

Главный редактор
Мальцев П. П.

Зам. гл. редактора
Лучинин В. В.

Редакционный совет:

Аристов В. В.
Васильев В. В.
Гапонов С. В.
Каляев И. А.
Климов Д. М.
Лифшиц В. Г.
Мокеров В. Г.
Никитов С. А.
Чаплыгин Ю. А.

Редакционная коллегия:

Антонов Б. И.
Белоус А. И.
Быков В. А.
Васильев А. А.
Волчихин В. И.
Горнев Е. С.
Градецкий В. Г.
Журавлев П. В.
Захаревич В. Г.
Кальнов В. А.
Карякин А. А.
Кузин А. Ю.
Мокров Е. А.
Норенков И. П.
Панич А. Е.
Панфилов Ю. В.
Петросянц К. О.
Петрунин В. Ф.
Путилов А. В.
Пятышев Е. Н.
Сауров А. Н.
Сигов А. С.
Станкевич В. Г.
Старостин А. К.
Степанов Ю. И.
Сухопаров А. И.
Телец В. А.

Отв. секретарь
Лысенко А. В.

Редакция:

Безменова М. Ю.
Григорин-Рябова Е. В.

Учредитель:

Издательство "Новые технологии"

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МСТ

Бабаевский П. Г., Жуков А. А., Жукова С. А. Влияние химической обработки на структуру и свойства тонких полиимидных пленок и покрытий и скорость ВЧ-плазменного травления "жертвенного" слоя в технологии микросистем. 2

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МСТ

Драгунов В. П. Нелинейность упругих элементов микромеханических систем 7

Евлюхин А. Б., Герке М. Н., Евлюхина Е. В. Теоретическая модель зондового излучения в ближнеполевой оптической микроскопии однослойной наноструктуры 13

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Нохрин А. В., Макаров И. М., Лопатин Ю. Г. Особенности методики исследования деформационно-стимулированного роста зерен в нано- и микрорекристаллических сверхпластичных алюминиевых сплавах методом атомно-силовой микроскопии 20

Далидчик Ф. И., Гришин М. В., Ковалевский С. А. Особенности электронного строения взаимодействующих нанокуглеродных частиц 29

СИСТЕМЫ НА КРИСТАЛЛЕ

Адамов Ю. Ф., Сомов О. А., Шевченко Е. А. Системы на кристалле в современной электронике 34

Ерохин В. В. Архитектурно-зависимое самотестирование сложных функциональных блоков 39

СТРАНИЧКА РФФИ 42

ИНФОРМАЦИЯ. 46

Contents 48

Журнал включен в перечень научных и научно-технических изданий ВАК России

Аннотации статей журнала на русском и английском языках и требования к оформлению статей доступны на сайте журнала: <http://www.microsystems.ru>.

ПОДПИСКА:

- по каталогу Роспечати (индекс 79493);
- по каталогу "Пресса России" (индекс 27849)
- в редакции журнала (тел./факс: 269-55-10)

УДК 621.382:537.525

П. Г. Бабаевский, д-р техн. наук, проф.,
А. А. Жуков, д-р техн. наук, С. А. Жукова,
ЦНИИ "ЦИКЛОН", Москва, "МАТИ"—РГТУ
им. К. Э. Циолковского, Москва

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТОНКИХ ПОЛИИМИДНЫХ ПЛЕНОК И ПОКРЫТИЙ И СКОРОСТЬ ВЧ-ПЛАЗМЕННОГО ТРАВЛЕНИЯ "ЖЕРТВЕННОГО" СЛОЯ В ТЕХНОЛОГИИ МИКРОСИСТЕМ

Работа посвящена решению задачи оптимизации технологического процесса травления "жертвенного" полиимидного слоя при производстве микросистем на основе многоуровневых структур. Установлено, что физико-химическая модификация тонких полиимидных пленок и покрытий при плазмохимической обработке и обработке в парах гексаметилдисилазана распространяется на всю их толщину, изменяя природу связей, поверхностные и объемные свойства, характер межфазного взаимодействия.

Введение

При производстве микромеханических устройств на основе многоуровневых структур используют различные методы получения микрозазоров [1, 2]. Наибольшее предпочтение при этом отдается использованию технологии селективного "сухого" ВЧ-плазменного травления "жертвенного" слоя. В качестве такого слоя обычно используют органические полимерные покрытия, в частности, полиимидные, толщиной порядка нескольких микрометров. "Жертвенный" слой, располагающийся между неорганическими функциональными слоями или слоистыми структурами, вытравливается, обеспечивая образование зазора требуемого значения при сохранении заданной структуры функциональных слоев.

Преимущества использования тонких полиимидных покрытий в качестве "жертвенного" слоя обусловлены простотой их нанесения на подложку из низкоконцентрированных растворов преполимеров (полиамидокислот или их производных), высокой тепло- и термостойкостью на стадиях фор-

мирования на них функциональных структур и сравнительно высокой скоростью "сухого" травления в кислородсодержащей плазме как с поверхности, так и в зазоре [3]. При этом на всех стадиях получения и обработки полиимидного "жертвенного" слоя решающую роль играют поверхностные и объемные эффекты, наблюдающиеся в тонких полиимидных пленках во время взаимодействия с функциональными слоями и при различных термических, химических и плазменных воздействиях, используемых для целенаправленного регулирования состава, структуры и свойств "жертвенного" или функциональных слоев.

При разработке технологии получения микрозазоров в модельной системе "окисленная поверхность кремния — балочная структура из напыленного алюминия" нами в процессе "сухого" травления ВЧ-плазмой воздуха "жертвенного" полиимидного слоя была опробована операция предварительной кратковременной обработки тонкого полиимидного покрытия парами кипящего гексаметилдисилазана (ГМДС). Было установлено сильное влияние этой операции на скорость травления "жертвенного" слоя и качество (однородность) балочной структуры на кремниевой пластине.

Поскольку литературных данных, позволяющих объяснить наблюдаемые эффекты, найдено не было, нами были проведены систематические исследования влияния обработки парами ГМДС двух типов тонких полиимидных пленок и покрытий на их химическую структуру, поверхностные и межфазные характеристики на границе раздела с воздухом и твердой поверхностью, а также на их взаимодействие с ВЧ-плазмой воздуха. Описание этих исследований и анализ полученных результатов являются целью данной работы.

Объекты и методы исследований

В качестве объектов исследований использовали полиимидные покрытия и пленки толщиной 3 мкм, полученные из полиамидокислот (ПАК) на основе пиромеллитового диангидрида и 4,4'-оксидианилина (ПМДА-ОДА), а также диангидрида 3,3',4,4'-дифенилоксидтетракарбоновой кислоты и диаминодифенилового эфира резорцина (ДАДФО-Р). Покрытия наносили на окисленную поверхность пластин кремния марки КДБ-4,5 диаметром 76 мм центрифугированием растворов ПАК в диметилацетамиде с концентрацией нелетучих веществ 12 масс. % и характеристической вязкостью 150 см³/г с последующей сушкой и термимилизацией при температуре 353...373 К и 558 К,

соответственно, в течение 30 мин. Сушку и термоимидизацию проводили в термошкафу СНОЛ-3,5.3,5.3,5/3,5-И2М с микропроцессорной системой регулирования, обеспечивающей поддержание заданной температуры с точностью ± 3 К. Пленки получали путем отделения покрытий от подложек.

Парами ГМДС полиимидные пленки и покрытия обрабатывали с помощью устройства, изображенного схематически на рис. 1. Полиимидная пленка закреплялась так, чтобы прямое воздействие паров ГМДС осуществлялось на поверхность пленки, обращенную к воздуху при формировании, сближая тем самым характер обработки пленки и покрытия. Кремниевая подложка со слоем термического диоксида кремния, подвергнутая обработке в растворе щелочи, служила "индикатором" диффузии паров ГМДС через полиимидную пленку, поскольку известно, что ее свободная поверхностная энергия изменяется при воздействии ГМДС [1].

Обработку и травление полиимидных покрытий проводили в реакторе установки "Плазма-600" при мощности разряда 600 Вт, частоте 13,56 МГц и остаточном давлении воздуха 10^{-2} Па.

Толщину пленок и покрытий, геометрические размеры структур и их изменения определяли с помощью микроинтерферометра МИИ-4 с точностью измерения 0,15 мкм и оптического микроскопа Union, снабженного блоком питания *Stepdown Transformer KD-100* и электронной измерительной системой *Beldex*, с точностью измерений 0,5 мкм. Электронные растровые микрофотографии образцов получали с помощью сканирующего электронного микроскопа *JSM 840A* фирмы *Jeol* (Япония). Изменения химической структуры полиимидных пленок после обработки в парах ГМДС определяли методом ИК-спектроскопии с помощью спектрофотометра *Specord M80* в диапазоне волновых чисел 4000...400 см^{-1} . Оценку удельной свободной поверхностной энергии и ее составляющих для полиимидных пленок и покрытий, а также для окис-

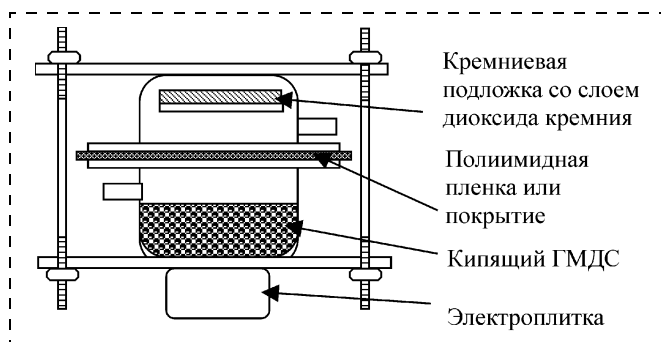


Рис. 1. Схема устройства для обработки в парах ГМДС полиимидной пленки, покрытия и кремниевой подложки

ленной и подвергнутой щелочной обработке поверхности кремния проводили методом Гуда—Ван Осса [4]. Метод основан на определении углов смачивания поверхностей несколькими жидкостями с известными энергетическими характеристиками и решении системы уравнений для работы адгезии W_a между жидкостями и твердой поверхностью. Эти уравнения базируются на представлениях о кислотно-основном (донорно-акцепторном) характере взаимодействия жидкостей с твердой поверхностью, которое включает в себя дисперсионную (γ_d), электронодонорную (основную) γ^- и электроноакцепторную (кислотную) γ^+ составляющие:

$$W_a = \gamma_{Li}(1 + \cos\theta_i) = 2(\sqrt{\gamma_S^d \gamma_{Li}^d} + \sqrt{\gamma_S^+ \gamma_{Li}^-} + \sqrt{\gamma_S^- \gamma_{Li}^+}) = 2\sqrt{\gamma_S \gamma_{Li}},$$

где γ_S , γ_{Li} , γ_S^d , γ_S^+ , γ_S^- , γ_{Li}^d , γ_{Li}^+ , γ_{Li}^- — удельная поверхностная энергия твердой поверхности и i -й жидкости и их дисперсионные, электроноакцепторные и электронодонорные компоненты соответственно, мДж/м^2 , θ_i — угол смачивания i -й жидкостью твердой поверхности.

Углы смачивания жидкостями твердых поверхностей определяли методом проекции капли на экран и с помощью модернизированного микроинтерферометра Линника. Точность измерений проекционным методом составляла 1° , микроинтерференционным — $0,5^\circ$, число измерений — не менее 5. Для расчетов использовали средние значения углов смачивания. В качестве жидкостей брали деионизованную воду, α -бромнафталин, глицерин и этиленгликоль с энергетическими характеристиками, представленными в [4].

Измерения адгезии полиимидных покрытий проводили с помощью адгезиметра УКАП-1-100.

Результаты и их обсуждение

На рис. 2 приведены характерные участки спектров поглощения ИК-излучения в интервале 1300...700 см^{-1} для полиимидной пленки ПМДА-ОДА в исходном состоянии и после обработки в парах кипящего ГМДС в течение 5 мин. Обобщенную оценку изменений в спектрах поглощения пленок ПМДА-ОДА и ДАДФО-Р проводили по рассчитанной относительной интенсивности полос спектров. В качестве внутреннего стандарта была взята полоса с оптической плотностью 3100 см^{-1} , соответствующая колебаниям группы СН ароматического кольца [5] и не изменяющая своей интенсивности после обработки.

Сравнительный анализ ИК-спектров поглощения показал, что после обработки ГМДС появля-

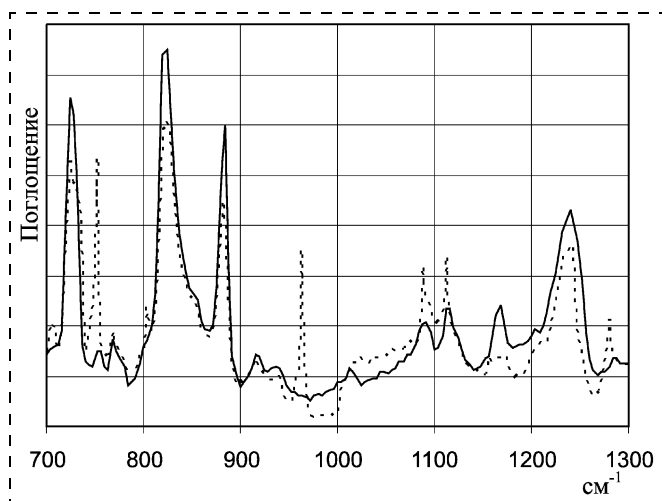


Рис. 2. ИК-спектры поглощения в области 1300–700 см^{-1} полиимидных пленок ПМДА-ОДА толщиной 3 мкм, необработанных (сплошные линии) и обработанных в течение 5 мин в парах кипящего ГМДС (штриховые линии)

ются полосы поглощения 968, 800, 750 см^{-1} , характерные для групповых колебаний Si—C [6], а также полоса 1280 см^{-1} , характерная для деформационных колебаний метильных групп CH_3 (см. рис. 2). В спектре необработанных пленок наблюдается полоса поглощения 1088–1096 см^{-1} , которую связывают с валентными колебаниями C—O полиимида [6]. После обработки в парах ГМДС интенсивность этой полосы в полиимидной пленке резко возрастает, и изменяется ее профиль. Указанную полосу поглощения для кремнийорганических соединений также относят к колебаниям силоксановых связей, что свидетельствует о возможности образования в полиимидной пленке связей Si—O [6]. Таким образом, анализ ИК-спектров показывает, что взаимодействие паров кипящего ГМДС с полиимидной пленкой протекает по объему пленки и может включать следующие основные процессы:

- сорбцию паров ГМДС полиимидной пленкой;

- взаимодействие с сорбированной водой с образованием аммиака и гексаметилдисилоксана;
- взаимодействие с непрореагировавшими при имидизации гидроксильными группами карбоксильных групп ПАК по механизму этерификации с образованием триметилсилоксановых групп и выделением аммиака.

Об уменьшении содержания сорбированной воды и гидроксидов карбоксильных групп в полиимидной пленке свидетельствует уменьшение после обработки ГМДС интенсивности полос 3490, 3640–3650 см^{-1} спектра поглощения, соответствующих связанной и слабосвязанной воде, а также полосы 3500 см^{-1} , соответствующей гидроксильной группе полиимида.

Изменения удельной поверхностной энергии и ее составляющих для поверхностей полиимидных пленок ПМДА-ОДА толщиной 3 мкм и ПМДА-ОДА толщиной 1,5 мкм со слоем ДАДФО-Р толщиной 1,5 мкм при некоторых значениях длительности обработки в парах кипящего ГМДС приведены в таблице. При этом удельная поверхностная энергия тестовой кремниевой подложки изменялась уже через 30 с обработки и по мере увеличения продолжительности опыта уменьшилась с 67,1 до 20,0 мДж/м² за 10 мин. Это показывает, что пары кипящего ГМДС быстро диффундируют через полиимидные пленки, причем концентрация продиффундировавших паров в верхней части устройства, изображенного на рис. 1, достаточна для протекания их реакции с поверхностью полиимидной пленки, обращенной к подложке при формировании и не контактирующей изначально с парами ГМДС.

Кинетические кривые изменения удельной поверхностной энергии и ее компонентов по модели Гуда—Ван Осса для полиимидных покрытий в парах кипящего ГМДС приведены на рис. 3. Из приведенных в таблице и на рис. 3 данных видно, что обработка в парах ГМДС полиимидных пленок и покрытий приводит к заметной гидрофобизации

Удельная поверхностная энергия и ее составляющие для разных поверхностей полиамидных пленок после различной длительности обработки в парах кипящего ГМДС

Поверхность пленки	γ_S , мДж/м ²			γ_S^d , мДж/м ²			γ_S^+ , мДж/м ²			γ_S^- , мДж/м ²		
	Длительность обработки в парах ГМДС, мин											
	0	3	10	0	3	10	0	3	10	0	3	10
ПМДА-ОДА при формировании покрытия: — обращенная на воздух — обращенная к подложке	61,8	54,2	54,2	42,3	40,0	39,0	0,5	1,5	1,5	36,8	22,5	22,5
	63,9	62,9	58,8	44,4	43,4	42,3	0,6	1,8	1,8	37,2	23,4	23,4
ПМДА-ОДА/ДАДФО-Р при формировании покрытия: — обращенная на воздух — обращенная к подложке	54,7	49,4	49,4	39,7	38,3	38,3	0,8	2,0	2,0	25,3	13,6	13,6
	63,9	62,9	58,8	44,4	43,4	42,3	0,6	1,8	1,8	37,2	23,4	23,4

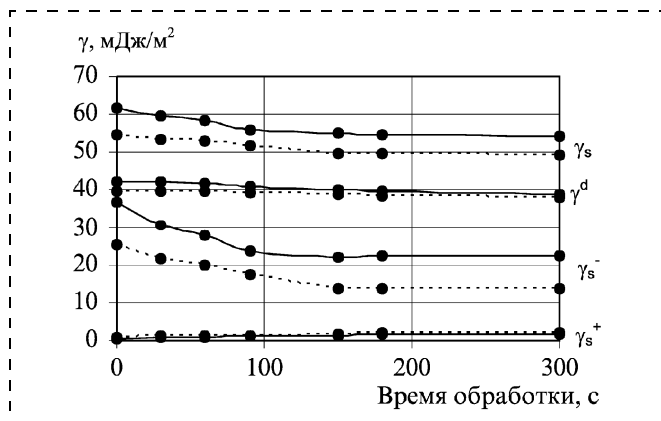


Рис. 3. Изменение удельной поверхностной энергии и ее составляющих для полиимидных покрытий ПМДА-ОДА (сплошные кривые) и ДАДФО-Р (штриховые кривые) при различной продолжительности обработки в парах кипящего ГМДС

их поверхностей — снижению значений γ_s , главным образом за счет снижения электронодонорной компоненты γ_s^- при некотором возрастании электроноакцепторной компоненты γ_s^+ , что свидетельствует о преимущественной роли дипольных и водородных связей в поверхностной энергии этих систем. Как до, так и после обработки в парах ГМДС значения γ_s для поверхности покрытия ДАДФО-Р приблизительно на 7 мДж/м² меньше, чем пленки ПМДА-ОДА, что связано с различиями химического состава этих покрытий. При этом следует обратить внимание на то, что для обоих типов пленок до обработки в парах ГМДС удельная энергия поверхности, обращенной к воздуху при формировании исходных покрытий, меньше, чем поверхности, обращенной к подложке, что, очевидно, может быть обусловлено различиями в структуре поверхностей полиимида на межфазных границах раздела при формировании исходных покрытий на сторонах, обращенных к воздуху и подложке. Последняя содержит группы SiOH, способные реагировать с ПАК при формировании покрытия. Удельная энергия окисленной и обработанной раствором щелочи поверхности кремния имеет значение того же порядка, что и удельная энергия поверхности полиимидных пленок, но вклад γ_s^d в нее существенно меньше, а компонент донорно-акцепторного взаимодействия — больше.

Кинетика изменения γ_s и ее компонент при обработке в ВЧ-плазме воздуха полиимидных покрытий, как предварительно обработанных в парах ГМДС, так и необработанных (рис. 4, 5), свидетельствует о значительной гидрофилизации поверхностей — возрастанию γ_s , главным образом, за

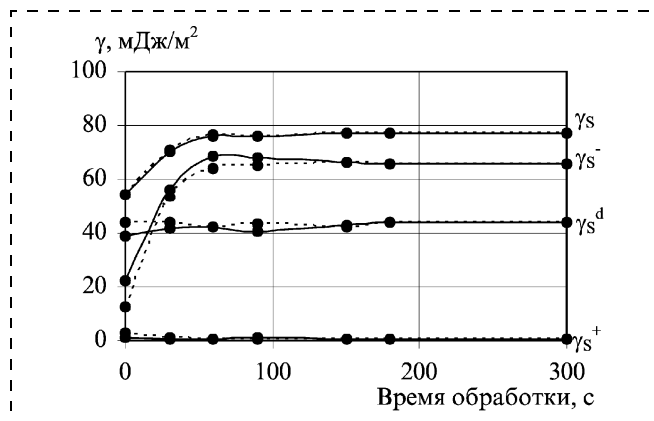


Рис. 4. Изменение удельной поверхностной энергии и ее составляющих для предварительно прошедших обработку в кипящих парах ГМДС полиимидных покрытий ПМДА-ОДА (сплошные кривые) и ДАДФО-Р (штриховые кривые) при различной продолжительности обработки в ВЧ-плазме воздуха

счет γ_s^- , что может быть обусловлено образованием на поверхности отрицательных зарядов. При продолжительности обработки в ВЧ-плазме воздуха в течение 100 с и более достигаются предельные значения γ_s и γ_s^- , которые практически не зависят от типа полиимида и от того, обработан ли он предварительно в парах ГМДС или нет.

С учетом полученных нами в этой работе и ранее [7, 8] данных ИК-спектроскопии об изменении химической структуры тонких полиимидных пленок после обработки в парах ГМДС и ВЧ-плазмой воздуха, очевидно, что обработка тонких полиимидных покрытий в парах ГМДС проявляется не только на поверхности, но и распространяется по их объему и на границу раздела с подложкой, изменяя природу и, в частности, устойчивость адгезионных соединений полиимидного покрытия и

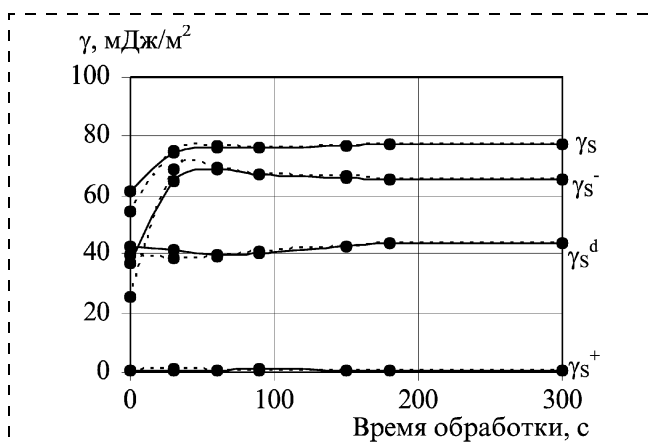


Рис. 5. Изменение удельной поверхностной энергии и ее составляющих для полиимидных покрытий ПМДА-ОДА (сплошные кривые) и ДАДФО-Р (штриховые кривые) при различной продолжительности обработки в ВЧ-плазме воздуха

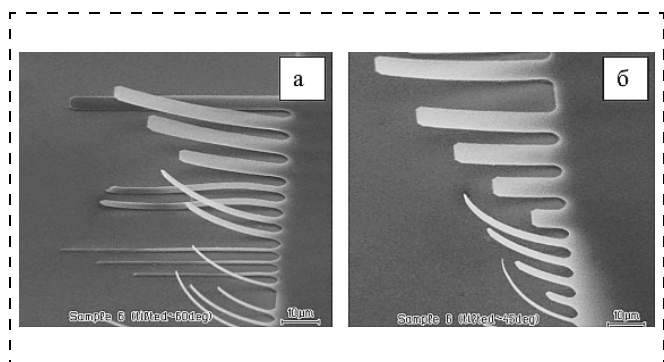


Рис. 6. Растровые электронные микрофотографии модельных балочных структур, полученных травлением необработанного (а) и обработанного парами ГМДС (б) "жертвенного" полиимидного слоя

подложки к воздействию влаги. Это подтверждено экспериментально при оценке прочности на отслаивание от подложки исследуемых покрытий. Хотя эта прочность для покрытий, как необработанных, так и обработанных парами ГМДС и ВЧ-плазмой воздуха, в исходно сухом состоянии не была оценена из-за когезионного характера разрушения, после выдержки этих покрытий в условиях 90 %-ной относительной влажности в течение 5 ч наблюдалось адгезионное отслаивание. При этом стандартная прочность при отслаивании, измеренная по усилию отслаивания полоски шириной 12 мм, составляла для покрытия без какой-либо обработки $6,5 \cdot 10^{-2}$ Дж/м² ($6,5 \cdot 10^{-5}$ Н/мм), после ВЧ-плазменной обработки $2,2 \cdot 10^{-2}$ Дж/м² ($2,2 \cdot 10^{-5}$ Н/мм), а после обработки в парах кипящего ГМДС $10,8 \cdot 10^{-2}$ Дж/м² ($10,8 \cdot 10^{-5}$ Н/мм). Очевидно, что наблюдаемые поверхностные, межфазные и объемные эффекты обуславливают заметное замедление скорости травления ВЧ-плазмой воздуха полиимидных слоев, предварительно обработанных в парах ГМДС, как с поверхности, так и из зазора, и приводят к повышению качества (однородности) модельных балочных структур на кремниевой пластине (рис. 6). Относительная линейная скорость травления предварительно обработанных в парах кипящего ГМДС полиимидных покрытий толщиной 3 мкм как с поверхности, так и из зазора (после нанесения слоя Al толщиной 0,12 мкм термовакуумным напылением) по сравнению со скоростью травления аналогичного полиимидного покрытия, не подвергнутого обработке ГМДС, имеет меньшее значение. При этом травление прошедших обработку покрытий ПМДА-ОДА проходит медленнее на 18 % с поверхности и на 21 % из зазора, а покрытия ДАДФО-Р — на 29 и 17 %, соответственно, по сравнению с необработанными.

Выводы

На примере двух типов полиимидов (ПМДА-ОДА и ДАДФО-Р) ИК-спектроскопией и методами смачивания жидкостями различной природы с расчетом удельной поверхностной энергии и ее составляющих по донорно-акцепторной модели Гудда—Ван Осса показано для обработки в парах ГМДС и подтверждено для обработки в ВЧ-плазме воздуха, что физико-химическая модификация тонких пленок и покрытий (толщиной порядка 3 мкм) при обоих видах обработки распространяется на всю их толщину, изменяя природу связей, поверхностные и объемные свойства, характер межфазного взаимодействия.

Установлено, что для обоих типов полиимидов обработка тонких покрытий ГМДС увеличивает, а ВЧ-плазмой воздуха уменьшает прочность адгезионных соединений полиимид — окисленная поверхность кремния в присутствии влаги.

Наблюдаемые при обработке тонких полиимидных покрытий в парах ГМДС поверхностные и объемные эффекты обуславливают уменьшение скорости травления полиимидов в ВЧ-плазме воздуха как с поверхности покрытий, так и "жертвенных" слоев из зазора, и повышение качества полученных модельных балочных структур на кремниевой пластине.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для оптимизации технологического процесса травления "жертвенного" полиимидного слоя при производстве микросистем на основе многоуровневых структур.

Список литературы

1. Моро У. Микролитография. В 2-х ч. Ч. 1: Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 605 с.
2. Готра З. Ю. Справочник по технологии микроразборных устройств. М.: Радио и связь, 1986. 486 с.
3. Gad-El-Hak M. (Ed.) The MEMS Handbook. CRC Press, 2001. 1368 p.
4. Walinder M. Wetting phenomena on wood. Factors influencing measurements of wood wettability // Doctoral Thesis. KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, 2000. 62 p.
5. Гильман А. Б., Драчев А. И., Кузнецов П. П., Лопухов Г. В., Павлов С. А., Потапов В. К. Влияние зарядовых состояний на смачиваемость полиимидных пленок, модифицированных в плазме тлеющего НЧ-разряда // Химия высоких энергий. 1996. Т. 30. № 5. С. 373—376.
6. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул. М.: Иностран. лит., 1963.
7. Жуков А. А. Физико-химические и технологические основы получения полиимидных структур для микроразборных устройств микромеханики и микросенсоры // Автореферат дисс. на соиск. уч. ст. д-ра техн. наук. "МАТИ"—РГТУ им. К. Э. Циолковского, ОАО "ЦНИИ "Циклон", Москва. 2003. 55 с.
8. Агапов О. А., Жуков А. А., Жукова С. А., Молоткова Н. Н., Прудскова Т. Н. Кристаллизация и пластификация тонких полиимидных пленок после плазмохимической обработки // Пластические массы. 2003. № 11. С. 21—25.

