Appl. Phys. 2001. Vol. 34. No 16. P. 2518–2529.
10. Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. 2-е изд. М.: Наука, 1979. 640 с.
11. Желудев И. С. Физика кристаллических диэлектриков. М.: Наука, 1968. 464 с.
12. Данцигер А. Я., Разумовская О. Н., Резниченко Л. А. и др. Высокоэффективные пьезокерамические материалы: Справ. Ростов-на-Дону: Книга. 1994. 32 с.
13. Ikegami S., Ueda I., Nagata T. Electromechanical properties of PbTiO<sub>3</sub> ceramics containing La and Mn // J. Acoust. Soc. Am. 1971. Vol. 50. No 4. Pt. I. P. 1060–1066.
14. Греков А. А., Крамаров С. О., Куприянов А. А. Эффективные свойства трансверсально-изотропного пьезокомпозита с цилиндрическими включениями // Механика композитных материалов. 1989. № 1. С. 62–69.

## Конструирование и моделирование МСТ

УДК 004.896

**И. М. Макаров**, акад. РАН,  
**В. М. Лохин**, д-р техн. наук, проф.,  
**С. В. Манько**, д-р техн. наук, доц.,  
**М. П. Романов**, д-р техн. наук, доц.,  
**А. А. Белькович**, **И. Б. Гарцеев**, **С. В. Киор**,  
 Московский государственный институт  
 радиотехники, электроники и автоматики  
 (технический университет)

### ДИСТАНЦИОННОЕ УПРАВЛЕНИЕ СЛОЖНЫМИ ДИНАМИЧЕСКИМИ ОБЪЕКТАМИ НА ОСНОВЕ СОВРЕМЕННЫХ СЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Часть II\*

Рассматриваются принципы построения и опыт разработки системы дистанционного управления сложными динамическими объектами на основе современных сетевых технологий. Обсуждаются результаты экспериментов по дистанционному управлению манипуляционным роботом по каналам Internet.

Возможности современных информационных технологий, основанных на применении таких языков программирования как Java и VRML, позволили обеспечить организацию режима дистанционного управления непосредственно с Internet-

страницы без предварительного скачивания программы на компьютер удаленного пользователя. Важно, что реализация подобного режима основана на использовании того же протокола передачи данных с сохранением их формата. Основные отличия соответствующего программного обеспечения, структура которого представлена на рис. 1, связаны с изменением клиентской части.

В ее состав входят три основных элемента:

- Java-программа, отвечающая за обеспечение интерфейса, а также прием и отправку данных;
- VRML-программа, отвечающая за отображение трехмерной модели управляемого устройства;



Рис. 1. Обобщенная структура комплекса программных средств для дистанционного управления учебной ГПС по каналам Internet

\*Часть I см. в № 5, 2002 г.

- программа, построенная на базе специализированного пакета NetMiting и отвечающая за отображение потокового видео.

Выбранный подход к построению системы дистанционного управления удаленными объектами по каналам Internet позволил обеспечить широкий набор следующих сервисных функций, предоставляемых оператору для работы с конкретными устройствами:

- динамическое отображение реальных состояний объекта управления на его виртуальной модели по показаниям датчиков обратной связи;
- возможность осмотра виртуальной модели объекта управления с произвольных точек наблюдения в трехмерном пространстве;
- возможность управления виртуальной моделью объекта на экране монитора при освоении навыков работы с конкретными образцами удаленного оборудования;
- возможность визуального контроля за работой дистанционно управляемого (в том числе и сторонним пользователем) оборудования по видеоизображению, транслируемому в реальном времени;
- возможность отладки исполнительных программ управления на виртуальной модели объекта (без привлечения реального оборудования).

Принципы построения и опыт реализации создаваемой в МИРЭА системы дистанционного управления сложными динамическими объектами многократно обсуждались, а ее готовые фрагменты демонстрировались на целом ряде научно-технических семинаров и конференций, пользуясь неизменным интересом и получая высокие оценки со стороны специалистов.

Одна из последних и наиболее показательных демонстраций состоялась в апреле 2001 г. на XI научно-технической конференции "Экстремальная робототехника" в рамках двустороннего сеанса связи, организованного по каналам Internet между Москвой и Санкт-Петербургом (рис. 2).

В первой части сеанса академик РАН И. М. Макаров, как председатель научного совета РАН по робототехнике и автоматизации производства, председатель Учебно-методического совета по направлению 65.20.00 "Мехатроника и робототехника" и руководитель работ по разработке средств и методов дистанционного управления на основе сетевых технологий, находясь в операторской МИРЭА, выступил с приветствием и в режиме телеприсутствия сделал научный доклад перед участниками конференции, которая традиционно проводилась на базе ЦНИИРТК в г. Санкт-Петербурге.

При этом аудитория могла не только прослушать текст выступления в реальном времени, но и получить необходимые ответы на задаваемые вопросы, параллельно наблюдая за докладчиком по проекции экрана монитора непосредственно в конференц-зале (рис. 3, см. вторую сторону обложки).

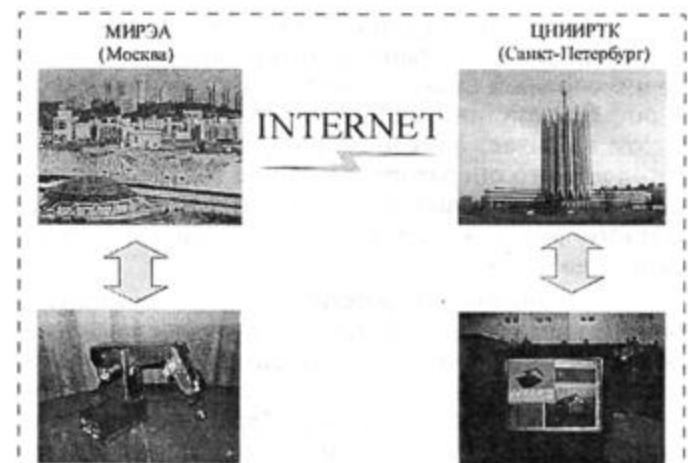


Рис. 2. Организация двустороннего сеанса через Internet между Москвой и Санкт-Петербургом для проведения эксперимента по дистанционному управлению сложным робототехническим оборудованием с удаленного терминала

В завершение сеанса был проведен уникальный эксперимент по дистанционному управлению манипуляционным роботом в реальном времени по каналам Internet.

Управление роботом, находившимся в одной из лабораторий МИРЭА, осуществлялось в интерактивном режиме с удаленного (на более чем 700 км) терминала в ЦНИИРТК (рис. 4, см. вторую сторону обложки). Контроль за правильностью выполняемых операций обеспечивался отображением текущих состояний робота с помощью его виртуальной модели по показаниям датчиков обратной связи, а также за счет оперативно передаваемого изображения с телекамеры (рис. 5, см. вторую сторону обложки).

Задержка в передаче данных, наблюдаемая в процессе эксперимента, варьировалась в диапазоне 5—10 мс, что не привело к возникновению существенных затруднений при управлении манипулятором в ручном режиме с использованием визуальной обратной связи для выполнения операций по захвату и перестановке технологических объектов. Общее время подготовки системы к работе, связанное с установлением канала связи через Internet, составило несколько минут.

Проведенный эксперимент и предварительные лабораторные испытания не только убедительно доказали возможность организации дистанционного управления сложными мехатронными устройствами, робототехническим и другим технологическим оборудованием по каналам Internet, но и позволили сделать несколько принципиально важных выводов более общего характера.

1. Глобальная компьютерная сеть Internet является эффективным, удобным и в известной мере универсальным средством организации и оперативного развертывания систем дистанционного управления объектами, удаленными как на малые (единицы и сотни метров), так на средние (единицы и десятки километров) и большие (сотни и тысячи километров) расстояния.

2. Анализ трехмерной сцены по ее плоскому изображению на экране монитора является достаточно сложной задачей, оперативное решение которой при дистанционном управлении манипулятором вызывает заметные сложности даже у подготовленного оператора, требуя не только наличия определенных навыков, но и богатого пространственного воображения в совокупности с высокой скоростью реакции.

3. Требования по разработке систем дистанционного управления роботами и другими сложными объектами на основе сетевых каналов связи должны формироваться с учетом не только особенностей соответствующих средств передачи информации, но и реальных возможностей оператора по выполнению возложенных на него командных и контролирующих функций.

4. Принципы построения систем дистанционного управления удаленными объектами по сетевым каналам связи, имеющим неравномерную загрузку (в зависимости от числа одновременно подключенных к сети абонентов), должны обеспечивать возможность автономного выполнения требуемых функций при задержке в передаче командной, сенсорной и иной необходимой информации.

5. Современный подход к организации дистанционного управления на основе сетевых каналов связи должен предусматривать возможность комплексной диагностики и настройки контролируемых объектов.

Обобщение этих выводов позволило перейти к разработке опытного образца системы дистанционного управления с более широким набором функциональных возможностей, представляющих интерес для различных приложений, включая промышленные, специальные и бытовые.

#### Список литературы

- Климов Д. М., Васильев А. А., Лучинин В. В., Мальцев П. П. Перспективы развития микросистемной техники в XXI веке // Микросистемная техника. 1999. № 1.
- Рубцов И. В., Несторов В. Е., Рубцов В. И. Современная зарубежная военная микро- и мини-робототехника // Микросистемная техника. 2000. № 3.
- Мальцев П. П., Пономарев К. М., Степанов Ю. И. "Умная пыль" на основе микросистемной техники // Микросистемная техника. 2000. № 4.
- Городецкий В. И. Многоагентные системы: современное состояние исследований и перспективы применения // Новости искусственного интеллекта. 1996. № 1.
- Каляев И. А. Принципы организации децентрализованных систем управления коллективом микророботов // Мехатроника. 2000. № 6.
- Дистанционно-управляемые роботы и манипуляторы. / Кулешов В. С., Лакота Н. А., Андрюшин В. В. и др.; Под общ. ред. Е. П. Попова М.: Машиностроение, 1986.
- Проектирование следящих систем двустороннего действия / Пол. ред. В. С. Кулешова // М.: Машиностроение, 1980.
- Кулаков Ф. М. Супервизорное управление манипуляционными роботами. М.: Наука, 1980.
- Лангратов К., Каменцев В. Космический "Экспресс" с литерой А // Новости космонавтики. 1999. № 12.
- Журавин Ю. "Экспресс-А" вышел на орбиту // Новости космонавтики. 2000. № 5.
- Голотюк С. Экспресс-АМ // Новости космонавтики. 2000. № 10.
12. Зайцев А. Спутниковая связь прирастает Интернетом // Новости космонавтики. 2000. № 10.

УДК 621.382.3

**И. И. Абрамов**, д-р физ.-мат. наук, проф.  
Учреждение образования "Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники", г. Минск

## МЕТОДОЛОГИЯ АВТОМАТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА КОМПАКТНЫХ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ СХЕМ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ И СТРУКТУР

Предложена методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур. Она основывается на трех подходах к синтезу моделей в рамках физики открытых систем. Рассмотрен ряд примеров ее применимости для построения эквивалентных схем приборов на кремни.

### Введение

Современные сверхбольшие (СБИС) и ультрабольшие (УБИС) интегральные схемы (ИС) микроэлектроники являются чрезвычайно сложными

высокоинтегрированными полупроводниковыми структурами. Ожидается, что степень интеграции схем наноэлектроники будет еще выше (по крайней мере на несколько порядков) и составит  $10^9$ – $10^{12}$  элементов на кристалле [1]. Учитывая возможный уровень интеграции, речь по сути дела идет о создании качественно новых искусственных интеллектуальных систем, по многим показателям сравнимых и даже превосходящих мозг человека, но на твердом теле. Сверхсложной задачей будет исследование физических процессов в таких твердотельных структурах, поэтому их разработка невозможна без соответствующих систем моделирования. Создание же систем, по-видимому, станет одной из ключевых проблем наноэлектроники [1].

Анализ методов разработки и проектирования СБИС и УБИС показывает, что эти методы основываются на иерархическом подходе к рассмотрению схем с привлечением принципа декомпозиции [2, 3]. В целом подход неплохо согласуется с основными положениями физики открытых систем [4–6]. Однако очевидно, что современная схема рассмотрения СБИС и УБИС еще далека от совершенства. Один из ее главных недостатков —

2. Анализ трехмерной сцены по ее плоскому изображению на экране монитора является достаточно сложной задачей, оперативное решение которой при дистанционном управлении манипулятором вызывает заметные сложности даже у подготовленного оператора, требуя не только наличия определенных навыков, но и богатого пространственного воображения в совокупности с высокой скоростью реакции.

3. Требования по разработке систем дистанционного управления роботами и другими сложными объектами на основе сетевых каналов связи должны формироваться с учетом не только особенностей соответствующих средств передачи информации, но и реальных возможностей оператора по выполнению возложенных на него командных и контролирующих функций.

4. Принципы построения систем дистанционного управления удаленными объектами по сетевым каналам связи, имеющим неравномерную загрузку (в зависимости от числа одновременно подключенных к сети абонентов), должны обеспечивать возможность автономного выполнения требуемых функций при задержке в передаче командной, сенсорной и иной необходимой информации.

5. Современный подход к организации дистанционного управления на основе сетевых каналов связи должен предусматривать возможность комплексной диагностики и настройки контролируемых объектов.

Обобщение этих выводов позволило перейти к разработке опытного образца системы дистанционного управления с более широким набором функциональных возможностей, представляющих интерес для различных приложений, включая промышленные, специальные и бытовые.

#### Список литературы

- Климов Д. М., Васильев А. А., Лучинин В. В., Мальцев П. П. Перспективы развития микросистемной техники в XXI веке // Микросистемная техника. 1999. № 1.
- Рубцов И. В., Несторов В. Е., Рубцов В. И. Современная зарубежная военная микро- и мини-робототехника // Микросистемная техника. 2000. № 3.
- Мальцев П. П., Пономарев К. М., Степанов Ю. И. "Умная пыль" на основе микросистемной техники // Микросистемная техника. 2000. № 4.
- Городецкий В. И. Многоагентные системы: современное состояние исследований и перспективы применения // Новости искусственного интеллекта. 1996. № 1.
- Каляев И. А. Принципы организации децентрализованных систем управления коллективом микророботов // Мехатроника. 2000. № 6.
- Дистанционно-управляемые роботы и манипуляторы. / Кулешов В. С., Лакота Н. А., Андрюшин В. В. и др.; Под общ. ред. Е. П. Попова М.: Машиностроение, 1986.
- Проектирование следящих систем двустороннего действия / Пол. ред. В. С. Кулешова // М.: Машиностроение, 1980.
- Кулаков Ф. М. Супервизорное управление манипуляционными роботами. М.: Наука, 1980.
- Лангратов К., Каменцев В. Космический "Экспресс" с литерой А // Новости космонавтики. 1999. № 12.
- Журавин Ю. "Экспресс-А" вышел на орбиту // Новости космонавтики. 2000. № 5.
- Голотюк С. Экспресс-АМ // Новости космонавтики. 2000. № 10.
12. Зайцев А. Спутниковая связь прирастает Интернетом // Новости космонавтики. 2000. № 10.

УДК 621.382.3

**И. И. Абрамов**, д-р физ.-мат. наук, проф.  
Учреждение образования "Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники", г. Минск

## МЕТОДОЛОГИЯ АВТОМАТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА КОМПАКТНЫХ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ СХЕМ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ И СТРУКТУР

Предложена методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур. Она основывается на трех подходах к синтезу моделей в рамках физики открытых систем. Рассмотрен ряд примеров ее применимости для построения эквивалентных схем приборов на кремни.

### Введение

Современные сверхбольшие (СБИС) и ультрабольшие (УБИС) интегральные схемы (ИС) микроэлектроники являются чрезвычайно сложными

высокоинтегрированными полупроводниковыми структурами. Ожидается, что степень интеграции схем наноэлектроники будет еще выше (по крайней мере на несколько порядков) и составит  $10^9$ – $10^{12}$  элементов на кристалле [1]. Учитывая возможный уровень интеграции, речь по сути дела идет о создании качественно новых искусственных интеллектуальных систем, по многим показателям сравнимых и даже превосходящих мозг человека, но на твердом теле. Сверхсложной задачей будет исследование физических процессов в таких твердотельных структурах, поэтому их разработка невозможна без соответствующих систем моделирования. Создание же систем, по-видимому, станет одной из ключевых проблем наноэлектроники [1].

Анализ методов разработки и проектирования СБИС и УБИС показывает, что эти методы основываются на иерархическом подходе к рассмотрению схем с привлечением принципа декомпозиции [2, 3]. В целом подход неплохо согласуется с основными положениями физики открытых систем [4–6]. Однако очевидно, что современная схема рассмотрения СБИС и УБИС еще далека от совершенства. Один из ее главных недостатков —

возможность неучета ряда принципиально важных коллективных эффектов, многочисленные примеры которых приведены в монографии [7]. Обычно они называются "паразитными эффектами". В то же время с уменьшением размеров элементов и увеличением степени интеграции важность таких специфических коллективных эффектов будет все более возрастать, и как их идентифицировать в общем случае неясно.

По изложенным причинам необходимы эффективные подходы, позволяющие моделировать физические процессы в достаточно сложных полупроводниковых структурах как едином целом без существенных упрощений, а следовательно, без потери точности и адекватности. Один из таких подходов предложен и реализован на основе численных диффузионно-дрейфовых моделей для СБИС и УБИС на кремнии [8]. Однако, к сожалению, анализ возможен лишь для не очень сложных фрагментов ИС, включающих несколько элементов и содержащих до нескольких десятков  $p-n$ -переходов в одном из трех измерений. Подход требует больших затрат вычислительных ресурсов ЭВМ. Кроме того, проблемы возникают при обработке информации для перехода на следующий иерархический уровень моделирования, в частности, схемотехнический. Анализ же СБИС и УБИС полностью на уровне численных диффузионно-дрейфовых моделей, к сожалению, невозможен на современных ЭВМ.

Цель данной статьи — описание методологии автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур. С помощью таких эквивалентных схем учитываются принципиально важные коллективные эффекты.

## Методология

Анализ известных моделей полупроводниковых приборов и элементов ИС физического типа позволил выделить три подхода к их синтезу [8, 9], в основе которых лежат: первого — физические допущения с огрублениями по пространству, времени и в результате статистического усреднения; второго — использование различных модельных зависимостей для параметров моделей; третьего — аппроксимации о характере поведения искомых функций. Первый подход является наиболее кардинальным и лежит в основе построения иерархии уравнений статистической физики открытых систем [5]. В работе [10] было показано, что в сочетании с двумя другими подходами он приводит к синтезу практически всех известных моделей элементов кремниевых ИС физического типа, т. е. не формальных.

Предлагаемая методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем произвольных полупроводниковых приборов и структур

также базируется на указанных трех подходах. Она состоит из следующих основных этапов: 1) выбор исходных уравнений; 2) редукция к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), имеющих схемную интерпретацию; 3) процесс синтеза эквивалентной схемы на грубой сетке, покрывающей структуру; 4) процесс идентификации параметров аналитических моделей элементов эквивалентной схемы.

Рассмотрим каждый из этапов. На первом этапе осуществляется выбор исходной степени детализации описания процессов переноса в исследуемой полупроводниковой структуре, т. е. по существу применяется первый подход к синтезу моделей. Для этих целей может, в частности, использоваться одна из систем уравнений иерархии классов моделей, отмеченных в [8, 9], например, гидродинамические модели. В общем случае это может быть одна из систем уравнений иерархии соответствующих уравнений статистической физики открытых систем [5]. Так, достаточно строгая модель СБИС, УБИС, а также наноэлектронных структур включает уравнение Лиувилля — фон Неймана для матрицы плотности совместно с уравнениями Лоренца для микрополей. К счастью, в большинстве практически важных случаев такая исходная степень детализации не нужна, например, для кремниевых СБИС и УБИС, как правило, достаточно использовать уравнения диффузионно-дрейфовой модели. Данный случай рассмотрен в следующей части статьи. Для наноэлектронных структур, однако, необходимо использовать на первом этапе один из известных квантово-механических формализмов, например, отмеченный для матрицы плотности.