УДК 621.3.049.76

В. П. Драгунов, канд. физ.-мат. наук,
Новосибирский государственный технический
университет

НЕЛИНЕЙНОСТЬ УПРУГИХ ЭЛЕМЕНТОВ МИКРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Исследован прогиб тонких диафрагм круглой, квадратной, треугольной и шестиугольной формы с защемленными краями в зависимости от нагрузки. Представленное исследование ограничено прогибами $W \leq h$. Показано, что изменяя размеры диафрагм микромеханических систем, можно изменять соотношение эффективных жесткостей и максимальных прогибов у диафрагм разной формы. Установлено, что в нелинейном приближении критический прогиб диафрагмы при воздействии электрического поля определяется не только начальным зазором между электродами, но и толщиной диафрагмы.

Введение

Эффективность работы большинства микромеханических систем (ММС) определяется конструкцией и параметрами их упругого элемента. В настоящее время наибольшее распространение получили ММС с упругим элементом *торсионного* (с торсионным подвесом) и *диафрагменного* (мембранного) типов. Обычно оптимизацию конструкции упругого элемента осуществляют, используя различные САПР, базирующиеся на методе конечных элементов [1]. Однако на начальном этапе проектирования требуются более мобильные и наглядные методы расчета, позволяющие с приемлемой точностью оценить основные параметры и характеристики конструкции. Применение же мощных (но "неповоротливых") САПР целесообразно для уточнения полученных характеристик и особенностей функционирования данной конструкции после того, как на этапе предварительного проектирования была выбрана конструкция и рассчитаны параметры ее элементов. Такой подход постоянно стимулирует разработку новых моделей, позволяющих оценивать поведение упругих элементов при различных внешних воздействиях [2–5].

В настоящее время технологии объемной и поверхностной микрообработки кремния позволяют при оптимизации конструкции ММС наряду с варьированием размеров элементов изменять и их форму, что необходимо учитывать при разработке соответствующих моделей. В [3] рассмотрено по-

ведение торсионных упругих элементов круглой, прямоугольной и треугольной формы при воздействии электрических полей. Поведение упругих элементов диафрагменного типа круглой, квадратной, треугольной и шестиугольной формы в линейном приближении при одновременном воздействии электрического поля и внешнего давления проанализировано в работе [5]. В настоящей статье поведение диафрагм круглой, квадратной, треугольной и шестиугольной формы при воздействии внешнего однородного давления рассматривается в нелинейном приближении.

Постановка задачи

Линейное приближение теории изгиба тонких пластин, используемое для определения прогибов и полей деформаций в упругих элементах ММС, является наиболее наглядным и распространенным. Однако оно справедливо лишь в области малых прогибов (максимальный прогиб не должен превышать одной-двух десятых толщины диафрагмы). Основной причиной, ограничивающей применимость линейной теории, является пренебрежение нормальными и касательными напряжениями, действующими в срединной плоскости. При больших прогибах усилия в срединной плоскости могут стать сравнимыми с максимальными изгибными напряжениями, и для их учета кроме нормального перемещения $W(x, y)$ точек, лежащих в срединной плоскости, необходимо учесть проекции $U(x, y)$ и $V(x, y)$ перемещения этих точек на оси, лежащие в этой плоскости. Для упрощения расчетов обычно предполагают, что эти проекции малы по сравнению с нормальным перемещением $W(x, y)$. Это предположение, конечно, ограничивает значение прогибов, до которых справедливо данное приближение. Однако, в отличие от линейного приближения, оно справедливо при прогибах, фактически сопоставимых с толщиной диафрагмы.

Для диафрагм, которые выполнены из ортотропного материала, система уравнений, описывающих деформированное состояние гибких пластин в предположении, что значения прогибов $W(x, y)$ имеют один порядок с толщиной пластины, приводится к виду

$$LW(x, y) = q + \left(N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} W(x, y) + 2T \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} W(x, y) + N_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} W(x, y) \right); \quad (1)$$

$$\frac{\partial N_x}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} = 0; \quad \frac{\partial N_y}{\partial y} + \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

Здесь

$$L = D_{11} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2(D_{12} + 2D_{66}) \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + D_{22} \frac{\partial^4}{\partial y^4}; \quad (3)$$

$$N_x = \frac{12}{h^2} D_{11} \left\{ \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + v_{21} \left[\frac{\partial V}{\partial y} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 \right] \right\}; \quad (4)$$

$$N_y = \frac{12}{h^2} D_{22} \left\{ \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + v_{12} \left[\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 \right] \right\}; \quad (5)$$

$$T = \frac{12}{h^2} D_{66} \left\{ \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial y} \right\}, \quad (6)$$

$$\text{где } D_{11} = \frac{h^3}{12} \frac{E_x}{1 - v_{12}v_{21}}; \quad D_{22} = \frac{h^3}{12} \frac{E_y}{1 - v_{12}v_{21}}; \quad D_{12} = \frac{h^3}{12} \frac{E_y v_{12}}{1 - v_{12}v_{21}} = D_{21}; \quad D_{66} = \frac{h^3}{12} G; \quad q - \text{интенсив-}$$

ность поперечной нагрузки; h — толщина диафрагмы; E_x, E_y — модули упругости материала упругого элемента в направлении осей x и y ; v_{12}, v_{21} — коэффициенты Пуассона, причем для ортотропного тела $E_x v_{21} = E_y v_{12}$; G — модуль сдвига в плоскости пластины.

Точное решение системы (1), (2) в аналитической форме получено лишь для некоторых простых задач. Обычно же применяют численные или приближенные методы расчета. В последнем случае для решения системы (1), (2) можно воспользоваться либо приближенными методами интегрирования дифференциальных уравнений (например, методом Бубнова—Галеркина), либо сначала проинтегрировать уравнения (2), а затем вариационным методом (например, методом Ритца) из условия стационарности полной энергии найти остальные параметры.

Изгиб круглой пластины

Рассмотрим задачу осесимметричного изгиба круглой однородной изотропной равномерно нагруженной пластины при больших деформациях. В данном случае порядок системы дифференциальных уравнений (1), (2) может быть понижен. В результате для осесимметричного изгиба придем к системе уравнений

$$D \left[\frac{d^4 W}{dr^4} + \frac{2}{r} \frac{d^3 W}{dr^3} - \frac{1}{r^2} \frac{d^2 W}{dr^2} + \frac{1}{r^3} \frac{dW}{dr} \right] = q + \frac{1}{r} 12 D h^2 T(r); \quad (7)$$

$$(1 - \nu) \left[\frac{U(r)}{r} - \frac{dU(r)}{dr} - \frac{1}{2} \left(\frac{dW}{dr} \right)^2 \right] = r \left(\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dr} \left(\frac{dW}{dr} \right)^2 + \frac{\nu}{r} \frac{dU(r)}{dr} - \nu \frac{U(r)}{r^2} \right), \quad (8)$$

где $D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu)}$ — изгибная жесткость; r — полярный радиус;

$$T(r) = \left[\frac{dU(r)}{dr} + \frac{1}{2} \left(\frac{dW}{dr} \right)^2 + \nu \frac{U(r)}{r} \right] \times \\ \times \left(\frac{dW}{dr} + r^2 \frac{d^2 W}{dr^2} \right) + r \frac{dW}{dr} \left(\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dr} \left(\frac{dW}{dr} \right)^2 + \frac{\nu}{r} \frac{dU(r)}{dr} - \nu \frac{U(r)}{r^2} \right).$$

Решение системы (7), (8) будем искать методом Бубнова—Галеркина (БГ). Рассмотрим случай жесткого защемления диафрагмы по внешнему контуру. Известно, что в этом случае при малых нагрузках прогибы W будут определяться выражением

$$W(\rho) = W_0(1 - \rho^2)^2, \quad (9)$$

где $\rho = r/R$; W_0 — прогиб центра пластинки; R — радиус пластинки.

Предположим, что и при больших прогибах форма изогнутой поверхности пластинки тоже имеет вид (9). Тогда, с учетом граничных условий и (8), выражение для функции смещения $U(r)$ можно выбрать в виде

$$U(\rho) = W_0^2 \frac{\rho}{6R} (1 - \rho^2)(b_0 + b_1 \rho^2 + b_2 \rho^4). \quad (10)$$

Подставляя (10) и (9) в (8), в рамках метода БГ получим, что

$$b_0 = 5 - 3\nu; \quad b_1 = -13 + 3\nu; \quad b_2 = 7 - \nu. \quad (11)$$

Теперь, решая (7) методом БГ, можно получить уравнение для определения W_0 в виде

$$\lambda \frac{1}{h^2} W_0^3 + \frac{4}{3} W_0 - q \frac{R^4}{48D} = 0.$$

Отсюда

$$W_0 = 0,6667h[F - (\lambda F)^{-1}], \quad (12)$$

где

$$F = \left[\frac{0,0035623}{\lambda} SP + \sqrt{\frac{1}{\lambda^3} + \left(\frac{0,0035623}{\lambda} SP \right)^2} \right]^{1/3},$$

$\lambda = 0,7 + 0,4\nu - 0,3\nu^2$; $SP = qS^2/(Dh)$; S — площадь диафрагмы.

Подставляя (12) в (9), видим, что при учете цепных усилий нормированный прогиб $W(\rho)/h$ пластинки зависит лишь от SP и ν , причем зависимость от ν довольно слабая.

На рис. 1 приведены зависимости W_0/h от приведенной нагрузки SP , рассчитанные по (9) с использованием (12). На этом же рисунке приведены результаты расчета в линейном приближении (прямая 1) без учета усилий, возникающих в срединной поверхности пластины. Видно, что в данном случае линейное приближение достаточно хорошо описывает зависимость максимального прогиба от нагрузки лишь до прогибов $W_0/h < 0,3$.

Изгиб квадратной пластины

Получим выражение для оценки прогиба изотропной квадратной пластинки, жестко защемлен-

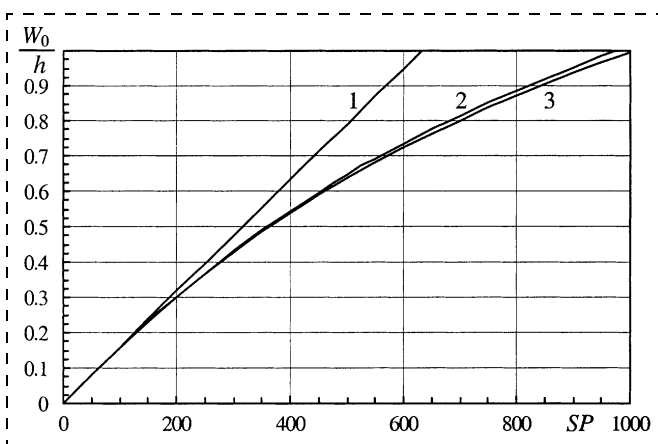


Рис. 1. Зависимости относительного максимального прогиба W_0/h для круглой диафрагмы от приведенной нагрузки SP :

1 — линейное приближение; 2 — нелинейное приближение с $\nu = 0,0622$; 3 — нелинейное приближение с $\nu = 0,3$

ной по контуру, под действием равномерно распределенного поперечного давления с учетом растяжения срединной поверхности.

В качестве пробной функции для прогиба используем функцию

$$W(X, Y) = W_0(X^2 - 1)^2(Y^2 - 1)^2, \quad (13)$$

удовлетворяющую граничным условиям (здесь $X = x/a$ и $Y = y/a$).

Учитывая вид уравнений (2), смещения по x и y будем представлять в виде

$$U = W_0^2 \frac{X}{a} (X^2 - 1)(b_0 + b_1 X^2 + b_2 X^4) \times (Y^2 - 1)^4; \quad (14)$$

$$V = W_0^2 \frac{Y}{a} (Y^2 - 1)(b_0 + b_1 Y^2 + b_2 Y^4) \times (X^2 - 1)^4. \quad (15)$$

Данные функции удовлетворяют граничным условиям и симметрии задачи. Подставляя (13)—(15) в (2), в рамках метода БГ можно определить коэффициенты b_i :

$$b_0 \cong -0,761 + 0,4912\nu; \quad b_1 \cong 2,172 - 0,54\nu; \\ b_2 \cong -1,177 + 0,234\nu. \quad (16)$$

Теперь, учитывая (1), (13)—(16), получим, что

$$W_0 = 0,6095h \left[F - \frac{1}{\lambda F} \right], \quad (17)$$

где $\lambda = 0,4864 + 0,2961\nu - 0,1654\nu^2$, а

$$F = \left[\frac{0,0032711}{\lambda} SP + \sqrt{\frac{1}{\lambda^3} + \left(\frac{0,0032711}{\lambda} SP \right)^2} \right]^{1/3}.$$

Видим, что при учете цепных усилий нормированный прогиб W_0/h квадратной пластинки, как и в случае круглой пластинки, зависит лишь от SP и ν .

Изгиб треугольной и шестиугольной пластины

В рамках метода БГ получим выражения, позволяющие описать изгиб изотропных равносторонних пластинок треугольной и шестиугольной формы под действием равномерно распределенного поперечного давления с учетом растяжения срединной поверхности.

Будем полагать, что пластинки жестко защемлены по периметру. Тогда в качестве пробной функции для прогиба треугольной диафрагмы можно использовать функцию

$$W(X, Y) = A_0((Y - 1)^2 - X^2)^2 Y^2 \quad (18)$$

(здесь $X = x/a$; $Y = y/b$; A_0 — искомая функция, определяющая прогиб; $2a$ — длина стороны; b — высота треугольника) и функцию

$$W(X, Y) = W_0(Y^2 - 1)^2[(0,5Y - 1)^2 - X^2]^2 \times [(0,5Y + 1)^2 - X^2]^2 \quad (19)$$

для шестиугольной диафрагмы (здесь $X = x/a$; $Y = y/b$; a — радиус, b — апофема шестиугольника).

Смещения по x и y с учетом (2) представим соответственно для треугольной диафрагмы в виде

$$U = A_0^2 \frac{X}{a} ((Y - 1)^2 - X^2)^2 (b_0 + b_1 X^2) Y^4; \quad (20)$$

$$V = A_0^2 \frac{1}{b} [(3Y - 1)(Y - 1) - X^2] ((Y - 1)^2 - X^2)^2 Y^3 (d_0 + d_1 Y^2 + d_2 X^2), \quad (21)$$

а для шестиугольной — в виде

$$U = W_0^2 \frac{X}{a} (Y^2 - 1)^4 (g_0 + g_1 X^2) [(0,5Y - 1)^2 - X^2]^2 [(0,5Y + 1)^2 - X^2]^2; \quad (22)$$

$$V = W_0^2 \frac{Y}{b} (Y^2 - 1)^2 [(0,5Y - 1)^2 - X^2]^4 \times [(0,5Y + 1)^2 - X^2]^4 (q_0 + q_1 Y^2).$$

Подставляя (18)–(22) в (2), можно найти b_i , d_i , g_i и q_i . Получим

$$\begin{aligned} b_0 &\cong 0,1943 - 0,056\nu + 0,0222\nu^2; \\ b_1 &\cong -1,2066 - 0,4127\nu - 0,0285\nu^2; \\ d_0 &\cong -0,27967 + 0,0422\nu + 0,001\nu^2; \\ d_1 &\cong 0,59243 + 0,2622\nu + 0,136\nu^2; \\ d_2 &\cong 1,0947 - 0,0423\nu - 0,193\nu^2; \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} g_0 &\cong 1,405 - 0,79\nu; \quad g_1 \cong -5,713 - 4,04\nu; \\ q_0 &\cong 1,1204 - 0,628\nu; \quad q_1 \cong -3,51 - 1,71\nu. \end{aligned}$$

Теперь, подставив (18)–(23) в (1) и проинтегрировав, получим, что для треугольной диафрагмы

$$A_0 = 47,513h \left[F - \frac{1}{\lambda F} \right]; \quad (24)$$

$$F = \left[\frac{0,0012332}{\lambda} SP + \sqrt{\frac{1}{\lambda^3} + \left(\frac{0,0012332}{\lambda} SP \right)^2} \right]^{1/3};$$

$$\lambda = (1,1285 + 0,74982\nu - 0,2266\nu^2),$$

а для шестиугольной

$$W_0 = 1,1345h \left[F - \frac{1}{\lambda F} \right]; \quad (25)$$

$$F = \left[\frac{0,0017074}{\lambda} SP + \sqrt{\frac{1}{\lambda^3} + \left(\frac{0,0017074}{\lambda} SP \right)^2} \right]^{1/3};$$

$$\lambda = (1,8316 + 0,85537\nu - 0,856\nu^2).$$

Отметим, что у диафрагмы в форме правильного треугольника максимальный прогиб наблюдается в ортоцентре. Таким образом, для нее $W_0 = 0,021948A_0$.

Результаты моделирования и их анализ

Полученные аналитические выражения позволяют рассмотреть влияние размеров и формы упругого элемента на его характеристики. На рис. 2 приведены зависимости нормированного максимального прогиба W_0/h от приведенной нагрузки SP , рассчитанные с использованием формул (9), (13), (18) и (19) для диафрагм разной формы, но одинаковой площади. Видно, что при одинаковых площадях наименьшая эффективная жесткость будет у диафрагмы круглой формы, а наибольшая —

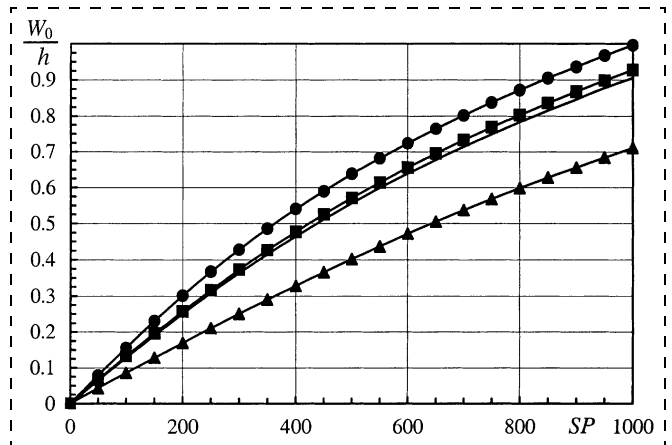


Рис. 2. Зависимости относительного максимального прогиба W_0/h от приведенной нагрузки SP при $\nu = 0,3$ для диафрагм разной формы, но одинаковой площади:

● — круглая диафрагма; ■ — квадратная диафрагма; ▲ — треугольная диафрагма; — — шестиугольная диафрагма

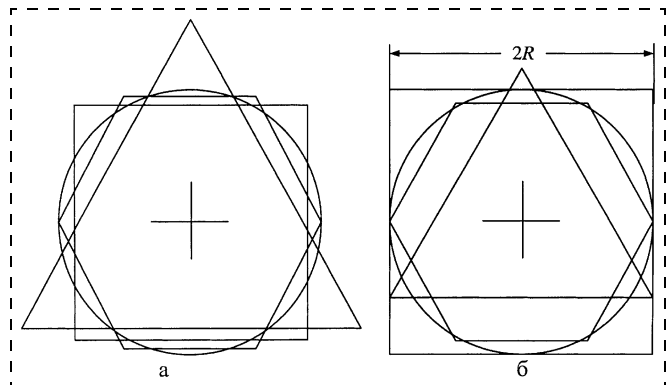


Рис. 3. Соотношение топологий диафрагм разной формы:

а — при одинаковой площади; б — при одинаковой длине базы

у диафрагмы треугольной формы. Прогибы же в центрах квадратной и шестиугольной диафрагм будут практически совпадать. Такое расположение кривых определяется соотношением топологий упругих элементов (рис. 3, а).

Изменяя размеры диафрагм, можно изменить соотношение эффективных жесткостей, а следовательно, и максимальных прогибов у диафрагм разной формы. На рис. 4 приведены зависимости нормированного максимального прогиба W_0/h от приведенной нагрузки $RP = qR^4/(Dh)$, рассчитанные с использованием формул (9), (13), (18) и (19) для диафрагм разной формы, но одинаковой длины базы $2R$ (см. рис. 3, б). Видно, что в этом случае при одинаковом давлении максимальный прогиб будет у диафрагмы квадратной формы, несколько меньше прогнется круглая диафрагма, еще меньше — диафрагма в виде правильного шестиугольника и треугольника.

Используя результаты, полученные в предыдущих разделах, можно найти распределение прогибов, смещений, напряжений и деформаций по площади диафрагмы, что необходимо для выявления областей, наиболее перспективных для размещения чувствительных элементов датчиков или испытывающих критические напряжения, способные вызвать разрушение конструкции.

На рис. 5, а приведено распределение линий равного смещения $U(X, Y)$ по площади квадратной диафрагмы при воздействии равномерно распределенного давления. Зависимость смещения $U(X, Y)$ от координаты X при $Y = 0$ показана на рис. 5, б.

На рис. 6, а приведено распределение линий равного прогиба $W(X, Y)$, а на рис. 6, б — распределение линий равного смещения V по площади

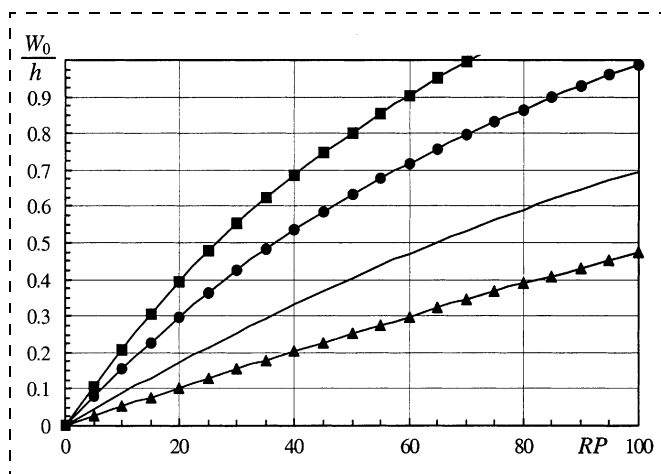


Рис. 4. Зависимости относительного максимального прогиба W_0/h от приведенной нагрузки RP при $\nu = 0,3$ для диафрагм разной форм, но одинаковой длины базы:

● — круглая диафрагма; ■ — квадратная диафрагма; ▲ — треугольная диафрагма; — — шестиугольная диафрагма

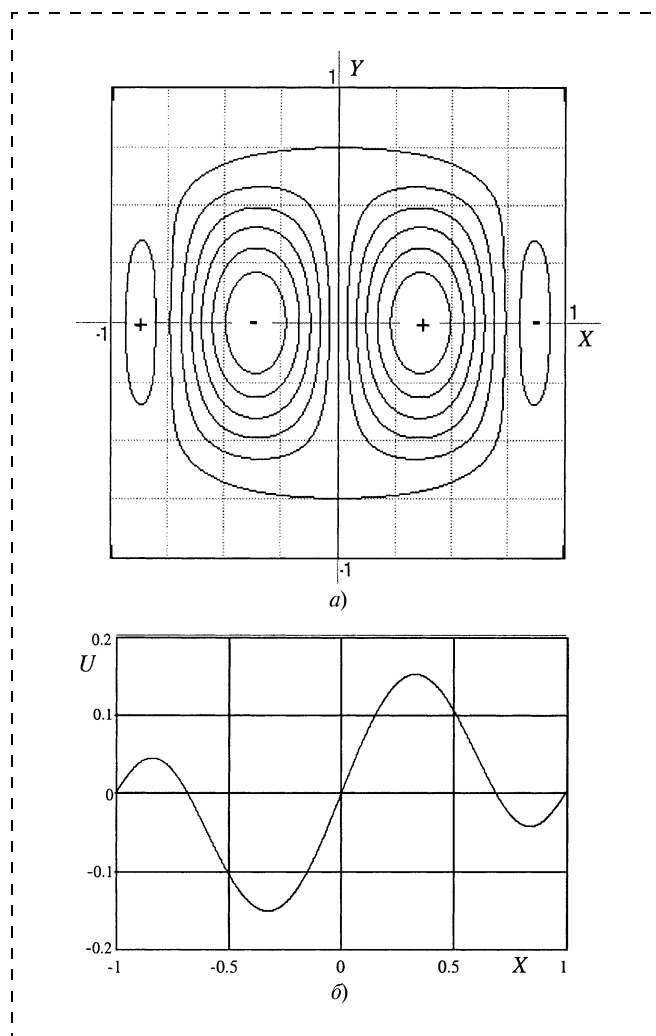


Рис. 5. Распределение линий равного смещения $U(X, Y)$ по площади (а) и зависимость смещения $U(X, Y)$ от координаты X при $Y = 0$ (б) для квадратной диафрагмы при воздействии равномерно распределенного давления

треугольной мембраны при воздействии равномерно распределенного давления. Распределение линий равного смещения V по площади шестиугольной пластины при изгибе равномерно распределенным давлением показано на рис. 7.

Полученные выше выражения для функций смещения U и V могут быть также использованы для уточнения результатов анализа в линейном приближении поведения диафрагм ММС и при других видах воздействия. Так, в работе [5] было показано, что в линейном приближении критический прогиб W_{kr} плоских диафрагм квадратной формы при изгибе под действием электрического поля составляет около $0,47d$ (здесь d — расстояние между электродами) и не зависит от размеров самой диафрагмы. Учитывая напряжения, возникающие в срединной поверхности, можно показать, что критический прогиб зависит еще и от толщины диафрагмы h . На рис. 8 приведена зависи-

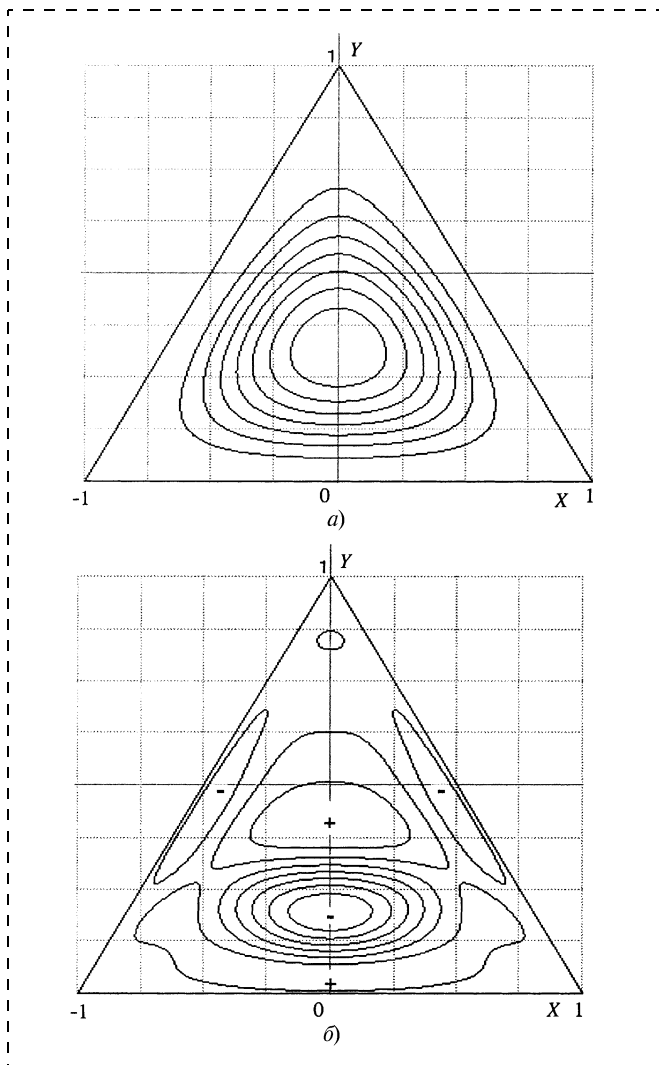


Рис. 6. Распределение линий равного прогиба $W(X, Y)$ (а) и равного смещения V (б) по площади треугольной диафрагмы при воздействии равномерно распределенного давления

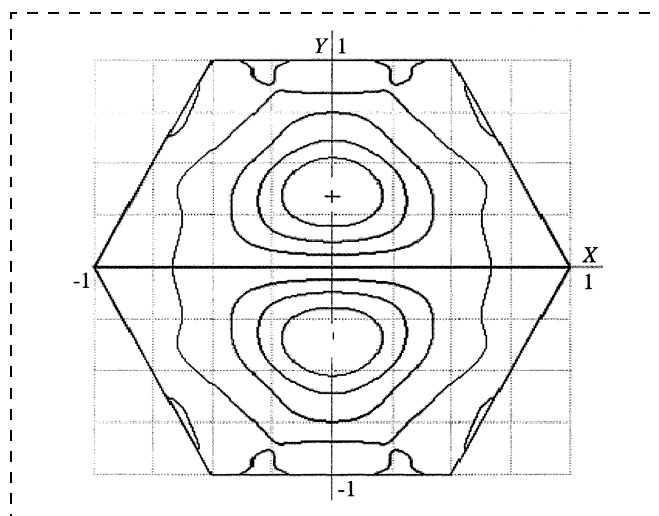


Рис. 7. Распределение линий равного смещения V по площади шестиугольной диафрагмы при изгибе равномерно распределенным давлением

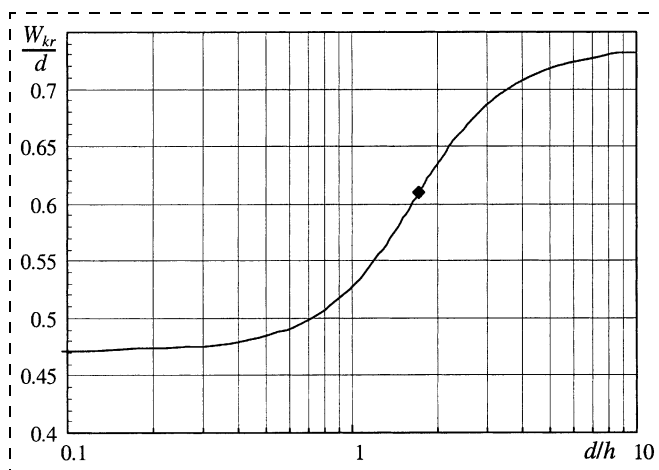


Рис. 8. Зависимость нормированного критического прогиба для квадратной диафрагмы от отношения d/h при изгибе однородным электрическим полем. Маркером отмечен случай, при котором критический прогиб диафрагмы равен ее толщине

мость нормированного критического прогиба для квадратной диафрагмы от отношения d/h , рассчитанная с использованием формул (13)–(16). Видно, что в области малых значений d/h , когда критический прогиб заведомо много меньше h и верно линейное приближение, $W_{kr} \rightarrow 0,47d$. По мере увеличения отношения d/h критический прогиб будет расти и приближаться к значению h . При этом будет возрастать роль цепных усилий и эффективная жесткость диафрагмы. В результате условия, необходимые для "схлопывания", будут достигаться при все больших прогибах. Если предположить, что и при больших прогибах существенную роль играют только изгибные напряжения и усилия в срединной поверхности, то по мере роста прогиба определяющими значение прогиба станут цепные усилия (т. е. как и при малых прогибах, доминирующим станет один, но уже другой механизм), и условия для "схлопывания" опять будут выполняться при неизменном отношении W_{kr}/d . Оценки показывают, что если усилия в срединной поверхности доминируют, то $W_{kr}/d \approx 0,74$.

Заключение

Получены аналитические выражения, позволяющие рассчитывать прогибы диафрагм, имеющих форму круга, квадрата, правильного треугольника и шестиугольника, с учетом усилий, возникающих в срединной плоскости. Показано, что изменяя размеры диафрагм ММС, можно изменять соотношение эффективных жесткостей и максимальных прогибов у диафрагм разной формы. Установлено, что в нелинейном приближении критический прогиб диафрагмы при воздействии электрического поля определяется не только началь-

ным зазором между электродами d , но и толщиной диафрагмы h .

Список литературы

1. Горнев Е. С., Зайцев Н. А., Равилов М. Ф., Романов И. М. Моделирование элементов микромеханики. Часть I // Микросистемная техника. 2002. № 10. С. 18–25.
2. Francois O., Dufour I. Normalized abacus for the global behavior of diaphragms: pneumatic, elastostatic, piezoelectric or elec-

tromagnetic actuation // J. of Modeling and Simulation of Microsystems. 1999. V. 1. N 2. P. 149–160.

3. Nemirovsky Y., Bochoz-Degani O. A methodology and model for the pull-in parameters of electrostatic actuators // Jour. of micromechanical system. 2001. V. 10. N 4. P. 601–615.

4. Steinmann R., Friemann H., Prescher C., Schellin R. Mechanical behavior of micromachined sensor membranes under uniform external pressure affected by in-plane stresses using a Ritz method and Hermite polynomials // Sensors and Actuators A. 1995. N 48. P. 37–46.

5. Драгунов В. П. Влияние формы упругого элемента на характеристики микроэлектромеханических систем // Микросистемная техника. 2004. № 1. С. 20–26.

УДК 621.315.592

А. Б. Евлюхин, канд. физ.-мат. наук, М. Н. Герке, Е. В. Евлюхина, канд. физ.-мат. наук, Владимирский государственный университет

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЗОНДОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БЛИЖНЕПОЛЕВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ МИКРОСКОПИИ ОДНОСЛОЙНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ

Выполнено моделирование распределения излучения внутри тонкого диэлектрического слоя, расположенного в ближней волновой зоне от малого источника. В качестве излучения рассматриваются вторичные волны, испускаемые мезоскопическим диэлектрическим объектом, взаимодействующим с внешней электромагнитной волной. Теоретическая модель основана на формализме самосогласованных интегральных уравнений, полученных из системы уравнений Максвелла методом функции Грина. Учитывая, что все характерные расстояния в задаче значительно меньше длины волны излучения, численные результаты получены в рамках незапаздывающего приближения. Показано, что картина распределения интенсивности может заметно зависеть от компонентов поля, перпендикулярных к поверхности слоя, даже в тех случаях, когда данные компонента отсутствуют во внешней волне.

Введение

Традиционные оптические экспериментальные методы, столь результативные при изучении относительно крупных объектов, при работе с нанообъектами сталкиваются с рядом принципиальных трудностей вследствие невозможности сконцентрировать оптическое поле в области с наноскопическими размерами и в связи с этим обеспечить его взаимодействие с отдельной наноструктурой.

Предложенная относительно недавно сканирующая ближнеполевая оптическая микроскопия

(СБОМ) является той оптической методикой, которая позволяет преодолеть данную трудность [1]. Основное преимущество СБОМ в сравнении с классической микроскопией — получение субволнового пространственного разрешения, которое определяется характерным размером зонда и в типичном случае составляет несколько десятков нанометров [2]. Во многих случаях распределение оптического поля в промежутке "острие зонда — образец" зависит не только от рельефа поверхности, но также и от подповерхностного слоя. Такая ситуация реализуется, например, при исследовании с помощью СБОМ полупроводниковых гетероструктур, имеющих сложную слоистую структуру, заглубленную на 10–100 нм под поверхность. Известно, что в ряде случаев подложка, на которой располагается исследуемый нанообъект, может существенным образом влиять на результат сканирования [3, 4]. Поэтому интерпретация полученных с предельным разрешением изображений часто является неоднозначной. Для понимания процессов взаимодействия оптического наноразмерного зонда с образцом, имеющим сложную структуру, необходимо прибегать к численному моделированию.

В данной работе представлены результаты расчетов распределения интенсивности светового поля в образце неоднородной структуры в присутствии оптического зонда конечных размеров, находящегося вблизи исследуемой поверхности. Для описания поля в рассматриваемой системе применяется формализм самосогласованных интегральных уравнений, основанный на тензорной функции Грина [5]. Особое внимание уделяется построению функции Грина для однослойного образца в приближении ближнего поля. Полученное решение описывает распределение интенсивности в данной системе как функцию ее геометрических параметров и материальных характеристик.

Описание физической модели

Примем в дальнейшем рассмотрении модель СБОМ, изображенную на рис. 1, где изучаемая тонкая диэлектрическая пленка, толщиной d , нанесена на поверхность плоской подложки. Как пленка, так и подложка характеризуются значением диэлектрической проницаемости. Зонд моделируется объектом T в виде прямоугольного параллелепипеда, находящегося на расстоянии Z' от поверхности. Данный объект освещается плоской монохроматической волной E_0 с длиной волны λ , много большей его поперечных размеров. При этом объект является источником вторичных волн, которые рассматриваются нами как модель излучения из кончика волоконной иглы СБОМ. В качестве основания для выбора такой сравнительно простой модели ближнеполевого излучения можно привести следующее рассуждение. В реальной ситуации излучение к наноскопическому образцу подводится через оптическое волокно, которое заканчивается волоконной иглой (в работе мы говорим и нематаллизированных иглах). Данную иглу можно рассматривать как деформированный участок оптического волновода, который препятствует распространению исходного излучения и является причиной его рассеяния. Часть рассеянного излучения выходит из волокна и взаимодействует с объектом исследования. Если неоднородный участок мал по сравнению с длиной волны распространяющегося света, то можно считать, что внешнее излучение однородно в области возмущения. Эту ситуацию и моделирует рассматриваемая система. Таким образом, можно ожидать, что принимаемая модель зонда отражает ряд принципиальных особенностей реальной системы.

Основная задача состоит в вычислении напряженности электрического поля внутри зонда, в слое, а также в подложке. Наш подход основан на методе самосогласованных интегральных уравне-

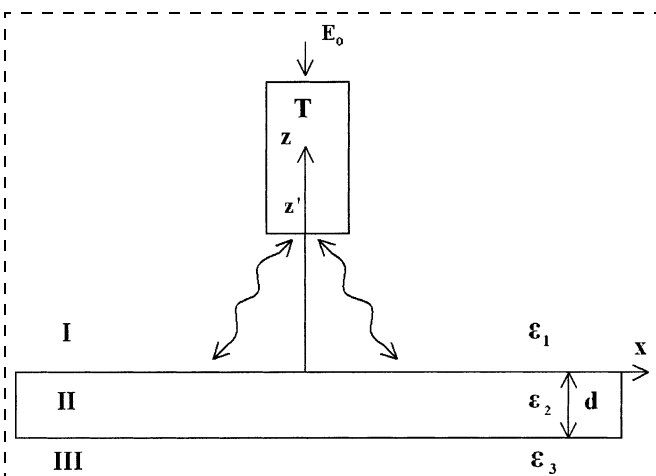


Рис. 1. Схематическое изображение физической системы

ний для электромагнитных полей в неоднородных системах, который был предложен для задач ближнего поля в работе [5].

Векторное волновое уравнение для электрического поля в системе, изображенной на рис. 1, получается из уравнений Максвелла и может быть представлено с использованием операторной записи в следующем виде:

$$(\vec{L} + \vec{e}_1 + \vec{e}_2 + \vec{e}_3 + \vec{e}_T)E = 0, \quad (1)$$

где $\vec{L} = -\nabla \times \nabla \times$; $\vec{e}_1 \equiv k^2 \epsilon_1(\mathbf{r}, \omega)$; $\vec{e}_2 \equiv k^2 \Delta \epsilon_2(\mathbf{r}, \omega)$; $\vec{e}_3 \equiv k^2 \Delta \epsilon_3(\mathbf{r}, \omega)$; $\vec{e}_T \equiv k^2 \Delta \epsilon_T(\mathbf{r}, \omega)$; k — волновое число в вакууме; ϵ_1 — относительная диэлектрическая проницаемость среды над слоистой структурой;

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon_3(\mathbf{r}, \omega) &= \epsilon_3(\mathbf{r}, \omega) - \epsilon_1(\mathbf{r}, \omega); \\ \Delta \epsilon_2(\mathbf{r}, \omega) &= \epsilon_2(\mathbf{r}, \omega) - \epsilon_1(\mathbf{r}, \omega); \\ \Delta \epsilon_T(\mathbf{r}, \omega) &= \epsilon_T(\mathbf{r}, \omega) - \epsilon_1(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned}$$

а ϵ_2 , ϵ_3 и ϵ_T — относительные диэлектрические проницаемости слоя, подложки и зонда, соответственно. Используя метод функции Грина, оператор Грина $\vec{G}_1$, связанный с системой, которая включает только диэлектрический слой и подложку в однородной бесконечной среде, может быть найден из уравнения Дайсона [5]

$$\vec{G}_1 = \vec{G}_0 - \vec{G}_0(\vec{e}_2 + \vec{e}_3)\vec{G}_1, \quad (2)$$

где $\vec{G}_0$ — оператор, описывающий однородную бесконечную среду и определяемый следующим выражением: $(\vec{L} + \vec{e}_1)\vec{G}_0 = \vec{I}$. Здесь $\vec{I}$ — единичный оператор. Для $\vec{G}_0$ существует известное координатное представление [6]:

$$\begin{aligned} \vec{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left[\left(-\frac{1}{R} - \frac{1}{k_1 R^2} + \frac{1}{k_1^2 R^3} \right) \vec{U} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{R} + \frac{3i}{k_1 R^2} - \frac{3}{k_1^2 R^3} \right) \mathbf{e}_R \mathbf{e}_R \right] \frac{e^{ik_1 R}}{4\pi}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $R = |\mathbf{R}| = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$; $\vec{U}$ — единичный тензор; $\mathbf{e}_R = \mathbf{R}/R$, $k_1^2 = \epsilon_1 k^2$. С использованием введенных обозначений можно записать операторное выражение для напряженности электрического поля E всей рассчитываемой системы:

$$E = E_1 - \vec{G}_1 \vec{e}_T E, \quad (4)$$

где E_1 — напряженность электрического поля в системе без зонда, $E_1 = E_0 - \vec{G}_0(\vec{e}_2 + \vec{e}_3)E_1$. Под-

ставляя выражение для $\vec{G}_1$ из (2) в (4) и предполагая, что внешнее поле рассеивается только зондом, получим для поля в системе выражение:

$$E = E_0 - (\vec{G}_0 - \vec{g}) \vec{e}_T E, \quad (5)$$

где $\vec{g} = \vec{G}_0(\vec{e}_2 + \vec{e}_3) \vec{G}_1$ — оператор, учитывающий влияние слоя с подложкой.

Уравнения (2) и (5) позволяют найти напряженность поля всей системы. При этом выражение (5) в координатном представлении может быть записано следующим образом:

$$E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) - k^2 \int_{V_T} (\vec{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \vec{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \times \\ \times \Delta \vec{e}_T E(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (6)$$

где V_T — объем, занимаемый зондом. Напряженность поля $E_0(\mathbf{r})$ отлична от нуля только внутри зонда.

Расчет поля из уравнения (6) можно выполнить в два этапа. На первом этапе вычисляется поле внутри зонда. В этом случае, благодаря малым размерам зонда, расстояния между всеми точками, определяемыми радиус-векторами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, в (6) будут значительно меньше длины волны внешнего излучения, и поэтому для функции Грина $\vec{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ можно ограничиться только ближнеполевой частью, пропорциональной $1/R^3$ (3). Более того, если толщина диэлектрического слоя и расстояние между зондом и слоем также значительно меньше длины волны, то для представления тензорной функции $\vec{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в (6) будет достаточно незапаздывающего приближения. На втором этапе, после того как будет определено поле в зонде, поле в некоторой плоскости под зондом может быть найдено вновь из уравнения (6), считая, что радиус-вектор $\mathbf{r}$ принадлежит плоскости расчетов. Так как нас интересует поле непосредственно под зондом, то и здесь можно использовать незапаздывающее приближение для функции Грина ($\vec{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \vec{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$). Таким образом, для осуществления указанных этапов необходимо знать функцию $\vec{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Тензорную функцию Грина для однослойной системы в пренебрежении эффектами запаздывания можно получить, решая задачу об электростатическом поле точечного диполя, расположенного вблизи диэлектрического слоя. В данном случае напряженность поля E в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}$, создаваемое дипольным моментом $\mathbf{p}$ в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}'$, может быть представлена в виде $E(\mathbf{r}) = \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{p}$, где

$\vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — тензор, определяющий электростатическое поле диполя. Этот тензор связан с электрическим тензором Грина уравнения (6) предельным переходом:

$$\epsilon_0 \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -k^2 \lim_{\lambda \rightarrow \infty} (\vec{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \vec{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')), \quad (7)$$

где λ — длина волны излучения в веществе слоя и подложки; ϵ_0 — электрическая постоянная вакуума. Из соотношения (7) следует, что в ближней волновой зоне от источника, когда все расстояния значительно меньше длины волны, поле имеет квазистатический характер. Поэтому для построения тензора Грина в ближайшей зоне мы и ограничимся данным приближением. Это позволит нам получить аналитическое выражение для тензора Грина и значительно упростить задачу.

3. Электрическая функция Грина

Рассмотрим для начала электростатическую задачу определения поля точечного заряда e , расположенного над диэлектрическим слоем толщиной d (см. рис. 1). Потенциал электрического поля определяется из уравнения Пуассона

$$\Delta \varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), & 0 \leq z \leq +\infty; \\ 0, & -\infty \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ — радиус-векторы точек, в которых определяется потенциал и находится заряд, соответственно; плоскость $z = 0$ соответствует границе между слоем и областью, где расположен заряд. Скалярный потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ удовлетворяет обычным граничным условиям [7] на поверхностях слоя и обращается в нуль на бесконечности.

Решение уравнения (8) в областях II и III (см. рис. 1) может быть представлено в виде электростатического аналога ($\lambda \rightarrow \infty$) углового спектра волнового поля [8]:

$$\varphi^{(2)}(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \iint A^{(2)}(u, v) e^{ik_{\parallel} \mathbf{r}_{\parallel} + wz} dudv + \\ + \iint B^{(2)}(u, v) e^{ik_{\parallel} \mathbf{r}_{\parallel} - wz} dudv; \quad (9)$$

$$\varphi^{(3)}(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \iint A^{(3)}(u, v) e^{ik_{\parallel} \mathbf{r}_{\parallel} + wz} dudv, \quad (10)$$

где $\mathbf{k}_{\parallel} = (u, v)$; $w = \sqrt{u^2 + v^2}$; $\mathbf{r}_{\parallel} = (x, y)$.

В выражении для $\varphi^{(3)}$ мы записали только решение, удовлетворяющее условию $\varphi^{(3)} \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$. Решение в области I ($0 \leq z \leq \infty$) состоит из решения однородного уравнения и некоторого частного решения неоднородного уравнения. Используя

электростатический аналог ($\lambda \rightarrow \infty$) представления Вейля для сферической волны [7], можем записать:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{2\pi} \iint e^{ik_{\parallel}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) - w|z - z'|} \frac{dudv}{w},$$

где $\mathbf{r}'_{\parallel} = (x', y')$. Тогда решение в области I представим в виде

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)}(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = & \iint B^{(1)}(u, v) e^{ik_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} - wz} dudv + \\ & + \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1} \iint e^{ik_{\parallel}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) - w|z - z'|} \frac{dudv}{2\pi w}, \end{aligned} \quad (11)$$

где первое слагаемое — общее решение однородного уравнения, удовлетворяющее условию на бесконечности $\varphi \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$, а второе слагаемое является кулоновским потенциалом заряда e .

Используя граничные условия, можно определить величины $A^{(2)}$, $B^{(2)}$, $A^{(3)}$, $B^{(1)}$ в выражениях (9), (10) и (11), и переходя от потенциала заряда e к потенциалу точечного диполя, формальной заменой величины e оператором $\mathbf{p}\nabla'$, получить выражение

$$\varphi^{(i)}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\nabla' \frac{F^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (12)$$

где $\mathbf{r}'$ — точка положения диполя с моментом $\mathbf{p}$; ∇' — оператор градиента по координатам $\mathbf{r}'$. При записи выражения (12) мы ввели индекс i . Индекс i указывает на номер области, которой принадлежит радиус-вектор $\mathbf{r}$ (I = 1, II = 2, III = 3). Функции $F^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ определяются выражениями:

$$\begin{aligned} F^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \\ & + \iint b^{(1)}(u, v) e^{ik_{\parallel}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) - w(z + z')} \frac{dudv}{2\pi w}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & \iint a^{(2)}(u, v) e^{ik_{\parallel}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) - w(z' - z)} \frac{dudv}{2\pi w} + \\ & + \iint b^{(2)}(u, v) e^{ik_{\parallel}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) - w(z + z' + 2d)} \frac{dudv}{2\pi w}, \end{aligned}$$

$$F^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \iint a^{(3)}(u, v) e^{ik_{\parallel}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) - w(z' - z)} \frac{dudv}{2\pi w},$$

$$\text{где } b^{(1)}(u, v) = \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \frac{1 - L_1}{1 - L};$$

$$a^{(2)}(u, v) = \frac{2\epsilon_1}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \frac{1}{1 - L};$$

$$b^{(2)}(u, v) = \frac{2(\epsilon_2 - \epsilon_3)\epsilon_1}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)(\epsilon_1 + \epsilon_3)} \frac{1}{1 - L};$$

$$a^{(3)}(u, v) = \frac{2\epsilon_1\epsilon_2}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)(\epsilon_1 + \epsilon_3)} \frac{1}{1 - L}.$$

Здесь

$$L_1(wd, \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = \frac{(\epsilon_3 - \epsilon_2)(\epsilon_1 + \epsilon_2)}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)(\epsilon_1 - \epsilon_2)} e^{-2wd}; \quad (13)$$

$$L(wd, \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_1)(\epsilon_2 - \epsilon_3)}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)(\epsilon_2 + \epsilon_1)} e^{-2wd}.$$

Зная потенциал в системе, определим электрическое поле $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$. Окончательно получим $\mathbf{E}^{(i)}(\mathbf{r}) = \vec{G}^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{p}$, $i = 1, 2, 3$, где

$$\vec{G}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\nabla\nabla' \frac{F^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (14)$$

где $\nabla\nabla'$ — диадное произведение операторов градиента по координатам $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, соответственно. Заметим, что случай, когда диполь локализован внутри слоя или под слоем, рассматривается аналогичным образом.

Теперь обратим внимание на то, что величина L (13) входит во все функции $b^{(1)}$, $a^{(2)}$, $b^{(2)}$ и $a^{(3)}$ одним и тем же способом. Поэтому, раскладывая в ряд выражение $(1 - L)^{-1}$, можно осуществить обратное преобразование Вейля и записать функцию Грина в виде

$$\begin{aligned} \vec{G}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & -\frac{\nabla\nabla'}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1} \left[\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \right. \\ & + \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{L_0^m}{R(z + z' + 2md)} + \\ & \left. + \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_3)}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{L_0^m}{R(z + z' + 2(m+1)d)} \right]; \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \vec{G}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & -\frac{\nabla\nabla'}{4\pi\epsilon_0(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \times \\ & \times \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{L_0^m}{R(-z + z' + 2md)} + \right. \\ & \left. + \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_3)}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{L_0^m}{R(z + z' + 2(m+1)d)} \right], \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \vec{G}^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & -\frac{4\epsilon_2\nabla\nabla'}{4\pi\epsilon_0(\epsilon_1 + \epsilon_2)(\epsilon_2 + \epsilon_3)} \times \\ & \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{L_0^m}{R(-z + z' + 2md)}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $R(t) = [(x - x')^2 + (y - y')^2 + t^2]^{1/2}$;

$$L_0 = \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)}.$$

В данной работе мы выполним расчеты для случая, когда величина L_0 , определяемая диэлектрическими постоянными слоя и подложки, мала и ряды в выражениях (15), (16) и (17) быстро сходятся. Тогда можно ограничиться несколькими первыми слагаемыми и получить аппроксимацию функции Грина уравнения (6) в виде конечного аналитического выражения, на основе которого затем рассчитать распределение электрического поля в ближней зоне под зондом.

4. Результаты численных расчетов

Общая схема численного решения интегрального уравнения (6) включает дискретизацию области расчетов на отдельные ячейки, в которых предполагается поле постоянным, и затем решение системы линейных уравнений для определения электрического поля в каждой ячейке дискретизации [8, 9]. Следует заметить, что шаг дискретизации должен быть значительно меньше длины волны излучения в соответствующем веществе. При решении системы линейных уравнений возникает проблема расходимости для случая, когда $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = 0$. Для преодоления этой трудности можно воспользоваться специальной процедурой, развитой в работе [10], которая учитывает эффекты деполяризации.

Целью исследования является выяснение того, как диэлектрический слой в непосредственной близости от зонда СБОМ может изменять электрическое поле и соответственно влиять на разрешение микроскопа. Мы предполагаем, что разрешение в плоскости наблюдения определяется распределением поля от зонда.

При расчете была принята толщина слоя, равной 60 нм, размеры зонда были $30 \times 30 \times 100$ нм, расстояние между зондом и поверхностью слоя — 20 нм. Длина волны внешнего излучения выбиралась равной 1000 нм.

Мы рассмотрели два типа поляризации внешней волны: ТМ-поляризация и ТЕ-поляризация. В первом случае вектор электрического поля падающей волны перпендикулярен плоскости поверхности слоя (плоскость XY), во втором случае — па-

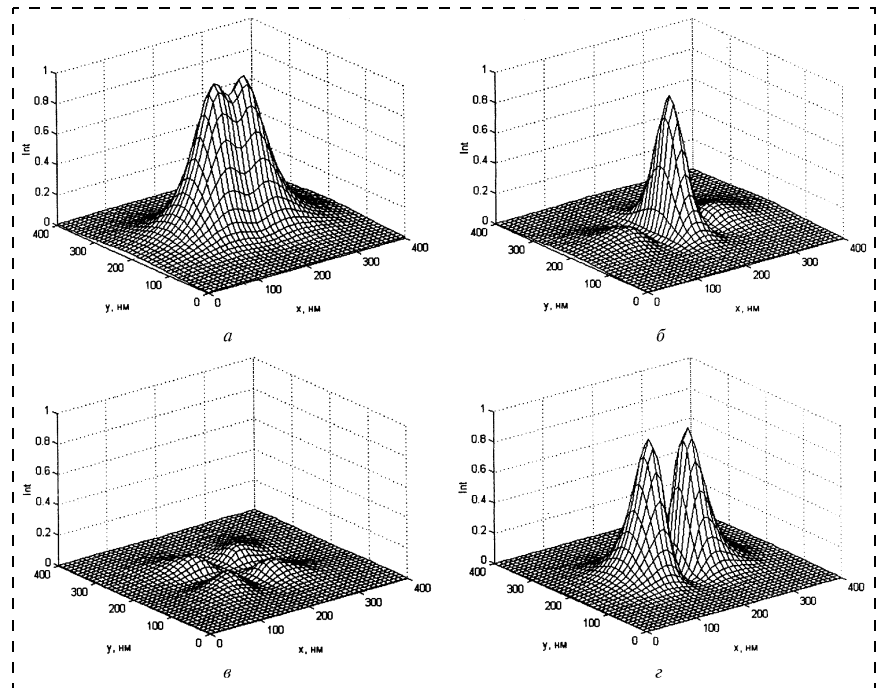


Рис. 2. Распределение нормированного квадрата модуля (интенсивности) электрического поля в плоскости ниже зонда без присутствия слоя и подложки, ТЕ-поляризация: a — полная интенсивность; b — интенсивность E_x -компоненты (как поляризация внешней волны); v — интенсивность E_y -компоненты; z — интенсивность E_z -компоненты

раллелен. Относительные диэлектрические проницаемости среды над слоем и зонда были выбраны $\varepsilon_1 = 1$ и $\varepsilon_T = 2,25$, соответственно. Результаты расчета приведены в нормированном виде. Нормировка определялась как отношение значения интенсивности в точке к максимальному значению, полученному в расчете.