На втором этапе осуществляется редукция выбранной исходной системы уравнений к системе ОДУ, имеющей схемную интерпретацию. Для этих целей должны использоваться второй и третий подходы к синтезу моделей. Рассмотрим достаточно общий случай, когда исходной является система дифференциальных уравнений в частных производных. В данном случае при редукции необходимо использовать интегро-интерполяционный подход Тихонова — Самарского [11] при аппроксимации по пространству в рамках методов конечных разностей или конечных элементов. Именно при аппроксимации интегралов по пространству необходимо использовать второй и третий подходы к синтезу моделей. В результате может быть получена система ОДУ на сетке пространственной дискретизации, имеющая схемную интерпретацию.

На третьем этапе осуществляется синтез вида эквивалентной схемы приборной структуры. В частности, определяются вид компактной эквивалентной схемы всей структуры и аналитические модели ее элементов для каждой ячейки сетки пространственной дискретизации. С этой целью син-

тез осуществляется на грубой сетке, покрывающей полупроводниковую структуру. При аппроксимации производных по времени в системе в общем случае нелинейных ОДУ целесообразно использование А-устойчивых методов [12]. При решении системы нелинейных алгебраических уравнений в дальнейшем применяются итерационные численные методы.

Ключевой вопрос на втором и третьем этапах — вопрос об устойчивости разностной схемы, аппроксимирующей исходную модель, выбранную на первом этапе. В противном случае не может быть синтезирована компактная эквивалентная схема приборной структуры, т. е. получено решение разностной схемы на грубой сетке дискретизации как по пространству, так и по времени. Сохранение разностной схемой устойчивости означает, что она отражает основные физические свойства, характерные для исследуемой приборной структуры в соответствующих режимах функционирования, включая отмеченные коллективные эффекты. Вопрос о точности модели хотя и важен, но здесь не имеет принципиального значения, так как во многом связан с процессом идентификации ее параметров.

На четвертом этапе осуществляется процесс идентификации параметров аналитических моделей элементов компактной эквивалентной схемы, синтезированной после выполнения второго и третьего этапов. Для этих целей могут использоваться две различные процедуры: 1) оптимизационные методы при идентификации параметров по экспериментальным данным [10], например по выходным характеристикам полупроводниковой структуры; 2) на основе сравнения с результатами расчета по более точным моделям, например по модели, синтезированной на более мелкой сетке дискретизации.

Вопросами, связанными с отмеченным ключевым вопросом и наиболее важными в данной методологии, являются: вопрос о степени детализации на первом этапе; используемые аппроксимации в рамках второго и третьего подходов к синтезу моделей. Заметим, что первая проблема хорошо известна из статистической теории макроскопических открытых систем и связана с выбором характерных масштабов, так как он, к сожалению, не может быть универсальным [5].

Рассмотрим как могут решаться отмеченные вопросы для приборных структур на кремнии, включая фрагменты СБИС и УБИС.

### Примеры

В настоящее время показано [8], что диффузионно-дрейфовые модели обеспечивают приемлемую адекватность и точность моделирования приборов и структур на кремнии с характерными размерами активных областей, по крайней мере, более

100 нм. Такой диапазон характерен и для элементов современных СБИС и УБИС. В связи с этим на первом этапе методологии выбираем основные уравнения диффузионно-дрейфовой модели [13]:

$$q \frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla J_p - qR; \quad (1)$$

$$q \frac{\partial n}{\partial t} = \nabla J_n - qR; \quad (2)$$

$$J_T = J_p + J_n - \varepsilon \frac{\partial \nabla \Phi}{\partial t}; \quad (3)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \phi^p; \quad (4)$$

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \phi^n; \quad (5)$$

$$\nabla \varepsilon \nabla \Phi = -q(p - n + N_d^+ - N_a^-), \quad (6)$$

с дополнительными соотношениями

$$n = n_{i0} \exp[(\phi - \phi^n)/\Phi_T], \\ p = n_{i0} \exp[(\phi^p - \phi)/\Phi_T]. \quad (7)$$

Здесь  $n, p$  — концентрации подвижных электронов и дырок соответственно;  $t$  — время;  $J_T, J_n, J_p$  — векторы полной, электронной и дырочной плотностей токов;  $q$  — заряд электронов;  $R$  — превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации;  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость материала;  $\Phi$  — электростатический потенциал;  $N_d^+, N_a^-$  — концентрации ионизированных доноров и акцепторов;  $\mu_n, \mu_p$  — подвижности электронов и дырок;  $\Phi_T$  — температурный потенциал, равный  $k_B T/q$ ;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $T$  — температура;  $n_{i0}$  — собственная концентрация;  $\phi^n, \phi^p$  — квазипотенциалы Ферми электронов и дырок.

Для простоты рассмотрим одномерный случай без учета эффектов сильного легирования. Иллюстрация применимости методологии в многомерном случае с учетом эффектов сильного легирования затруднений не вызывает.

На втором этапе методологии осуществляется редукция (1)–(6) к системе ОДУ, имеющей схемную интерпретацию. Для конечно-разностной аппроксимации основных уравнений используем интегро-интерполяционный подход Тихонова—Самарского [11], в частности, метод интегрального тождества Марчука [14] или метод интегрирования на ячейке [15]. В результате для элементарного объема  $\Delta V_k = \Delta x_k A$  ( $A$  — площадь поперечного сечения структуры) для области сетки рис. 1 получается следующая аппроксимация уравнения Пуассона:

$$Q_{k+1/2}^c - Q_{k-1/2}^c = Q_k^n - Q_k^d - Q_k^p + Q_k^a, \quad (8)$$

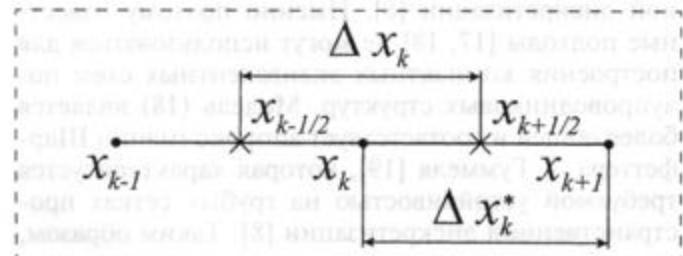


Рис. 1. Область сетки пространственной дискретизации в одномерном случае

где заряды и емкости задаются соотношениями

$$Q_{k+1/2}^c = C_{k+1/2}(\phi_{k+1} - \phi_k);$$

$$Q_{k-1/2}^c = C_{k-1/2}(\phi_k - \phi_{k-1});$$

$$C_{k+1/2} = \frac{A}{\int_{x_k}^{x_{k+1}} \epsilon^{-1} dx}; \quad C_{k-1/2} = \frac{A}{\int_{x_k}^{x_{k-1}} \epsilon^{-1} dx};$$

$$Q_k^d = qA \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} N_d^+ dx; \quad Q_k^a = qA \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} N_a^- dx;$$

$$Q_k^n = qAn_{i0} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \exp[(\phi - \phi^n)/\phi_T] dx;$$

$$Q_k^\rho = qAn_{i0} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \exp[(\phi^\rho - \phi)/\phi_T] dx.$$

Уравнение (8) — закон сохранения заряда для объема  $\Delta V_k$ . Дифференцируя по времени и учитывая, что  $\partial N_d^+ / \partial t = \partial N_a^- / \partial t = 0$ , получаем

$$\frac{dQ_{k+1/2}^c}{dt} - \frac{dQ_{k-1/2}^c}{dt} = \frac{dQ_k^n}{dt} - \frac{dQ_k^\rho}{dt}. \quad (9)$$

Для уравнения непрерывности электронов (2) выводим следующую аппроксимацию:

$$\frac{dQ_k^n}{dt} = I_{k+1/2}^n - I_{k-1/2}^n - I_k^R, \quad (10)$$

где токи  $I_{k-1/2}^n$ ,  $I_k^R$  выражаются с помощью формулы

$$I_{k-1/2}^n = qn_{i0}\phi_T A \times \frac{\exp(-\phi^n/\phi_T)_k - \exp(-\phi^n/\phi_T)_{k-1}}{\int_{x_k}^{x_{k+1}} \mu_n^{-1} \exp(-\phi/\phi_T) dx}, \quad (11)$$

$$I_k^R = qA \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} R dx. \quad (12)$$

Аналогичная аппроксимация получается для уравнения непрерывности дырок (1), а именно:

$$\frac{dQ_k^\rho}{dt} = -I_{k+1/2}^p + I_{k-1/2}^p - I_k^R, \quad (13)$$

где  $I_{k-1/2}^p$  имеет вид

$$I_{k-1/2}^p = -qn_{i0}\phi_T A \frac{\exp(\phi^\rho/\phi_T)_k - \exp(\phi^\rho/\phi_T)_{k-1}}{\int_{x_k}^{x_{k-1}} \mu_p^{-1} \exp(\phi/\phi_T) dx}.$$

Таким образом, после данных преобразований необходимо решать другую систему уравнений, которая имеет простую схемную интерпретацию.

Эквивалентная схема для случая большого сигнала для элемента объема получается из уравнений (8), (10) и (13), и ее вид приведен в [16]. Для случая малого сигнала эквивалентная схема показана на рис. 2. В этом случае уравнения (9), (10) и (13) могут рассматриваться как уравнения Кирхгофа для данной схемы. Здесь сразу же отметим принципиальное отличие от подходов [17, 18] на описываемом этапе. В них применяется локальная конечно-разностная аппроксимация основных уравнений. В предлагаемой методологии используется интегральная формулировка, что позволяет более плодотворно применять второй и третий подходы к синтезу моделей, и в конечном итоге получить компактные эквивалентные схемы полупроводниковых структур на грубых сетках пространственной дискретизации, т. е. добиться большей устойчивости разностной схемы.

Рассмотрим, как выводятся аналитические выражения для элементов схемы рис. 2.

Во-первых, для иллюстрации этого достаточно рассмотреть аппроксимации интегралов:

$$J_1^n = \int_{x_k}^{x_{k+1/2}} \exp[(\phi - \phi^n)/\phi_T] dx; \quad (14)$$

$$J^\phi = \int_{x_k}^{x_{k+1}} \mu_n^{-1} \exp(-\phi/\phi_T) dx; \quad (15)$$

$$J^R = \int_{x_k}^{x_{k+1/2}} R dx. \quad (16)$$

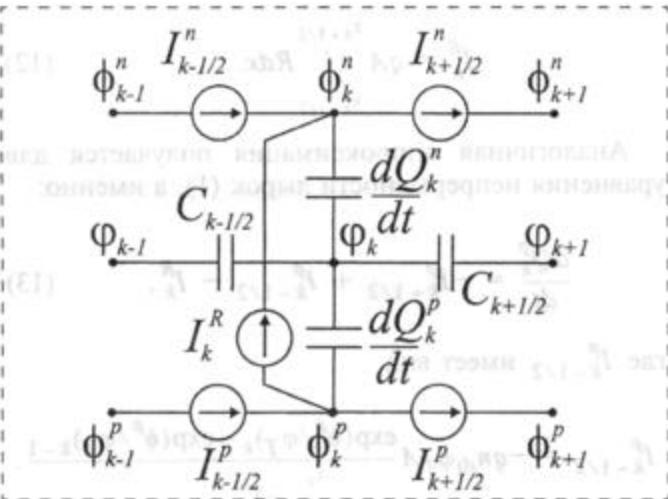


Рис. 2. Малосигнальная эквивалентная схема

Отметим, что интегралы от  $N_d^+$ ,  $N_a^-$ ,  $\epsilon$  могут быть вычислены достаточно точно, например с использованием более мелкой сетки  $\{x_i\}$ , так как эти функции известны.

Во-вторых, для аппроксимации интегралов (14)–(16) и других, входящих в (9), (10) и (13), на каждой области сетки рис. 1 должна привлекаться иерархия различных физических предположений [8, 16]. Так, используя только три предположения о постоянстве концентрации электронов и рекомбинации на  $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$ , а также линейности изменения электростатического потенциала на  $[x_k, x_{k+1}]$ , получим следующие аналитические модели для интегралов:

- 1) когда  $|\phi_k - \phi_{k+1}| \leq \epsilon^\Phi$ ,
- $$J^\Phi = \mu_n^{-1} \Delta x_k^* \exp(-\phi_k/\phi_T); \quad (17)$$
- 2) когда  $|\phi_k - \phi_{k+1}| > \epsilon^\Phi$ ,
- $$J^\Phi = -\frac{\mu_n^{-1} \phi_T \Delta x_k^* [\exp(-\phi_{k+1}/\phi_T) - \exp(-\phi_k/\phi_T)]}{\phi_{k+1} - \phi_k}; \quad (18)$$

$$3) J_1^n = 0,5 \Delta x_k^* \exp[(\phi_k - \phi_k^n)/\phi_T]; \quad (19)$$

$$4) J^R = 0,5 \Delta x_k^* R_k, \quad (20)$$

где  $\bar{\mu}_n$  — среднее значение подвижности на  $[x_k, x_{k+1}]$  ( $\bar{\mu}_n = (\mu_{nk} + \mu_{nk+1})/2$ );  $\epsilon^\Phi$  — параметр автоматического синтеза. Аппроксимация (17) является локальной конечно-разностной аппроксимацией, которая приводит к построению неустойчивых разностных схем на грубой сетке пространствен-

ной дискретизации [8]. Именно поэтому известные подходы [17, 18] не могут использоваться для построения компактных эквивалентных схем полупроводниковых структур. Модель (18) является более общей и соответствует аппроксимации Шарфеттера — Гуммеля [19], которая характеризуется требуемой устойчивостью на грубых сетках пространственной дискретизации [8]. Таким образом, получаются аналитические модели для интегралов и следовательно, набор моделей для элементов схемы каждой ячейки сетки пространственной дискретизации. Видно, что при выводе выражений (17)–(20) использовались второй и третий подходы к синтезу моделей.

На третьем этапе на грубой сетке  $\{x_k\}$  в результате решения системы ОДУ, которая включает (8), (10), (13) для случая большого сигнала [(9), (10), (13) — для малого сигнала], синтезируется вид компактной эквивалентной схемы всего прибора, при этом устанавливаются и соответствующие аналитические модели ее элементов. Например, если в результате решения  $|\phi_k - \phi_{k+1}| \leq \epsilon^\Phi$ , то используется модель (17) для  $J^\Phi$  и соответствующая модель элемента схемы. С целью применения и большого временного шага целесообразно использовать при аппроксимации по времени неявный метод Эйлера, характеризующийся максимальной устойчивостью. Заметим, что, вообще говоря, на каждом временном слое может быть синтезирована своя компактная эквивалентная схема, если осуществляется оценка ошибки усечения и перераспределение узлов сетки пространственной дискретизации. Для решения систем нелинейных алгебраических уравнений, возникающих на каждом временном шаге, целесообразно использование итерационных численных методов, в общем случае многоступенчатых [8].

На четвертом этапе идентификации параметров возможно применение двух отмеченных ранее процедур. Так, в случае расчета на более мелкой сетке как по времени, так и по пространству  $\{x_m\}$  определяются коэффициенты в моделях элементов. Например, в моделях интегралов (17)–(20) — это коэффициенты, явно не зависящие от основных переменных, т. е.  $\phi$ ,  $\phi^n$ .

Важными частными случаями в рамках предложенной методологии являются эквивалентные схемы физических процессов полупроводниковых приборов [11, 18]. Они соответствуют случаю, когда  $\epsilon^\Phi \rightarrow \infty$  (используются только аппроксимации вида (17)); мелкая сетка  $\{x_m\}$  применяется на третьем этапе, а четвертый этап не проводится. В результате компактная эквивалентная схема не может быть синтезирована, так как требуется более 80 ячеек на один  $p-n$ -переход [20]. В то же время с по-

мощью описанной методологии возможен и синтез компактных эквивалентных схем на сетках с числом узлов, меньшим десяти. Так, известная модель Гуммеля [21] для биполярного транзистора автоматически синтезируется всего лишь на одной ячейке сетки пространственной дискретизации в стационарном случае [16]. Недавно был предложен эффективный метод экстракции малосигнальных эквивалентных схем из результатов численного моделирования полупроводниковых приборов [22], и он также может интерпретироваться как частный случай предложенной методологии. Так, в методе, приведенном в [22], значительно упрощены этапы 2 и 3. Метод с успехом применялся для генерации компактных малосигнальных эквивалентных схем диода,  $n-p-n$  биполярного транзистора и  $n-p-n$  фототранзистора.

Разработанная методология применима и при необходимости учета тепловых эффектов. В данном случае аналоги уравнений Пуассона (8), непрерывности электронов (10) и дырок (13) дополняются, например, аналогом уравнения теплопроводности [23].

## Заключение

Предложена методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур, состоящая из четырех этапов. Методология основывается на трех выделенных подходах к синтезу моделей в рамках физики открытых систем. Рассмотрен ряд примеров применимости методологии для синтеза эквивалентных схем кремниевых приборов и структур. Показано, что важным компонентом для автоматического синтеза компактных эквивалентных схем является использование свойства устойчивости разностных схем, аппроксимирующих исходные уравнения, которые описывают с достаточной степенью адекватности и точности физические процессы в исследуемых структурах. Значительный интерес представляет иллюстрация применимости методологии для синтеза эквивалентных схем наноэлектронных приборов и структур. Наиболее сложным вопросом здесь будет являться выбор аппроксимаций для построения устойчивых разностных схем на грубых сетках пространственной дискретизации. Ситуация здесь, к сожалению, далека от достигнутой для кремниевых приборов и структур [8], и будет являться предметом для дальнейших исследований.

Автор считает своим приятным долгом выразить признательность проф. Serge Luryi и проф. Andrea

Pacelli за любезно предоставленные оттиски своих работ в обмен на оттиски моих работ [16, 23].

## Список литературы

1. Averin D. V., Likharev K. K. Possible application of the single charge tunneling. In: Single Charge Tunneling: Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures, ed. by H. Grabert, M. H. Devoret [NATO ASI Series B: Physics (N. Y., Plenum, 1992) v. 294]. P. 311–332.
2. Крон Г. Исследование сложных систем по частям (диакоптика). М.: Наука, 1972. 544 с.
3. Казенинов Г. Г., Соколов А. Г. Принципы и методология построения САПР БИС. М.: Высшая школа, 1990. 142 с.
4. Николос Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.
5. Климонтович Ю. Л. Критерии относительной степени упорядоченности открытых систем // УФН, 1996, 166 (11). С. 1231–1243.
6. Хакен Г. Синергетика: Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985. 423 с.
7. Ферри Д., Эйкерс Л., Гранич Э. Электроника ультрабольших интегральных схем. М.: Мир, 1991. 327 с.
8. Абрамов И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск: БГУ, 1999. 189 с.
9. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника, 1991, вып. 5. С. 3–9.
10. Абрамов И. И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем". Минск: БГУ, 1999. 92 с.
11. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
12. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. М.: Мир, 1979. 312 с.
13. Van Roosbroeck W. Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors // Bell System Techn. J., 1950, 29. P. 560–607.
14. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 456 с.
15. Varga R. S. Matrix Iterative Analysis. Prentice — Hall, Englewood Cliffs, 1962. 505 p.
16. Абрамов И. И. Метод синтеза эквивалентных схем полупроводниковых приборов и структур // Известия вузов СССР. Радиоэлектроника, 1985, 28 (11). С. 63–69.
17. Sah C. T. The equivalent circuit model in solid-state electronics // Proc. IEEE, 1967, 55 (5). P. 654–684.
18. Ohtsuki T., Kani K. A unified modeling scheme for semiconductor devices with applications of state-variable analysis // IEEE Trans., 1970, CT-17 (1). P. 26–32.
19. Scharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator // IEEE Trans., 1969. ED-16 (1). P. 64–77.
20. Maes H. E., Sah C. T. Application of the equivalent circuit model for semiconductors to the study of Au-doped p-n junctions under forward bias // IEEE Trans., 1976. ED-23 (10). P. 1131–1143.
21. Gummel H. K. A charge control relation for bipolar transistors // Bell System Techn. J., 1970. 49(1). P. 115–120.
22. Pacelli A., Mastrapasqua M., Luryi S. Generation of equivalent circuits from physics-based device simulation // IEEE Trans., 2000, CAD-19 (11). P. 1241–1250.
23. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Метод автоматического синтеза эквивалентных схем полупроводниковых приборов с учетом тепловых эффектов // Весні АН БССР. Сер. фіз.-енерг. наук, 1987, 3. С. 78–84.

# Применение МСТ

УДК 621.313.12 + 519.876.5 + 537.226.4

**И. Л. Багинский, канд. физ.-мат. наук,  
Э. Г. Костров, д-р физ.-мат. наук,  
Институт автоматики и электрометрии СО РАН  
(Новосибирск)  
e-mail: kostrov@iae.nsk.su)**

## МИКРОЭЛЕКТРОННЫЕ ВЫСОКОЭНЕРГОЕМКИЕ ГЕНЕРАТОРЫ ЭНЕРГИИ

*Описаны принцип работы и особенности изготовления с использованием технологии микрэлектроники емкостного электростатического генератора энергии на основе тонких сегнетоэлектрических пленок. Модуляция емкости осуществлялась путем механической вибрации решеток металлических полосок с осажденной сегнетоэлектрической пленкой. Проанализирована работа двухконденсаторного генератора с учетом потери заряда из-за токов утечки.*

### Введение

В настоящее время все большее внимание уделяется альтернативным способам получения энергии. Одним из перспективных путей развития энергетики является получение электрической энергии из различных источников с малой плотностью потока энергии (например, ветер, остаточная теплота технологических процессов и др.). В большинстве случаев такая энергия первоначально трансформируется в механическую энергию вращения роторов электромагнитных генераторов, а лишь затем — в электрическую. Однако при уменьшении плотности потока энергии такая схема преобразования энергии наталкивается на ряд принципиальных трудностей. Из-за малой плотности потока преобразуемой энергии (например, в ветроустановках — до  $100 \text{ Вт}/\text{м}^2$ ) КПД преобразования невысок. С уменьшением этой плотности возрастает отношение массы (объема) генератора к мощности получаемой электрической энергии — падает энергоемкость генератора, а также значительно возрастают стоимость единицы выработанной энергии (которая в значительной степени определяется невысокой надежностью согласующих редукторов) и стоимость вырабатываемой энергии. Кроме того, такие преобразователи энергии начинают работать только при достижении некоторого порогового потока энергии, например, при скорости ветра не менее 2 м/с. Эти факторы предопре-

деляют низкую конкурентную способность таких установок.

Одним из путей решения проблемы является преобразование энергии указанных маломощных источников в механические колебания малой амплитуды, совершаемые подвижной частью генератора с малой массой, которые далее непосредственно преобразуются в электрическую энергию.

Данная работа демонстрирует возможность создания преобразователей энергии механических колебаний с микрометровой амплитудой в электрическую энергию, которая вырабатывается емкостным электростатическим генератором, создаваемым методами микрэлектронной технологии.

### Электростатические генераторы энергии

Электростатические генераторы известны достаточно давно. Принцип их действия основан на совершении работы механических сил против сил электрического поля [1]. В емкостных генераторах эта работа совершается против действия электростатических сил притяжения разноименных заряженных пластин конденсатора, т. е. происходит модуляция емкости за счет механического фактора. В простейшем емкостном генераторе (машина Типлера [1]), схема которого приведена на рис. 1, преобразование механической энергии в электрическую имеет место при раздвижении пластин заряженного разомкнутого конденсатора, после чего конденсатор переключается на нагрузку — осуществляется съем электрической энергии.

### Микрэлектронный электростатический генератор энергии

Ранее нами был разработан новый принцип электромеханического преобразования энергии, основанный на использовании эффекта электростатиче-

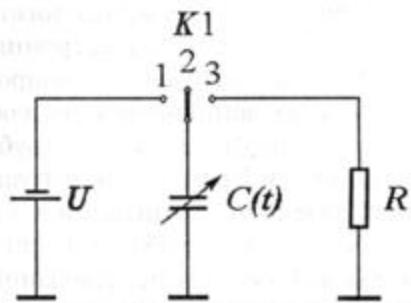


Рис. 1. Машина Типлера:  
K1 — ключ; U — источник напряжения; C — конденсатор; R — резистор

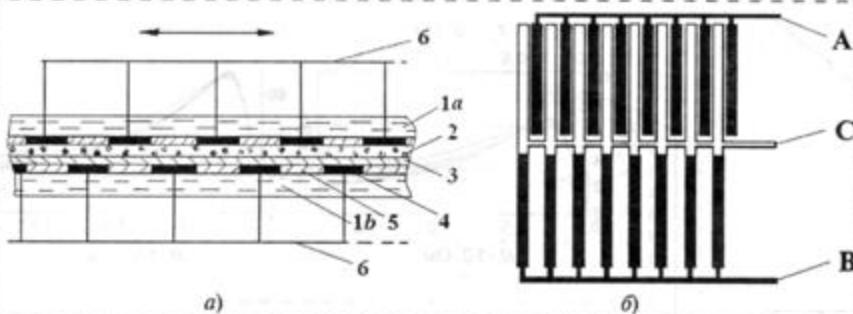


Рис. 2. Пример топологической реализации двумкостного генератора:

а — ячейка преобразования колебательной механической энергии в электрическую (конденсатор  $C_1$ ). Стрелками показано направление движения: 1 — подложка ( $1a$  — верхняя и  $1b$  — нижняя); 2 — зазор (может быть заполнен материалом с высоким  $\epsilon$ ); 3 — сегнетоэлектрическая пленка; 4 — металлические полоски; 5 — диэлектрик; линиями б схематически показано соединение верхних и нижних металлических полосок 4 в конденсатор; б — схематическое представление топологии двумкостного генератора (показаны только металлические полоски; полоски, расположенные на верхней подложке обозначены черным цветом, на нижней — белым); А — шина  $C_1$ , В — шина  $C_2$ , С — общая шина

ского наката свободных металлических пленок на поверхность сегнетоэлектрических пленок с высокой диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ , и создан на основе этого эффекта ряд электростатических микродвигателей [2]. Экспериментальные исследования закономерностей наката показывают, что под действием электростатических сил возможно изменение емкости в 100—1000 раз, при удельной емкости 100—1000 пФ/мм<sup>2</sup>. В принципе, при использовании обратного эффекта "отделения" от поверхности сегнетоэлектрика металлических пленок, прижатых к ней за счет действия сил электрического поля, возможна генерация электрической энергии. Однако возможно преобразование энергии и с помощью другой тонкопленочной конструкции на основе сегнетоэлектрических пленок, выполненной в виде сдвиговой решетки металлических полосок, расположенных на двух подложках, зазор между которыми заполнен диэлектрической (сегнетоэлектрик) средой с высокой диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  (рис. 2).

Рассмотрим принцип работы двухконденсаторного генератора (рис. 3, см. [3]). Он основан на

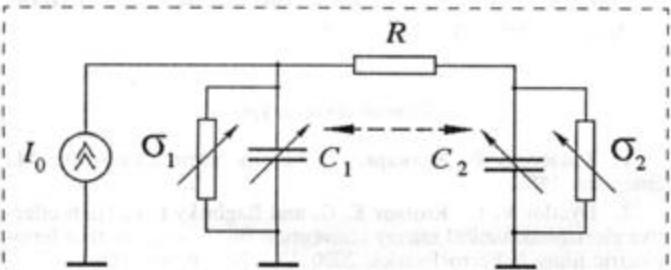


Рис. 3. Схема двумкостного генератора с учетом утечек  $\sigma_i$  (в общем случае изменяющихся во времени с периодом модуляции емкостей  $C_1$  генератора) и с компенсацией потерь за счет включения источника тока  $I_0$ ;  $R$  — сопротивление нагрузки

уменьшении одной группы емкостей в процессе колебания решетки и соответствующего увеличения в этот период времени емкости другой группы. При этом происходит перетекание заряда через сопротивление нагрузки  $R$  и нет необходимости использовать электронные ключи для передачи электрической энергии в нагрузку, что характерно для одноемкостных электростатических генераторов (см. рис. 1). Возможные потери заряда из-за наличия утечек  $\sigma_i$  ( $i = 1, 2$ ) компенсируются от внешнего источника постоянного тока  $I_0$ .

Математическая модель двухконденсаторного генератора и анализ различных режимов его работы проведены в работе [4]. На рис. 4 показано влияние глубины модуляции емкости конденсаторов  $C_1$  и  $C_2$  ( $\eta = C_{\max}/C_{\min}$ ) на максимальную эффективность преобразования энергии  $E_{\max} = P_{\max}/P_1$ , где  $P_{\max}$  — максимальная электрическая мощность, выделяемая на оптимально согласованной нагрузке  $R$ ;  $P_1$  — электрическая мощность, теряемая в сопротивлениях утечки. Увеличение утечек приводит к снижению эффективности, соответственно порог начала генерации энергии (при котором  $E_{\max} = 1$ ) сдвигается в сторону больших  $\eta_{kp}$ . Отметим, что хотя величина  $E_{\max}$  почти линейно зависит от глубины модуляции в области значений  $\eta = 3 \div 20$ , представляющих интерес для практического использования, в области больших  $\eta$  наблюдается тенденция к насыщению, а при  $\eta < 1$  значение эффективности стремится к нулю. Увеличение амплитуды колебаний решетки и перекрытие  $N$  линеек решетки за один период колебаний, эквивалентно увеличению частоты модуляции  $f$ . На рис. 5

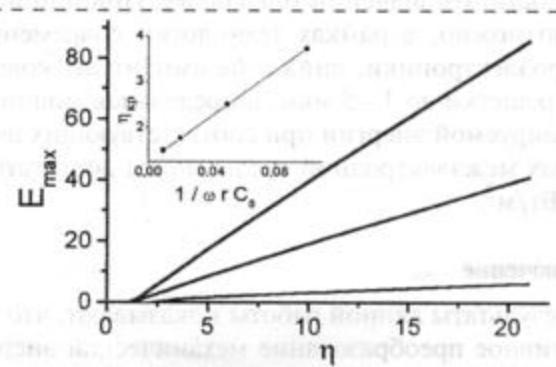


Рис. 4. Пример зависимости максимально возможной эффективности  $E_{\max}$  преобразования энергии от глубины  $\eta$  амплитудной модуляции емкости для  $1/\omega_r C_0 = 0,01; 0,02; 0,05$  (сверху вниз). На вставке — зависимость критической  $\eta_{kp}$ , с которой начинается генерация энергии от  $1/(\omega_r C_0)$

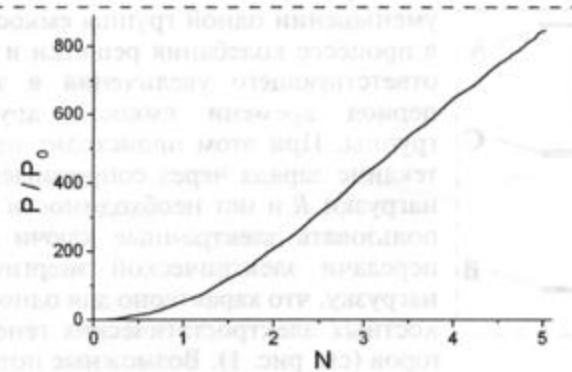


Рис. 5. Пример зависимости электрической мощности, развиваемой генератором, от числа  $N$  перекрываемых полосок решетки:  $P_0 = I^2 / (\omega C_0)$ ;  $\omega C_0 R = 1$ ;  $\sigma_0 / (\omega C_0) = 0,1$ ;  $C_0 = C_1 + C_2$ ;  $\sigma_0 = \sigma_1 + \sigma_2$

показана зависимость выходной мощности генератора от числа перекрываемых линеек решетки  $N$ .

Рис. 6 демонстрирует возможности рассматриваемого генератора в режиме стабилизации напряжения. Приведенная зависимость удельной мощности  $P$  генератора от  $R$  и  $r_0$  (где  $r_0$  — сопротивление утечки, в общем случае — переменное, усредненное за период колебаний) построена для решетки линеек с площадью  $1 \text{ см}^2$  и для следующих параметров:  $C_{\text{уд}} = 100 \text{ пФ/мм}^2$  (это минимальное значение), ширина электродов 20 мкм, расстояние между ними также 20 мкм,  $f = 160 \text{ Гц}$ , начальное напряжение на емкости 40 В при амплитуде колебаний 40 мкм, что соответствует перекрытию одной линейки решетки (рис. 6, а), и 200 мкм — амплитуда колебаний соответствует перекрытию пяти линеек решетки (рис. 6, б). Эффективность преобразования энергии — отношение энергии, вырабатываемой генератором за период колебаний, к энергии, теряемой в утечках  $\sigma_i$  ( $i = 1, 2$ ) может достигать значений 100 и более. Принципиально возможно, в рамках технологии современной микроэлектроники, снижение амплитуды колебаний решетки до 1–5 мкм, а предельная мощность генерируемой энергии при соответствующих параметрах межэлектродной среды может достигать до 10 кВт/м<sup>2</sup>.

## Заключение

Результаты данной работы показывают, что эффективное преобразование механической энергии в электрическую форму энергии возможно с помощью устройств, полностью создаваемых на основе технологии микроэлектроники. Преимущества таких генераторов по сравнению как с традиционными электростатическими генераторами, так и с

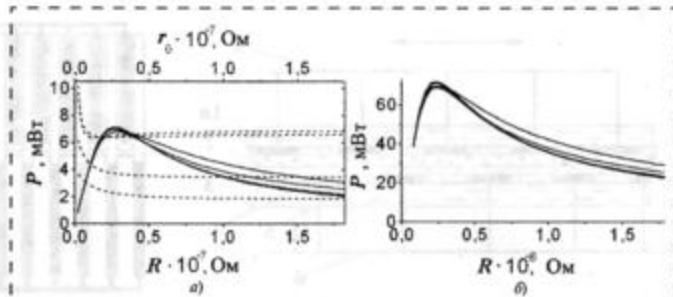


Рис. 6. Зависимость мощности ячейки генератора площадью  $1 \text{ см}^2$ :

а — от сопротивления нагрузки (сплошные кривые:  $r_0 = 10^6, 5 \cdot 10^6, 2 \cdot 10^7, 10^7 \text{ Ом}$  — сверху вниз) и от сопротивления утечки (штриховые линии:  $R = 2 \cdot 10^6, 4 \cdot 10^6, 10^7, 2 \cdot 10^7 \text{ Ом}$  — сверху вниз) для перекрытия одной линейки; б — от сопротивления нагрузки для случая перекрытия  $n = 5$  линеек ( $r_0 = 10^5, 2 \cdot 10^5, 4 \cdot 10^5, 10^6 \text{ Ом}$  — сверху вниз)

электромагнитными генераторами, заключаются в следующем:

- они остаются работоспособными в широком диапазоне механических нагрузок, генерация энергии имеет место уже при микрометровых сдвигах одной плоскости относительно другой, при этом практически отсутствует порог в интенсивности потока механической энергии;
- стоимость таких генераторов значительно ниже по сравнению с любыми известными аналогами в силу массовой и воспроизводимой технологии их изготовления, по этой же причине выше и их надежность;
- такие генераторы отличаются достаточно высокими массогабаритными характеристиками — удельная энергоемкость может достигать значений 100 Вт/кг и более;
- управление ими значительно более простое — достаточно иметь источник напряжения, в коммутации каналов нет необходимости;
- они допускают возможность параллельного их объединения на общую нагрузку;
- принцип их работы допускает создание достаточно гибких двух- и трехмерных конструкций, конструкций вращательного типа, когда колебания или непрерывное движение осуществляются относительно оси.

## Список литературы

1. Тэнэеску Ф., Крамарюк Р. Электростатика в технике. М.: Энергия, 1980.
2. Dyatlov V. L., Kostsov E. G. and Baginsky I. L. High-effective electromechanical energy conversion on the basis of thin ferroelectric films // Ferroelectrics. 2000. Vol. 241. P. 99–106.
3. Breaux O. P. Electrostatic energy conversion system. Патент США № 4127804, 1978.
4. Багинский И. Л., Косцов Э. Г. Анализ возможности создания микроэлектронного электростатического генератора энергии // Автометрия. 2002, № 1. С. 107–122.

УДК 621.317.772:681.325

В. М. Сапельников, д-р техн. наук,  
Р. А. Хакимов,  
Башкирский государственный университет

## ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЦИФРОАНАЛОГОВЫЕ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ И КАЛИБРАТОРЫ ФАЗЫ НА ИХ ОСНОВЕ

**Рассмотрены два метода построения цифроаналоговых преобразователей с нелинейной характеристикой преобразования. Используются два способа аппроксимации: кусочно-линейная и степенная. Показана возможность построения цифроуправляемых калибраторов фазы на основе функциональных цифроаналоговых преобразователей.**

Цифроаналоговые преобразователи (ЦАП) широко используются для преобразования сигналов в информационно-измерительной технике, радиотехнике и приборостроении. Они являются мощным средством увеличения точности отсчета. Особенно важно эти вопросы рассматривать в распределенных метрологических системах, разрабатываемых на основе микросистемной техники.

Существующие ЦАП могут выполнять только линейные преобразования вида  $U_{\text{вых}} = kU_{\text{оп}}$  [1, 2]. В то же время в различных областях техники необходимо с высокой точностью воспроизводить нелинейные функциональные зависимости. Например, такая необходимость возникает при построении цифроуправляемых фазовращателей и калибраторов фазы, так как зависимость фазового сдвига от изменения регулируемой величины всегда нелинейна [3, 4]. Наиболее предпочтительный способ для осуществления этой операции — использование ЦАП.

Для воспроизведения нелинейных функциональных зависимостей и моделирования их с помощью линейных ЦАП мы использовали два вида аппроксимации: кусочно-линейную аппроксимацию и аппроксимацию степенными рядами. Каждый из указанных видов аппроксимации предполагает свой способ аппаратной реализации. Однако оба способа для увеличения дискретности воспроизводимой функции используют стандартные многоразрядные ЦАП.

Рассмотрим первый способ (рис. 1), в котором используется линейная аппроксимация воспроизводимой функциональной зависимости  $y = f(x)$  в интервале  $[a + ih, a + (i + 1)h]$ . Здесь  $[a, b]$  — отрезок аппроксимации функциональной зависимости  $f(x)$ , который разбивается на интервалы величиной

$h = (b - a)/n$ ;  $i$  — номер интервала аппроксимации;  $n$  — число интервалов аппроксимации зависимости  $f(x)$ . Полагаем, что на отрезке аппроксимации функция неотрицательна, хотя данный способ может быть распространен и на отрицательные значения функции.

В качестве многоразрядного линейного ЦАП используется любой умножающий ЦАП с постоянным входным сопротивлением  $R_0$  [2]. Это может быть ЦАП, использующий резисторную матрицу  $R-2R$  и управляемый двоичным кодом, или делитель напряжения с шунтирующими декадами, управляемый десятичным кодом.