Вначале рассмотрим случай, когда в системе нет слоя и подложки (рис. 2, 3). Из рисунков видно, что размер области локализации полной интенсивности электрического поля в выбранной плоскости расчетов (50 нм от зонда) превышает поперечные размеры зонда, что свидетельствует о сильной зависимости разрешения микроскопа от расстояния между зондом и образцом даже на масштабах значительно меньших длины волны излучения.

Из рис. 2 также видим, что для ТЕ-поляризации, когда Z -компонента поля (продольная) отсутствует в падающей волне, эта составляющая поля играет важную роль в разрешении, так как ее вклад в общую интенсивность переизлученного зондом поля является определяющим. Это приводит к тому, что распределение одной интенсивности вытянуто вдоль направления поляризации падающей волны. Если рассмотреть распределение интенсивности отдельных компонент поля, то легко увидеть, что поперечные составляющие выступают не одинаковым образом и имеют разные зна-

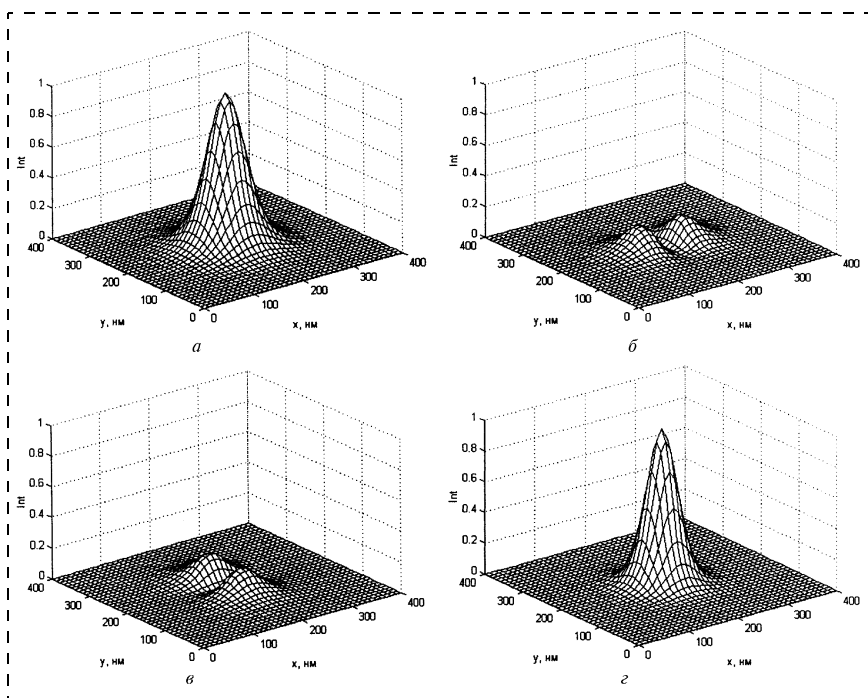


Рис. 3. Распределение нормированного квадрата модуля (интенсивности) электрического поля в плоскости ниже зонда без присутствия слоя и подложки, ТМ-поляризация:

a — полная интенсивность; *б* — интенсивность E_x -компоненты; *в* — интенсивность E_y -компоненты; *г* — интенсивность E_z -компоненты (как поляризация внешней волны)

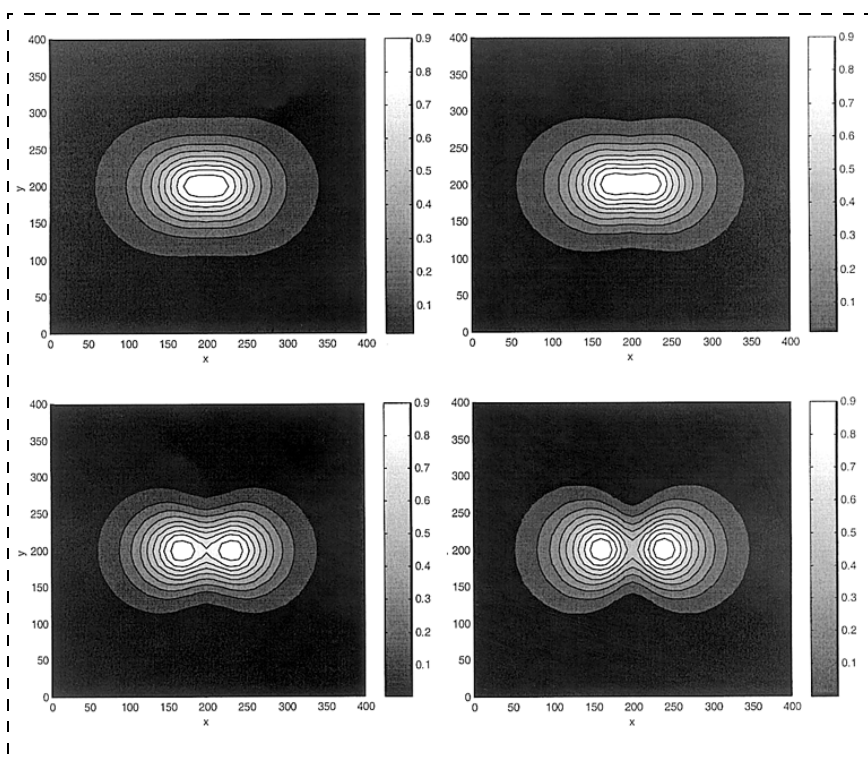


Рис. 4. Распределение нормированного квадрата модуля (интенсивности) электрического поля в плоскости ниже зонда на 50 нм в середине слоя толщиной 60 нм, ТЕ-поляризация:

a — $\epsilon_2 = 3$ (слой), $\epsilon_3 = 1$ (нет подложки); *б* — $\epsilon_2 = 14$ (слой), $\epsilon_3 = 9$ (подложка); *в* — $\epsilon_2 = 9$ (слой), $\epsilon_3 = 14$ (подложка); *г* — $\epsilon_2 = 1$ (нет слоя), $\epsilon_3 = 14$ (подложка)

чения и разное пространственное распределение. Преобладающая поперечная компонента совпадает с компонентой поля падающей внешней волны. Ее пространственное распределение существенно отличается от распределения продольной составляющей поля, но имеет с ней соизмеримую величину. Это может приводить к особенностям неоднородного возбуждения мезоскопических объектов, если последние имеют анизотропные электромагнитные свойства.

В случае ТМ-поляризации (см. рис. 3) компонента Z присутствует в падающей волне и является определяющей. Однако компоненты X и Y также играют заметную роль в определении общей интенсивности и как следствие в разрешении измерений. При этом распределение полной интенсивности является симметричным (рис. 3, *a*). Вследствие симметрии системы такое качественное поведение электрического поля для ТМ-поляризации остается в силе и в присутствии однородного слоя и подложки, поэтому остановим свое внимание на другом случае.

Рис. 4 демонстрирует распределение квадрата модуля электрического поля для ТЕ-поляризации внутри слоя без учета подложки и с включением в расчет подложки. Так как трехмерное представление распределения интенсивности в целом и отдельных компонент имеет похожий вид в сравнении со случаем отсутствия слоя и подложки, то на рис. 4 приведено только распределение интенсивности для полного электрического поля в представлении линий уровня. Из рисунка видно, что благодаря граничным условиям для поля на поверхностях слоя, слой и подложка влияют на распределение компоненты Z результирующего поля, поэтому относительный вклад этой компоненты в полную интенсивность изменяется, что приводит к изменению распределения полной интенсивности электрического по-

ля. Действительно перпендикулярные к поверхности слоя составляющие напряженности электрического поля имеют скачок значения, следствием чего является изменение их значений в соответствующих частях системы. Следует отметить, что большое значение имеет разность между диэлектрическими проницаемостями подложки и слоя. Сравнивая зависимости на рис. 4, видим, что если диэлектрическая проницаемость слоя меньше проницаемости подложки, то интенсивность поля в слое имеет два пика (рис. 4, в), которые соответствуют вкладу компонент Z . Это значит, что "сильная" подложка ведет к увеличению роли продольных компонент поля в слое, и наоборот. Это особенно видно в случае, когда диэлектрическая проницаемость слоя равна единице, т. е. слой отсутствует (рис. 4, г), здесь полная интенсивность в основном определяется продольной составляющей поля.

В итоге приходим к выводу, что меняя подложку, можно изменять относительную роль различных компонент поля в слое, и соответственно, влиять на разрешающую способность микроскопа. Этот вывод является весьма важным с точки зрения использования ближнеполевого зонда для изучения объектов с анизотропными свойствами и для исследования оптических переходов с учетом правил отбора в слоистой структуре.

Заключение

В работе методом самосогласованных интегральных уравнений выполнено моделирование электромагнитного поля в ближней волновой зоне от мезоскопического зонда системы, включающей наноскопический диэлектрический слой на подложке.

Аналитически построена тензорная функция Грина для источника поля над однослойной системой в ближнеполевом приближении.

Численные результаты показали, что слой и подложка могут изменять относительный вклад различных компонент электрического поля в распределение электрической энергии в системе по сравнению со случаем, когда в системе отсутствуют слой и подложка.

Следовательно, данный эффект может изменять разрешение микроскопа и является очень важным при исследовании анизотропных оптических эффектов.

Модель может быть применена для исследования диэлектрических и металлических нанобъектов скрытых внутри слоистой структуры.

Список литературы

1. **Bozhevolnyi S. I.** In *Optics of Nanostructured Materials* / Edited by V. M. Markel and T. F. George. New York: Wiley, 2001.
2. **Greffet J.-J., Carminati R.** Image formation in near-field optics // *Prog. in Surf. Sci.* 1997. V. 56. N 3. P. 133—237.
3. **Евлюхин А. Б.** Влияние мезоскопических полупроводниковых возмущений на распределение электромагнитных полей в ближнеполевой оптической микроскопии // *Письма в ЖТФ.* 2002. Т. 28. 7. С. 6—11.
4. **Feldj N., Aubard J., Levi G., Krenn J. R., Schider G., Leitenner A., Aussenegg F. R.** Enhanced substrate-induced coupling in two-dimensional gold nanoparticle arrays // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. N 245407. P. 1—7.
5. **Martin O. J. F., Girard C., Dereux A.** Generalized filed propagator for electromagnetic scattering and light confinement // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 74. P. 526—529.
6. **Keller O.** Local field in the electrodynamics of mesoscopic media // *Phys. Rep.* 1996. V. 268. P. 85—262.
7. **Мандель Л., Вольф Э.** Оптическая когерентность и квантовая оптика. М.: Физматлит, 2000. 896 с.
8. **Li Z., Gu B., Yang G.** Modified self-consistent approach applied in near-field optics for mesoscopic surface defects // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 55. N 16. P. 10883—10894.
9. **Girard C., Dereux A., Martin O. J. F., Devel M.** Generation of optical standing wave around mesoscopic surface structure: scattering and light confinement // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. N 4. P. 2889—2898.
10. **Yaghjian A. D.** Electric dyadic Green's functions in the source region // *Proceed. IEEE.* 1980. V. 68. P. 248—263.

УДК 53.082.1, 53.085.332, 53.087.022, 681.2.087

А. В. Нохрин, канд. физ.-мат. наук, **И. М. Макаров**, канд. физ.-мат. наук, **Ю. Г. Лопатин**,
Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского

ОСОБЕННОСТИ МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕФОРМАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННОГО РОСТА ЗЕРЕН В НАНО- И МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СВЕРХПЛАСТИЧНЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВАХ МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Изложены основные подходы к применению методики атомно-силовой микроскопии для изучения эволюции зеренной структуры при отжиге и после высокоскоростной сверхпластической деформации алюминиевых сплавов системы Al—Mg—Sc—Zr и Al—Zn—Mg—Sc—Zr, полученных методом равноканального углового прессования.

Введение

Одной из проблем, стоящих на пути широкого использования микрокристаллических (МК) сверхпластичных алюминиевых сплавов, полученных методом равноканального углового прессования (РКУП), является проблема стабильности их структуры [1–3]. Нагрев до температур $\sim 0,35...0,40 T_m$, необходимых для осуществления высокоскоростной сверхпластичности (ВССП) [3–5] (где T_m — абсолютная температура плавления), приводит к развитию процессов рекристаллизации [1–4], а в условиях ВССП — к деформационно-стимулированному росту зерен [3, 4, 6]. Эти процессы в МК алюминиевых сплавах протекают с большой скоростью и приводят к утрате микрокристаллической структуры, необходимой для реализации сверхпластичности [3–6]. В связи с этим в последние годы активно продолжаются поиски оптимальных составов МК сплавов и режимов их стабилизирующей термообработки. При этом

используется широкий спектр методов — как прямых структурных [6–9], так и относительно новых, в частности, атомно-силовой микроскопии [3, 10, 11].

Анализ экспериментальных работ, посвященных исследованию процессов рекристаллизации [1–9] и деформационно-стимулированного роста зерен в условиях высокоскоростной сверхпластичности [3, 4] МК алюминиевых сплавов, показывает, что приводимые авторами экспериментальные результаты зачастую противоречивы — наблюдаются существенные расхождения в вопросах о характере роста зерен [1, 5, 7, 8], о значениях энергии активации процесса миграции [1, 7, 8], о температуре начала рекристаллизации [1–9] и др.

Одной из причин появления отмеченных противоречий являются методические трудности, возникающие при изготовлении образцов для структурных исследований. Эти трудности связаны со спецификой МК сплавов — малым размером зерна, высокой плотностью дислокаций и нерав-

новесностью границ зерен. Специфика МК материалов приводит к возникновению разнообразных артефактов, существенно искажающих "истинную картину" зеренной структуры МК сплавов.

Традиционно структура МК материалов исследуется методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и металлографии. К основным недостаткам ПЭМ относят трудоемкость приготовления фольг, быстрое окисление их поверхности, возможность локального разогрева фольги при приготовлении и, как следствие, существенное локальное изменение микроструктуры. Металлография, лишенная перечисленных выше недостатков, не может быть основным методом для исследования МК структур вследствие ограничений на минимальный размер зерна, разрешимый оптикой (0,5...1 мкм). Указанных недостатков лишен метод АСМ, обладающий высокой разрешающей способностью (вплоть до атомарного уровня), не требующий особых ограничений на размеры образцов, а также обеспечивающий относительно высокую скорость сканирования поверхности. Однако в методе АСМ, как и в каждой новой методике, остается еще много неясных моментов.

В связи с этим целью настоящей работы является разработка методики приготовления образцов для исследований зеренной структуры МК алюминиевых сплавов методом атомно-силовой микроскопии, обсуждение возникающих при структурных исследованиях МК металлов проблем и анализ типичных артефактов, возникающих при использовании АСМ.

В работе дано краткое описание объектов исследования и описаны методика исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после равноканального углового прессования (РКУП),

методика исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после РКУП и последующего нагрева до температуры ВССП и выдерживания при этой температуре, методики исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после РКУП, рекристаллизационного отжига и испытаний образца на ВССП.

Объекты исследования. Экспериментальные методы

В качестве объектов исследований были выбраны сплавы системы Al—Mg—Sc—Zr состава Al— X % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr ($X = 0, 1.5, 3.0$ и 4.5 вес. %) и сплавы системы Al—Zn—Mg—Sc—Zr состава Al— X % Zn— Y % Mg — 0,3 % Sc (~0,2 % Zr) ($X = 4.5, 5$; $Y = 1.5, 2.0$)*. После кристаллизации образцы гомогенизации не подвергались. МК структура в исследуемых образцах была сформирована методом многоциклового РКУП [12]. Образцы размером $21 \times 21 \times 165$ мм были подвергнуты $N = 6...8$ циклам РКУП** при температуре ~100...200 °С. РКУП осуществлялось в инструменте с углом пересечения рабочего и выходного каналов $2\Phi = \pi/2$. Однородность деформации простого сдвига контролировалась на каждом цикле РКУП с помощью поперечных рисок, механически нанесенных в плоскости течения образца. Использовался максимально жесткий режим РКУП, при котором заготовка на каждом цикле поворачивается на угол $\pi/2$ вокруг своей продольной оси. Такой режим обеспечивает наиболее интенсивное измельчение зеренной структуры [12]. Скорость деформирования составляла 0,4 мм/с.

Для исследования микроструктуры МК металлов использовался универсальный воздушный

АСМ/СТМ микроскоп "Accurex-2100". Зеренная структура изучалась в контактном режиме (*Contact Mode*), позволяющем "отстроиться" от наличия на поверхности исследуемых образцов адсорбционных слоев. Для исследования использовался тонкопленочный V-образный кантилевер Si_3N_4 с пирамидальным зондом (отношение длины L зонда к ширине W основания 1 : 1, радиус закругления конца $r < 50$ нм). Использовался сканер *Tripod* с опорной точкой и линейризатором *TrueMetrix* (диапазон x и y — 100 мкм, z — 10 мкм). Точность отработки перемещений составляет 0,1 % от максимального диапазона, уровень вибрационного и акустического шума — 0,07 нм. Размер области сканирования варьировался от 1 до 100 мкм в зависимости от характерных размеров изучаемого объекта. Число точек, по которым строилось изображение в пределах одного скана, равнялось 300 и оставалось постоянным для всех случаев.

Для контроля АСМ-результатов параллельно проводились исследования методами оптической и просвечивающей электронной микроскопии.

Оптические (металлографические) исследования проводились с помощью оптического микроскопа НЕОФОТ-32 при увеличении $\times 1000$.

ПЭМ-исследования проводились на микроскопе Hitachi H-800 при ускоряющем напряжении 200 кВ в диапазоне увеличений от $\times 10\,000$ до $\times 100\,000$. Фольгу для исследований готовили из дисков диаметром 3 мм. Диски вырубались из пластин, вырезанных параллельно плоскости течения образца на последнем цикле РКУП. Первоначальная толщина дисков (~250 мкм) уменьшалась путем механического шлифования до ~150 мкм. Затем из дисков готовили фольгу электрополированием в электролите состава: HNO_3 — 49 об. %;

CH_3OH — 49 об. %; HCl — 2 об. %, при напряжении $U = 8...10$ В, температуре $T = 20...25$ °С и плотности тока $j \approx 1$ А/см².

Все структурные исследования проводили при комнатной температуре. Для изучения термической стабильности образцы сплавов отжигали в воздушной печи с точностью поддержания температуры ± 2 °С, с последующим охлаждением в воде, в интервале температур 160...500 °С. Испытания на растяжение проводили на модернизированной разрывной машине 2167 Р-50. Нагрев образца до рабочей температуры осуществлялся за 5 мин. До начала испытаний для обеспечения теплового равновесия и создания изотермических условий растяжения образцы выдерживали при рабочей температуре в течение 5 мин. Испытания проводили в режиме растяжения с постоянной истинной скоростью деформации в интервале скоростей $10^{-2}...4 \cdot 10^{-1}$ с⁻¹ при $T = 300...500$ °С с точностью ± 1 °С [3].

Экспериментальные результаты

Предварительные замечания.

Для выявления закономерностей деформационно-стимулированного роста зерен в алюминиевых МК сплавах в условиях ВССП необходимо решить следующие методические задачи: 1) отработка методики исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после РКУП; 2) отработка методики исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после РКУП и последующего нагрева до температуры ВССП и выдерживания при этой температуре; 3) отработка методики исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после РКУП, рекристаллизационного отжига и испытаний образца на ВССП.

Последовательное решение этих задач позволит создать методику исследования зеренной

* Материалы для исследований были предоставлены В. В. Захаровым (ВИЛС, г. Москва)

** РКУП проводилось В. И. Копыловым (ФТИ НАН Беларуси).

структуры МК алюминиевых сверхпластичных сплавов в различных структурных состояниях методом атомно-силовой микроскопии.

Особенности исследования зеренной структуры МК алюминиевых сплавов в состоянии после РКУП. Как было показано в работах [10, 11], стандартные методики приготовления поверхности образцов для металлографических исследований, которые используются для изучения структуры обычных крупнокристаллических материалов, заключающиеся в последовательном шлифовании на наждачных бумагах, полировании с помощью алмазных паст и селективного травления [13–16], оказываются непригодными для исследования структуры МК металлов методами АСМ. Использование традиционных металлографических методик приготовления поверхности МК металлов приводит к появлению разнообразных артефактов, существенно искажающих "истинную" картину зеренной структуры.

Особенности методики исследования зеренной структуры МК меди в состоянии после РКУП были описаны в работе [10]. Искажения наблюдаются и в МК алюминиевых сплавах.

В качестве примера на рис. 1 (см. третью страницу обложки) представлены АСМ-изображения (топограммы) поверхности МК сплавов системы Al–Mg–Sc–Zr с различным содержанием магния в состоянии после РКУП, поверхность которых для АСМ-исследования была приготовлена стандартными металлографическими методами.

Сравнение полученных результатов с данными электронно-микроскопических исследований (рис. 2), показывает существенные отличия в параметрах структуры. Средний размер структурных элементов поверхности МК металла, полученный методом АСМ, на различных участках

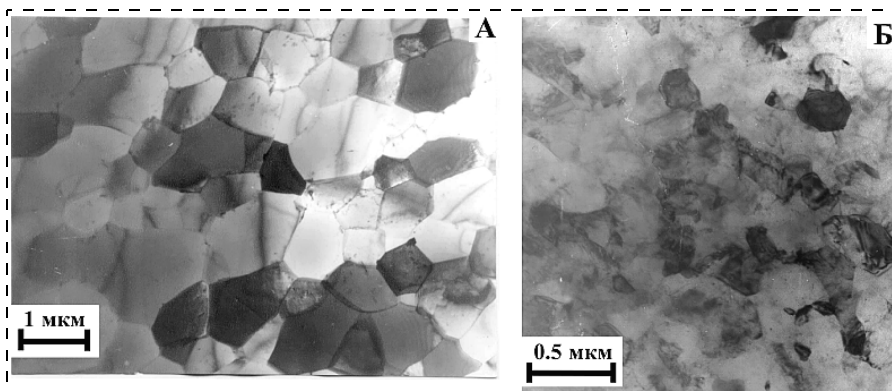


Рис. 2. ПЭМ-изображения структуры МК алюминиевых сплавов в состоянии после РКУП:

А — сплав Al — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr; Б — сплав Al — 4,5 % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr

шлифа существенно (более чем на 100 %) отличается от среднего размера зерна, определяемого методом ПЭМ*. На ПЭМ-снимках отсутствует характерная для АСМ-изображений "разнозернистость". Следует также отметить, что получаемая после стандартной обработки АСМ-картина структуры оказывается трудно интерпретируемой и плохо повторяющейся даже в пределах одного шлифа. Таким образом, стандартная обработка поверхности дает искаженную картину структуры. В связи с этим возникает необходимость проанализировать причины этих искажений (артефактов) и найти правильные способы обработки и АСМ-анализа поверхности. Рассмотрим подробнее основные причины появления артефактов, возникающих при стандартных методах обработки и АСМ-исследованиях структуры микрокристаллических алюминиевых сплавов.

Во-первых, это высокая скорость окисления, что приводит к созданию на поверхности окисных пленок. Согласно [13–16] на поверхности алюминия при комнатной температуре за несколько секунд образуется окисная плен-

ка толщиной 10...15 нм, существенно "сглаживающая" АСМ-топограмму [10, 11]. Окисные пленки существенно искажают топографию поверхности [10, 11].

В качестве примера на рис. 3 (см. четвертую страницу обложки) представлены АСМ-изображения МК сплавов Al–Mg–Sc–Zr в состоянии после РКУП, на поверхности которых образовалась окисная пленка, и которые были подвергнуты травлению. Как видно из представленных топограмм, образование окисной пленки на поверхности МК Al-сплавов происходит весьма неравномерно. Окисленная предварительно протравленная поверхность имеет более размытую гистограмму распределения зерен по размерам [10]. Следует также отметить, что вследствие преимущественного окисления границ зерен и приграничного слоя, определение параметров зеренной структуры становится весьма затруднительным.

Длительное вылеживание шлифа на воздухе (вследствие окисления поверхности) приводит к замедлению скорости травления поверхности и появлению эффекта неравномерного травления. Некоторые области шлифа практически не подвергаются травлению, в то время как в других областях структура выявляется прекрасно.

Вторая особенность МК структуры алюминиевых сплавов — не-

* По данным ПЭМ средний размер зерна в исследуемых сплавах в состоянии после РКУП составил 1,2 мкм — в МК безмагниевого сплава, 0,2...0,4 мкм — в МК сплаве с 1,5 % магния и 0,3...0,5 мкм в МК сплавах с 3 и 4,5 % магния (см. рис. 2).

однородность структуры материала, подвергнутого РКУ-деформации при повышенной температуре.

На рис. 4 (см. четвертую страницу обложки) представлены АСМ-изображения поверхности МК сплавов системы Al—Mg—Sc—Zr с различным содержанием магния в состоянии после РКУП, поверхность которых была последовательно подвергнута механическому и электролитическому полированию, а также селективному травлению. Как видно из представленных топограмм, неверный выбор режимов травления (времени травления и выбора травителя) может привести к получению сильно неоднородной топографической картины поверхности. Анализ представленных топограмм показывает, что области металла с повышенной травимостью чередуются с областями непротравленной поверхности. Попытка увеличения времени травления с целью получения однородной топографической картины сопровождается появлением областей "перетрава" [10, 11].

Отметим, что причиной неоднородности структуры при температурах РКУ-деформации более высоких, чем температура начала рекристаллизации, может быть развитие процессов динамической рекристаллизации. Кроме того, согласно традиционным представлениям причиной неоднородности структуры сильно деформированного металла может быть также наличие текстуры деформации [17].

Третья особенность структуры МК сверхпластичных сплавов системы Al—Mg и Al—Zn — склонность к образованию пор в процессе электролитического полирования.

На рис. 5, А, Б представлены топограммы МК алюминиевых сплавов с различным содержанием легирующих элементов в состоянии после РКУП. Поверхность сплавов была подготовлена

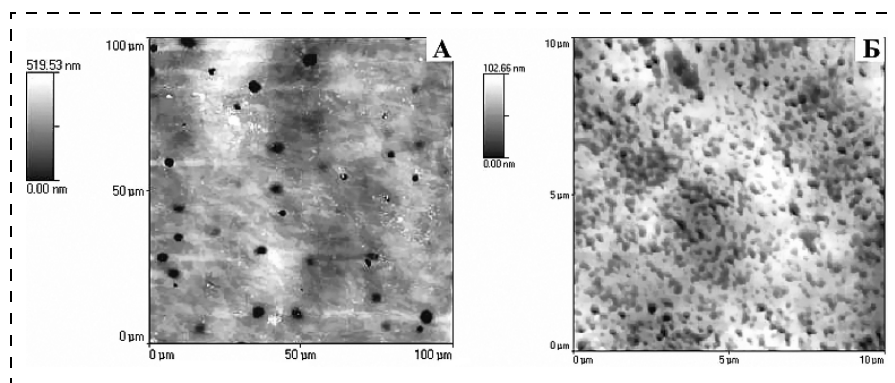


Рис. 5. Образование ямок на поверхности МК алюминиевых сплавов в результате неверно выбранного режима электрополирования

методом электролитического полирования и травления. Как следует из представленных АСМ-изображений, поверхность МК металла оказывается весьма чувствительной к выбору состава электролита и режимов полирования. Неверный выбор режимов полирования (плотности тока, напряжения, времени) приводит к формированию сильно развитой поверхности с отчетливо видными порами, места образования которых связаны, согласно [13—16], с местами активного взаимодействия атомов кислорода с поверхностью в процессе электролитической обработки. Правильно выбранный режим электрополирования сводит число пор к минимуму и оставляет достаточно свободной поверхности для проведения исследований.

И наконец, в-четвертых, это высокая пластичность МК алюминиевых сплавов. Высокая пластичность является причиной того, что в процессе механической обработки происходит активное царапание поверхности шлифа с одновременным образованием наклепанного слоя большой толщины, существенно влияющего на режимы полирования и травления поверхности [10, 13—16]. При наличии на поверхности металла грубых царапин возможен выход кантилевера СЗМ из режима "обратной связи", для устранения этого необходимо либо существенное снижение скорости

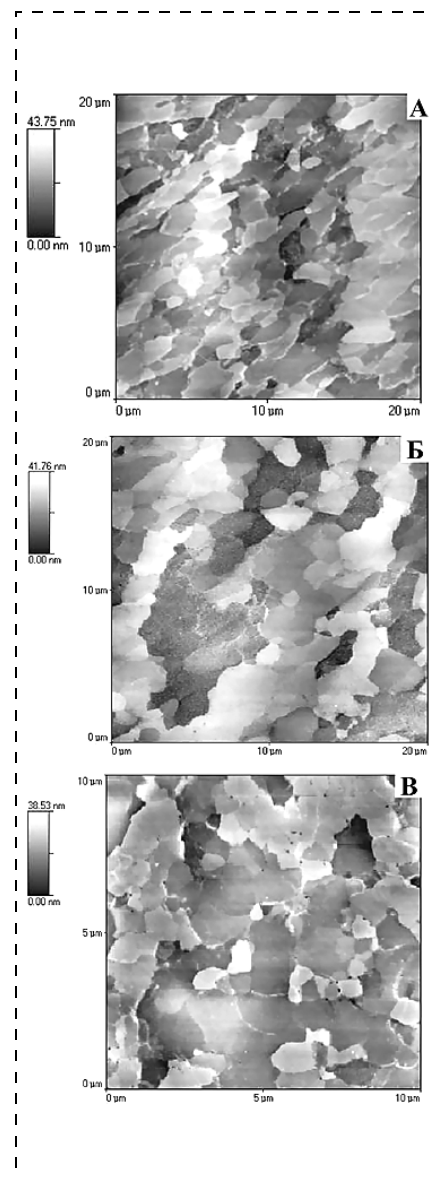


Рис. 6. Микроструктура МК сплавов без магния (А, Б) и с 1,5 % магния (В) после отжига: А — 200 °С (1 ч); Б — 320 °С (1 ч); В — 240 °С (10 сут)

сканирования, либо переход к другому режиму сканирования (режим Non-Contact Mode).

Особенности исследования зеренной структуры МК сплавов в состоянии после РКУП и рекристаллизационных отжигов. Экспериментальные исследования структуры сплавов в состоянии после РКУП и рекристаллизационных отжигов (рис. 6) свидетельствуют о том, что процесс роста зерен в МК алюминиевых сплавах носит аномальный характер — на фоне достаточно стабильной МК матрицы с размером зерна $\sim 0,2...0,4$ мкм существенно увеличивают свой размер лишь отдельные зерна [7, 8]. Характер процесса рекристаллизации зависит от содержания магния: в безмагневом МК сплаве Al — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr наблюдается обычная собирательная рекристаллизация (рис. 6, А, Б), в то время как в МК сплавах, содержащих магний, наблюдается аномальный рост зерен (рис. 6, В).

Сопоставление данных АСМ-исследований с данными ПЭМ (рис. 7) подтверждает указанную особенность рекристаллизации.

Важно отметить, что картина травления поверхности МК металла при аномальном росте зерен весьма сходна с картиной травления в случае частичного окисления поверхности (см. рис. 3 на четвертой странице обложки) и в случае неравномерного травления (см. рис. 4), поэтому выделить эффект аномального роста зерен

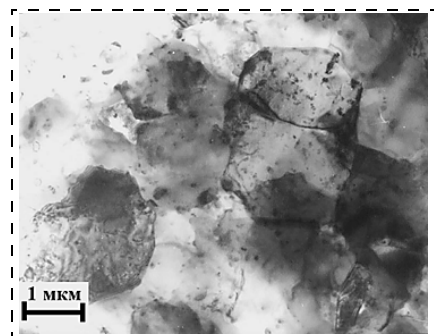


Рис. 7. ПЭМ-изображение структуры МК сплава Al — 1,5 % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr после отжига 300 °С, 1 ч

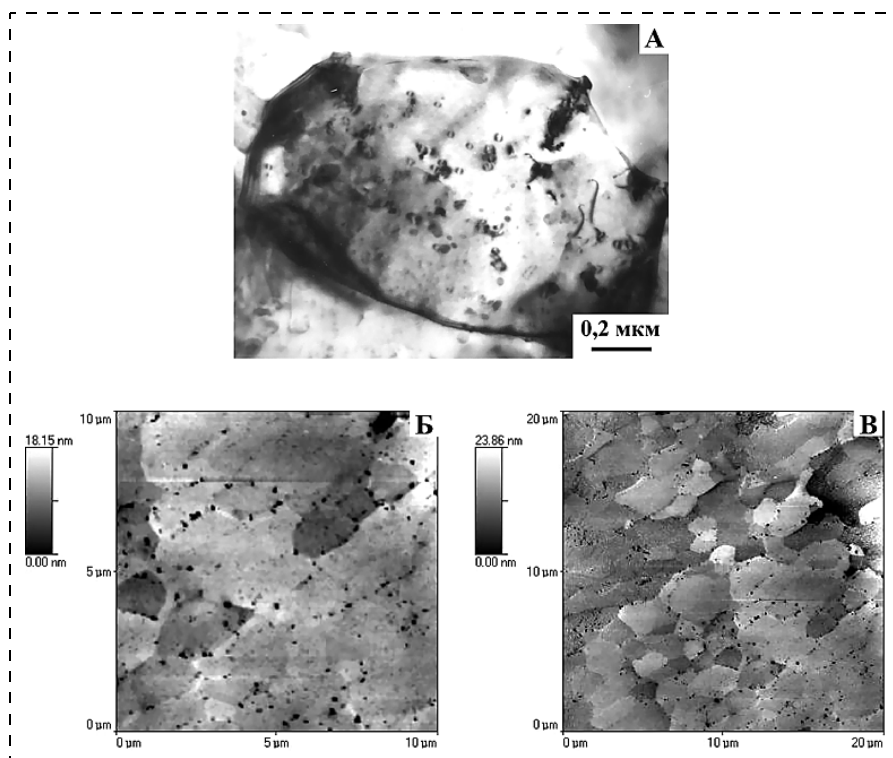


Рис. 8. Частицы $Al_3(Sc_xZr_{1-x})$, выделившиеся в результате отжига в течение 1 ч из твердого раствора МК сплавов:

А — Al — 1,5 % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr при $T = 300$ °С (ПЭМ, $\times 80\,000$); Б — Al — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr при $T = 300$ °С; В — при $T = 400$ °С (АСМ)

на фоне многочисленных артефактов достаточно сложно. Это выделение возможно лишь на основе серии измерений параметров структуры МК металла после отжигов при различной температуре, при которой средний размер зерна изменяется значительно.

Другая особенность МК структуры после отжига — выделение и рост частиц второй фазы* в объеме и вблизи границ зерен. Выделение частиц приводит к появлению дополнительных областей "повышенной травимости" и к изменению топографии поверхности МК сплава.

На рис. 8, А представлено ПЭМ-изображение частиц $Al_3(Sc_xZr_{1-x})$, выделившихся из твердого раствора в процессе отжига при температуре 300 °С в те-

чение 1 ч. На фото видно, как равномерное, так и строчечное выделение частиц, что свидетельствует о выделении частиц и в решетке, и на дислокациях. АСМ-исследования структуры МК алюминиевого безмагниевого сплава после высокотемпературных отжигов (360...450 °С) также свидетельствуют о расположении частиц второй фазы и в объеме, и на границах зерен (рис. 8, Б, В).

Необходимо отметить, что АСМ-изображения ямок травления частиц второй фазы (рис. 8, Б, В) весьма похожи на изображения пор, образующихся в результате электролитического полирования (см. рис. 5). В первом приближении от пор их отличают меньшие размеры и упорядоченность расположения.

Особенности структуры МК алюминиевых сплавов в состоянии после РКУП, отжига и деформационно-стимулированного роста зерен. Основная проблема,

* В соответствии с [18] в изучаемых сплавах Al—Mg—Sc—Zr при температурах более 200 °С выделяются интерметаллиды состава $Al_3(Sc_xZr_{1-x})$.

возникающая при исследовании структуры МК сплава после испытаний на сверхпластичность — выбор области сканирования для получения достоверной информации о процессе деформационно-стимулированного роста зерен. При исследовании образцов, подвергнутых испытанию на сверхпластичность, выявляются следующие особенности:

1. Постепенно уменьшается средний размер зерна по мере удаления от места разрушения (деформированной области) к области зажимов (недеформированной области).

На рис. 9 представлены схематическое изображение образца после испытания на сверхпластичность, а также АСМ-изображения селективно протравленной поверхности образца на различных его участках (от области разрушения до недеформированной области). Анализ представленных топограмм показывает, что при удалении от места разрыва средний размер зерна в МК сплаве Al — 1,5 % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr монотонно уменьшается примерно в 2...2,5 раза.

2. Имеется развитая кавитация вблизи места разрыва.

На рис. 10 представлены топограммы поверхности МК сплавов Al — 1,5 % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr (рис. 10, А, Б) и Al — 5 % Zn — 2 % Mg — 0,3 % Sc (рис. 10, В, Г) в области разрушения после испытания на сверхпластичность. Область разрушения характеризуется развитой системой пор (рис. 11), что существенно затрудняет процесс сканирования поверхности. (В некоторых случаях это приводит к выходу кантилевера из режима "обратной связи" или даже к его механической поломке. Для исследования этой области предпочтительнее использовать режим Non-Contact Mode.) Для сравнения на рис. 11 приведены макрофотографии области разрушения, полученные с помощью

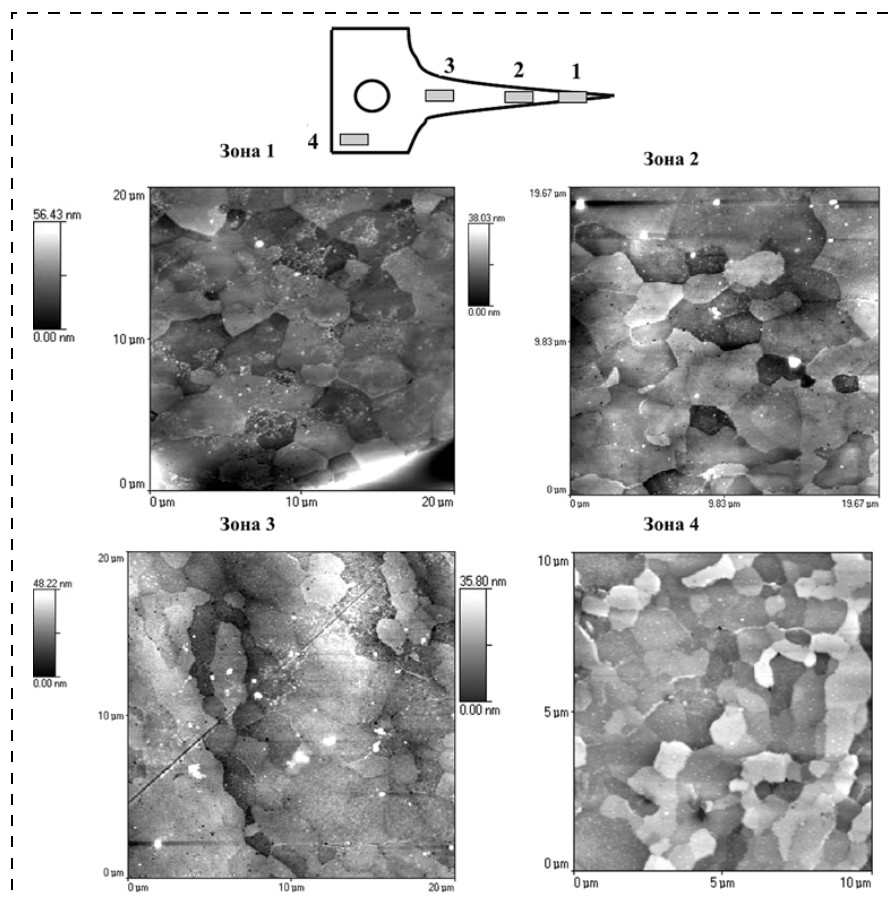


Рис. 9. Зеренная структура образца МК сплава с 1,5 % магния после испытания на сверхпластичность при $T = 450^\circ\text{C}$

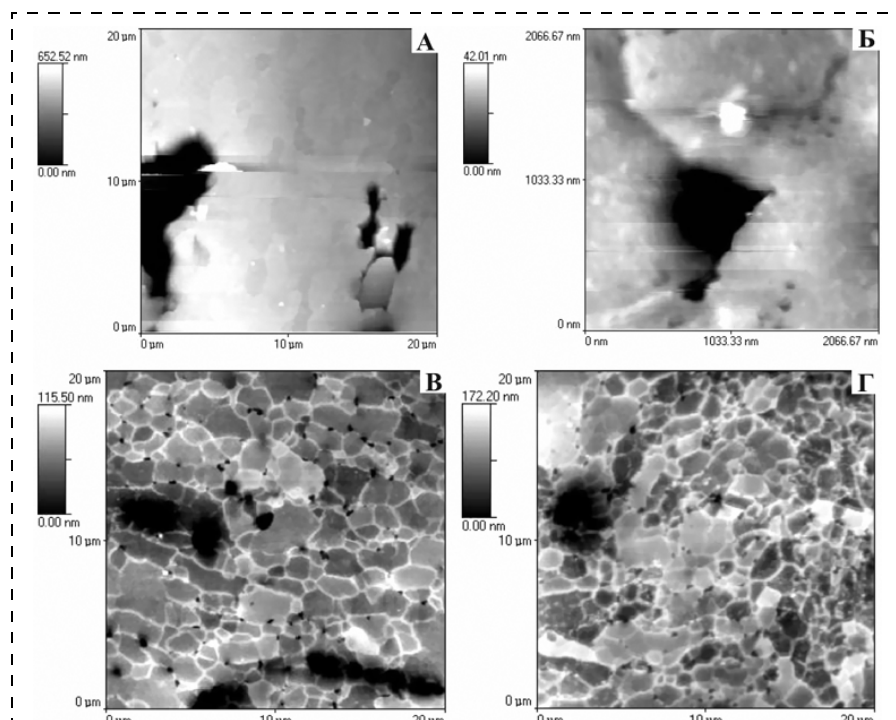


Рис. 10. Поры в области разрушения образца МК сплавов Al — 1,5 % Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr (А, Б) и Al — 5 % Zn — 2 % Mg — 0,3 % Sc (В, Г) после испытаний на сверхпластичность

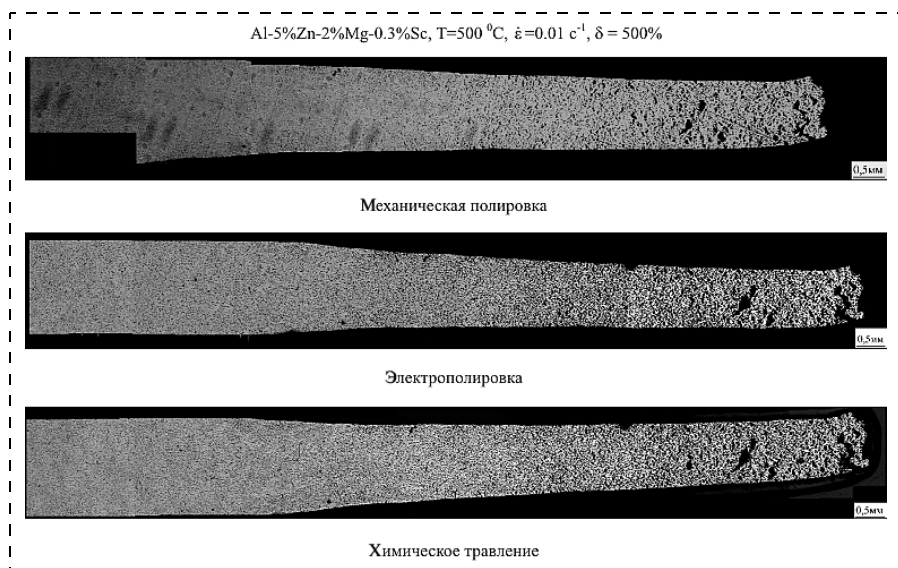


Рис. 11. Макроструктура деформированного образца сплава системы Al—Zn—Mg—Sc—Zr после испытаний на ВССП-деформацию. Кавитационное разрушение материала

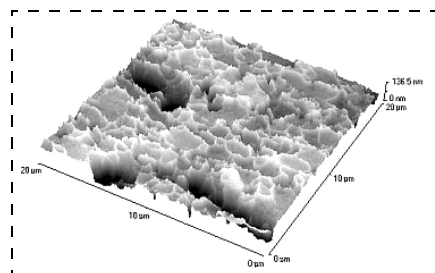


Рис. 12. Повышенная травимость тела зерен по отношению к их границам в МК сплаве Al—5 % Zn—2 % Mg—0,3 % Sc, подвергнутом испытанию на высокоскоростную сверхпластичность ($T=450\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\dot{\epsilon}=10^{-1}\text{ c}^{-1}$)

оптической металлографии после обработки поверхности.

Необходимо отметить, что в МК сплавах системы Al—Zn—Mg—Sc—Zr (рис. 10, *В, Г*) причиной образования крупных пор в результате электролитического полирования являются крупные частицы Т-фазы, хорошо выявляемые на непротравленной поверхности металла при его полировании.

3. МК сплавы системы Al—Zn—Mg—Sc—Zr в травителях, содержащих HF, обладают повышенной скоростью травления внутризеренной структуры по сравнению со скоростью травления границ зерен.

На рис. 12 представлены АСМ-изображения селективно

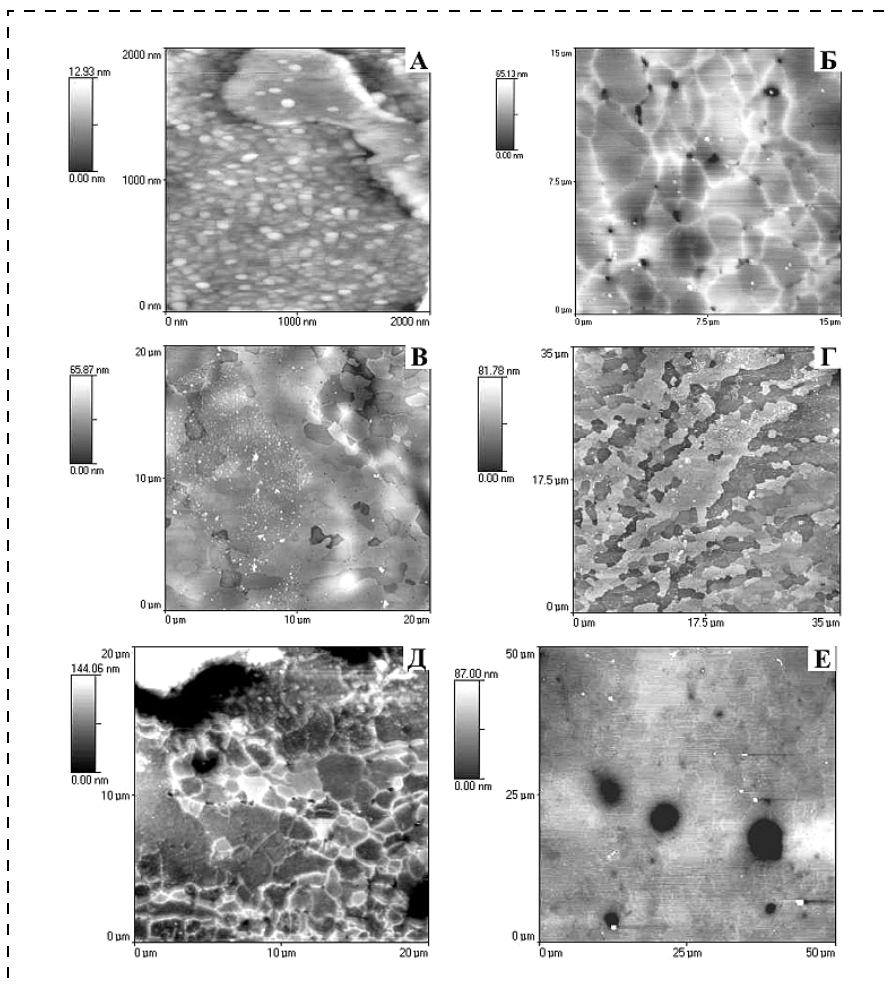


Рис. 13. Артефакты на поверхности МК сплава, прошедшего испытание на сверхпластичность:

А — перетрав поверхности; *Б* — недотрав поверхности; *В, Г* — неравномерное травление; *Д* — наличие окисной пленки на поверхности образца; *Е* — кавитационное повреждение

Ж), образование пор при электролитическом полировании (рис. 13, Ж, 3) и др. (см. выше).

Рекомендации по приготовлению поверхности МК сверхпластичных алюминиевых сплавов для АСМ-исследований. Для выявления малого зерна в МК алюминиевых сплавах необходимо подобрать травитель и режимы травления, которые позволяют "тонко" прорисовать границы зерен без существенного травления внутризеренной структуры и образования кавитационных пор при электрополировании. Кроме того, важно отметить, что для АСМ-исследований необходимо формировать менее глубокий рельеф поверхности, чем рельеф, обычно используемый для металлографических наблюдений. Оптимальной для АСМ является поверхность с глубиной рельефа около 30 нм.

Перед травлением МК металла травители отработывались на литых образцах с крупным (около 200 мкм) зерном и электрополированной поверхностью.

В качестве травителей были опробованы:

1. Водные растворы NaOH с концентрацией от 1 до 20 %. Эти травители формируют глубокий рельеф на поверхности зерен, приграничная область сильно растравливается. Для АСМ-наблюдения такой рельеф не пригоден вследствие значительной глубины. По-видимому эти травители можно использовать для выявления зерна только в крупнокристаллическом алюминии.

2. Часто используемый для травления алюминия и его сплавов травитель Келера образует мелкий, сплошной рельеф на поверхности и не позволяет выявлять зеренную структуру.

3. Водные растворы HF (плавиковой кислоты) с концентрацией 1 и 0,5 % травят МК алюминий неоднородно и формируют на поверхности глубокие полосы, рельеф которых напоминает

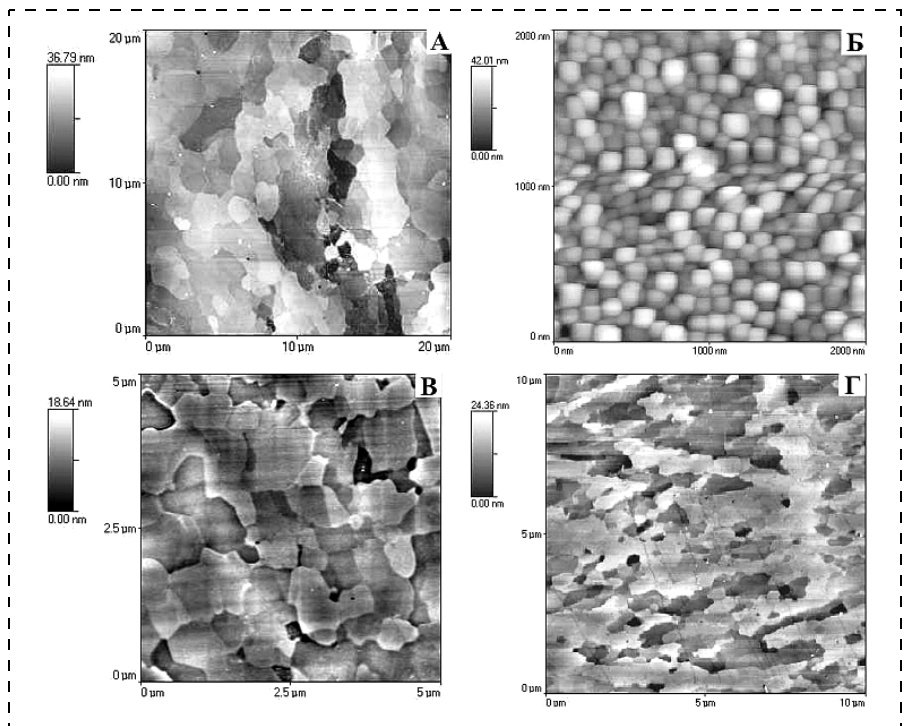


Рис. 14. "Истинная" микроструктура микрокристаллических сплавов системы Al — Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr без магния (А) ($N = 6$), с 1,5 % магния после $N = 6$ (Б) и $N = 8$ (В) циклов РКУП, а также МК сплав с 3 % магния (Г) ($N = 6$) в состоянии после РКУ-прессования

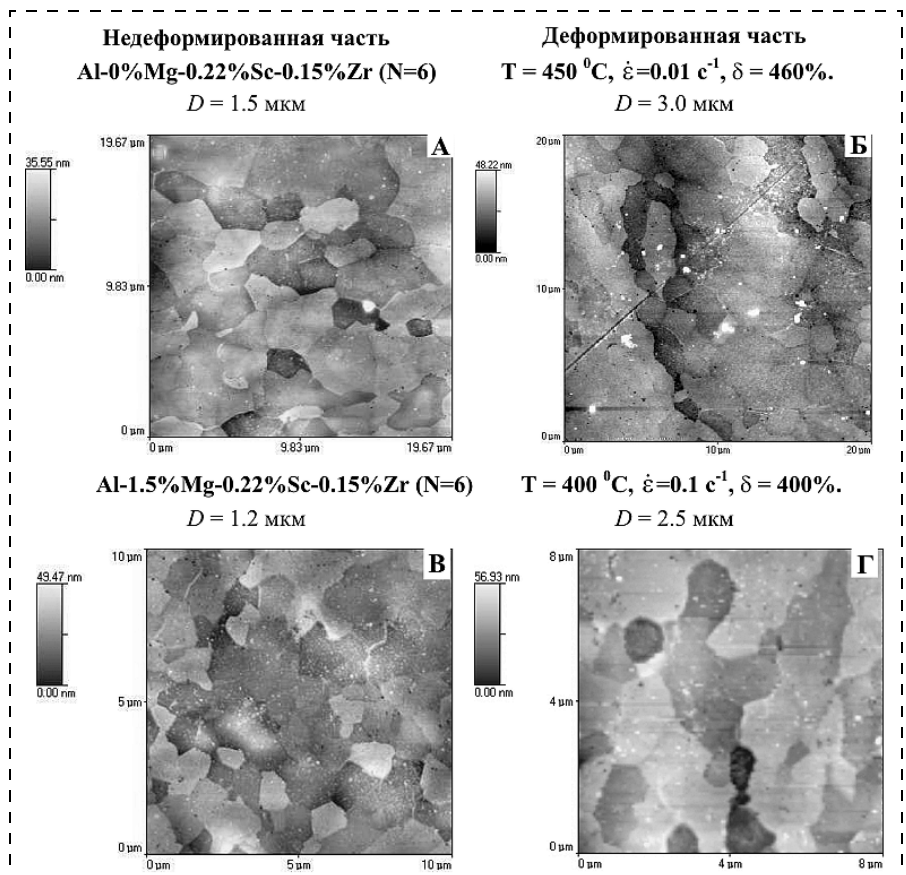


Рис. 15. Микроструктура МК сплавов системы Al — Mg — 0,22 % Sc — 0,15 % Zr с различным содержанием магния в области захвата (зажима) и в области разрыва (шейки) после испытания на сверхпластичность в различных температурно-скоростных режимах

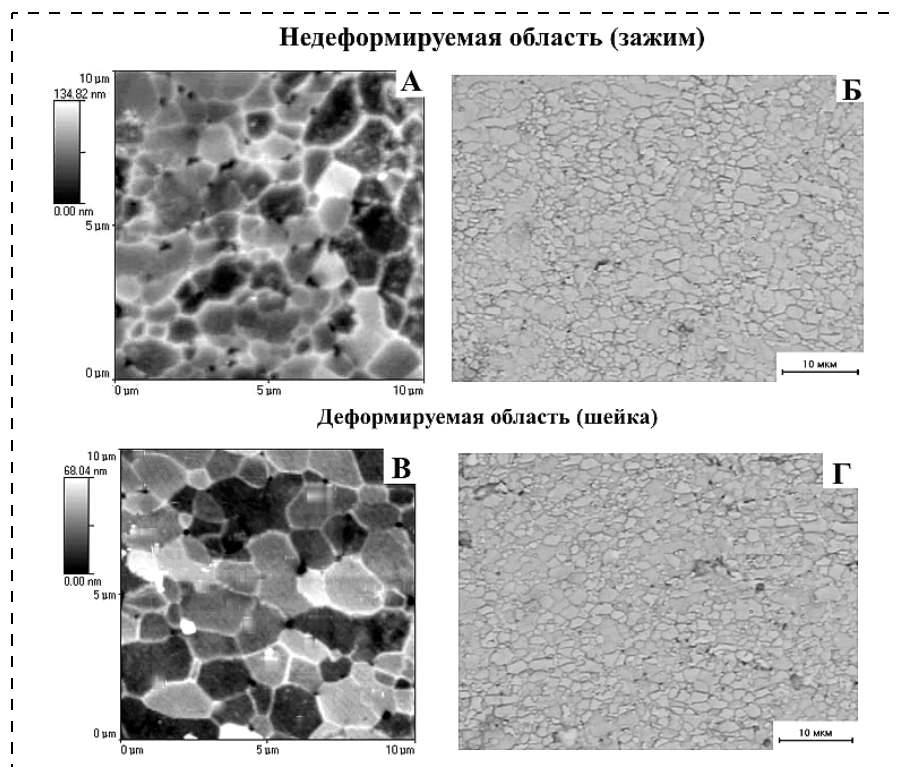


Рис. 16. Микроструктура МК сплава системы Al — 4,5 % Zn — 1,5 % Mg — 0,2 % Sc — 0,15 % Zr ($T = 450^\circ\text{C}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-1}\text{c}^{-1}$) в недеформируемой (А, Б) и деформируемой (В, Г) области после испытания на ВССП, полученная методом АСМ (А, В, Д, Ж) и металлографии (Б, Г, Е, З)

рельеф, формирующийся при травлении реактивом Келера.