Если предположить, что напряжение, подводимое к функциональному ЦАП, равно максимальному значению функции на участке  $[a, b]$   $U = \max_{[a, b]} f(x)$ , тогда сопротивления  $R_{1i}, R_{2i}, R_0$  будут связаны между собой соотношениями

$$R_{1i} = \frac{R_0 f(a + ih)}{f(a + (i + 1)h) - f(a + ih)},$$

$$R_{2i} = R_0 \frac{\max_{[a, b]} f(x) - f(a + (i + 1)h)}{f(a + (i + 1)h) - f(a + ih)}.$$

Напряжения в схеме (рис. 1) при этом распределяются следующим образом:

$$U_a = U \frac{f(a + ih)}{\max_{[a, b]} f(x)}, \quad U_b = U \frac{f(a + (i + 1)h)}{\max_{[a, b]} f(x)}.$$

С помощью линейного ЦАП выходное напряжение  $U_{\text{вых}}$  изменяется от  $U_a$  до  $U_b$ , приближенно воспроизводя в  $i$ -м интервале зависимость  $f(x)$  с заданным шагом квантования. Для изменения интервала регулирования функциональной зависимости  $f(x)$  (старший разряд функционального ЦАП) используется ключ  $\Pi$ .

Естественно, что при таком построении функционального ЦАП последний имеет методическую погрешность, вызванную линейной аппроксимацией функциональной зависимости  $f(x)$  в интервале  $[a + ih, a + (i + 1)h]$ . Эта погрешность определяется выражением

$$\Delta = f(x) - y_i,$$

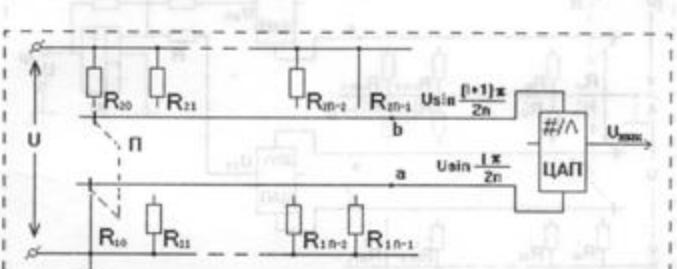


Рис. 1. Функциональный ЦАП — дискретный аналог синусного потенциометра

где  $y_i$  — уравнение прямой, аппроксимирующей зависимость  $f(x)$  в интервале  $[a + ih, a + (i + 1)h]$ .

Введем обозначение  $\Delta f = f(a + (i + 1)h) - f(a + ih)$ , тогда уравнение прямой запишется в виде

$$y_i = \frac{\Delta f}{h} (x - (a + ih)) + f(a + ih).$$

Здесь  $a + ih \leq x \leq a + (i + 1)h$ .

Методическая погрешность воспроизведения функции  $f(x)$  будет зависеть как от ее вида и выбранного отрезка аппроксимации, так и от номера и чисел участков аппроксимации.

Функциональные ЦАП, аппроксимирующие функции  $\sin\phi$  и  $\cos\phi$ , широко применяются при построении калибраторов фазы и фазовращателей [3, 4], в которых при формировании напряжения выхода реализуется соотношение

$$U = U \cos\phi + jU \sin\phi = U e^{j\phi}. \quad (1)$$

На рис. 2 приведена принципиальная схема калибратора фазы с поразрядным регулированием фазового сдвига. Схема состоит из двух функциональных ЦАП, моделирующих синусную и косинусную зависимости в интервале  $[0^\circ, 90^\circ]$ .

Ко входам устройства подводятся два синусоидальных напряжения, равных по модулю и сдвинутых по фазе на  $90^\circ$  (для регулирования фазового сдвига в одном квадранте). Эти напряжения подаются на функциональные ЦАП, которые с допустимой погрешностью воспроизводят зависимости  $\cos\phi$  и  $\sin\phi$ .

Для реализации соотношения (1) проводится суммирование выходных напряжений  $U_{1m}$  и  $U_{1q}$  с помощью операционного усилителя  $A1$ .

Кроме того, рассмотренный способ применим для построения цифроуправляемых потенциометрических и мостовых фазовращателей [4].

Второй способ, использующий *степенную аппроксимацию*, заключается в следующем. На рассматриваемом отрезке  $[a, b]$  функция  $f(x)$  заменяется многочленом  $P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ .

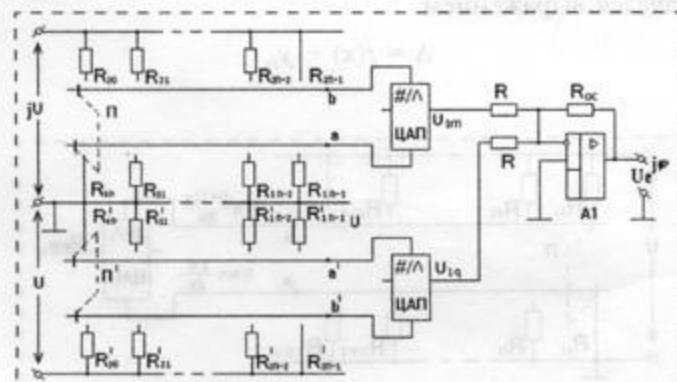


Рис. 2. К принципу построения синусно-косинусного калибратора фазы

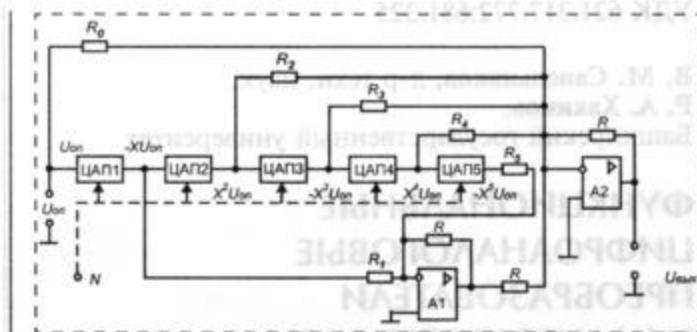


Рис. 3. Схема функционального цифроаналогового преобразователя

Моделирование многочлена осуществляется каскадно соединенными ЦАП (рис. 3).

В качестве ЦАП, изображенных на схеме, применяют умножающие ЦАП, которые могут работать с двуполярным опорным напряжением. Выходное напряжение таких ЦАП определяется по формуле

$$U = -U_{\text{оп}} \frac{R_N N}{RN_{\max}},$$

где  $N$  — текущий цифровой код, который изменяется в пределах от 0 до  $N_{\max} - 1$ ;  $N_{\max} = 2^m$ ;  $m$  — разрядность ЦАП;  $R$  — сопротивление матрицы резисторов;  $R_N$  — сопротивление резистора цепи обратной связи операционного усилителя ЦАП;  $U_{\text{оп}}$  — опорное напряжение. Отношение  $A = R_N/R$  называют масштабным коэффициентом, или масштабным множителем. Его можно изменять в широких пределах, изменяя значение  $R_N$ .

В схеме, приведенной на рис. 3, при подаче на цифровые входы ЦАП кода  $N$  на выходе ЦАП1 формируется напряжение

$$U_1 = -U_{\text{оп}} A \frac{N}{N_{\max}}.$$

Это напряжение является входным для второго ЦАП, а напряжение на его выходе будет определяться соотношением

$$U_2 = -U_1 A \frac{N}{N_{\max}} = U_{\text{оп}} \left( -A \frac{N}{N_{\max}} \right)^2.$$

Продолжая этот ряд, для  $k$ -го ЦАП можно записать:

$$U_k = U_{\text{оп}} \left( -A \frac{N}{N_{\max}} \right)^k.$$

Напряжения с выходов ЦАП через резисторы  $R_1, R_2, \dots, R_5$  подаются на вход сумматора  $A2$ . Для обеспечения необходимого знака сигнала напряжения с выходов первого и пятого ЦАП проходят через инвертор  $A1$ . Дополнительно на сумматор че-

рез резистор  $R_0$  подается опорное напряжение. На выходе сумматора формируется напряжение

$$U_{\text{вых}} = - \left( \frac{R}{R_0} U_{\text{оп}} - \frac{R}{R_1} U_1 + \frac{R}{R_2} U_2 + \frac{R}{R_3} U_3 + \frac{R}{R_4} U_4 - \frac{R}{R_5} U_5 \right)$$

или (с учетом предыдущего уравнения)

$$U_{\text{вых}} = -U_{\text{оп}} \left( \frac{R}{R_0} - \frac{R}{R_1} \left( -A \frac{N}{N_{\max}} \right) + \frac{R}{R_2} \left( -A \frac{N}{N_{\max}} \right)^2 + \dots - \frac{R}{R_5} \left( -A \frac{N}{N_{\max}} \right)^5 \right).$$

Обозначим  $x = A \frac{N}{N_{\max}}$ ,  $|a_i| = \frac{R}{R_i}$ , тогда последнее уравнение примет вид

$$U_{\text{вых}} = -U_{\text{оп}} (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5) \approx -U_{\text{оп}} f(x).$$

Коэффициенты многочлена, реализуемого по данной схеме, имеют следующие знаки:  $a_0 > 0$ ,  $a_1 > 0$ ,  $a_2 > 0$ ,  $a_3 < 0$ ,  $a_4 > 0$ ,  $a_5 > 0$ . Если коэффициенты имеют другие знаки, то схема претерпевает лишь незначительные изменения. Таким образом, мы получаем выходное напряжение, пропорциональное аппроксимируемой функции  $f(x)$ .

Необходимо указать на ограничение, которое накладывается каскадным включением ЦАП на диапазон изменения масштабного коэффициента  $A$ . При подаче на цепочку ЦАП кода, близкого к  $N_{\max}$ , выходное напряжение  $k$ -го ЦАП пропорционально  $U_{\text{оп}}(-A)^k$ . Для  $A > 1$  эта величина возрастает в геометрической прогрессии и может привести к насыщению операционных усилителей. Поэтому целесообразно устанавливать  $A$  равным 1 и аппроксимировать функцию исходя из того, что аргумент  $x$  изменяется от 0 до 1.

Из вышесказанного следует, что для воспроизведения многочлена  $P_n(x)$  степени  $n$  необходимо иметь  $n$  каскадно включенных ЦАП. Коэффициенты многочлена реализуются подбором резисторов  $R$ ,  $R_0$ ,  $R_1$ , ...,  $R_k$ , а знаки слагаемых устанавливаются с помощью инвертора.

Для того чтобы погрешность, вызванная аппроксимацией (методическая погрешность), была минимальной, необходимо соответствующим образом подобрать коэффициенты многочлена.

Нами рассмотрены три метода вычисления этих коэффициентов.

Наиболее распространенный метод аппроксимации функции  $f(x)$  — ее разложение в ряд Тейло-

ра. В общем виде это разложение функции  $f(x)$  в окрестности точки  $x_0$  осуществляется по формуле

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} (x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \dots$$

Разложение функции в ряд Тейлора не является единственным. Существует возможность разложить функцию в ряд по обобщенным многочленам, например, по многочленам Лежандра, Чебышева, Якоби, Эрмита или Лагерра. Здесь мы остановимся на многочленах Чебышева, поскольку они дают наилучшее приближение [5, 6].

Для нахождения коэффициентов  $C_k$  разложения по многочленам Чебышева  $f(x) = \sum_{k=0}^n C_k T_k(x)$  используем следующие формулы:

$$C_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 f(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi f(\cos \theta) d\theta;$$

$$C_k = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 f(x) T_k(x) dx = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi f(\cos \theta) \cos(k\theta) d\theta, \quad k > 0.$$

Подставив вместо многочленов Чебышева их выражения через переменную  $x$ , а затем приведя подобные члены, получим искомый многочлен

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n.$$

Согласно общим теоремам теории аппроксимации, разложение функции  $f(x)$  в ряд по многочленам Чебышева дает наилучшее приближение из всех возможных. Необходимо отметить, что разложение функции  $f(x)$  по многочленам Чебышева возможно только для функций, имеющих непрерывную первую производную на отрезке  $[-1, 1]$ . Это условие обеспечивает сходимость ряда к функции  $f(x)$ . Для большинства элементарных функций это условие выполняется.

Следующий метод основан на теории интерполяции [5]. В этом случае строят многочлен, который в  $n+1$  заданных точках  $x_0, x_1, \dots, x_n$ , принимает значения  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ , а в остальных точках отрезка  $[a, b]$ , принадлежащего области определения  $f(x)$ , приближенно представляет функцию  $f(x)$  с той или иной степенью точности. Для нахождения коэффициентов многочлена  $a_k$  составляется система уравнений

$$a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_n x_i^n = f(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, n,$$

которая легко решается методом Крамера.

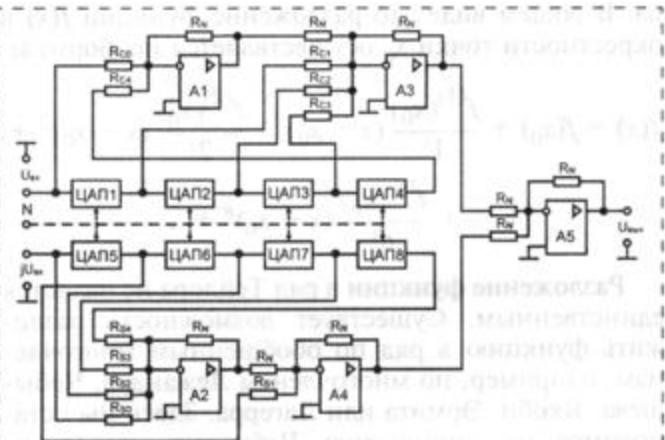


Рис. 4. Широкополосный калибратор фазы на основе функциональных ЦАП

Функциональный ЦАП, использующий степенную аппроксимацию тригонометрических функций, является основой построения широкополосного цифроуправляемого калибратора фазы (рис. 4).

Выходное напряжение калибратора фазы формируется в соответствии с зависимостью

$$\dot{U}_{\text{вых}} = -(C(x)\dot{U}_{\text{вх}} + jS(x)\dot{U}_{\text{вх}}) \approx -(\cos\left(\frac{\pi}{2}x\right)\dot{U}_{\text{вх}} + j\sin\left(\frac{\pi}{2}x\right)\dot{U}_{\text{вх}}) = -\dot{U}_{\text{вх}} e^{j\frac{\pi}{2}x},$$

где

$$\begin{aligned} C(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 \approx \cos(\pi x/2), \\ S(x) &= b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + b_4 x^4 \approx \sin(\pi x/2) \end{aligned}$$

— многочлены, аппроксимирующие функции  $\cos(\pi x/2)$  и  $\sin(\pi x/2)$ . Здесь  $x$  — относительное значение цифрового кода  $N/N_{\max}$ , подаваемого на входы всех ЦАП, оно изменяется в интервале  $[0, 1]$ ;  $N_{\max}$  — максимальное значение цифрового кода  $N$ . Это позволяет регулировать угол фазового сдвига в диапазоне от  $\pi$  до  $\pi + \pi/2$ . Преобразование входного гармонического сигнала по синусоидальному и косинусоидальному законам осуществляется двумя функциональными ЦАП.

Для регулирования угла фазового сдвига в других квадрантах необходимо изменить полярность на выходах одного или двух функциональных ЦАП. Этого можно добиться, добавив инвертор на выход соответствующего функционального ЦАП или выбрав в качестве нелинейного закона преобразования функцию с противоположным знаком.

Степень многочленов  $C(x)$  и  $S(X)$  выбирается исходя из требуемой точности, она определяет число используемых в схеме линейных ЦАП. Для упрощения устройства следует стремиться к тому, чтобы уменьшить число каскадно включенных ЦАП без увеличения погрешности.

n	Метод Чебышева		Интерполяция		Метод Тейлора	
	$\Delta\phi, ^\circ$	$\delta U_{\text{вых}}, \%$	$\Delta\phi, ^\circ$	$\delta U_{\text{вых}}, \%$	$\Delta\phi, ^\circ$	$\delta U_{\text{вых}}, \%$
3	0,07	0,2	0,06	0,2	0,5	1
4	0,009	0,01	0,009	0,01	0,1	0,6
5	0,0006	0,001	0,0006	0,001	0,01	0,06
6	0,0006	0,0003	0,0006	0,0002	0,002	0,002

Методическую погрешность воспроизведения угла фазового сдвига и нестабильность выходных напряжений такого калибратора фазы можно уменьшить, применяя для расчета коэффициентов степенной аппроксимации метод Чебышева или интерполяцию. Методическая погрешность воспроизведения фазового сдвига и нестабильность амплитуды выходного напряжения калибратора фазы определяются по следующим формулам:

$$\Delta\phi = \frac{\pi}{2}x - \arctg \frac{S(x)}{C(x)};$$

$$\delta U_{\text{вых}} = \frac{U_{\text{вх}} - U_{\text{вых}}}{U_{\text{вх}}} = 1 - \sqrt{C^2(x) + S^2(x)}.$$

В таблице приведены максимальные значения погрешностей для упомянутых методов в сравнении с методом Тейлора. Здесь  $n$  — степень многочленов  $S(x)$  и  $C(x)$ .

Анализ данных, приведенных в таблице, показывает, что метод Чебышева и интерполяция дают значительное снижение методических погрешно-

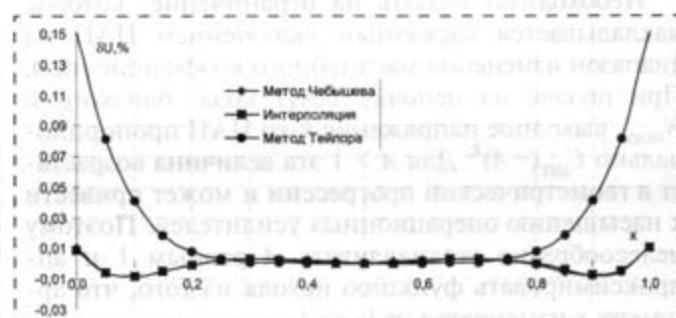


Рис. 5. Нестабильности выходного напряжения при регулировании фазового сдвига в интервале  $[\pi, 3\pi/2]$

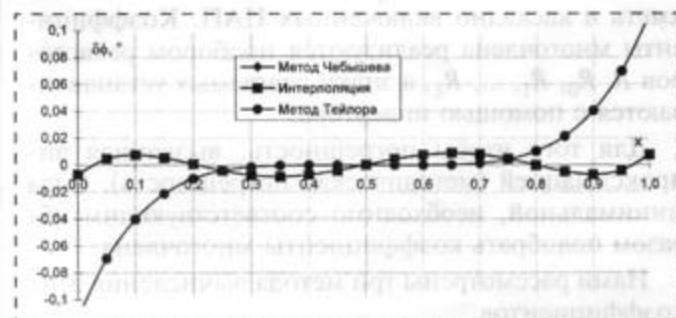


Рис. 6. Погрешность воспроизведения фазового сдвига при регулировании в интервале  $[\pi, 3\pi/2]$

стей в сравнении с разложением в ряд Тейлора. Это обстоятельство позволяет сократить число включенных каскадно ЦАП при заданной погрешности калибратора.

Распределение погрешностей в интервале регулирования фазового сдвига (интервале аппроксимации) для случая  $n = 4$  показано на рис. 5 и 6. Как видно из графиков, погрешности интерполяции и метода Чебышева практически совпадают.

\*\*\*

Рассмотренные функциональные ЦАП и созданные на их основе калибраторы фазы состоят только из интегральных микросхем и резисторов и могут быть изготовлены в виде микросборок. На точность воспроизведения указанных функций заметно влияют отношения сопротивлений резисто-

ров. Интегральное исполнение резисторов позволяет снизить погрешности сопротивлений, вызванные температурными колебаниями и обеспечить тем самым более высокие метрологические характеристики.

#### Список литературы

- Быстров Ю. А., Великсон Я. М., Богдан В. Д. и др. Электроника: Справочная книга. СПб.: Энергоатомиздат, 1996. 544 с.
- Федорков Б. Г., Телен В. А. Микросхемы ЦАП и АЦП. М.: Энергоатомиздат, 1990. 320 с.
- Сапельников В. М., Кравченко С. А., Чмых М. К. Проблемы воспроизведения смещаемых во времени электрических сигналов и их метрологическое обеспечение. Уфа: Изд. Башкирск. гос. ун-та, 2000. 196 с.
- Сапельников В. М. ЦАП в калибраторах фазы. Уфа: Изд. Башкирск. ун-та, 1997. 152 с.
- Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. М.: Физматлит, 1959. 464 с.
- Броиштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике: Для инженеров и учащихся вузов. М.: Наука, 1986. 544 с.

## В МИРЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 539.217:542.8

А. Н. Лаптев<sup>1)</sup>,

А. В. Проказников<sup>1, 2)</sup>, канд. физ.-мат. наук,

Н. А. Рудь<sup>1)</sup>, канд. физ.-мат. наук,

<sup>1)</sup>Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

E-mail: rud@univ.uniyar.ac.ru

<sup>2)</sup>Институт микроэлектроники и информатики

РАН, г. Ярославль

E-mail: prok@imras.yar.ru

### АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ В СЕНСОРНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Обнаружен обратимый процесс возникновения отрицательной дифференциальной проводимости динамических вольт-амперных характеристик структур на пористом кремнии  $p$ -типа под воздействием паров поверхности активных веществ. Воздействие паров веществ с полярными молекулами приводит к появлению автоколебательных процессов как при исследовании вольт-амперных характеристик, так и при релаксации обратного тока структуры. Наблюдаемые эффекты связываются с образованием глубоких поверхностных уровней и их зарядкой в процессе токопрохождения при наличии среды, содержащей поверхностью активные молекулы.

#### Введение

Основное внимание исследователей пористого кремния (ПК) и структур на его основе уделяется явлениям фото-(ФЛ) и электролюминесценции

(ЭЛ), их зависимости от условий получения пористого кремния, структуры и качества пористых слоев и металлических контактов. Исследования электрофизических свойств структур на основе ПК представляют интерес как для понимания самого процесса ЭЛ, так и процессов токопрохождения в ПК. Так, в работах [1, 2] при исследовании динамических вольт-амперных характеристик электролюминесцентных структур на  $p$ - и  $n$ -Si был обнаружен гистерезис на прямой и обратной ее ветвях. В этих работах гистерезисные явления объясняются наличием медленных ловушек для основных носителей заряда в ПК. Как показали исследования, параметры гистерезиса в значительной мере зависят от свойств молекул (атомов) окружающей среды. Воздействие молекул (атомов) определенного сорта способно коренным образом поменять динамику происходящих в системе процессов, приводя к возникновению автоколебаний в системе [3].

Длительное хранение устройств на основе ПК вызывает модификацию их свойств, что необходимо учитывать при использовании приборов на основе пористых веществ. Этот аспект проблемы тесно связан с изучением электрофизических свойств структур на основе ПК. Изучение электрофизических свойств устройств на основе пористых материалов (кремний, арсенид галлия и т. д.) при наличии взаимодействия с окружающей средой является важным как с точки зрения понимания природы процессов электролюминесценции и токопрохождения в пористых полупроводниках, так и для понимания специфики влияния поверхностных процессов на объемные свойства. Все сказанное выше

стей в сравнении с разложением в ряд Тейлора. Это обстоятельство позволяет сократить число включенных каскадно ЦАП при заданной погрешности калибратора.

Распределение погрешностей в интервале регулирования фазового сдвига (интервале аппроксимации) для случая  $n = 4$  показано на рис. 5 и 6. Как видно из графиков, погрешности интерполяции и метода Чебышева практически совпадают.

\*\*\*

Рассмотренные функциональные ЦАП и созданные на их основе калибраторы фазы состоят только из интегральных микросхем и резисторов и могут быть изготовлены в виде микросборок. На точность воспроизведения указанных функций заметно влияют отношения сопротивлений резисто-

ров. Интегральное исполнение резисторов позволяет снизить погрешности сопротивлений, вызванные температурными колебаниями и обеспечить тем самым более высокие метрологические характеристики.

#### Список литературы

- Быстров Ю. А., Великсон Я. М., Богдан В. Д. и др. Электроника: Справочная книга. СПб.: Энергоатомиздат, 1996. 544 с.
- Федорков Б. Г., Телен В. А. Микросхемы ЦАП и АЦП. М.: Энергоатомиздат, 1990. 320 с.
- Сапельников В. М., Кравченко С. А., Чмых М. К. Проблемы воспроизведения смещаемых во времени электрических сигналов и их метрологическое обеспечение. Уфа: Изд. Башкирск. гос. ун-та, 2000. 196 с.
- Сапельников В. М. ЦАП в калибраторах фазы. Уфа: Изд. Башкирск. ун-та, 1997. 152 с.
- Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. М.: Физматлит, 1959. 464 с.
- Броиштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике: Для инженеров и учащихся вузов. М.: Наука, 1986. 544 с.

## В МИРЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 539.217:542.8

А. Н. Лаптев<sup>1)</sup>,

А. В. Проказников<sup>1, 2)</sup>, канд. физ.-мат. наук,

Н. А. Рудь<sup>1)</sup>, канд. физ.-мат. наук,

<sup>1)</sup>Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

E-mail: rud@univ.uniyar.ac.ru

<sup>2)</sup>Институт микроэлектроники и информатики

РАН, г. Ярославль

E-mail: prok@imras.yar.ru

### АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ В СЕНСОРНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Обнаружен обратимый процесс возникновения отрицательной дифференциальной проводимости динамических вольт-амперных характеристик структур на пористом кремнии  $p$ -типа под воздействием паров поверхности активных веществ. Воздействие паров веществ с полярными молекулами приводит к появлению автоколебательных процессов как при исследовании вольт-амперных характеристик, так и при релаксации обратного тока структуры. Наблюдаемые эффекты связываются с образованием глубоких поверхностных уровней и их зарядкой в процессе токопрохождения при наличии среды, содержащей поверхностью активные молекулы.

#### Введение

Основное внимание исследователей пористого кремния (ПК) и структур на его основе уделяется явлениям фото-(ФЛ) и электролюминесценции

(ЭЛ), их зависимости от условий получения пористого кремния, структуры и качества пористых слоев и металлических контактов. Исследования электрофизических свойств структур на основе ПК представляют интерес как для понимания самого процесса ЭЛ, так и процессов токопрохождения в ПК. Так, в работах [1, 2] при исследовании динамических вольт-амперных характеристик электролюминесцентных структур на  $p$ - и  $n$ -Si был обнаружен гистерезис на прямой и обратной ее ветвях. В этих работах гистерезисные явления объясняются наличием медленных ловушек для основных носителей заряда в ПК. Как показали исследования, параметры гистерезиса в значительной мере зависят от свойств молекул (атомов) окружающей среды. Воздействие молекул (атомов) определенного сорта способно коренным образом поменять динамику происходящих в системе процессов, приводя к возникновению автоколебаний в системе [3].

Длительное хранение устройств на основе ПК вызывает модификацию их свойств, что необходимо учитывать при использовании приборов на основе пористых веществ. Этот аспект проблемы тесно связан с изучением электрофизических свойств структур на основе ПК. Изучение электрофизических свойств устройств на основе пористых материалов (кремний, арсенид галлия и т. д.) при наличии взаимодействия с окружающей средой является важным как с точки зрения понимания природы процессов электролюминесценции и токопрохождения в пористых полупроводниках, так и для понимания специфики влияния поверхностных процессов на объемные свойства. Все сказанное выше

обусловило необходимость более детально анализировать вольт-амперные характеристики (ВАХ) [4] и релаксационные характеристики, полученные в различных условиях, наряду с изучением процессов ЭЛ и фоточувствительности (ФЧ).

### Формирование структур и постановка эксперимента

Слои ПК изготавливались на монокристаллических пластинах *n*-Si типа КЭФ-20 с кристаллографической ориентацией (100) путем электролитического анодирования [5, 6]. Специальная технология приготовления электролюминесцентных структур [5, 6] затрагивала два важных аспекта: управляемое, воспроизводимое формирование структур с особой морфологией пористой структуры и окончательное создание электролюминесцентных структур с помощью лазерной обработки образцов на базе сформированного слоя ПК.

Морфология пористой структуры контролировалась выбором рабочей точки на ВАХ процесса анодирования кремния в растворах плавиковой кислоты [5, 6]. Получающиеся при этом структуры стабильно воспроизводимы с точки зрения морфологии и электролюминесцентных свойств [7, 8] и имеют при этом достаточно высокий квантовый выход ЭЛ. В качестве нижнего омического контакта к *n*-Si в наших структурах Me-PK-Si-Me (Me — металл) использовался вожженный Al. Для верхнего металлического контакта использовалась Pt. Этот контакт был изготовлен следующим образом. Естественная диэлектрическая пленка, которая образуется над слоем ПК в процессе анодирования, служила в качестве межслойного диэлектрика. В тех местах, где требовался контакт металла с ПК, пленка удалялась импульсами N<sub>2</sub>-лазера с контролем числа импульсов, попавших в точку.

На образце B<sub>2</sub> (см. классификацию в [1]) было сформировано два типа структур:

- структуры типа "точки" аналогичны таким же структурам для образца B<sub>5</sub>;
- структуры типа "гребенки", которые представляют собой встречно-штыревые структуры из узких (ширина 20 мкм с шагом 100 мкм) металлических полос. Эта структура была изготовлена таким образом, чтобы можно было менять геометрию протекания тока: перпендикулярно ("сэндвичевая" геометрия) и по поверхности образца соответственно.

В результате мы могли исследовать фактически три различные структуры на одном образце B<sub>2</sub>:

- 1) "гребенки правые" в "сэндвич"-геометрии;
- 2) "гребенки" по поверхности;
- 3) "точки плюс левые гребенки" в "сэндвич"-геометрии.

Следует отметить, что для структур типа 3 потенциал зажигания видимого глазом свечения составлял  $U \approx 20$  В при токе  $I \approx 20$  мА, при этом на-

блюдалось голубовато-белое свечение, хорошо заметное в темноте. Структуры 1 в "сэндвич"-геометрии загораются при потенциале  $U \approx 60$  В при токе  $I \approx 30$  мА. При этом на фоне голубовато-белого свечения заметны яркие вспышки красного свечения, которые начинают доминировать по мере увеличения разности потенциалов на структуре. На структурах 2 ЭЛ не наблюдалась при разности потенциалов на них до 100 В. Данные исследований сопротивлений структур 1 и 3 при пропускании тока в геометрии "сэндвича" и структур 2 по поверхности свидетельствуют о наличии слоя диэлектрика у всех структур. Однако у структур типа "гребенки" этот слой имеет большую толщину [7] ввиду большего сопротивления и большего потенциала зажигания видимой ЭЛ при меньшем токе [1, 7, 8].

На образце B<sub>5</sub> (см. классификацию в [1]) было сформировано два типа структур. Структуры типа "точки" состоят из равноотстоящих отверстий с диаметром около 20 мкм (шаг 100 мкм) в пленке ПК. На структурах типа "квадраты" отверстия представляют собой равноотстоящие друг от друга (с тем же шагом) квадраты со стороной 20 мкм. После этого на поверхность напылялся металл толщиной около 0,2 мкм. На обоих типах структур металл удалялся лазерным рисованием везде, кроме узких линий, содержащих "точки" или "квадраты". Таким образом, на каждом кристалле с ПК формировались две структуры типа "точки" и "квадраты", каждая из которых состояла из 1600 точек и квадратов. В силу специфики образования "точек" и "квадратов" при формировании отверстия в диэлектрике использовалось разное число импульсов N<sub>2</sub>-лазера. Эти особенности проявились в некотором отличии ВАХ структур типа "точки" и "квадраты", что сказывалось на различных пороговых токах наблюдаемой ЭЛ, а также на характере этой ЭЛ [1, 7, 8].

Сформированные на образце структуры имели различные характеристики. Для структур B<sub>5</sub> типа "точки" потенциал зажигания видимого глазом свечения составлял  $U \approx 20$  В при  $I \approx 30$  мА, при этом наблюдалось не слишком яркое, ровное бело-голубое свечение. Сопротивление структуры при пропускании тока через подложку от одной стороны структуры к другой ("сэндвич"-геометрия) было порядка  $r_{\uparrow}^{(o)} \approx 21$  кОм при "минусе" на Pt (обратное смещение) и  $r_{\downarrow}^{(o)} \approx 9,4$  кОм при "плюсе" на Pt (прямое смещение).

Для структур типа "квадраты" потенциал зажигания видимого ЭЛ свечения составлял  $U \approx 50$  В при  $I \approx 10$  мА, при этом наблюдалось неравномерное бело-голубое свечение с яркими красными вспышками. Сопротивление структуры при пропускании тока через подложку от одной стороны структуры к другой ("сэндвич"-геометрия) было

порядка  $r_{\uparrow}^{(0)} \approx 346$  кОм при "минусе" на Pt (обратное смещение) и  $r_{\downarrow}^{(0)} \approx 28,4$  кОм при "плюсе" на Pt (прямое смещение).

Эти данные свидетельствуют о наличии слоя диэлектрика у обеих структур. Однако у структур типа "квадраты" этот слой имеет большую толщину [7] ввиду большего сопротивления и большего потенциала зажигания видимого ЭЛ свечения при меньшем токе [2, 7, 8].

### Стимулированная отрицательная дифференциальная проводимость структур на пористом кремнии

Ниже мы излагаем результаты исследования динамических ВАХ и релаксации обратного тока структур на ПК *n*-типа под воздействием различных полярных молекул на поверхностные состояния ПК.

Исследовались образцы  $B_2$  и  $B_5$  (см. классификацию в [1]). Описание образцов  $B_5$  подробно представлено в работе [9]. ВАХ исследованных структур снимались в динамическом режиме, для чего на структуру подавалось периодическое, линейно меняющееся напряжение в диапазоне от +10 до -10 В, а период развертки напряжения варьировался от 10 до  $10^3$  с. В работах [1, 2] нами были подробно описаны экспериментальные закономерности при исследовании ВАХ структур на основе ПК. В частности, был обнаружен гистерезис ВАХ, причем гистерезис обратного тока (на *c*-Si подавался потенциал: для *p*-Si более отрицательный, а на *n*-Si более положительный, чем на верхний металлический (Pt) контакт) был относительно большим, чем для прямого тока, и зависел от предыстории, т. е. от того, какой заряд прямого тока протекал до этого через структуру, а также от скорости изменения обратного смещения. Подача обратного смещения в начале развертки напряжения приводила практически к полному отсутствию гистерезиса обратного тока, тогда как гистерезис прямого тока практически не зависел от предыстории. Это трактовалось нами как захват основных носителей заряда (электронов в *n*-Si, дырок в *p*-Si) на глубокие поверхностные уровни при протекании прямого тока с последующей эмиссией этих носителей с ловушек [1, 2]. Этот механизм вполне объяснял поведение ВАХ при периодическом линейно изменяющемся смещении на структуре. При уменьшении смещения независимо от предыстории прямой ток мог быть только выше, чем при нарастании смещения. В то же время для обратного тока картина диаметрально противоположна: при уменьшении смещения ток меньше, чем при росте смещения. Такая картина поведения динамических ВАХ наблюдалась на различного типа электролюминесцентных структурах (как на *n*-Si, так и на *p*-Si [1, 2, 9]).

Окружающая среда существенным образом влияла на ВАХ исследуемых структур. В частности, хранение структур при нормальной температуре и нормальном атмосферном давлении на воздухе с влажностью 50—70% в течение нескольких месяцев привело к существенным изменениям в поведении ВАХ некоторых структур. Так, у структур  $B_5$  типа "точки" для обратного смещения появилась отчетливая область отрицательной дифференциальной проводимости (см. рис. 1, б [9]), которая проявляется при различных периодах развертки от 10 до  $10^3$  с после прохождения прямого тока через структуру. Для структуры 3 ("точки" плюс левые "гребенки") образца  $B_2$ , как и для  $B_5$  "точки", наблюдается менее отчетливая область с отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП) для обратного смещения после прохождения прямого тока при различных периодах развертки. Остальные структуры не проявляли рассмотренных особенностей поведения обратного тока при исследовании динамических ВАХ (рис. 1, а и д).

Однако характер поведения обратного тока существенным образом изменился при воздействии паров веществ с полярными молекулами: эфир, ацетон, вода. Так, пары эфира и ацетона воздействуя на структуру  $B_5$  "квадраты", обусловили появление отчетливой области с ОДП для обратного смещения, причем эта область появляется при различных потенциалах (рис. 1, б, в). Воздействие паров эфира с водой привело не только к появлению

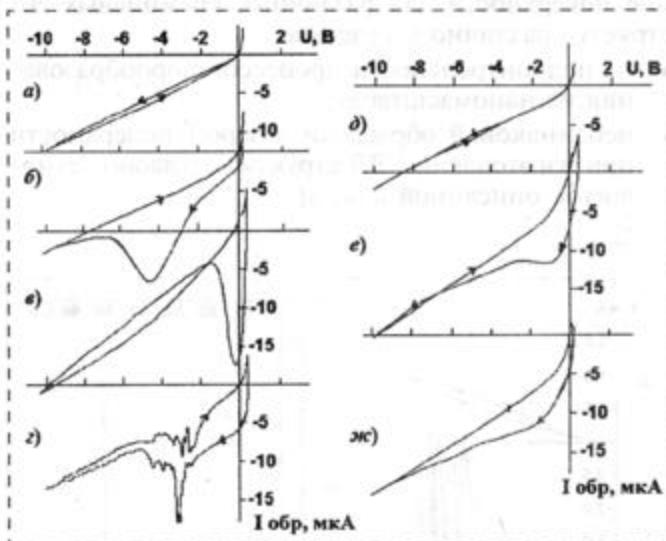


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики образцов  $B_5$  (типа "квадраты", "сэндвичевая" геометрия):

*a* — после нескольких дней хранения на воздухе; *b* — в атмосфере эфира после 1,5—2 ч хранения; *v* — то же, что *b*, но в атмосфере ацетона; *g* — то же, что *b* с добавлением паров воды в состав окружающей образец атмосферы.

Вольт-амперные характеристики образцов  $B_2$  (типа "гребенки", "сэндвичевая" геометрия): *d* — после нескольких дней хранения на воздухе; *e* — в атмосфере эфира после 1,5—2 ч хранения; *ж* — после 8 дней хранения в атмосфере эфира

области с ОДП, но через некоторое время обусловило появление колебательных процессов обратного тока при изменении обратного смещения на исследуемой структуре (рис. 1, г). Амплитуда и период этих колебаний в значительной мере отличается от колебаний, наблюдавшихся на структурах  $B_5$  "точки" [9]. Наличие паров эфира при исследовании динамических ВАХ структур  $B_2$  с "гребенкой" в различной геометрии протекания тока привело к различным эффектам. При "сэндвичевой" геометрии (структура 1 образца  $B_2$ ), кроме появления области с ОДП, никаких осцилляционных эффектов не наблюдалось (рис. 1, е, ж). При протекании тока по поверхности (структуре 2 образца  $B_2$ ) воздействие полярных молекул эфира привело к появлению стохастических выбросов на динамической ВАХ (рис. 2, а, б), которые также отчетливо наблюдались при исследовании релаксации тока через эту структуру (рис. 2, в).

Вакуумирование исследованных структур приводило к восстановлению их динамических ВАХ и исчезновению как ОДП, так и осцилляционных эффектов на динамических ВАХ и релаксационных кривых. Повторные воздействия паров поверхности активных веществ с полярными молекулами обуславливали появление рассмотренных эффектов.

Обсудим основные закономерности, обнаруженные в результате проведенных экспериментов. Как показывают результаты экспериментов по влиянию адсорбированных молекул на электрофизические свойства структур на основе ПК, состояние поверхности для различных кремниевых ЭЛ структур различно вследствие:

- не подконтрольности процессов порообразования на наномасштабах;
- неодинаковой обработки лазером поверхности при изготовлении ЭЛ структур согласно технологии, описанной в [7, 8].