Для устранения указанных артефактов была предложена методика ступенчатой подготовки поверхности МК металла для АСМ-исследований, которая включает в себя следующие этапы:

а) механическое полирование поверхности с помощью алмазных паст различной дисперсности, позволяющее добиться уровня шероховатости ~ 1 мкм;

б) электролитическое полирование поверхности шлифа в электролите состава CH_3COOH — 90 об. %, HClO_4 — 10 об. %, при напряжении $U = 15$ В, температуре $T = 10^\circ\text{C}$ и плотности тока $j \approx 1 \text{ A/cm}^2$ (для сплавов системы Al—Mg—Sc—Zr) или в электролите состава $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ — 85 об. %, HClO_4 — 15 об. %, при напряжении $U = 20$ В, температуре $T = 20^\circ\text{C}$ и плотности тока $j = 1,5 \text{ A/cm}^2$ (длительностью до 3 с);

в) пассивация поверхности МК металла в 0,5 %-ном растворе HNO_3 в спирте в течение 5 с;

г) селективное травление в реактиве состава 0,5 об. % HF + 95,5 % H_2O (для сплавов системы Al—Mg—Sc—Zr) и в реактиве состава 2 об. % HF + 1 об. % HNO_3 + 97 % H_2O (для сплавов системы Al—Zn—Mg—Sc—Zr) длительностью от 5 до 20 с.

Использование данной методики приготовления поверхности для изучения МК алюминиевых сплавов в состоянии после РКУП позволяет выявить достоверную картину зеренной структуры (рис. 14), хорошо согласующуюся с данными ПЭМ (см. рис. 2).

Применение этой методики для изучения деформационно-стимулированного роста зерен МК алюминиевых сплавов в состоянии после ВССП (рис. 15, 16) (сравнение с результатами металлографических исследований при размерах зерен более 1 мкм после

ВССП) (рис. 16) также показывает ее высокую эффективность.

* * *

Разработана методика выявления и изучения зеренной структуры микроструктурных алюминиевых сплавов систем Al—Mg—Sc—Zr и Al—Zn—Mg—Sc—Zr с помощью атомно-силовой микроскопии. Описаны основные артефакты, возникающие при использовании традиционных методов подготовки поверхности образца для АСМ-структурных исследований микроструктурных металлов в различных структурных состояниях.

Авторы благодарят В. В. Захарова (ВИЛС, г. Москва) за предоставленные для исследований образцы литых сплавов, В. И. Копылова (ФТИ НАН Республики Беларусь, г. Минск) за предоставленные для исследований образцы сплавов с микроструктурной структурой.

Авторы выражают благодарность за поддержку Российскому фонду фундаментальных исследований (гранты № 02-03-33043, № 03-02-16923, МАС 03—3-06196), Минобразования РФ (грант Е02-4.0-131, А03-3.17-214), программе фундаментальных исследований РАН "Фундаментальные проблемы физики и химии наноразмерных систем и наноматериалов", а также Научно-образовательному центру "Физика твердотельных наноструктур" Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского (НОЦ ФТНС ННГУ) и программе "Фундаментальные исследования в высшем образовании" (BRHE).

Список литературы

1. Валиев Р. З., Александров И. В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. М.: Логос, 2000. 272 с.
2. Валиев Р. З., Исламгалиев Р. К. Структура и механическое поведение ультрамелкозернистых металлов и сплавов, подвергнутых интенсивной пластической деформации // Физика металлов и

металловедение. 1998. Т. 85. Вып. 3. С. 161—177.

3. Perevezentsev V. N., Chuviľ'deev V. N., Kopylov V. I., Sysoev A. N., Langdon T. G. Developing high strain rate superplasticity in Al—Mg—Sc—Zr alloys using equal-channel angular pressing // Ann. Chim. Sci. Mat. 2002. 27(3). P. 36—44.

4. Komura S., Berbon P. B., Furukawa M., Horita Z., Nemoto M., Langdon T. G. High strain rate superplasticity in an Al—Mg alloy containing scandium // Scripta Materialia. 1998. Vol. 38. N 12. P. 1851—1856.

5. Новиков И. И. Высокоскоростная сверхпластичность алюминиевых сплавов // Металловедение и термическая обработка металлов. 1993. № 7. С. 16—20.

6. Horita Z., Furukawa M., Nemoto M., Barnes A. J., Langdon T. G. Superplastic forming at high strain rates after severe plastic deformation // Acta Materialia. 2000. Vol. 48. P. 3633—3640.

7. Чувиľдеев В. Н., Нохрин А. В., Макаров И. М., Копылов В. И. Рекристаллизация в нано- и микрокристаллических металлах, полученных методом РКУ-прессования // Микросистемная техника. 2002. № 8. С. 19—28.

8. Чувиľдеев В. Н., Копылов В. И., Нохрин А. В. и др. Аномальный рост зерен в нано- и микрокристаллических металлах, полученных методами РКУ-прессования. Часть I. Структурные исследования // Металловедение. 2003. № 4. С. 9—18.

9. Дегтярев М. В., Воронова Л. М., Губернаторов В. В., Чашухина Т. И. О термической стабильности микрокристаллической структуры в однофазных металлических материалах // ДАН. 2002. Т. 386. № 2. С. 180—183.

10. Нохрин А. В., Макаров И. М. Методика исследования зеренной структуры нано- и микрокристаллических металлов методом атомно-силовой микроскопии // Заводская лаборатория. 2002. Т. 68. № 1. С. 70—79.

11. Нохрин А. В., Макаров И. М. Особенности методики исследований зеренной структуры нано- и микрокристаллических металлов методом атомно-силовой микроскопии // Микросистемная техника. 2003. № 3. С. 19—28.

12. Сегал В. М., Резников В. И., Копылов В. И. и др. Процессы пластическо-

го структурообразования металлов. Минск: Наука и техника, 1994. 232 с.

13. Болховитинов Н. Ф., Болховитинова Е. Н. Атлас макро- и микроструктур металлов и сплавов. М.: Машгиз, 1959. 87 с.

14. Металлография железа: В 3-х томах / Пер. с англ. В. П. Калинина, Н. А. Золотидзе и Н. В. Чаргеишвили (под ред. Н. Ф. Тавадзе). М.: Металлургия. 1972.

15. Панченко Е. В., Скаков Ю. А., Попов К. В. и др. Лаборатория металлографии. М.: ГНТИ ЛЧЦМ, 1957. 695 с.

16. Беккерт М., Клемм Х. Справочник по металлографическому травлению. М.: Металлургия, 1979. 335 с.

17. Hurley P. J., Humphreys F. J. The application of EBSD to the study of substructural development in a cold rolled single-phase aluminum alloy // Acta Materialia. 2003. V. 51. P. 1087—1102.

18. Елагин В. И., Захаров В. В., Павленко С. Г., Ростова Т. Д. Влияние добавки циркония на старение сплавов Al—Sc // Физика металлов и металловедение. 1985. Т. 60. Вып. 1. С. 97—100.

УДК 537.311.3

Ф. И. Далидчик, д-р физ.-мат. наук,
М. В. Гришин, канд. физ.-мат. наук,
С. А. Ковалевский, д-р физ.-мат. наук,
Институт химической физики
им. Н. Н. Семенова РАН

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ НАНОУГЛЕРОДНЫХ ЧАСТИЦ*

Обнаружены и интерпретированы новые топографические и спектроскопические эффекты, обусловленные слабым обменным взаимодействием углеродных атомов различных низкоразмерных наносистем (точечных дефектов графита, ансамблей упорядоченно расположенных на графите углеродных нанотрубок, муаровых сверхрешеток).

Введение

Открытия низкоразмерных аллотропных форм чистого углерода — фуллеренов [1] и тубуленов [2], последовавшие вскоре после создания зондовых методов (сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии [3], атомно-силовой микроскопии [4] и др.), позволяющих изучать атомное и

электронное строение единичных наночастиц с ангстремным пространственным разрешением, во многом предопределили быстрое развитие "нанонаук" и нанотехнологий. Уникальные физические и химические свойства новых наночастиц сразу же привлекли всеобщее внимание и породили множество идей их применений в различных областях науки и техники.

Физические и химические свойства низкоразмерных наночастиц определяются, очевидно, совместным влиянием размерных и размерностных факторов. Размерные факторы, которые проявляются квантованием электронных энергий и влиянием относительно большого числа поверхностных атомов, общеизвестны. Размерностные факторы, зависящие от размерностей фазовых пространств наносистем, за исключением спектроскопических проявлений особенностей Ван—Хова [5], для многих интересных систем остаются до сих пор незамеченными. Цель настоящей статьи — продемонстрировать на примере углеродных структур роль размерностных факторов в формировании особенностей электронных спектров слабозаимодействующих низкоразмерных наночастиц.

Во всех рассмотренных ниже случаях роль слабого взаимодействия играют обменные силы, которые действуют между атомами, входящими в состав различных графеновых сеток. Напомним, что для графита обменный интеграл, учитывающий

* Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, гранты №№ 02-03-32998 и 02-03-33367.

взаимодействие соседних слоев, на порядок меньше обменного интеграла, который соответствует взаимодействию соседних атомов углерода, входящих в одну графеновую сетку [6]. Одно из проявлений слабых обменных взаимодействий в графите — пониженная плотность электронов вблизи А-атомов графита с А-В-А-В-упаковкой [7], хорошо известно. Асимметрия А- и В-атомов на топографических изображениях, полученных методом сканирующей туннельной микроскопии [8], объясняется этим эффектом [9].

В настоящей работе мы приведем результаты новых зондовых исследований атомного и электронного строения низкоразмерных углеродных наноструктур, которые демонстрируют новые топографические и спектроскопические эффекты, обусловленные слабыми обменными взаимодействиями углеродных атомов.

Эксперимент

Топографические и спектроскопические измерения, результаты которых приводятся ниже, были выполнены с помощью сканирующего туннельного микроскопа "Omicron": на пиролитическом графите. Измерения проводились при комнатной температуре в условиях сверхвысокого вакуума при давлении остаточных газов $P < 1,32 \cdot 10^{-7}$ Па (10^{-9} Торр). Топографические изображения исследуемых поверхностей были получены в двух режимах — при постоянном токе и при постоянном расстоянии между поверхностью и острием. Спектроскопические зависимости были получены численным дифференцированием измеренных $I-U$ кривых.

На поверхности исследуемых образцов были найдены участки, которые содержали достаточно большое число топографических дефектов. Среди них можно было обнаружить дефекты и структуры различных размерностей — "нуль-мерные" (единичные точечные дефекты), "квазиодномерные" (единичные и ассоциированные углеродные нанотрубки — УНТ) и "двумерные" (муаровые сверхрешетки).

Пример топографического изображения нуль-мерного дефекта приведен на рис. 1. Отметим, что такого же типа изображения точечных дефектов можно найти и в других работах (см., например, [10, 11]). Существенно, что во всех случаях видимые размеры точечных дефектов всегда значительно больше атомных, т. е. искажения электронных подсистем двумерных решеток распространяются в этих случаях на расстояния, в десятки раз превышающие размеры элементарных ячеек. В зависимости от природы дефекта характер изменений проводимости наноконтакта может варьироваться в ши-

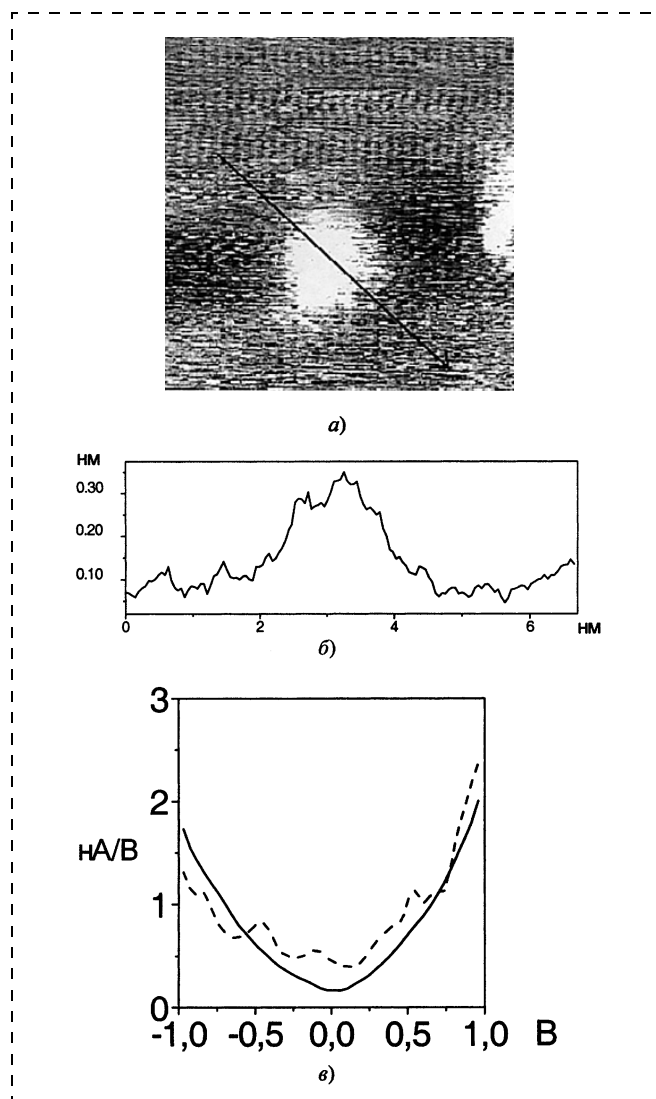


Рис. 1. Топографическое изображение дефекта (а) (75×75 нм, $I = 1,9$ нА, $U = -1$ В); профиль дефекта вдоль разреза, показанного выше (б); спектроскопические зависимости, соответствующие графиту (сплошная линия) и дефекту (штриховая линия) (в)

роких пределах — от металлического (см. рис. 1, б) до полупроводникового (с шириной запрещенной зоны ~ 1 эВ).

Другой тип поверхностных низкоразмерных углеродных наноструктур — ассоциаты параллельно расположенных адсорбированных углеродных нанотрубок, электронные спектры которых, как известно, представлены одномерными зонами (см., например, [12]). Топографическое изображение такого ассоциата приведен на рис. 2. (В ходе сканирования напряжение равномерно менялось в пределах, указанных на рисунке.) Топографические изображения и спектроскопические зависимости, содержащие особенности Ван—Хова, доказывающие квазиодномерный характер электронного строения этих наноструктур, были опублико-

ваны нами ранее [13]. Изображения ансамблей параллельных УНТ, осажденных на графит, можно найти также в работах [14, 15]. Их авторы, однако, не заметили основной особенности топографических изображений таких наноструктур — зависимости яркости изображений различных трубок, входящих в ассоциат, от напряжения сканирования. Результаты наших экспериментов, выполненных для различных ассоциатов, приводят к выводу, что в диапазоне изменений напряжений от +1 В до -1 В изображения различных УНТ, образующих на поверхности графита упорядоченные 2D-структуры, меняются по-разному. При некоторых напряжениях, различных для различных трубок, изображения отдельных УНТ исчезают. Дальнейшие изменения напряжения восстанавливают изображения "исчезнувших" трубок, при этом некоторые другие становятся "невидимыми". Такие превращения изображений УНТ обычно наблюдались нами на масштабе изменений напряжения порядка 1 В, однако в некоторых случаях соответствующий интервал изменений был в несколько раз меньше (около 0,3 В).

Третий класс низкоразмерных (квазидвумерных) поверхностных углеродных наноструктур — центрированные гексагональные решетки с гигантскими периодами L и аномально большими корругированностями (до 1,0—1,5 нм), так называемые "муары" [16, 17]. Пример топографического изображения "муара" с периодом 8,5 нм приведен на рис. 3 (см. вторую сторону обложки). (Отметим, что на других участках поверхности в наших экспериментах наблюдались "муары" с периодом 3,5 нм.) По современным представлениям "муарам" соответствуют наномасштабные сверхрешетки (СР), образованные группами поверхностных А- и В-атомов, которые формируются при небольшом вращательном смещении поверхностных слоев графита [18]. Участки поверхности, содержавшие СР, обычно имели четкие границы и простирались на макроскопические расстояния (до тысяч нанометров). Во многих случаях границы были обозначены упорядоченными цепочками ярко светящихся пятен, выступавших над фоном на 0,8—1,5 нм (рис. 4, см. вторую сторону обложки). Периоды этих граничных структур всегда совпадали с периодами СР. Перепады уровней фона по разные стороны от границы либо отсутствовали, либо были в пределах нескольких расстояний между соседними слоями графита. В отдельных случаях СР просматривались через несколько графеновых слоев. Все перечисленные выше результаты совпадают с опубликованными в работах [18—20].

Новыми результатами наших экспериментов являются:

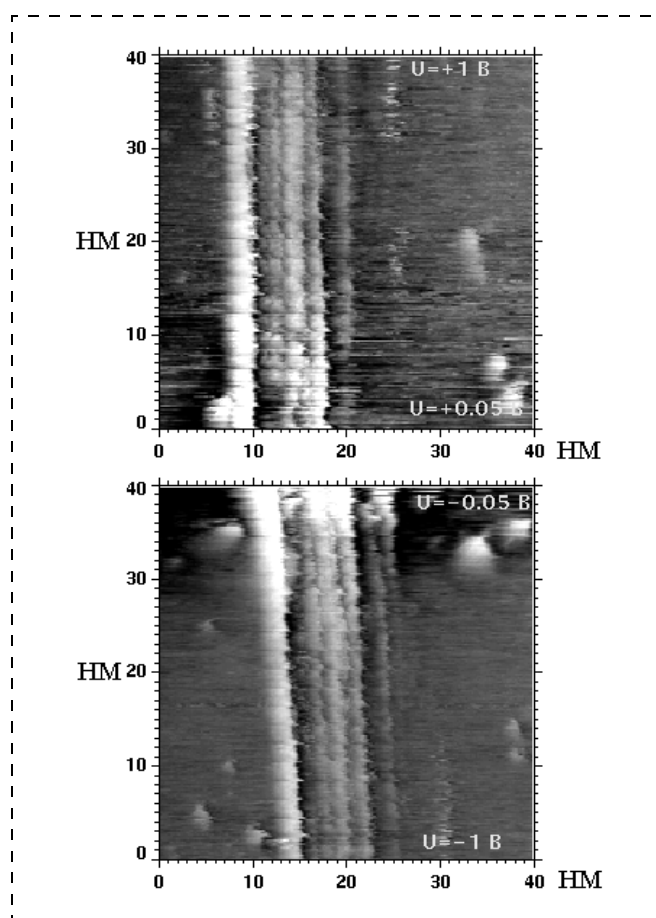


Рис. 2. Топографические изображения ассоциата нанотрубок, полученные при различных напряжениях: $-1 \text{ В} < U < +1 \text{ В}$, $\Delta U = 0,05 \text{ В}$, $I = 1,34 \text{ нА}$

- обнаружение "псевдощелей" (провалов) в электронных спектрах "муаров" (см. рис. 3);
- обнаружение зависимости изображений границ СР от напряжения сканирования — число видимых граничных цепочек и яркость их изображений меняется с напряжением (см. рис. 4);
- обнаружение эффекта сильной перестройки электронных спектров СР около границ (рис. 5, см. вторую сторону обложки). Вблизи границ существование "псевдощелей" в электронных спектрах вращательно смещенных графеновых листов проявляется особенно четко (см. кривую B на рис. 5).

Особенности возмущений и взаимодействий периодических низкоразмерных структур (обсуждение результатов)

Низкоразмерные кристаллы (двумерные и одномерные периодические решетки) имеют общую фундаментальную особенность — их спектры неустойчивы относительно слабых (формально сколь

угодно слабых) возмущений. Простейший пример такой неустойчивости — отщепление от одномерных зон дискретных уровней локализованных на точечном дефекте состояний [20]. Для одномерных зон энергия ε_1 отщепленного уровня, отсчитанная от края зоны, зависит от параметра возмущения по степенному закону. Нетрудно показать, что отщепление дискретных уровней имеет место и в случае двумерных зон [21]. Однако в этом случае энергия отщепленного уровня (для слабых точечных возмущений) оказывается экспоненциально малой величиной [21]:

$$\varepsilon_1 = A \exp(-A/g).$$

Здесь g — параметр точечного возмущения; A — параметр энергетической зоны, равный по порядку величины внутризонному обменному интегралу J . Соответствующие длины затухания локализованных состояний $\lambda \approx (2\varepsilon_1)^{-1/2}$, $e = h = m = 1$, которыми определяются размеры СТМ-изображений точечных дефектов, экспоненциально велики. Оценки λ для параметров графита ($g = 0,3$ эВ, $J = 3$ эВ) дают значения $\lambda = 4,5$ нм, что соответствует эксперименту (см. рис. 1, а также топографические изображения точечных дефектов, приведенных в работах [10, 11]).

Сценарий потери устойчивости низкоразмерными системами, в которых "включаются" упорядоченные совокупности точечных возмущений, образующих линейные или двумерные СР, существенно иной [21]. Создание СР у одномерных систем всегда приводит к расщеплению исходной зоны на совокупность β подзон ($\beta = L/a$, L — период СР, a — период неискаженного 1D-кристалла), при этом на краях зоны Бриллюэна (при $k = 0$ и $k = \pi/2$) открываются энергетические щели (зоны запрещенных состояний) с ширинами $\sim 2g$. В случае четных значений параметра β энергетические щели открываются на уровне Ферми, т. е. все электрофизические свойства металлического квазиодномерного кристалла при создании 1D-сверхрешетки с периодом $L = 2n$, $n = 1, 2, \dots$, становятся полупроводниковыми (на масштабе энергий $\approx 2g = 0,6$ эВ). Вблизи границ образовавшихся подзон плотности электронных состояний имеют корневые расходимости (особенности Ван—Хова).

Возможность формирования атомных сверхрешеток в системах типа двух соприкасающихся УНТ достаточно очевидна. Поясним это на примере хиральных одностенных УНТ, которые имеют структуру однослойных цилиндров. Пару соприкасающихся труб, имеющих линейную СР обменных взаимодействий, можно представить как результат сворачивания в противоположных на-

правлениях двух полосок, вырезанных из двух графеновых слоев, вращательно смещенных на малый угол θ . (Период СР и соответственно характер изменения проводимости зависят, очевидно, от угла θ .)

Создание на поверхности 2D-кристалла линейной цепочки точечных возмущений также приводит к качественной перестройке электронного спектра. На линии возмущений всегда формируются 1D-зоны локализованных состояний, стационарных или резонансных [21]. В ансамблях параллельных квазиодномерных наноструктур, например в ансамбле параллельных УНТ, все состояния коллективизируются. По отношению к различным УНТ электронные волновые функции приобретают вид стоячих волн, распределения узлов и пучностей которых зависят от параметра обменной связи соседних атомов углерода, принадлежащих различным трубкам. Описанный сценарий перестройки спектров взаимодействующих квазиодномерных кристаллов позволяет объяснить обнаруженную нами зависимость яркости изображений различных УНТ, входящих в упорядоченный ассоциат, от напряжения (см. рис. 2). Распределение электронов по отдельным трубкам зависит от дискретных энергетических уровней стоячих волн. Спектр этих уровней и соответственно напряжения, при которых пучности приходятся на ту или иную трубку, определяются обменными взаимодействиями углеродных атомов, лежащих на линии соприкосновения УНТ. Для УНТ, взаимодействующих с графитом, обменная связь между соседними атомами углерода, входящими в состав различных трубок, может осуществляться либо через вакуум (тогда обменный интеграл $g = 0,3$ эВ и соответственно смена яркости изображения различных трубок будет наблюдаться на масштабе изменений напряжения сканирования $\Delta U = 0,3$ В), либо через графит и через вакуум одновременно (суммарный параметр обменной связи будет в этом случае больше и смена яркости изображений трубок будет наблюдаться при больших изменениях напряжения ΔU).

Чтобы понять причины изменений спектров муаровых структур (см. рис. 3), нужно учесть общий характер перестройки спектров 2D-кристаллов с дефектами, образующими правильные 2D-сверхрешетки. С увеличением размеров элементарной ячейки решетки размеры первой зоны Бриллюэна, очевидно, уменьшаются. Энергетические зоны соответственно всегда (при сколь угодно слабых возмущениях) должны быть приведены к этой уменьшенной зоне. При малых возмущениях для всех квазиимпульсов, достаточно далеко отстоящих от границ "суженной" зоны Бриллюэна,

закон дисперсии остается почти не искаженным. На границах зоны неискаженные электронные состояния имеют вырождение, которое снимается любым, сколь угодно слабым возмущением. На всех границах зоны Бриллюэна, таким образом, закон дисперсии искаженной 2D-решетки имеет разрывы — в энергетических спектрах появляются запрещенные состояния. Поскольку в общем случае линии разрывов не являются изоэнергетическими, открывающиеся щели частично перекрываются зонами разрешенных состояний, т. е. в спектрах 2D-кристаллов со сверхрешетками, в отличие от одномерных систем, могут существовать лишь "псевдощели" — на энергетических зависимостях плотности состояний появляются минимумы [21]. Параметры "псевдощелей" (их положение и форма) определяются неискаженными законами дисперсии, геометрией сверхрешетки и параметром возмущения g . Для графита со сверхрешетками А- и В-атомов роль возмущения играет обменная связь графеновых слоев. В этом случае ширины "псевдощелей" имеют значения порядка 0,6 эВ. (Спектроскопические зависимости, приведенные на рис. 4, согласуются с этой оценкой.)

Заключение

Возможность перестройки электронных спектров слабо взаимодействующих низкоразмерных наночастиц может иметь принципиальное значение для наноэлектроники, развитие которой предполагает широкое применение одномерных квантовых проводников. В роли возможных кандидатов здесь рассматриваются и УНТ, которые, как демонстрируют приведенные выше результаты и результаты моделирования низкоразмерных наноструктур [21], из-за слабого обменного взаимодействия атомов углерода могут существенно менять характер электронной проводимости. Законы классических электрических цепей для взаимодействующих нанокуглеродных "проводов" могут не выполняться. (Затем, что по той же причине проводимости отдельных слоев в многослойных УНТ также неаддитивны.)

Дальнейшее изучение эффектов перестройки электронных спектров слабо взаимодействующих низкоразмерных наносистем необходимо и для решения других задач, например, задач, связанных с синтезом новых наноматериалов с заданными физико-химическими свойствами. Целенаправленное создание в низкоразмерных наночастицах раз-

личным образом организованных ансамблей точечных и линейных дефектов, в роли которых могут выступать вакансии, интеркалированные или адсорбированные частицы, — один из возможных способов решения стоящих здесь задач.

Список литературы

1. Kroto H. W., Allaf A. W., Balm S. P. C60: buckminsterfullerene // Chemical Review. 1991. V. 91. P. 1213.
2. Iijima S. Helical microtubes of graphic carbon // Nature. 1991. V. 354. P. 56.
3. Binning G., Rohrer H. Scanning tunneling microscopy // Helvetic Physical Acta. 1982. V. 55. P. 726.
4. Binning G., Quake C. F., Gerber M. Atomic force microscope // Physical Review Letters. 1986. V. 56. P. 930.
5. Wilder J., Veneva L., Rinzler A. et al. Electronic structures of atomically resolved nanotubes // Nature (London). 1998. V. 931. P. 59.
6. Charlier J.-C., Michenand J.-P., Lambin Ph. Tight-binding density of electronic states of pregraphite carbon // Physical Review B. 1992. V. 47. P. 4540.
7. Toy W., Dresselhaus M. S., Dresselhaus G. Minority carriers in graphite and the H-point magnireflection spectra // Physical Review B. 1977. V. 15. P. 4077.
8. Tomanek D., Louie S., Mamin H. et al. Theory and observation of highly asymmetric atomic structure in scanning-tunneling-microscopy images of graphite // Physical Review B. 1987. V. 35. P. 7790.
9. Tomanek D., Louie S. First principles calculation of highly asymmetric atomic structure in scanning-tunneling-microscopy images of graphite // Physical Review B. 1987. V. 37. P. 8327.
10. Hahn J., Kang H. Vacancy and interstitial defects at graphite surfaces: scanning tunneling microscopy study of the structure, electronic property and yield for ion-induced defect creation // Physical Review B. 1999. V. 60. P. 6007.
11. Hahn J., Kang H., Song S. et al. Observation of charge enhancement induced by graphite atomic vacancy: a comparative STM and AFM study // Physical Review B. 1996. V. 53. P. R1725.
12. Ивановский А. Л. Нанотубулярные формы вещества. Екатеринбург: УрО РАН. 1999.
13. Гришин М. В., Далидчик Ф. И., Ковалевский С. А. Упорядоченная адсорбция углеродных нанотрубок на пиролитическом графите // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные нейтронные исследования. 2001. № 7. С. 103.
14. Clauss W. Scanning tunneling microscopy of carbon nanotubes // Applied Physics. 1999. V. A69. P. 275.
15. Biro L. P., Thiry P. A., Journet C. et al. Influence of tunneling voltage on the imaging of carbon nanotubes // Applied Physics Letters. 1998. V. 73. P. 3680.
16. Patric D. L., Beebe T. P. Substrate defects and variations in interfacial ordering of monolayer molecular film on graphite // Langmuir. 1994. V. 10. P. 229.
17. Wiederholt T., Brune H., Wintterlin J. et al. Formation of two-dimensional surface phase on Al(111): an STM study // Surface Science. 1995. V. 324. P. 91.
18. Xhie J., Sattler K., Ge M. et al. Giant and supergiant lattices on graphite // Physical Review B. 1993. V. 47. P. 15835.
19. Rong Z. Y. Extended modifications of electronic structures caused by defects: scanning tunneling microscopy of graphite // Physical Review B. 1994. V. 50. P. 1839.
20. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир. 1969.
21. Балашов Е. М., Далидчик Ф. И., Ковалевский С. А., Колченко Н. Н. Химическая физика (в печати).

УДК 621.397.62:681.51

Ю. Ф. Адамов, д-р техн. наук, проф.,
О. А. Сомов, Е. А. Шевченко,
ООО "Юник Ай Сиз", Москва, Зеленоград

СИСТЕМЫ НА КРИСТАЛЛЕ В СОВРЕМЕННОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ

Дан аналитический обзор литературы по вопросам развития систем и методологии проектирования СБИС. Сделан прогноз развития систем проектирования. Они будут развиваться в направлении объединения маршрутов проектирования систем на платах и систем на кристалле на основе использования библиотечных сложно-функциональных блоков.

Развитие САПР и методологии проектирования БИС

Проблемы построения САПР. Согласно закону Мура число транзисторов на кристалле растет экспоненциально во времени. С усложнением интегральных устройств растет число требований к их элементам, что приводит к сверхэкспоненциальному росту необходимых вычислений в системе проектирования.

Первая проблема — это проблема больших чисел, т. е. рост объемов вычислений.

Вторая проблема — это усложнение физических процессов (и их расчетов) для нанометровых размеров элементов, например, квантовые явления и статистический разброс числа легирующих атомов в активных областях транзисторов, дискретный характер электрических зарядов при малых токах.

Третья проблема — человеческий фактор. Разработчикам приходится создавать все более объемные спецификации на проекты. Очень сложно оценить оптимальность полученных решений. Большие объемы вычислений создают и большие массивы результатов. Требуется более высокие уровни описания проектов и представления результатов для управления процессом разработки.

Комплекс этих проблем не может быть решен механически только путем повышения производительности компьютеров и соответствующих программ. Требуется развитие методологии проектирования и иерархическое построение проектов ультра БИС.

Реализуемость проектов. Рост затрат на проекты требует, чтобы большая их часть осваивалась в производстве и продавалась. Требуется методика и про-

граммы предсказания характеристик устройств, сроков и затрат на разработку, маркетинговые исследования. Сейчас осваивается около одной трети разработок. Время и затраты на разработку стали определяющим фактором при принятии решений.

Снижение затрат. Описание проекта должно осуществляться на самом высоком уровне абстракции. Для реализации проектов потребуются новые системы проектирования. Верхний — системный уровень описания должен осуществляться с использованием языков высокого уровня (MatLab, C, C++, Систем C с соответствующими расширениями). САПР должна поддерживать единство проекта, начиная с системного уровня.

Совместимость технических решений. Совместимость технических решений является необходимой для расширения рынка сбыта. Совместимость должна пониматься и как технологическая, и как совместимость интерфейсов устройств, и как возможность масштабирования и расширения возможностей.

Функциональная верификация проекта. Моделировать все возможные комбинации состояний и переходов в сложной системе невозможно сейчас и в ближайшем будущем. Основное направление — это макетирование устройств или больших блоков с использованием ПЛИС, микропроцессоров или других специализированных микросхем. Специализированные генераторы тестовых задач для макетов должны быть основаны на последовательности случайных чисел. Система макетирования оказывается дешевле, чем моделирование.

Потребуется новая методика оценки результатов верификации при моделировании и макетировании. Поскольку процесс верификации требует много дней непрерывной работы компьютера или макетного стенда, а сбои всегда есть, то критерием годности проекта будет допустимый пороговый уровень ошибок за большой период времени (например, за неделю).

Обеспечение связности сигналов. Работоспособность электронной системы обеспечивается только при определенной последовательности управляющих и информационных сигналов. С увеличением задержек в линиях связи увеличивается и разброс задержек. Последовательность сигналов меняется, что приводит к нарушению алгоритма работы системы.

В СБИС проектирование линий связи между блоками — это отдельный этап проектирования, требующий особого внимания. Развитие систем связи на кристалле очень похоже на развитие систем связи в аппаратуре и идет в направлении соз-

дания асинхронных последовательных интерфейсов.

Автоматизация разработки топологии и физическая верификация. Синтезаторы топологии должны автоматически выполнять ряд важных этапов физического проектирования БИС:

- оптимальное размещение блоков с учетом их мощности и связей;
- построение системы электропитания;
- построение системы распределения синхросигнала;
- приоритетное построение сигнальных связей.

Потребуется создание программ верификации, рассчитывающих взаимодействие линий связи, помех, распространяющихся по подложке, помех в цепях питания и др.

Встроенные средства контроля. Контрольно-измерительного оборудования для тестирования БИС в реальном масштабе времени сейчас нет и создать его нельзя. Современные сочетания сложности и быстродействия достижимы только в составе БИС. Контроль сигналов можно осуществить только специальными регистрирующими блоками, размещенными на том же кристалле. Проектирование системы встроенного контроля должно осуществляться одновременно с разработкой основной системы.

Инфраструктура, обеспечивающая функционирование САПР. Эффективное применение САПР предполагает использование заранее подготовленных библиотек элементов и сложных блоков, а также программ, управляющих работой этих блоков. При этом должна обеспечиваться совместимость всех частей проекта. Полномасштабное внедрение новой методологии потребует создания международных информационных центров с банком блоков и программ, развития сети распространения блоков, разработки системы стандартизации и унификации блоков для систем на кристалле. Очевидно потребуется информационная сеть, предназначенная для свободного бесплатного обмена и распространения информации о методах разработки систем на кристалле. Такая сеть может быть создана в Интернете. Процесс совершенствования методологии должен быть непрерывным и соответствовать уровню развития САПР.

Элементы новой инфраструктуры САПР сейчас уже появляются. В Интернете идет обмен информацией, фабрики создают банки блоков и предлагают их заказчикам. Фирмы-разработчики САПР создают центры поддержки проектов и центры обучения персонала. Включение России в этот процесс подтверждает глобальный масштаб перестройки мировой системы разработки микроэлектронных устройств.

Системы на кристалле — новая методология проектирования заказных микросхем

Способы реализации микроэлектронных устройств можно разделить на четыре основные группы:

- на основе универсальных микросхем (микропроцессоры, память, АЦП, операционные усилители и др.);
- на основе микросхем, программируемых потребителем (ПЛИС, ПЛМ, ППЗУ);
- на основе базовых кристаллов, программируемых изготовителем микросхем;
- на основе заказных микросхем, разработанных специально для данного устройства.

Выбор способа реализации устройства определяется, в первую очередь, экономическими показателями, т. е. стоимостью используемых микросхем. Развитие технологии приводит к снижению производственных затрат на выпуск микросхем. Наилучшие технические и экономические показатели серийной аппаратуры обеспечивают заказные микросхемы. При этом большой вклад в стоимость аппаратуры вносят затраты на разработку заказных микросхем.

Маршрут проектирования обычных заказных микросхем включает следующие основные этапы:

- системное проектирование;
- функциональное проектирование;
- макетирование и функциональная верификация;
- физическое проектирование и верификация;
- аттестация проекта.

Наиболее трудоемкими и длительными по времени являются второй и третий этапы. Именно они определяют основные затраты и время на разработку.

Кристалл БИС как системная плата. Основная идея в развитии методологии проектирования заказных микросхем — это использование в проекте уже готовых функционально законченных блоков. Примерно так, как это делается при разработке системы на плате с использованием универсальных микросхем. Заказные микросхемы, разрабатываемые на основе сложнофункциональных макроблоков, называются системами на кристалле (СНК), а используемые блоки — СФ-блоками или IP-блоками (*intellectual property*). Маршрут проектирования СНК существенно сокращается и упрощается по сравнению с маршрутом полностью заказных микросхем.

Методология проектирования СНК приближается к методологии разработки систем на печатных платах. Основным этапом проектирования — системный. Именно на этом этапе определяются все основные характеристики разрабатываемого микроэлектронного устройства. Этапы функционального проектирования и верификации объединяются и

упрощаются. Моделирование схемы на транзисторном и вентильном уровнях вообще может не проводиться. Используются только модели высокого уровня. Возможно и исключение этапа макетирования СНК, если все используемые СФ-блоки аттестованы и адекватно описаны на языках высокого уровня (VHDL, VHDL-AMS и др.). Физическое проектирование также существенно упрощается, так как число используемых СФ-блоков и сигнальных связей между ними сравнительно невелико.

По существу СНК являются полузаказными микросхемами и основные затраты приходятся на создание системы проектирования и распространения СФ-блоков. Основная выгода состоит в том, что каждый СФ-блок используется во многих изделиях, кроме того, в несколько раз сокращается время разработки конечных продуктов.

СФ-блоки для СНК должны разрабатываться по общим для всех правилам и учитывать особенности их совместного применения. В настоящее время еще не разработаны спецификации, определяющие требования к унифицированным СФ-блокам. Однако ряд требований можно сформулировать достаточно определенно уже сегодня.

Выбор технологии для СНК

Важнейшим этапом подготовки технического задания для СНК является выбор технологии. При этом важно знать основные возможности и ограничения выбранной технологии.

В сверхскоростных цифровых блоках невозможно реализовать режим с низкой потребляемой мощностью при снижении рабочей частоты. Сверхскоростные МОП-транзисторы никогда не бывают полностью закрыты. При равной ширине канала ток утечки МОП-транзистора с длиной канала 0,09 мкм и напряжением питания 1,2 В более чем в 100 раз превышает ток утечки для транзистора с длиной канала 0,25 мкм и питанием 2,5 В. В сложных схемах токи утечки могут превысить рабочие токи. Поэтому не следует выбирать технологии с размерами элементов меньше, чем необходимо для достижения требуемого быстродействия.

В аналоговых устройствах с уменьшением размеров транзисторов и напряжения питания уменьшаются динамический диапазон и коэффициент усиления при одновременном возрастании токов утечки. Уровень тепловых шумов технология изменить не может, поэтому с уменьшением размеров транзисторов резко снижается соотношение сигнал/шум в аналоговых блоках. Современные требования к параметрам аналоговых блоков не могут быть реализованы при напряжениях питания менее 2,5 В. В низковольтных схемах аналоговую об-

работку сигналов, по возможности, следует заменить цифровой. Существует ряд технологий, позволяющих объединять биполярные и МОП высоковольтные транзисторы с низковольтными КМОП-приборами. Такие смешанные технологии обычно разрабатывают на основе базового биполярного или КМОП-процесса. При этом не удается достичь высокого быстродействия для дополнительных элементов, не входящих в базовый процесс.

Включение в состав СНК *блоков, программируемых потребителем* или производителем микросхем, также требует применения специальной технологии. В современных микросхемах обычно используются элементы энергозависимой памяти на основе МОП-транзисторов с "плавающим", т. е. изолированным промежуточным затвором. При подаче повышенного напряжения на управляющий затвор МОП-транзистора "плавающий" затвор заряжается за счет туннельных токов утечки подзатворного диэлектрика, при этом пороговое напряжение транзистора значительно изменяется. Заряд на "плавающем" затворе может сохраняться много лет. Для стирания информации требуется подача на затвор повышенного напряжения противоположной полярности. Блоки управления записью и стиранием информации в ячейке ПЗУ должны выдерживать удвоенное повышенное напряжение. Размеры элементов в данном случае определяются используемыми напряжениями.

В радиотехнических микросхемах используются высокочастотные LC резонаторы и фильтры. Добротность резонаторов определяется потерями энергии в индукторах. Потери энергии в индукторах на кремниевых подложках определяются токами, наведенными магнитным полем в подложке. Добротность резонаторов на кремниевой подложке не превышает 5. Чтобы ослабить электромагнитную связь индуктора с проводящей подложкой используют два основных метода: нанесение на пластину слоя органического диэлектрика (полиимида) толщиной не менее 20 мкм с изготовлением индуктора на этом слое или формирование в диэлектрике под индуктором опор и мостов с последующим вытравливанием кремния под индуктором на глубину не менее 20 мкм. Добротность резонаторов при этом возрастает до 20...30.

При наличии в составе микросхемы *фотоприемных элементов* (оптических матриц и линеек) необходимо обеспечить прозрачность покрывающих диэлектриков для оптического излучения. Методы планаризации многоуровневой системы металлических проводников в БИС требуют равномерного заполнения слоев фрагментами металлизации. Для этого при подготовке рисунка фотошаблонов все свободные места заполняются мелкими фрагментами металлизации — фиктивными проводниками.

Слои металлизации становятся непрозрачными даже там, где нет проводников. Создание прозрачных участков диэлектриков требует введения в маршрут дополнительных операций. Изменяется также процесс формирования полупроводниковой структуры БИС.

Отклонения от базового технологического маршрута, необходимые для получения дополнительных элементов, могут увеличить стоимость обработки пластин вдвое.

Техническое обеспечение проекта СНК

Первая задача — это использование эффективной САПР. Основные производители САПР БИС — это фирмы *Cadence*, *Synopsis* и *Mentors Graphics*. Каждая из фирм поставляет достаточно полный комплект программных модулей. Однако все фирмы имеют определенную спецификацию. Фирма *Cadence* имеет лучшие программы для проектирования аналоговых и аналого-цифровых микросхем; *Synopsis* специализируется на автоматизации проектирования цифровых БИС; *Mentors Graphics* поставляет лучшие программы для работы с ПЛИС и для комплексного моделирования и физического проектирования плат. Форматы представления данных унифицированы, что должно обеспечивать совместимость программных модулей разных фирм в одной САПР. Несовместимость программных модулей еще встречается, однако это скорее исключение, чем правило.

Коллектив разработчиков СНК должен объединить и настроить в своей САПР оптимальный набор программных модулей, поставляемых, возможно, разными фирмами.

Вторая задача — создание базы данных. В любом случае потребуется аналоговая библиотека примитивных элементов: транзисторов, резисторов, индукторов, конденсаторов и т. д. Потребуется библиотека цифровых логических элементов. Библиотеки простейших элементов обычно поставляются кремниевыми фабриками и должны в точности соответствовать технологическому процессу. Согласованные требования к подготовке библиотек позволяют использовать их в САПР любого производителя.

Законченные СФ-блоки поставляются как фабриками, так и независимыми производителями. Для обеспечения их совместимости разработаны требования, включающие несколько сотен пунктов. В общем случае СФ-блоки не переносятся с одной фабрики на другую. Однако для цифровых устройств достаточно просто выполнить автоматический синтез электрической схемы и топологии, опираясь на VHDL/Verilog-описание и отлаженную топологию блока для другого тех-

нологического процесса, поэтому для цифровых блоков часто продаются только описания на языках VHDL/Verilog.

Третья задача — информационная и техническая поддержка процесса разработки. Далеко не всегда удается в заданный срок подготовить самостоятельно или приобрести требуемый набор СФ-блоков. В этом случае необходимо обратиться за помощью в центры поддержки разработки. Такие подразделения создаются фирмами-разработчиками САПР. В этих фирмах часто используется термин "виртуальная САПР". Это когда требуемой САПР нет, и задача решается специалистами фирмы на основе полученной спецификации и собственного опыта. Центры поддержки не только разрабатывают заказанные СФ-блоки, но и дают консультации по конкретным вопросам проектирования. Консультации осуществляются как дистанционно через Интернет, так и с выездом специалистов к заказчику.

Четвертая задача — решение вопросов аттестации проекта и производственного тестирования изделия электронной техники. Как отмечалось выше, в проекте должны быть предусмотрены встроенные средства контроля. Однако только встроенные средства контроля не способны обеспечить тестирование БИС. Для этого требуется специальное контрольно-измерительное оборудование, стоящее миллионы долларов. Специализированные фабрики (*Test-house*) готовы предоставить в аренду тестовое оборудование, однако проект должен быть подготовлен к использованию данного конкретного оборудования. Должен быть выполнен анализ тестопригодности проекта и совместимости его с выбранным тестовым оборудованием. Особо это касается аналоговых, радиотехнических и оптоэлектронных блоков СНК. Вопросы тестирования не должны откладываться на окончание проекта, а должны рассматриваться в течение всей работы, начиная с подготовки технического задания.

Пятая задача — обучение персонала. Каждый год производители САПР анонсируют десятки новых программных модулей. Приобретение новых программ не гарантирует их эффективного использования, а отказ от новинок обрекает фирмы на техническую отсталость. Экономия на образовании может обернуться потерей позиций на рынке. В России сейчас около 10 образовательных центров по САПР, созданных совместно с ведущими техническими вузами.

Особенности синхронизации СФ-блоков в системах на кристалле

Функции системы синхронизации в СНК те же, что и в любых синхронных микросхемах. Это ини-

специализация устройства при включении питания, распределение синхросигналов, выравнивание задержек на выходных шинах данных и восстановление данных на входах. Так как маршрут проектирования СНК не предусматривает переделку СФ-блоков, то каждый СФ-блок должен иметь собственную систему синхронизации.

Совместная работа СФ-блоков в составе СНК достигается реализацией асинхронного протокола передачи данных или передачей синхросигнала вместе с данными по одной шине от одного блока к другому. Для работы с внутренними шинами СНК в состав СФ-блоков вводятся внутренние интерфейсы и синхрогенераторы. Так же как в системах на печатных платах в СНК параллельно распределяются на СФ-блоки только сравнительно низкочастотные опорные синхросигналы, высокочастотные синхросигналы вырабатываются внутри СФ-блоков собственными синхрогенераторами или восстанавливаются внутренними интерфейсами из входного потока данных. Введение независимой локальной синхронизации снижает уровень помех в цепях питания, так как переключения синхронизируемых элементов в разных СФ-блоках происходят в разное время.

Требования к электрическим параметрам систем локальной синхронизации цифровых и аналого-цифровых СФ-блоков не очень жесткие. Основная проблема состоит в том, что традиционный маршрут проектирования системы синхронизации основан на использовании аналоговых методов управления с применением *RC* элементов. При этом *RC* элементы занимают большую площадь на кристалле или подключаются извне через выводы микросхемы. Для СНК с 10 локальными синхросигналами потребуется не менее 20 внешних компонентов на плате или увеличение площади кристалла в 2—3 раза. Техно-экономические показатели продукции при этом значительно ухудшаются. Успешное внедрение новой методологии проектирования СФ-блоков для СНК требует развития схемотехники цифровых малогабаритных элементов системы синхронизации без внешних компонентов.

Заключение

Развитие технологии неизбежно приводит к изменению методологии проектирования СБИС. На современном этапе развития микроэлектроники осуществляется глобализация инфраструктуры разработки и производства СБИС. Глобальная структура разработки и производства микроэлектронной аппаратуры уже полностью сформирова-

лась, в этой структуре происходит полное разделение функций разработки, производства и технической поддержки проектов, а также специализация крупных фирм, отдельных стран и мировых регионов на исполнении этих функций.

Системы на кристалле — это новая методология разработки СБИС, обеспечивающая эффективное разделение этапов системного и функционального проектирования, снижение сроков и затрат на исполнение проекта. Внедрение новой методологии требует создания унифицированных правил проектирования СНК и составляющих СФ-блоков, а также соответствующих САПР.

Углубление специализации фирм-разработчиков СБИС приведет к созданию мировой сети небольших узкоспециализированных дизайн-центров. Российские предприятия, обладающие квалифицированным персоналом и интеллектуальным заделом, должны занять равноправное место в мировой микроэлектронике.

Список литературы

1. Мурог С. Системное проектирование интегральных схем. М.: Мир, 1985.
2. Ферри Д., Эйкерс Л., Гринич Э. Электроника сверхбольших интегральных схем. М.: Мир, 1991.
3. Уэйкерли Д. Ф. Проектирование цифровых устройств. М.: Постмаркет, 2002.
4. Стемпковский А. Л., Шепелев В. А., Власов А. В. Системная среда САПР БИС. М.: Наука, 1994.
5. Бухтеев А. В. Методы и средства проектирования систем на кристалле // Chip news. 2003. № 4. С. 4—14.
6. Старосельский В. И. Адиабатическая логика // Микроэлектроника. 2002. Т. 31. № 1. С. 42—65.
7. Сергиенко А. Б. Цифровая обработка сигналов. СПб.: Питер, 2002.
8. Адамов Ю. Ф., Баринов В. В. Введение в конструирование элементов СБИС. Изд. МИЭТ, 1996.
9. Johns D., Martin K. Analog integrated circuit design. Toronto: John Wiley & Sons, Inc. 1997.
10. Hastings A. The art of analog layout. N. J.: Prentice Hall. 2001.
11. Weste N. H., Eshraghian K. Principles of CMOS VLSI design. A systems perspective. Addison-Wesley publishing company, 1994.
12. Rubin S. Computer aids for VLSI design. Addison-Wesley publishing company, 1994.
13. Chandrakasan A. P., Brodersen R. W. Low power digital CMOS design. Kluwer Academic publishers, 1998.
14. Chandrakasan A. P., Bowhill W. J., Fox F. Design of high-performance microprocessors circuits. IEEE Press, 2001.
15. Abidi A. S., Gray P. G., Meyer R. G. Integrated circuits for wireless communications. IEEE Press, 1999.
16. Doering R., Nishi Y. Limits of integrated circuit manufacturing // Proceedings of the IEEE. 2001. V. 89. N 3. P. 375—393.
17. Bryant R. E., Cheng K.-T., Kahng A. B. et al. Limitations and challenges of computer-aided design technology for CMOS VLSI // Proceedings of the IEEE. 2001. V. 89. N. 3. P. 341—362.
18. Chang H., Cooke L., Hunt M. et al. Surviving the SOC revolution: A guide to platform-based design. Norwell. MA: Kluwer, 1999.

УДК 004.312.466

В. В. Ерохин, канд. техн. наук,
МГИЭМ, г. Москва

АРХИТЕКТУРНО-ЗАВИСИМОЕ САМОТЕСТИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ БЛОКОВ

Рассматриваются возможные подходы к самотестированию (BIST) микропроцессоров. Предлагается MSS BIST метод, основанный на генерации стимулирующих воздействий на базе микропрограммы. Обсуждаются возможные приложения этого подхода к другим устройствам, управляемым не микропрограммой, а например, конечными автоматами. В сочетании с методом моделирования внешнего окружения MSS BIST обеспечивает высокий процент покрытия неисправностей при небольших затратах дополнительного оборудования.

Сложный функциональный блок, или IP-блок, является функционально законченным устройством, которое может быть использовано в дальнейшем без изменений в любых разработках как часть проекта, например, в **системах на кристалле** (*system-on-chips — SoC*) [1]. Современные SoC могут содержать десятки таких IP-блоков.

Одна из важнейших проблем в проектировании сложных функциональных блоков — производственное тестирование (*production test*), задачей которого является определение наличия или отсутствия дефектов в изготовленном на кристалле устройстве. Основные требования при тестировании — обеспечить приемлемый процент покрытия неисправностей (*fault coverage — FC*) при минимальном дополнительном оборудовании. В настоящее время считается приемлемым порядка 95 % FC при 10–15 % дополнительного оборудования.

К тестированию возможны два подхода: тестирование устройства с использованием специальной аппаратуры путем подачи на кристалл заранее разработанных тестовых воздействий и самотестирование (*built-in self-test — BIST*). Основными достоинствами самотестирования является дешевизна, а также возможность тестирования устройства конечным пользователем.

Характерными особенностями самотестирования можно назвать [2]:

- использование случайных тестовых воздействий (детерминированное тестирование из-за больших затрат аппаратуры возможно только в специальных случаях);
- использование сигнатурного анализатора в качестве устройства, фиксирующего ответы от тестируемого устройства;
- использование этого же сигнатурного анализатора в качестве генератора случайных тестовых последовательностей (*test pattern generation — TPG*).

Сигнатурный анализатор представляет собой сдвигающий регистр с линейными обратными связями (*linear feedback shift register — LFSR*). Реально в качестве сигнатурного анализатора используется модификация LFSR — MISR (*multiple input shift register*) — многовходовой сдвигающий регистр с линейными обратными связями.

Существующие методы самотестирования можно разбить на две группы: архитектурно-независимые и архитектурно-зависимые.

Архитектурно-независимые методы основаны в основном на использовании сканирующих цепочек, вставляемых в принципиальную схему HDL (*hardware design language*) компилятором. При

реализации данного подхода дизайнер может ничего не знать об архитектуре тестируемого устройства, откуда и происходит название этой группы методов. Соответственно, для архитектурно-зависимых подходов некоторое представление об архитектуре тестируемого устройства иметь необходимо, что конечно не может быть проблемой для проектировщика устройства [1, 3].

В ряде случаев архитектурно-зависимое самотестирование (самотестирование на архитектурном уровне) имеет существенные преимущества перед другими методами самотестирования. Во-первых, получаемая при этом принципиальная схема (*netlist*) точно соответствует описанию на HDL, что позволяет полностью контролировать процесс проектирования на поведенческом уровне. Во-вторых, в некоторых типах схем для повышения процента покрытия неисправностей (*fault coverage — FC*) в тестовом режиме необходимо внести изменения на архитектурном уровне, поскольку из-за стохастического характера тестирования простого внесения дополнительных точек наблюдения бывает недостаточно. В-третьих, в крупных проектах это позволяет сократить дополнительное оборудование. В-четвертых, этот метод не накладывает ограничений на стиль кода HDL.