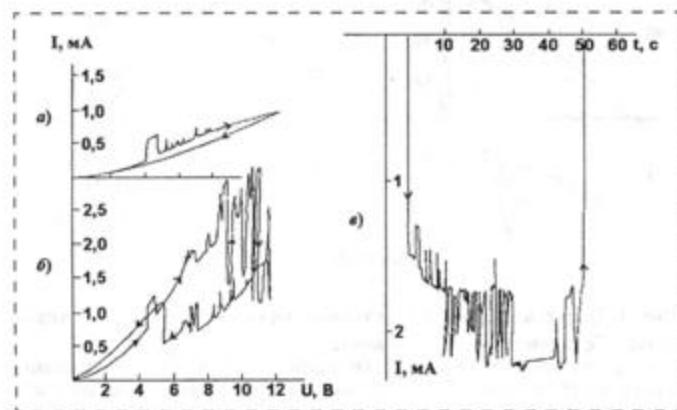


Рис. 2. Вольт-амперная характеристика образцов  $B_2$  (типа "гребенки", геометрия по поверхности):  
а — в эфире в течение 1 ч; б — после хранения в эфире в течение 2,5 ч; в — релаксация тока после 3 ч хранения в эфире

Анализ экспериментальных данных согласуется с моделью, в соответствии с которой обмен зарядами между адсорбированными поверхностно активными молекулами и полупроводником происходит как через валентную зону, так и через поверхностные состояния. На подобный вывод указывает анализ данных, приведенных на рис. 1. Участок с ОДП появляется при воздействии молекул эфира, однако это не приводит к появлению осцилляции на ВАХ, хотя на образце  $B_5$ , описанном в работе [9], осцилляции были четко зафиксированы. В данном случае осцилляции появляются на спадающем участке ВАХ лишь после добавления молекул воды в составе атмосферы.

Подобное поведение можно объяснить на основании модели, согласно которой осцилляции на ВАХ возникают в ходе обмена носителями как с валентной зоной полупроводника, так и с поверхностными состояниями. Участок с ОДП появляется при обмене носителями с поверхностными состояниями, когда имеют место вакантные состояния на поверхности кремния, занимаемые полярными молекулами в ходе адсорбции. Этот участок формируется, согласно [9], вследствие специфики заполнения полярными молекулами (эфир, ацетон, вода) поверхности и обмена носителями с поверхностными состояниями, энергетические уровни которых, как было отмечено выше, зависят от приготовления и обработки поверхности образцов. Как следует из рис. 1, энергии поверхностных состояний разного сорта адсорбированных полярных молекул различны, о чем свидетельствует разное положение участка с ОДП для различных полярных молекул (эфир, ацетон). При наличии участка с ОДП на спадающей части ВАХ наблюдаются квазирегулярные осцилляции на ВАХ при обмене носителями с валентной зоной (см. рис. 1 и соответствующий рисунок в [4]). При отсутствии участка с ОДП квазирегулярных колебаний не наблюдается. Возникновение осцилляции связано с глобальной синхронизацией локальных процессов в системе, что возможно при наличии положительной обратной связи. Такого рода связь возникает, если ВАХ системы имеет участок с отрицательной дифференциальной проводимостью, что и наблюдалось на эксперименте, описанном выше.

С течением времени поведение ВАХ структур при наличии адсорбции поверхности активных веществ, как правило, с полярными молекулами, претерпевает значительные изменения. Участок с ОДП постепенно исчезает, при этом гистерезис по-прежнему остается на ВАХ (см. рис. 1, ж). Это связано с тем, что со временем происходит полное насыщение вакантных адсорбционных центров, с наличием которых во многом и связано существование участка с ОДП. Таким образом, синхронизация возникающих колебаний связана с наличием ОДП на ВАХ, когда имеется место обмен носителями

заряда как с поверхностными уровнями, так и с валентной зоной.

Развитая теоретическая модель связывает различие в положении участка с ОДП с разным поведением зависимостей степени заполнения поверхности адсорбированными молекулами для различных веществ. В нашем случае эта зависимость напрямую связана, во-первых, с параметрами, характеризующими как латеральное взаимодействие молекул, так и их различное взаимодействие с поверхностью, и, во-вторых, с изменением давления со стороны полярных молекул с ростом приложенного на структуру напряжения. Как отмечалось в работе [9], область с ОДП возникает, когда степень заполнения имеет участок резкого роста и близка к насыщению. Адсорбционные кривые, характеризующие зависимость степени заполнения поверхности адсорбированными молекулами от давления, приведены, например, в работе [10].

В пользу модели, связанной с зарядкой глубоких уровней, в отличие от модели, основанной на чисто химическом взаимодействии [11], которая развита для процессов порообразования в кремнии, свидетельствуют следующие факты. Во-первых, достаточно большое время зарядки ловушек (порядка нескольких часов [9]), что характерно для такого рода процессов, и, во-вторых, различное положение участка с ОДП для одного и того же состава окружающей среды (эфир) в случае использования различных структур (сравни рис. 1, б и 1, е). Этот факт связан с различными режимами обработки поверхности лазером при формировании разных структур на основе ПК. В случае химических процессов характерные реакции происходили бы при одинаковых потенциалах активации, определяющих протекание определенных реакций, которые одинаковы для различной обработки поверхности лазером. Обработка же лазером поверхности различных структур на основе ПК отличалась всего лишь несколькими импульсами, что, по-видимому, не вносило существенных изменений в химический состав, изменения лишь адсорбционные характеристики поверхности.

В планарной геометрии протекания тока на ВАХ не наблюдалось участка с ОДП для исследованных образцов (см. рис. 2). Различная форма ВАХ для разной геометрии протекания тока свидетельствует о вкладе контактных явлений в формирование ВАХ. В планарной геометрии форма ВАХ связана с работой контактов металла с ПК. Кроме того, проявление эффекта для разных геометрий имеет разный порядок. Так, в "сэндвичевой" геометрии очень значителен вклад шунтирующего тока ("bypass" current), тогда как в планарной геометрии у носителей нет иного пути, как через более толстый слой вкрапленных в диэлектрическую матрицу нанокристаллитов, поэтому эффекты в "сэндвичевом" режиме слабее выражены и наблю-

даются в области токов ~1–10 мА, а в планарной геометрии — в областях токов ~1–2 мА.

Стохастические "выбросы" на ВАХ связаны с влиянием прохождения носителей через область вкрапленных в диэлектрическую матрицу нанокристаллитов. Стохастические "выбросы" имеют место и на релаксационных зависимостях  $I(t)$  (см. рис. 2). Отметим, что наблюдается корреляция между наличием вспышек на спектрах ЭЛ и стохастических "выбросов" на ВАХ, т. е. вспышки ЭЛ непосредственно связаны с "выбросами" на ВАХ [2].

Изложенные выше результаты имеют значение в связи с двумя фактами. Во-первых, обнаруженные закономерности во многом аналогичны процессам, наблюдаемым в ходе порообразования в системе электролит/кремний [9, 11]. Во-вторых, они важны с точки зрения понимания процессов деградации свойств структур на основе ПК и могут быть использованы при создании устройств, использующих адсорбционные свойства пористого кремния.

#### Автоколебания в низкоразмерных системах на основе пористого кремния

В этом разделе излагаются результаты исследования ВАХ и релаксации обратного тока структур  $B_5$  на пористом кремнии  $n$ -типа после длительного хранения (несколько месяцев) в атмосфере с влажностью 50–70% и воздействия полярных молекул, которые присутствуют в атмосфере, на поверхности состояния в пористом кремнии.

Изучение ВАХ исследованных структур также проводилось в динамическом режиме путем подачи на структуру периодически линейно меняющегося напряжения в диапазоне от +10 до -10 В. Период развертки напряжения варьировался от 10 до  $10^3$  с.

После хранения данных структур с ПК на  $n$ -Si при нормальной температуре, нормальном атмосферном давлении и влажности 50–70% в течение нескольких месяцев произошли существенные изменения ВАХ некоторых структур. Как отмечалось выше, у структур типа  $B_5$  "точки" для обратного смещения формировалась отчетливая область ОДП (рис. 3, б). Эта область ОДП имела место при различных периодах развертки от 10 до  $10^3$  с. Было установлено, что ОДП появляется для обратного смещения только после прохождения прямого тока через структуру. В противном случае, при обратном смещении, ОДП на исследуемой структуре не наблюдалась (рис. 3, а). Наличие ОДП всегда может привести к колебательным процессам, если в системе имеется положительная обратная связь. Были исследованы для структур процессы релаксации обратного тока после переключения с прямого смещения на обратное до появления в них участка с ОДП. На рис. 4, б представлена типичная зависимость релаксационного тока от времени.

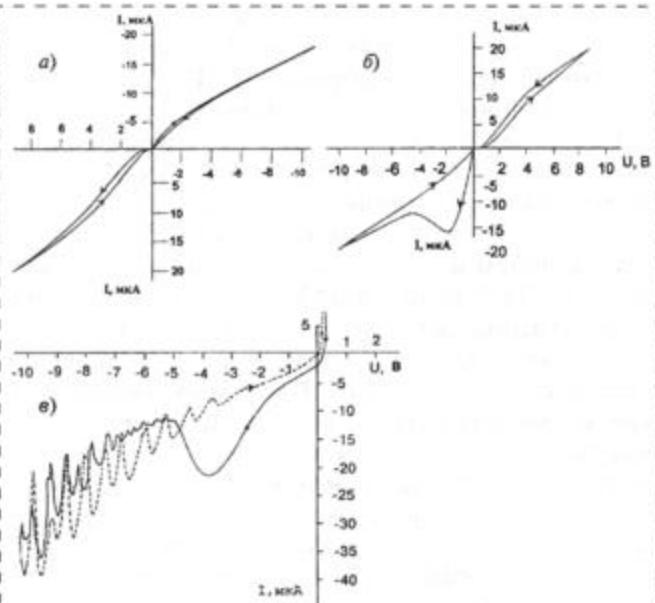


Рис. 3. Вольт-амперные характеристики ЭЛ структур:  
а — при обходе от обратного смещения ("плюс" на образец Si, "минус" на Pt) к прямому в воздухе; б — при обходе от прямого смещения ("минус" на образец Si, "плюс" на Pt) к обратному в воздухе; в — то же, что и б, но в атмосфере полярных молекул (эфир)

Исследования показали, что характер релаксации практически слабо зависит от обратного смещения, но значение релаксационного тока в момент переключения знака смещения на структуре зависело от прямого смещения. Следует отметить, что в этой релаксации присутствует как быстрый компонент (характерное время составляет менее секунды), так и медленная с характерным временем от нескольких секунд до нескольких минут. Наличие релаксации прямого тока при переключении смещения на структуре с ПК установлено в работе [12]. Авторы этой работы объясняют наличие обнаруженной релаксации прямого тока перезарядкой глубоких уровней на интерфейсе ПК-SiO<sub>2</sub>.

Таким образом, все исследования динамических ВАХ и релаксации прямого и обратного тока в структурах с ПК указывают на существенное влияние глубоких уровней (играющих роль ловушек для основных носителей заряда), которые могут образоваться как в самом ПК, так и на границе ПК с оксидами [12, 13]. Следовательно, мы можем влиять на их состояния посредством воздействия поверхности активных полярных молекул. По-видимому, структура на ПК в силу специфики ее формирования, в которой проявляется ОДП, подверглась существенному воздействию полярных молекул атмосферы (вероятнее всего это молекулы воды [13]). Для проверки данного предположения мы поместили исследуемую структуру с наличием ОДП в среду с наличием поверхностью активных

веществ (в нашем случае молекул эфира), которые обладают дипольным моментом (в частности, индуцированным). Мы предполагали, что воздействие этих молекул на поверхностные состояния в ПК более существенное, поэтому эффект влияния их на электрофизические свойства исследованных структур проявится за более короткое время. Через 1,5–2 ч произошли разительные изменения ВАХ структур. На рис. 3, в представлена типичная зависимость обратного тока от смещения после воздействия прямого смещения (период развертки напряжения составлял 100 с). На этой зависимости четко обнаруживаются осцилляционные эффекты в поведении обратного тока, которые начинают развиваться при обратных смещениях ( $U_{\text{обр}} \geq 5$  В) и увеличиваются по амплитуде с ростом этого смещения. Наиболее четко они наблюдаются на обратном ходе (штриховая линия на рис. 3, в). Отметим, что затухание осцилляции на обратном ходе происходит при меньших смещениях, чем их возникновение. Поскольку на исследуемых ВАХ изменяется смещение на структуре и время, то мы не наблюдаем периодических колебаний обратного тока. Однако, при изучении релаксации обратного тока после переключения с прямого смещения (+10 В) на обратное (> 5 В) были обнаружены строго периодические, со временем нарастающие по амплитуде, колебания обратного тока при фиксированном обратном смещении (см. рис. 3, а). При смещениях, меньших 5 В, таких периодических колебаний обратного тока не наблюдается, хотя релаксация явно имеет достаточно сложный

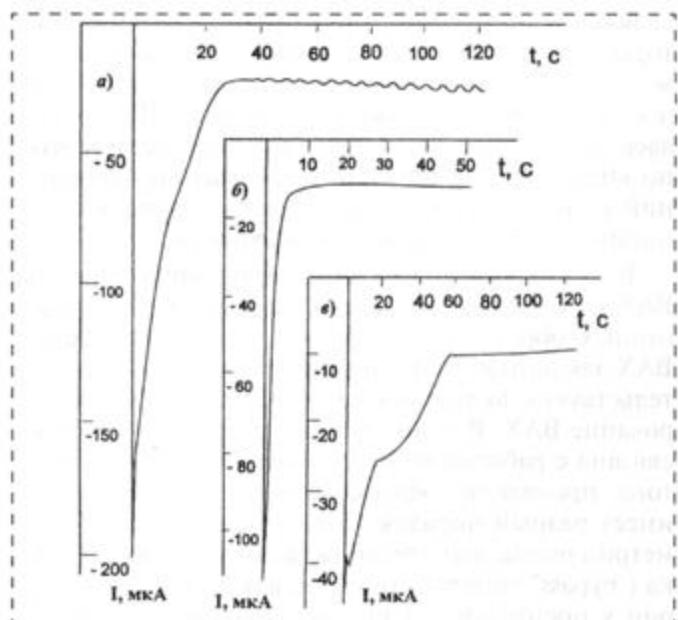


Рис. 4. Релаксация обратного тока после переключения с прямого на обратное направление в атмосфере полярных молекул (эфир): а — при  $U > 5$  В; б — при малых  $U < 1$  В; в — при  $U = 4,5$  В

характер (см рис. 3, в). Отметим, что при обратном смещении 4,5 В релаксационный обратный ток, по-видимому, обуславливается различными механизмами.

### Кинетика поверхностных процессов в системе: адсорбированные полярные молекулы/полупроводник

Динамика наблюдаемых явлений объясняется следующей картиной. Молекулы поверхности активных веществ из атмосферы встраиваются определенным образом в слой диэлектрика, порождая поверхностные центры (ловушки в данном случае для электронов), способные изменять свое зарядовое состояние либо под воздействием приложенного внешнего электрического поля, либо под воздействием адсорбированных полярных молекул. Поверхностно активные полярные молекулы (спирты, эфиры, кетоны, ацетон и др.) из окружающей среды адсорбируются на поверхностные состояния, которые, как показывают эксперименты по релаксации тока, являются медленными состояниями. Как показывают эксперименты (см. рис. 1—4), под действием внешнего электрического поля определенной полярности поверхностные состояния, теряя электрон, который уходит на полярные молекулы, заряжаются положительно. При обратной полярности зарядки поверхностных состояний не происходит (см. рис. 3) вследствие того, что электронные состояния ловушек заняты электронами. Эти факты позволяют сделать заключение о знаке зарядов поверхностных центров при определенной поляризации. Число поверхностных состояний достаточно велико, о чем свидетельствует мощность "ямы" на гистерезисе (см. рис. 3), так что при смене полярности, когда заряженные состояния вступают в действие, на обратной ветви ВАХ обнаруживается образование в виде "ямы" ("мешка"). При сравнительно небольших потенциалах часть электронов с полярными молекулами начинает приходить на поверхностные состояния за счет туннелирования. Полярные молекулы при этом заряжаются положительно. С повышением потенциала заполняется все большая часть поверхностных состояний. Наблюдается максимум тока на ВАХ; это значение потенциала соответствует наиболее оптимальным условиям туннелирования электронов с полярных молекул на поверхностные центры. При заполнении большей части поверхностных центров ток при повышении потенциала начинает падать. Образуется участок ВАХ с отрицательной проводимостью. При этом заряды с поверхностных центров уходят вследствие диффузии по поверхностным состояниям. Для работы этого механизма необходимо наличие большого числа поверхностных центров в рабочем состоянии, способных принимать носители определенного знака,

что достигается на начальном этапе приложением разности потенциалов определенной полярности. Затем с поверхности десорбируют активационным образом заряженные молекулы. На их место приходят новые, и процесс возобновляется.

Пусть  $\tau_t$  и  $\tau'_t$  — время прямого туннелирования носителей заряда с полярных молекул на поверхностные состояния и обратного (с поверхностных состояний на молекулы). Кроме времен электронных движений  $\tau_t$  и  $\tau'_t$  поверхностные процессы описываются временем адсорбции нейтральных молекул (атомов)  $\tau_a$  и временем активационного преодоления (ухода) поверхностного барьера заряженной полярной молекулой (атомом)  $\tau_s$ . Времена адсорбции определяются сечением захвата полярных молекул поверхностью  $\sigma_m$  и потоком налетающих молекул  $J_m$ :

$$\tau_a = (\sigma_m J_m)^{-1}. \quad (1)$$

Время активационного преодоления поверхности барьера заряженной полярной молекулой, которое описывает как десорбцию с поверхности, так и, в принципе, уход под поверхность, выражается формулой

$$\tau_s = \tau_s^0 \exp \left\{ \frac{E_s - e\varepsilon a}{k_B T} \right\}, \quad (2)$$

где  $\tau_s^0 \approx 10^{-12}$  с — характерное время молекулярных колебаний;  $E_s$  — высота барьера;  $E'_s = E_s - e\varepsilon a$  — высота поверхностного барьера, понижающаяся за счет возникающего в поверхностной пленке электрического поля напряженности

$$\varepsilon = \bar{\varepsilon}^{(in)} + \bar{\varepsilon}^{(out)}, \quad (3)$$

причем  $\bar{\varepsilon}^{(in)}$  — напряженность двойного слоя, возникающего между заряженными поверхностными центрами и полярными молекулами;  $\bar{\varepsilon}^{(out)}$  — напряженность приложенного внешнего электрического поля;  $e$  — заряд электрона;  $a$  — расстояние от адсорбированной частицы до поверхности;  $k_B$  — постоянная Больцмана.

Напряженность электрического поля двойного слоя, связанная с поверхностной концентрацией  $P$  заряженных полярных молекул, определяется формулой плоского конденсатора

$$\varepsilon^{(in)} = \frac{4\pi e P}{\varepsilon}, \quad (4)$$

где  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость двойного слоя. Образование электрического поля  $\bar{\varepsilon}^{(in)}$  связано с процессами переброса электронов из ловушек

в кремнии через диэлектрическую пленку к адсорбированным полярным молекулам и обратно в зависимости от стадии процесса (в частности, от полярности образца кремния). При этом на поверхности образуются заряженные полярные молекулы, а на границе раздела диэлектрик/полупроводник — заряженные противоположно поверхностные центры. В понижение поверхностного барьера вносит вклад суперпозиция внешнего и внутреннего полей  $\vec{E}$ .

Кинетические уравнения для концентрации  $P$  адсорбированных на поверхности нейтральных и заряженных полярных молекул могут быть записаны в следующем виде:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\Gamma - P}{\tau_T} - \frac{P}{\tau'_T} - \frac{P}{\tau_s}; \quad (5)$$

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \frac{\Gamma_t - \Gamma}{\tau_a} - \frac{\Gamma}{\tau_d} - \frac{P}{\tau_s}, \quad (6)$$

здесь  $\Gamma$  — суммарная поверхностная концентрация нейтральных и заряженных полярных молекул;  $\Gamma_t$  — концентрация активных центров адсорбции (совпадающая с концентрацией ловушек). В правой части (5) первый член есть число заряженных полярных молекул, образующихся в результате туннелирования электронов, второй — число заряженных молекул, теряющих электрон в результате обратного процесса, третий — поток заряженных молекул, покидающих поверхность активационным образом. При составлении уравнения предполагалось, что зарядом, сосредоточенным в пленке, можно пренебречь. Уравнение (6), аналогично (5), описывает кинетику прихода/ухода на поверхностные состояния нейтральных полярных молекул.

Рассмотрим нестационарное (зависящее от времени) решение системы уравнений (5), (6). Для этого выразим из (5) величину  $\Gamma$  и подставим его в (6). После преобразований получаем:

$$\ddot{P} + 2\gamma \dot{P} + \omega_0^2 P = \frac{\Gamma_t}{\tau_T \tau_a}, \quad (7)$$

$$\text{где } 2\gamma = [(\tau_T)^{-1} + (\tau'_T)^{-1} + (\tau_s)^{-1} + (\tau_d)^{-1} + (\tau_a)^{-1}]; \quad (8)$$

$$\omega_0^2 = \{[(\tau_a)^{-1} + (\tau_d)^{-1}] [(\tau_T)^{-1} + (\tau'_T)^{-1} + (\tau_s)^{-1}] + (\tau_T)^{-1} (\tau_s)^{-1}\}. \quad (9)$$

Определим положение равновесия:

$$P_0 = \frac{\Gamma_t}{\omega_0^2 \tau_T \tau_a}. \quad (10)$$

Число заряженных полярных молекул представим в виде (см., например, [14])

$$P = P_0 + Q, \quad (11)$$

где  $Q$  — отклонение от равновесия.

Вместо (7) получим выражение, аналогичное уравнению для осциллятора при наличии сил трения (см. [14]):

$$\ddot{Q} + 2\gamma \dot{Q} + \omega_0^2 Q = 0. \quad (12)$$

Отметим, что фазовой диаграммой динамических переменных является наматывающаяся спираль.

При наличии электрических полей внутреннего и внешнего, представленного в виде (3), величины, входящие в  $\gamma$ ,  $\omega_0$ ,  $\Gamma_t$  (см. (8), (9)), зависят от  $\vec{E}$ . При наличии электрического поля смещается и положение равновесия, что связывается с изменением числа адсорбированных молекул.

Учитем нелинейные по полу (и по концентрации  $P$  полярных молекул) эффекты при условии, когда  $\tau_T, \tau'_T \ll \tau_a, \tau_d, \tau_s$ , т. е. времена туннелирования являются самыми малыми. Уравнение (7) перепишется в виде

$$\ddot{P} + 2\tilde{\gamma} \dot{P} + \tilde{\omega}_0^2 P + \frac{1}{\tau_T \tau_s} P = \frac{\Gamma_t}{\tau_T \tau_a}, \quad (13)$$

$$\text{где } 2\tilde{\gamma} = [(\tau_T)^{-1} + (\tau'_T)^{-1}]; \quad (14)$$

$$\tilde{\omega}_0^2 = \{[(\tau_a)^{-1} + (\tau_d)^{-1}] [(\tau_T)^{-1} + (\tau'_T)^{-1}]\}. \quad (15)$$

Запишем величину  $(\tau_s)^{-1}$  в виде

$$(\tau_s)^{-1} = (\tau_s^0)^{-1} \exp \left\{ -\frac{E_s - e\varepsilon a}{k_B T} \right\} =$$

$$= (\tau_s^0)^{-1} \exp \left\{ -\frac{E_s}{k_B T} \right\} \exp \left\{ \frac{e\varepsilon a}{k_B T} \right\} =$$

$$= (\tau_s^0)^{-1} \left\{ 1 + \frac{e\varepsilon a}{k_B T} + \frac{1}{2!} \left( \frac{e\varepsilon a}{k_B T} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (16)$$

Ограничимся в (16) первым членом разложения. Вместо (13) с учетом (4) получим:

$$\ddot{P} + 2\tilde{\gamma} \dot{P} + \Omega_0^2 P + \beta P^2 = \frac{\Gamma_t}{\tau_T \tau_a}, \quad (17)$$

$$\text{где } \Omega_0^2 = \tilde{\omega}_0^2 + \frac{1}{\tau_T \tau_0^s} \left( 1 + \frac{e\varepsilon^{(out)} a}{k_B T} \right), \quad (18)$$

$$\beta = \frac{4\pi e^2 a}{\varepsilon \tau_t \tau_s^0 k_B T}. \quad (19)$$

Найдем корень уравнения (см., например, [14]):

$$\Omega_0^2 P_0 + \beta P_0^2 = \frac{\Gamma_t}{\tau_t \tau_a}. \quad (20)$$

Возьмем тот корень уравнения (20), который меньше отличается от ранее найденного значения  $P_0$  [см. (10)]. Оставим для этого корня то же обозначение  $P_0$ . Положим аналогично предыдущему:  $P = P_0 + Q$ , где  $Q$  описывает отклонение от равновесия. После преобразований, пренебрегая степенями  $Q$  выше первой, (17) запишется в виде

$$\ddot{Q} + 2\bar{\gamma}\dot{Q} + \Omega_0^2 Q + 2\beta P_0 Q = 0. \quad (21)$$

Объединяя последние два слагаемых, получаем выражение:

$$\ddot{Q} + 2\bar{\gamma}\dot{Q} + \tilde{\Omega}_0^2 Q = 0, \quad (22)$$

где  $\tilde{\Omega}^2 = \Omega_0^2 + \Delta\Omega_0^2 = \Omega_0^2 + 2\beta P_0 = \Omega_0^2 + \frac{8\pi e^2 a \Gamma}{\varepsilon \tau_s^0 \Omega_0^2 \tau_t \tau_a k_B T}$ . (23)

Поскольку параметры в (23) зависят от электрического поля, то частота колебания системы будет изменяться с изменением напряженности электрического поля как внешнего за счет изменения разности потенциалов, так и внутреннего, в частности, за счет изменения состава окружающей газовой среды. При наличии ангармонизма внешнее поле не только смещает положение равновесия, но и изменяет собственную частоту колебаний системы.

Уравнения вида (12), (22) описывают движение осциллятора, на который действуют силы трения. В случае нелинейного закона действия сил трения уравнения (12), (22) преобразуются определенным образом. В исследуемой нами системе имеет место нелинейность в законе тормозящих сил, о чем свидетельствует наличие участка с отрицательной проводимостью на ВАХ системы. Для учета факта нелинейности сил сопротивления вводится дополнительный член специального вида, включающий нелинейность в законе действия сил трения [15]. Дополнительный член, согласно [15], имеет вид  $S(Q) = (S_0 - S_2 Q^2)$ . Если рабочая точка выбрана на участке с отрицательной проводимостью, то уравнения (12), (22) принимают вид

$$\ddot{Q} - (S_0 - S_2 Q^2 - 2\bar{\gamma})\dot{Q} + \Omega^2 Q = 0. \quad (24)$$

Выражение (24) приводится к виду

$$\ddot{Q} - \alpha(1 - \beta Q^2)\dot{Q} + \Omega^2 Q = 0, \quad (25)$$

где  $\alpha = (S_0 - 2\bar{\gamma})$ ;  $\beta = \frac{S_2}{S_0 - 2\bar{\gamma}}$ .

Уравнение (25) записывается в виде

$$\ddot{x} - \mu(1 - x^2)\dot{x} + x = 0, \quad (26)$$

где  $x = \beta^{1/2} Q$ ,  $\tau = \Omega t$ ,  $\mu = \alpha\Omega$ .

Уравнения (25), (26) являются различной формой хорошо изученного уравнения Ван дер Поля [15], которое описывает линейный осциллятор с нелинейной силой трения. Фазовые портреты динамических переменных при различных значениях параметров являются иллюстрацией наличия предельного цикла (осцилляций переменных) в описываемой динамической системе. Конкретный вид колебаний зависит от параметров системы и представляет широкий спектр колебаний: гармонических, ангармонических, релаксационных и др.

Отметим тот факт, что переменная  $Q$  описывает динамику поверхностной концентрации заряженных полярных молекул, а следовательно, непосредственно связана с токопереносом в исследуемой системе. Параметры в уравнениях (25), (26) зависят как от приложенного напряжения, так и от свойств окружающей среды (в частности, ее состава).

## Обсуждение

Поведение ВАХ и временных зависимостей для динамических переменных  $I(t)$ ,  $U(t)$  в случае протекания процессов порообразования и процессов адсорбции/десорбции полярных молекул во многом одинаковы. Осцилляционный режим возникает в обоих случаях при наличии поверхностно активных, как правило, полярных молекул (заметим, что молекулы воды также являются полярными молекулами) в определенном интервале напряжений (токов). В начале зависимостей всегда имеет место явно выраженная нелинейность с участком ОДП, связанная с влиянием поверхностных состояний. С увеличением потенциала (тока) уменьшается период осцилляции динамических переменных. Эти факты позволяют сделать вывод, что осцилляционный режим имеет природу, связанную с адсорбцией/десорбцией полярных молекул с участием поверхностных центров в приповерхностном слое полупроводника, которые изменяют свое зарядовое состояние. Отметим, что результаты проведенных исследований могут быть полезны при разработке и создании газовых сенсоров на основе низкоразмерных систем, таковыми являются структуры пористого кремния.

## Список литературы

- Лаптев А. Н., Проказников А. В., Рудь Н. А. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 11. С. 59–65.
- Бучин Э. Ю., Лаптев А. Н., Проказников А. В. и др. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 11. С. 70–76.
- Бернацкий Д. П., Павлов В. П. Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 6. С. 22–26.
- Каганович Э. Б., Манилов Э. Г., Свечников С. В. ФТП. 1999. Т. 33. Вып. 3. С. 327–331.
- Бучин Э. Ю., Проказников А. В. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 6. С. 80–84.
- Бучин Э. Ю., Проказников А. В. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 6. С. 1–7.
- Babanov Yu. E., Prokaznikov A. V., Rud N. A. and Svetovoy V. B. Phys. Stat. Sol. (a). 1997. Vol. 162. P. R7–R8.
- Babanov Yu. E., Buchin E. Yu., Prokaznikov A. V. et al. Phys. Low-Dim. Struct. 1999. Vol. 7/8. P. 77–80.
- Лаптев А. Н., Проказников А. В., Рудь Н. А. Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 23. С. 47–54.
- Адамсон А. Физическая химия поверхности. М.: Мир, 1979. 568 с.
- Foll H., Carstensen J., Christoffersen M., Hasse G. Phys. Stat. Sol. (a). 2000. Vol. 182. P. 7–15.
- Cadet C., Deresmes D., Vuillaume D. and Stlevens D. Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 64. N 21. P. 2827–2829.
- Fujii H., Kanemaru S., Matsukawa T. and Itoh J. Jpn. Appl. Phys. 1999. Vol. 38. P. 7237–7240.
- Сивухин Д. В. Оптика. Т. IV. М.: Наука, ГРФМЛ, 1983. 624 с.
- Рабинович М. И., Трубников Д. И. Введение в теорию колебаний и волн. М.: Наука, ГРФМЛ, 1984. 432 с.

# РФФи Страница РФФИ

*В этом номере продолжаем публикацию аннотационных отчетов, полученных в инициативных научных проектах в области математики, информатики, механики, химии и физики и поддержанных РФФИ по итогам конкурса 1997 г. (начало см. в № 1–12, 2001 г., № 1–5, 2002 г.). Данные по исполнителям проектов можно найти в "Информационном бюллетене РФФИ" № 5 за 1997 г.*

<http://intra.rfbr.ru>

## АННОТАЦИОННЫЕ ОТЧЕТЫ ПО ТЕМАМ РФФИ

### Исследование физических механизмов формирования пространственно-временной изменчивости звуковых полей в гидроакустических волноводах и разработка оптимизированных методов подводного наблюдения

Номер проекта: 97-02-17555-а

Год предоставления отчета: 1997

В ходе выполнения проекта были проведены теоретические и экспериментальные исследования статистических характеристик интерференционных флуктуаций акустического поля в условиях многомодового распространения. Рассмотрена статистическая задача о коротковолновой дифракции частично когерентного многомодового акустического поля на рассеивающем объекте в мелком море. Проведенный анализ основан на совместном использовании приближения Кирхгофа и малоуглового уравнения переноса излучения для второго момента функции Грина случайного канала распространения. В рамках указанного подхода получены основные расчетные соотношения для энергетических и корреляционных характеристик прямого и дифрагированного поля в дальней зоне

объекта и оценено влияние эффектов многократного рассеяния звука взволнованной поверхностью и объемными флуктуациями акустического показателя преломления на отражающую способность тела. На основе построенных теоретических моделей проведено компьютерное моделирование флуктуации поля в мелководных каналах. Методами математической статистики получены оценки предельных возможностей проведения измерений при наличии таких флуктуаций. Исследованы вопросы об эргодичности ансамблей из реализации флуктуирующего поля и другие сопутствующие вопросы о репрезентативности компьютерного моделирования помех. Впервые определены точные границы Крамера-Рао оценок углового положения источников детерминированного и стохастического сигналов при приеме на многоэлементную antennу в присутствии пространственно некоррелированного шума с неизвестной неодинаковой в точках приема мощностью.

Летом 1997 г. был проведен масштабный модельный эксперимент в естественном водоеме (озеро Санхар). Измерены статистические характеристики флуктуации принимаемого поля на стационарной трассе при приеме на вертикальную и горизонтальную антенные цепочки. Поставлены эксперименты по изучению структуры поля и вариаций условий распространения. Обработка экс-

## Список литературы

- Лаптев А. Н., Проказников А. В., Рудь Н. А. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 11. С. 59–65.
- Бучин Э. Ю., Лаптев А. Н., Проказников А. В. и др. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 11. С. 70–76.
- Бернацкий Д. П., Павлов В. П. Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 6. С. 22–26.
- Каганович Э. Б., Манилов Э. Г., Свечников С. В. ФТП. 1999. Т. 33. Вып. 3. С. 327–331.
- Бучин Э. Ю., Проказников А. В. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 6. С. 80–84.
- Бучин Э. Ю., Проказников А. В. Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 6. С. 1–7.
- Babanov Yu. E., Prokaznikov A. V., Rud N. A. and Svetovoy V. B. Phys. Stat. Sol. (a). 1997. Vol. 162. P. R7–R8.
- Babanov Yu. E., Buchin E. Yu., Prokaznikov A. V. et al. Phys. Low-Dim. Struct. 1999. Vol. 7/8. P. 77–80.
- Лаптев А. Н., Проказников А. В., Рудь Н. А. Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 23. С. 47–54.
- Адамсон А. Физическая химия поверхности. М.: Мир, 1979. 568 с.
- Foll H., Carstensen J., Christoffersen M., Hasse G. Phys. Stat. Sol. (a). 2000. Vol. 182. P. 7–15.
- Cadet C., Deresmes D., Vuillaume D. and Stlevens D. Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 64. N 21. P. 2827–2829.
- Fujii H., Kanemaru S., Matsukawa T. and Itoh J. Jpn. Appl. Phys. 1999. Vol. 38. P. 7237–7240.
- Сивухин Д. В. Оптика. Т. IV. М.: Наука, ГРФМЛ, 1983. 624 с.
- Рабинович М. И., Трубников Д. И. Введение в теорию колебаний и волн. М.: Наука, ГРФМЛ, 1984. 432 с.

# РФФи Страница РФФИ

*В этом номере продолжаем публикацию аннотационных отчетов, полученных в инициативных научных проектах в области математики, информатики, механики, химии и физики и поддержанных РФФИ по итогам конкурса 1997 г. (начало см. в № 1–12, 2001 г., № 1–5, 2002 г.). Данные по исполнителям проектов можно найти в "Информационном бюллетене РФФИ" № 5 за 1997 г.*

<http://intra.rfbr.ru>

## АННОТАЦИОННЫЕ ОТЧЕТЫ ПО ТЕМАМ РФФИ

### Исследование физических механизмов формирования пространственно-временной изменчивости звуковых полей в гидроакустических волноводах и разработка оптимизированных методов подводного наблюдения

Номер проекта: 97-02-17555-а

Год предоставления отчета: 1997

В ходе выполнения проекта были проведены теоретические и экспериментальные исследования статистических характеристик интерференционных флуктуаций акустического поля в условиях многомодового распространения. Рассмотрена статистическая задача о коротковолновой дифракции частично когерентного многомодового акустического поля на рассеивающем объекте в мелком море. Проведенный анализ основан на совместном использовании приближения Кирхгофа и малоуглового уравнения переноса излучения для второго момента функции Грина случайного канала распространения. В рамках указанного подхода получены основные расчетные соотношения для энергетических и корреляционных характеристик прямого и дифрагированного поля в дальней зоне

объекта и оценено влияние эффектов многократного рассеяния звука взволнованной поверхностью и объемными флуктуациями акустического показателя преломления на отражающую способность тела. На основе построенных теоретических моделей проведено компьютерное моделирование флуктуации поля в мелководных каналах. Методами математической статистики получены оценки предельных возможностей проведения измерений при наличии таких флуктуаций. Исследованы вопросы об эргодичности ансамблей из реализации флуктуирующего поля и другие сопутствующие вопросы о репрезентативности компьютерного моделирования помех. Впервые определены точные границы Крамера-Рао оценок углового положения источников детерминированного и стохастического сигналов при приеме на многоэлементную antennу в присутствии пространственно некоррелированного шума с неизвестной неодинаковой в точках приема мощностью.

Летом 1997 г. был проведен масштабный модельный эксперимент в естественном водоеме (озеро Санхар). Измерены статистические характеристики флуктуации принимаемого поля на стационарной трассе при приеме на вертикальную и горизонтальную антенные цепочки. Поставлены эксперименты по изучению структуры поля и вариаций условий распространения. Обработка экс-

периметрических записей и сопоставление результатов с теоретическими прогнозами и с данными проведенных ранее морских измерений в Баренцевом море (1990 г.) показали хорошее соответствие между ними. Разработана новая методика акустического наблюдения подводных неоднородностей на основе метода некогерентного пространственного и частотного накопления с согласованной фильтрацией сигналов на элементах вертикальной антенны. В эксперименте на озере Санхар впервые проведены успешные наблюдения движущейся дифрагирующей неоднородности с размером в несколько длин волн на стационарной трассе в режиме многочастотного излучения. Экспериментально было достигнуто рекордное на сегодняшний день шумоподавление (60 дБ) относительно амплитуды прямого сигнала. На этом фоне удалось наблюдать акустическую дифракцию от удаленной малой неоднородности с превышением полезного сигнала над помехой более 30 дБ.

Создано программное обеспечение, позволившее реализовать численное моделирование флуктуаций поля в многомодовых каналах при наличии неоднородностей и выполнить обработку сигналов, зарегистрированных в реальных акустических экспериментах.

Полученные результаты являются новыми и соответствуют мировому уровню.

## **Комплексное исследование критических явлений и фазовых переходов в сложных термодинамических системах, содержащих неполярные и полярные компоненты**

Номер проекта: 97-02-17622-а

Год предоставления отчета: 1997

Экспериментально исследована изохорная теплоемкость систем углеводород (неполярный компонент) — вода (полярный компонент) с малыми ( $x = 3 \pm 11,52\%$  (масс.)) концентрациями полярного компонента. Изохорная теплоемкость исследована в диапазоне температур от точки нормального кипения более летучего компонента — углеводорода — до 680 К. Исследования проведены вдоль 34 изохор в диапазоне плотностей 117,8—501,63 кг/м<sup>3</sup>. Температурная зависимость изохорной теплоемкости определена в областях трехфазного состояния (жидкостьI—жидкостьII—пар), двухфазного (жидкость—пар), гомогенного (жидкость, пар), включая области фазовых переходов и критическую область. Обнаружены особенности поведения температурной зависимости теплоемкости исследуемых смесей. Ранее авторами было показано, что для компонентов воды, углеводородов и смесей углеводородов фазовый переход сопровождается скачком изохорной теплоемкости. Для исследуемых

систем вдоль изохор наблюдаются два скачка теплоемкости, обусловленные двумя фазовыми переходами: жидкость—жидкость и жидкость—пар. Характер скачков теплоемкости при фазовых переходах жидкость—жидкость и жидкость—пар различен и имеет особенности в зависимости от концентрации полярного компонента и плотности смеси. Создана экспериментальная установка для комплексного изучения вязкости и  $P$ — $V$ — $T$  свойств смесей. Исследованы  $P$ — $V$ — $T$  свойства в диапазоне температур 320—680 К, давлений до 60 МПа и вязкости в гомогенной фазе системы гексан—вода с различным содержанием полярного компонента. Установлено, что переход через кривую фазового равновесия сопровождается уменьшением вязкости в окрестности температуры перехода. Для исследованных составов определены критические параметры, кривые фазовых равновесий жидкость—жидкость и жидкость—пар. Для системы гексан—вода эти кривые имеют общую точку для состава 0,0673 массовых долей воды. Параметры этой точки  $T = 494,6$  К,  $P = 5,28$  МПа. Обнаружено, что в исследованном диапазоне концентраций присутствие полярного компонента деформирует кривые фазового равновесия жидкость—пар и снижает критическую температуру.

## **Туннельные явления в полупроводниковых структурах**

Номер проекта: 97-02-16168-а

Год предоставления отчета: 1997

Проведены экспериментальное и теоретическое исследования энергетического спектра 2D электронных состояний в узкощелевых и бесщелевых полупроводниках HgCdTe. Спецификой этих полупроводников является сильное межзонное взаимодействие и, следовательно, необходимость учета многокомпонентности волновой функции. Основным экспериментальным методом являлась туннельная спектроскопия в квантующем магнитном поле, которая позволила определить закон дисперсии и величину спин-орбитального расщепления спектра в широком диапазоне энергий и квазимпульсов. В рамках трехзонной модели Кейна проведен теоретический расчет спектра 2D состояний, локализованных в поверхностной квантовой яме. Сравнение с экспериментальными данными показало адекватность использованной модели границы диэлектрик — полупроводник и потенциала поверхности квантовой ямы.

Исследовано уширение спектра 2D состояний в узкощелевых и бесщелевых полупроводниках, связанное с тем, что они находятся в резонансе с состояниями валентной зоны полупроводника. Показано существенное различие уширения для разных спиновых состояний. Проведено экспериментальное и теоретическое исследования зависящего от спина туннелирования в магнитном поле. По-

казано, что в магнитном поле, параллельном плоскости туннельной структуры, вероятность туннелирования в различные спиновые состояния существенно различаются. Проведенные расчеты показывают, что этот эффект связан с сильным спинорбитальным взаимодействием с границей полупроводник—диэлектрик.

Обнаружено пороговое возрастание туннельной проводимости при напряжениях, соответствующих туннелированию на дно зоны проводимости в структурах на основе сильно легированных полупроводников *p*-типа. Показано, что наблюдаемое поведение не описывается в рамках одноэлектронного туннелирования. Рассмотрена роль возможных многоэлектронных эффектов.

### **Теоретическое и экспериментальное исследование динамики ультрахолодных атомов в неоднородных магнитных полях**

Номер проекта: 97-02-16211-а

Год предоставления отчета: 1997

За отчетный период было проведено теоретическое исследование динамики ультрахолодных атомов в неоднородных магнитных полях на практически важном примере квадрупольной магнитной ловушки с орбитирующим потенциалом. Данная магнитная ловушка является одной из основных, применяемых в современных экспериментальных исследованиях для сверхглубокого охлаждения плененных атомов.

На основе анализа уравнения Шредингера, учитывающего динамику центра масс атома, были изучены квантовые движения холодных атомов. В отличие от широко используемого в литературе описания движения атомов в усредненном по времени магнитном потенциале в работе были учтены быстрые осцилляции атомной волновой функции, обусловленные вращающимся магнитным полем. Было показано, что при типичных экспериментальных параметрах квадрупольной магнитной ловушки вращающееся магнитное поле вызывает высокочастотную модуляцию импульсов атомов с амплитудой, сравнимой с ширинами импульсных распределений для низших колебательных состояний атомов в усредненном по времени потенциале. Найдены квантово-статистические распределения атомов по импульсам и координатам. Установлено, что при низких температурах, которые, однако, значительно превышают эффективную температуру колебаний атомов в ловушке, квантово-статистические распределения координат и импульсов являются гауссовскими. Вместе с тем найдено, что при температурах атомов, сравнимых с эффективной температурой колебаний, квантово-статистическое импульсное распределение имеет кольцевую форму в плоскости симметрии ловушки, обусловленную глубокой модуляцией импульсов атомов вращающимся магнитным полем.

### **Низкотемпературные исследования энергетического спектра и динамики 2D-дырок в квантоворазмерных структурах на основе *p*-GaAs/AlGaAs при одноосных деформациях**

Номер проекта: 97-02-17685-а

Год предоставления отчета: 1997

- ◆ Исследованы магнитотранспортные свойства 2D дырок в одиночных (*p*-GaAs/Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As) и двойных (Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As/GaAs/Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As) гетероструктурах, выращенных вдоль [001], при одноосном сжатии до  $P = 350$  МПа вдоль [110] и температурах 1,5–10 К.
- В двойных гетероструктурах с симметричными барьерами полная концентрация носителей и циклотронная масса с деформацией меняются слабо. Без давления в пределах ошибки определения частоты осцилляции Шубникова—де Гааза (ШдГ) регистрируется одна группа носителей, проявляющая обычное спиновое расщепление в высоких магнитных полях  $B > 3T$ .

Однако анализ смещения пиков осцилляции при сжатии указывает на наличие двух групп носителей, принадлежащих основному состоянию тяжелых дырок, слабо расщепленному на две спиновые подзоны уже при  $B = 0$ . Это расщепление, ярко выраженное в *p*-GaAs/Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As с асимметричной квантовой ямой, связывается с отклонением формы ямы от прямоугольной уже в недеформированном состоянии.

Исследование деформационной зависимости осцилляции ШдГ может служить методом обнаружения такого отклонения.

- Исследованы магнитотранспортные свойства гетероструктур *p*-GaAs/Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As в слабых и промежуточных магнитных полях при температурах 1,7–10 К. Обнаружено сильное падение при одноосном сжатии положительного магнитосопротивления (почти полностью исчезающего при  $P > 150$  МПа) и появление области отрицательного магнитосопротивления, природа которого пока не выяснена.

Расчеты, проведенные в модели двух групп носителей в двух спиновых подзонах с учетом механизма взаимного рассеяния дырка—дырка, хорошо описывают экспериментальные данные и показывают, что при  $P > 150$  МПа рассеяние дырка—дырка почти полностью подавляется одноосным сжатием.

Обнаружено возрастание с деформацией подвижностей дырок в спиновых подзонах, предположительно связанное с уменьшением рассеяния на заряженных примесях за барьером.

- ◆ Численными методами рассчитан энергетический спектр 2D дырок на гетерогранице *p*-GaAs/Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As в самосогласованном приближении. Воздействие одноосной деформации

учтено по схеме Бира — Пикуса. Влияние экранировки потенциала носителями оказалось существенным. Расчет деформационной зависимости концентраций в подзонах и более "легкой" циклотронной массы в пределах 10—20 % согласуется с экспериментом.

Развит вариационный метод расчета волновых функций и уровней энергий примесного центра в квантующем магнитном поле для систем с анизотропным спектром.

- При 4,2 и 77 К изучено влияние света, ИК-излучения  $\lambda = 0,9$  мкм и сильного импульсного электрического поля на стимулированные одноосным сжатием долговременные релаксации сопротивления 2D дырок на гетерогранице  $p\text{-GaAs}/\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$ . Обнаружено, что разогрев носителей заряда подсветкой, а при 77 К — и электрическим полем вызывает резкое падение характерных времен релаксации. При 4,2 К электрическое поле выше 200 В/см само вызывает переключение образцов в высокоомное метастабильное состояние.
- Создан криостат для исследования низкотемпературных спектров фотolumинесценции при одноосном сжатии.

## Квазидимерные структуры с волнами зарядовой плотности: получение и электрофизические свойства вблизи температуры пайерлсовского перехода

Номер проекта: 97-02-17751-а

Год предоставления отчета: 1997

Синтезированы сравнительно широкие моноисталлы моноклинного  $\text{TaS}_3$  и целый спектр моноисталлов орторомбического  $\text{TaS}_3$  с различным легированием. Разработаны основные процедуры изготовления структур на базе отдельных моноисталлов с волнами зарядовой плотности (ВЗП) и получены первые искусственные структуры.

Впервые исследован температурный ход поперечной проводимости  $m\text{-TaS}_3$  в широком диапазоне температур. Обнаружено, что в отличие от продольной линейной проводимости, температурная зависимость которой отклоняется от активационного закона при  $T = 100$  К, поперечная проводимость имеет активационный характер, по крайней мере, до 30 К. В результате коэффициент анизотропии проводимости увеличивается на три порядка в области температур от 100 до 30 К.

Впервые исследованы температурные зависимости нелинейной проводимости при низких температурах вплоть до 2 К. Обнаружено существенное уменьшение энергии активации нелинейной проводимости при  $T = 10$  К. Опровергнуты существующие в литературе представления о том, что аномалия низкотемпературной проводимости в  $o\text{-TaS}_3$  связана с соизмеримостью ВЗП.

На моноисталлах орторомбического  $\text{TaS}_3$  изучен диэлектрический отклик на ступенчатое изменение напряжения в диапазоне времен 1 мкс — 1000 с и при температурах 1,6—32 К. Обнаружено, что характерное время диэлектрической релаксации следует активационной зависимости с энергией активации 400 К, не зависящей ни от химического типа легирующей примеси, ни от ее концентрации, тогда как энергия активации линейной проводимости зависит от обоих параметров.

Установлено, что в области низких температур диэлектрическая проницаемость  $o\text{-TaS}_3$  возрастает с увеличением концентрации легирующей примеси. Полученные результаты позволили сделать выбор между существующими в литературе объяснениями низкотемпературной диэлектрической аномалии в  $o\text{-TaS}_3$  в пользу теории, связывающей наличие аномалии с вымораживанием носителей тока, экранирующих неоднородности потенциала, возникающего вследствие деформации ВЗП при ее пиннинге на дефектах.

## Диэлектрические и люминесцентные свойства сегнетоэлектрических матриц с ультрадисперсными люминофорами

Номер проекта: 97-02-16710-а

Год предоставления отчета: 1997

Было проведено экспериментальное исследование влияния сегнетоэлектрической матрицы на характеристики помещенного в нее люминофора, в первую очередь связанные с электролюминесценцией такой системы. В качестве матрицы использовался специально изготовленный сегнетоэлектрик, имеющий фазовый переход вблизи нормальной температуры. Роль люминофоров выполняли микропорошки сульфида цинка, активированные медью и люминесцирующие в зеленой и синей области видимого диапазона. Определенное внимание было уделено изучению природы светящихся центров с помощью спектров одно- и двухфотонновозбуждаемой фотolumинесценции, а также исследованию оптических спектров других материалов (в частности, карбида кремния, алмаза), перспективных для получения оптического излучения в коротковолновой области спектра. Сравнительный анализ спектров электролюминесценции собственно легированных медью цинк-сульфидных люминофоров и в составе вышеописанной системы показывает, что кривые зависимостей интенсивности излучения от напряжения и частоты возбуждения, а также температуры в обоих случаях качественно похожи. Однако относительное изменение интенсивности, особенно вблизи критической точки, позволяет утверждать, что поле сегнетоэлектрической матрицы может заметно влиять на электролюминесценцию содержащихся в ней объектов.

# ИНФОРМАЦИЯ



## Новосибирск

Совещание  
по росту кристаллов,  
пленок и дефектам  
структур кремния

**КРЕМНИЙ-2002**

Совещание по росту  
кристаллов, пленок и дефектам структуры кремния  
(с участием иностранных ученых)

**КРЕМНИЙ-2002**

9-12 июля 2002 г.

Новосибирск

Совещание по росту кристаллов, пленок и дефектам структуры кремния возобновляет традицию, заложенную предыдущими совещаниями, которые проводились в Новосибирске в 1969, 1973, 1977 и 1984 гг. и были посвящены природе и механизмам образования дефектов, установлению связи между условиями и механизмами роста полупроводниковых кристаллов и эпитаксиальных слоев, процессам легирования полупроводников. Последняя Российской конференция, в рамках которой обсуждались родственные проблемы, проводилась в Московском государственном институте стали и сплавов в 2000 г. (Кремний-2000). Совещание ставит целью обсуждение существующих в настоящее время проблем в области роста слитков полупроводникового кремния и эпитаксиальных слоев и в создании низко-размерных и новых приборных структур. Предполагается собрать вместе специалистов, работающих в различных областях кремниевой тематики, и обсудить современное состояние проблемы и пути развития кремниевой технологии.

### СОВЕЩАНИЕ ПРОВОДИТСЯ ПРИ СОДЕЙСТВИИ:

- Министерства промышленности, науки и технологий РФ;
- Министерства по атомной энергии РФ;
- Научного совета РАН «Физико-химические основы материаловедения полупроводников»;
- Научного совета РАН «Радиационная физика твердого тела».

### ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ:

1. Процессы роста из расплава методами зонной плавки и Чохральского.
2. Эпитаксиальные структуры, низкоразмерные системы на основе кремния.
3. Структуры кремний-на-изоляторе.
4. Дефекты и примеси, ионная имплантация, ядерное легирование.
5. Микрокристаллические, аморфные и пористые слои.
6. Новые приборные структуры на основе объемного материала иnanoструктур.
7. Методы и аппаратура для роста и исследования кремния.

### ОРГАНИЗАТОР:

Институт физики полупроводников СО РАН.

### Организационный комитет:

Председатель Оргкомитета:  
Асеев А.Л. ИФП СО РАН

Зам. председателя:  
Дувуреченский А.В. ИФП СО РАН

Сопредседатель:  
Кузнецов Ф.А. ИНХ СО РАН

Ученый секретарь:  
Ильина Л.А. ИФП СО РАН

### Адрес оргкомитета совещания

Ильина Лариса Александровна  
Институт физики полупроводников СО РАН  
пр. Ак. Лаврентьева 13  
600090 Новосибирск, Россия  
Тел.: (3832) 333260  
Факс: (3832) 332771  
e-mail: [ilina@isp.nsc.ru](mailto:ilina@isp.nsc.ru)

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН),

Институт нанотехнологий Международного фонда конверсии,

Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет)

**12 марта с. г. в Наноцентре (м. Павелецкая, М. Татарский пер., д. 1)**  
состоялось заседание семинара

## "МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ И СТРУКТУРАХ"

Председатель семинара

чл.-корр. РАН Ю. П. Попов

Ученый секретарь семинара д-р физ.-мат. наук Г. К. Боровин

### Повестка заседания:

#### Сверхвысоковакуумная сканирующая тунNELьная микроскопия/спектроскопия и ее возможности

К. Н. Ельцов, А. Н. Климов

(Центр естественно научных исследований,

Институт общей физики РАН)

В докладе были изложены основные принципы работы сканирующего туннельного микроскопа (СТМ), физические основы сканирующей и туннельной микроскопии и спектроскопии, режимы получения атомно-разрешенных изображений проводящей поверхности. Были обсуждены основные принципы конструирования сверхвысоковакуумных СТМ и проведен анализ основных конструкций, использующихся в эксперименте. Помимо основной возможности измерения топографии и локальной электронной спектроскопии обсуждено использование СТМ для изучения локального спинового состояния поверхности и локальной колебательной спектроскопии отдельной адсорбированной молекулы. Предельные возможности методов проиллюстрированы экспериментальными данными.

## НОВЫЕ КНИГИ

**Абрамов И. И., Новик Е. Г. Численное моделирование металлических одноэлектронных транзисторов. — Минск: Изд-во Бестпринт, 2000. — 164 с.**

Приведена классификация одноэлектронных структур наноэлектроники. Описана методика оценки предельных характеристик одноэлектронных транзисторов. Разработана двумерная численная модель металлических одноэлектронных транзисторов, включающая уравнение Пуассона. Предложенные и известные модели и методики положены в основу разработанного комплекса программ моделирования одноэлектронных структур SET-NANODEV, который предназначен для проведения исследований характеристик одноэлектронных приборов и структур. С использованием комплекса программ проанализированы металлические одноэлектронные транзисторы на различных соединениях металлов: Al/AlO<sub>x</sub>, Al/SiO<sub>2</sub>, Au/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Nb/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Ti/TiO<sub>x</sub>, Cr/Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Nb/NbO<sub>x</sub>. Монография предназначена для специалистов в области микроэлектроники и наноэлектроники, а также может быть полезна преподавателям, аспирантам и студентам старших курсов соответствующих специальностей.

Дополнительную информацию можно получить на сайте:

[www.nanodev.org](http://www.nanodev.org) и по e-mail: [nanodev@bsuir.edu.by](mailto:nanodev@bsuir.edu.by)

## ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МИКРОСТРУКТУР РАН

В марте 2002 г. в Нижнем Новгороде на базе Института физики микроструктур РАН под руководством чл.-корр. РАН Гапонова С. В. прошли три совещания:

### SCANNING PROBE MICROSCOPY—2002

(3—6 марта 2002 г.)

#### Scope of Conference

- Scanning tunneling microscopy and spectroscopy;
- Atomic-force microscopy;
- Magnetic-force microscopy;
- Optical near-field microscopy;
- Physics of microcontacts;
- SPM investigation and modification of solid state surface;
- SPM in the chemical and biological applications;
- Original microscopy designs and novel methods of surface research.

### НАНОФОТОНИКА

(11—14 марта 2002 г.)

#### Программа совещания

Совещание "Нанофотоника" прошло с целью обсуждения современного состояния работ в области:

- физических явлений, лежащих в основе оптоэлектронных свойств низкоразмерных гетероструктур;
- физики неравновесных и инвертированных распределений и внутризонных оптических переходов горячих носителей в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами в сильных электрических и магнитных полях, включая механизмы инверсии и стимулированного излучения в среднем и дальнем ИК диапазонах;
- нелинейных оптических явлений вnanoструктурах;
- оптических свойств экситонов в nanoструктурах.

### РЕНТГЕНОВСКАЯ ОПТИКА—2002

(18—21 марта 2002 г.)

#### Основные разделы программы

- Многослойная рентгеновская оптика нормального падения для экстремального ультрафиолетового и рентгеновского диапазонов.
- Многослойная рентгеновская оптика "жесткого" рентгеновского диапазона.
- Монокристаллическая дифракционная оптика.
- Рентгеновская оптика СИ.
- Новые методы диагностики многослойных структур из сверхтонких пленок.
- Использование многослойной оптики в задачах проекционной рентгеновской литографии, рентгеновской микроскопии, рентгеновской астрономии, рентгеновской диагностики высокотемпературной плазмы.

С материалами конференций можно познакомиться на сайте

[www.ipm.sci-nnov.ru](http://www.ipm.sci-nnov.ru)

e-mail: [spm@ipm.sci-nnov.ru](mailto:spm@ipm.sci-nnov.ru)