Одна из важнейших проблем при построении BIST-контроллера — как "заставить" устройство работать в тестовом режиме, ведь любое устройство работает полноценно либо под внешним управлением, либо только в определенном внешнем окружении, которое в данном случае отсутствует. Для экономии оборудования при проектировании BIST-контроллера целесообразно использовать ресурсы тестируемого устройства. Как правило, современные IP-блоки разрабатываются с управлением на основе конечных автоматов (FSM

— *finite state machine*) или на основе микропрограммного управления (например, микропроцессоры). Именно эти устройства целесообразно использовать в качестве "движка", вынуждающего тестируемое устройство функционировать в тестовом режиме. Идея заключается в том, что в тестовом режиме устройство принудительно проходит все свои внутренние состояния, результаты фиксируются в MISR. Изменения в управляющих устройствах при этом минимальны.

В качестве примеров рассмотрим самотестирование для микропроцессоров. Полезно рассмотреть два подхода.

1. Реализация тестового режима через псевдонормальный режим работы процессора.

2. Использование предложенного автором MSS-метода генерации тестовых воздействий (*MSS — microprogram stimuli source*) [3].

При реализации первого подхода процессор работает практически в нормальном режиме, а тестовый режим реализуется путем изменения окружения микропроцессора. Когда процессор ожидает операционный код, окружение подставляет на входную шину данных очередной операционный код; если ожидаются данные, окружение подставляет данные с генератора случайных чисел. Процесс циклически повторяется. В этом подходе источником стимулирующих воздей-

ствий является "программа", формируемая окружением.

Интуитивным обоснованием этого подхода является такое соображение: если одна и та же команда выполняется с самыми разными данными (адресами), то рано или поздно аппаратура, обеспечивающая выполнение данной команды, будет проверена при $n \rightarrow \infty$, где n — количество наборов входных данных. Поскольку процент разделяемого оборудования в микропроцессорах обычно велик, достаточно повторить указанную операцию (пройтись по всем операционным кодам) один-два раза для достижения желаемого FC.

Реализация данного подхода для функционального аналога Motorola M68hc05, содержащего порядка 4500 эквивалентных вентилей, дала 97 % FC. Объем дополнительного оборудования составил 10 % по отношению ко всему устройству. Конкретная реализация изображена на рис. 1.

Достоинства этого подхода:

1. Для его реализации дизайнеру достаточно знать внешние спецификации работы микропроцессора и не требуется вникать в тонкости его внутреннего устройства. Архитектура процессора в простейшем случае остается без изменения.

2. Процессор проверяется в обычном режиме работы, что позволяет параллельно осуществлять проверку функционирова-

ния, т. е. правильности выполнения команд, процедур и т. п.

3. Процедура самотестирования позволяет осуществлять проверку покрытия кода (*code coverage*). Это покрытие позволяет косвенным образом судить о полноте тестирования.

Рассмотрим ограничения, накладываемые этим методом.

1. Такой подход требует эмулировать окружение для различных режимов работы микропроцессора (прерывание, захват шин, подтверждающие сигналы и т. п.). Это усложняет реализацию окружения и может привести к существенному росту затрат оборудования.

2. Генератор операционных кодов может быть реализован в виде регистра с инкрементом только в случае, если таблица операционных кодов проста по структуре и число операционных кодов микропроцессора относительно невелико (для представления всех операционных кодов достаточно одного байта).

В целом метод можно рекомендовать для относительно простых микропроцессоров.

При реализации самотестирования более сложных микропроцессоров, где количество операционных кодов велико и/или алгоритмы взаимодействия процессора с окружением достаточно сложны, описанный метод становится неприемлемым из-за больших затрат оборудования. В этом случае целесообразно использование MSS-метода.

Одна из основных задач в процессе организации самотестирования на архитектурном уровне — разработка устройства для подачи тестовых воздействий. В описанном выше варианте в роли такого устройства выступает окружение процессора и частично он сам. Когда на вход процессора поступает команда, он ее выполняет. Таким образом, в роли генератора тестов выступает "программа" и данные, генерируемые окружением. При переводе же

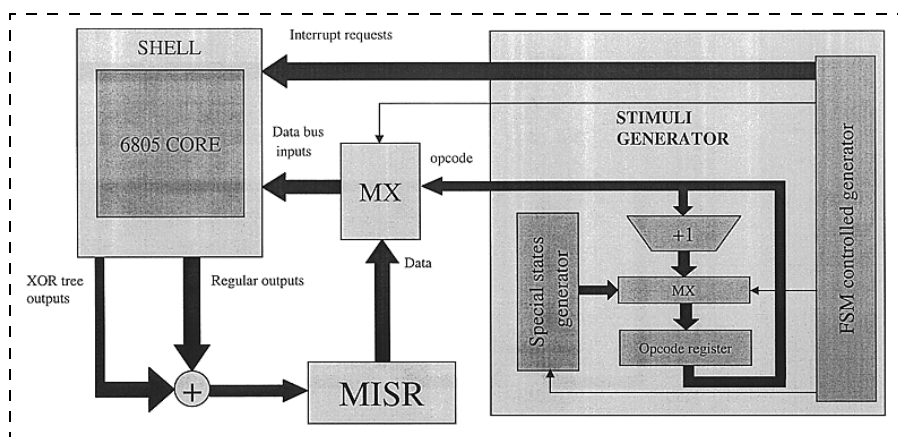


Рис. 1

процессора в особый, тестовый режим возникает вопрос, как организовать выдачу тестовых воздействий.

Примем, что процессор имеет микропрограммное управление.

Каждому операционному коду соответствует своя последовательность микрокоманд, в общем случае зависящая от данных. Если организовать выдачу воздействий из блока микропрограммного управления, таких же, как и при выполнении соответствующей команды для того же набора данных, результат будет тот же, что и при обычном выполнении команды.

Если принять, что микрокоманды, соответствующие операционному коду, в ПЗУ микрокоманд располагаются последовательно (линейно), очевидно, что можно построить такую тестирующую программу, при которой адреса микрокоманд будут линейно возрастать от нуля до N , где N — число микрокоманд. Тот же эффект достигается введением такой схемы тестирования, в которой генератор операционных кодов в виде регистра с инкрементом перенесен из эмулятора внешней среды в оболочку ПЗУ микрокоманд (рис. 2). Таким образом, удастся избежать усложнения генератора операционных кодов.

В случае, если в микропрограммах присутствуют переходы, подпрограммы (т. е. микропрограммы не являются линейными), предлагаемая схема тестирования не будет соответствовать ни одной программе в операционных кодах данного процессора. Однако с точки зрения проблемы FC, это не имеет никакого значения. Такой подход имеет то преимущество, что позволяет практически на 100 % протестировать основной управляющий блок — ПЗУ микрокоманд, для этого достаточно поставить на выходе ПЗУ микрокоманд MISR (см. рис. 2). Теперь на входах микропроцессора можно не различать,

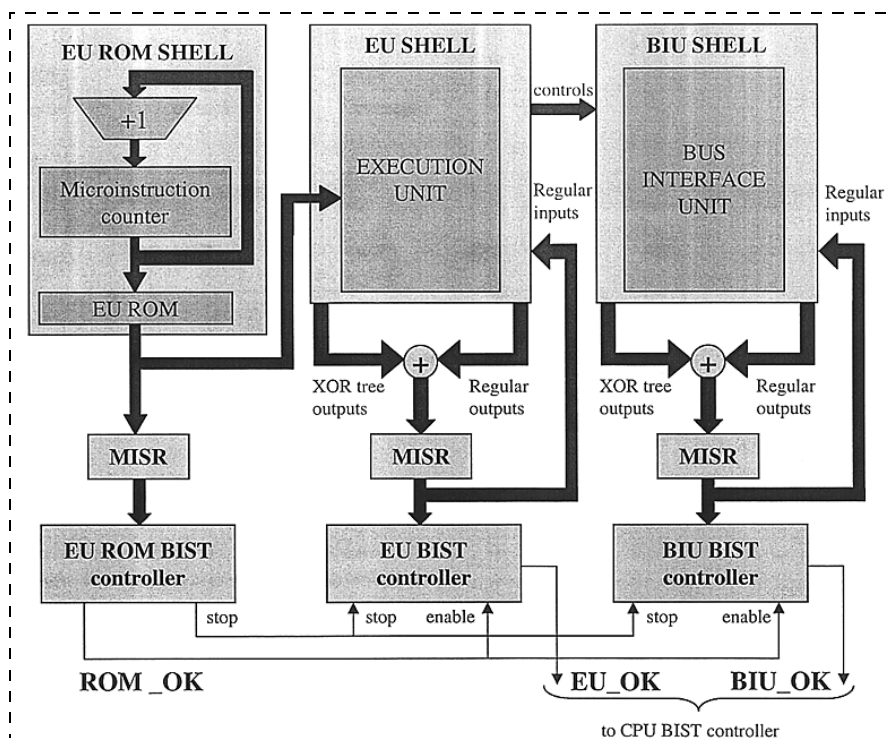


Рис. 2

что именно читается — данные или команды, и подставлять при каждом чтении значения с генератора случайных чисел. Даже если при тестировании дешифратор команд не пройдет все возможные состояния, это не будет иметь серьезных последствий для тестирования всего процессора, так как микрокоманды будут задействованы все.

Реализация описанного подхода для ядра функционального

аналога Intel 80C186, содержащего порядка 40000 эквивалентных вентилях, позволила получить 94 % FC при 7 % дополнительно оборудования.

Детальное обсуждение процедуры самотестирования

Процесс тестирования содержит три стадии. На первой стадии тестирования, когда процессор находится в специальном тестовом

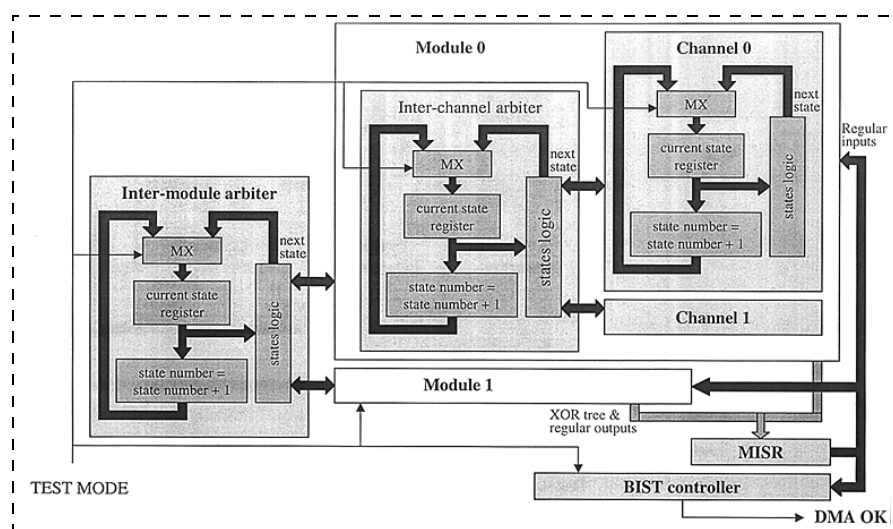


Рис. 3

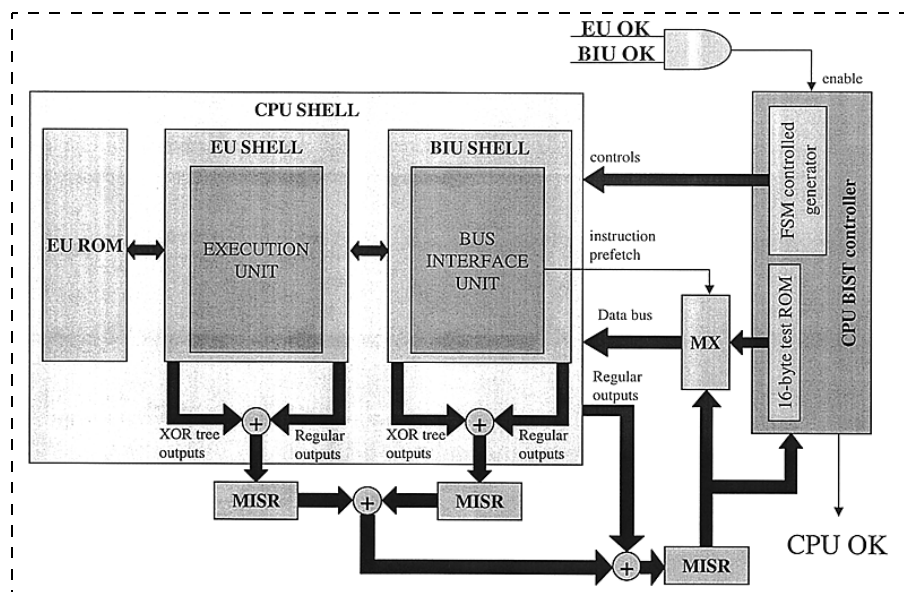


Рис. 4

вом режиме, проверяются ПЗУ микропрограмм, на второй с использованием микрокодов как "движка" проверяются остальные блоки процессора и шинный интерфейс. На третьей стадии тестирования, аналогично описанному выше подходу тестирования функционального аналога микропроцессора M68hc05, процес-

сор находится в псевдонормальном режиме, а тестовые воздействия поступают извне микропроцессора (рис. 3). Заключительная стадия тестирования необходима для повышения FC при обработке команд, требующих взаимодействия с внешним окружением (команд сопроцессору и т. п.).

Приложение MSS-метода к объектам, управляемым FSM

Описанный выше подход как обобщение может быть применен не только к микропроцессорным устройствам, реализованным с микропрограммным управлением, но и для микропроцессоров, в которых управление выполнено в виде FSM, а также к другим устройствам, управляемым FSM. Так, реализация данного подхода к DMA-контроллеру дала 95 % FC при 7 % дополнительного оборудования (рис. 4). Аналогично, применение описанного подхода к тестированию различных вариантов AES криптопроцессоров дает 95 % FC при менее, чем 6 % дополнительного оборудования.

Список литературы

1. Keating M., Bricaud P. Reuse Methodology Manual for System-on-a-Chip Design. Kluwer Academic Publishers. 1998. 224 p.
2. Stroud C. E. A Designer's Guide to Built-In Self-Test. Kluwer Academic Publishers. 2002. 319 c.
3. Erokhin V., Warren C., Fügert E. Erfahrungen zum Einsatz von BIST Strukturen für wiederverwendbare IP Blöcke // DASS 2000 workshops, Dresden, Germany.



СТРАНИЧКА РФФИ

В этом номере мы продолжаем публикацию аннотационных отчетов, полученных в инициативных научных проектах в области математики, информатики, механики, химии и физики и поддержанных РФФИ по итогам конкурса 1998 г. Данные по исполнителям проектов можно найти в "Информационном бюллетене РФФИ" № 6 за 1998 г. <http://intra.rfbr.ru>

АННОТАЦИОННЫЕ ОТЧЕТЫ ПО ТЕМАМ РФФИ

Тепловые и электродинамические явления в композитных сверхпроводящих средах и условия сохранения их сверхпроводящего состояния

Номер проекта: 98-02-16046
Год представления отчета: 2001

В ходе выполнения проекта были исследованы особенности диффузионных явлений в сверхпроводящих средах с вольт-амперными характеристиками, описы-

вающими электродинамическое состояние сверхпроводников при крипе магнитного потока. На основе разработанных в рамках данного проекта моделей и методов решения соответствующих задач сформулирована новая концепция — концепция квазикритического состояния сверхпроводников, в которых они находятся при крипе в ответ на какое-либо внешнее возмущение. Строго доказано, что при крипе электромагнитное поле независимо от характера возмущения существует только в финитной области сверхпроводника в виде характерной до-

менной структуры. При этом на подвижной границе области намагниченности имеют место особые условия, согласно которым дифференциальное сопротивление сверхпроводника монотонно уменьшается, принимая нулевое значение на подвижной границе области намагниченности. Изучено влияние вида вольт-амперной характеристики сверхпроводника на динамику его электродинамических состояний как при непрерывном вводе электромагнитного поля внутрь сверхпроводника, так и при его релаксации. Для данных режимов изменения внешнего магнитного поля сформулированы характерные особенности распределения электромагнитного поля внутри низко- и высокотемпературных сверхпроводников в зависимости от параметров нарастания их вольт-амперных характеристик. Указано на существенную роль области низких электрических полей в формировании электродинамических состояний сверхпроводников. Ее необходимо принимать во внимание для адекватного описания релаксационных процессов в сверхпроводниках и прежде всего в высокотемпературных. Проведен экспериментальный анализ теплового состояния низкотемпературного сверхпроводника при накачке внешнего магнитного поля. Он подтвердил существование зависимости конечного допустимого перегрева сверхпроводника от скорости изменения внешнего магнитного поля в моменты времени, предшествующие возникновению неустойчивости. Исследовано влияние внешних нестационарных воздействий на условия сохранения сверхпроводящих свойств ВТСП пленок. На основании этого объяснен ряд наблюдаемых в эксперименте аномальных эффектов разрушения сверхпроводимости ВТСП и созданы методы расчета устойчивых параметров ВТСП пленок, удобных для практических приложений. Решения поставленных задач связаны с общей теорией нелинейных процессов, представляющих общефизический интерес с точки зрения исследования сложных явлений в нелинейных активных средах, в частности, в структурах нанотехнологии. Поэтому результаты, сформулированные в рамках настоящего проекта, позволяют также расширить рамки существующих представлений о диффузионных явлениях в средах с существенно нелинейными свойствами.

Рентгенодифракционная кристаллооптика многослойных гетероструктур и сверхрешеток

Номер проекта: 98-02-16151

Год представления отчета: 2000

Развиты общие качественные подходы к анализу особенностей распространения волнового поля в сверхрешетках (СР) различных моделей. Проведена классификация параметров, описывающих динамическое рассеяние в СР, на "внешние" и "внутренние". "Внутренние" параметры описывают специфические особенности конкретной модели СР, а "внешние" параметры отвечают за общие структурные характеристики СР — амплитуду и период. Для структур с переменным градиентом деформации получен достаточный критерий углового положения области полного дифракционного отражения в зависимости от характера убывания деформации на бесконеч-

ности. Получено точное аналитическое решение задачи динамической дифракции в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. Показано, что для определенных условий дифракции возможна потеря информации о структурных параметрах деформированного слоя. Получены новые точные аналитические решения для задач динамической дифракции в кристалле с профилем $1/z$ и $1/\sqrt{z}$.

Природа и молекулярные механизмы взаимодействия частиц в высокодисперсных волокнистых материалах

Номер проекта: 98-03-32754

Год представления отчета: 2001

С помощью разработанных в данном проекте прецизионных методик и соответствующей аппаратуры измерены силы трения и силы сцепления (при испытаниях на отрыв) в точечных контактах между индивидуальными волокнами (диаметром 10—30 мкм) природной целлюлозы и ее производных — вискозы и ацетилцеллюлозы — в различных средах: на воздухе, в воде и водных растворах поверхностно-активных веществ (ПАВ).

Определены коэффициенты трения и молекулярная составляющая сил трения (по Дерягину), обусловленная только притяжением волокон в отсутствии внешней нагрузки.

В экспериментах с модельными образцами, идентичными или аналогичными по природе поверхности волокон, определена термодинамическая характеристика — удельная свободная энергия взаимодействия. Дана количественная оценка влияния на эти параметры катионных ПАВ — галоидных производных ряда четвертичных жирных аминов и катионоактивного полиэлектролита — полиэтиленимина. На основании измерения адсорбции ПАВ и электроповерхностных характеристик волокон выявлена природа установленной немонотонной зависимости параметров контактных взаимодействий — микропараметров волокнистых систем — от концентрации ПАВ и обоснован механизм их действия.

Изучено влияние ПАВ на макроскопические свойства волокнистых систем — устойчивость водных дисперсий волокон (длиной 1 мм) и их реологическое поведение. Установлена корреляция между макро- и микропараметрами волокнистых дисперсных систем.

Предложена модель волокнистой структуры, позволяющая рассчитать число контактов между волокнами и (при известных силах сцепления в контактах) дать оценку механических характеристик волокнистой системы.

Метод поверхностных акустических волн (ПАВ) для анализа физико-химических процессов на поверхности и в объеме микропористых твердых тел

Номер проекта: 98-03-32850

Год представления отчета: 2000

Новый аналитический метод, который на первом этапе работы базировался на отличии ПАВ в разных пьезоэлектрических монокристаллах, на втором этапе модернизирован на случай, когда отличие волн обеспечи-

вается их распространением по разным направлениям на одной плоскости анизотропной акустической подложки. Показано, что упругая, тепловая и пьезоэлектрическая анизотропии такой подложки позволяют осуществлять акустическую характеристику поверхностных процессов путем зондирования тестируемого пленочного адсорбента несколькими ПАВ, распространяющимися под разными углами в рамках одной кристаллографической плоскости. При этом идентичность адсорбента не нарушается, благодаря чему надежность и точность измерений повышаются.

Многоканальная интегральная ПАВ-структура применена для:

- определения шести параметров процесса адсорбции из газовой фазы (числа адсорбированных частиц, относительных изменений плотности, двух упругих модулей, электрической проводимости и температуры адсорбента. Точность измерений — $\pm 5\%$ и $\pm 0,001^\circ\text{C}$, соответственно);
- анализа кинетических и равновесных значений этих параметров (разрешение по времени 1 с);
- установления знака изменения сил межатомного взаимодействия в объеме адсорбента;
- исследования его "старения" под действием окружающей среды;
- разделения поверхностной и объемной стадий процесса адсорбции в пористых пленках.

Вместе с тем установлено, что ПАВ-структуры неприменимы для анализа жидкостей, при использовании подложек, не обладающих анизотропией, при проведении измерений в областях с линейными размерами менее апертуры звукового пучка (обычно 1 мм), а также при удалении от поверхности более, чем на глубину локализации ПАВ (обычно 20 мкм). При проведении электрических измерений отсутствует возможность подавления паразитного влияния металлического электрода на свойства адсорбента.

Горение газа в закрытом сосуде с инертной пористой средой

Номер проекта: 98-03-32308

Год представления отчета: 2000

В результате работ по проекту получены следующие основные результаты.

- Установлена область параметров и природа больших степеней недогорания в сосудах с пористой средой. Показано, что недогорание обусловлено гашением пламени вблизи поверхности пористой среды.
- Установлены характер и природа формирования максимальных давлений при горении в сосудах с пористой средой.
- Выявлено четыре фактора, определяющих это давление: равновесная температура газа и пористой среды, температурная неравновесность, жидкость на поверхности пористой среды и конфигурация сосуда.
- Получены параметрические обобщения экспериментальных данных по недогоранию и максимальным давлениям.

Экспериментально и теоретически исследованы эффекты числа Льюиса при распространении пламен в уз-

ких каналах и пористых средах. Показано, что в этих условиях на пределах распространения критическое число Пекле есть величина непостоянная. Разработан подход, позволяющий оценивать поправку к "плоскому" числу Пекле, обусловленную кривизной, растяжением фронта пламени и эффектами числа Льюиса.

Показано, что образование пространственных структур фронта, таких как ячеистый рельеф или отдельные разрывы фронта, могут происходить из-за диффузионно-тепловой неустойчивости плоского пламени.

Теоретически и экспериментально изучены режимные переходы. Определены условия их реализации. Показано, что в полидисперсных пористых средах существенную роль могут играть режимные переходы на уровне отдельных пор. В закрытых сосудах возможны динамические режимные переходы. Проведено экспериментальное исследование режима звуковых скоростей. Развита физическая модель РЗС. Получена формула для вычисления скорости волны горения. Выполнено обобщение экспериментальных данных. Сделано аргументированное заключение о механизме распространения волны горения в РЗС.

Механохимические реакции твердое тело/газ: обнаружение и изучение промежуточных неравновесных состояний

Номер проекта: 98-03-32725

Год представления отчета: 2001

При постановке работ по проекту 98-03-32623а задача состояла в том, чтобы раскрыть и на количественном уровне описать основные стадии низкотемпературного механохимического синтеза твердое/твердое и твердое/газ, в котором диспергирование компонентов, создание контактов между частицами и массоперенос в зонах контакта вызваны непосредственно механической обработкой порошков твердых реагентов. С этой целью были расширены методы измерений затрат работы (доза D) и площади контакта S, накоплены и обобщены экспериментальные данные о стадийном механизме реакции, зависимости выхода реакции от дозы, давления газа и других факторов.

При анализе результатов были использованы современные методы исследования (РФА, ЯГР, ДТА, электронная микроскопия, адсорбции, хемосорбции, термодесорбции и др.) и представления о развитии деформации в наноразмерных реакционных системах по межфазным и межзеренным границам. Это дало возможность количественно описать и объяснить основные результаты экспериментов. К ним относятся:

- схема количественного описания гетерогенных механохимических реакций как последовательности процессов создания границ и граничного деформационного массопереноса с постоянными A_s и G_0 , которые характеризуют эффективность этих процессов;
- количественные значения введенных параметров A_s и G_0 для нескольких серий однотипных реакций, первые данные об их изменениях, связанных с варьированием природы реагентов, а также возможный диапазон значений для "легких" и "трудных" механо-

- химических процессов; смеси Y/X, где Y = Al, Si, Fe, Ni, а X = Al, Sn, Ti, Zr, Cr, Ta, Nb, W и др.;
- процессы создания межзеренных границ в Al, Si, Fe, Zr, W и распределение твердых компонентов по границам для систем Fe/X (X = Sn, Ti, Zr и др.);
 - ступенчатый характер зависимости сорбции газов и выхода реакций твердое/газ от давления газа в реакциях гидрирования керамики и металлов, а также взаимодействия CO и CO₂ с гидридами;
 - двухступенчатый механизм механического сплавления, обусловленный высокой интенсивностью массопереноса на начальной стадии реакции.

Микронзондовая конфокальная спектроскопия комбинационного рассеяния света (КР) — новый подход к исследованию дефектообразования в поликристаллических алмазных структурах, синтезируемых из газовой фазы

Номер проекта: 98-03-33217

Год представления отчета: 2001

Показано, что микронзондовый вариант спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) и фотолюминесценции (ФЛ) в сочетании с просвечивающей электронной микроскопией является эффективным инструментом для изучения трехмерных (внутренние напряжения) и точечных (различные структурные формы азота и кремния) дефектов. Исследованы поликристаллические алмазные пленки толщиной до 1,5 мм, выращенные в СВЧ плазменном реакторе в различных условиях.

Анизотропные внутренние напряжения изучены методом КР в сочетании с просвечивающей электронной микроскопией. Техника КР в режиме микронзонда дала детальную информацию о распределении напряжений как в пределах отдельных кристаллитов пленки, так и при переходе через межкристаллитные границы с пространственным разрешением в несколько микрометров. Электронная микроскопия показала, что основными протяженными дефектами в пленках являются ряды параллельных микродвойников. На основании сопоставления данных по спектроскопии КР и электронной микроскопии предложен механизм формирования внутренних напряжений за счет образования некогерентных границ между кристаллами в процессе роста алмазных пленки.

Успешное изучение трехмерных дефектов с помощью микронзондовой спектроскопии КР позволило расширить круг первоначально поставившихся в проекте задач и перейти к исследованию точечных дефектов, образующих оптические центры в кристаллах, методом микронзондовой спектроскопии ФЛ. Техника ФЛ в режиме микронзонда дает детальную информацию о распределении примесей в образцах с пространственным разрешением в несколько микрометров. С ее помощью исследовано объемное распределение оптических центров, связанных с включениями кремния в алмазную решетку. Показано, что концентрация кремния плавно снижается по глубине пленки, имея максимум вблизи кремниевой подложки, на которую осаждается пленка, и глубина

проникновения примеси зависит от условий осаждения. Предполагается, что кремний встраивается в решетку алмаза в результате травления кремниевой подложки в процессе синтеза.

Структурные формы включения азота в алмазную пленку определялась с помощью спектроскопии ФЛ, ультрафиолетового, видимого и инфракрасного поглощения. Для этой цели исследуемые образцы подвергались радиационному воздействию (электронному и нейтронному) с последующим термическим отжигом. Показано, что в алмазных пленках атомы примесного азота находятся по крайней мере в четырех различных формах. В целом, в рамках решения фундаментальной проблемы плазмохимического синтеза совершенных алмазных структур определены механизмы образования и эволюции ряда основных дефектов в таких структурах, что позволило совершенствовать технику роста алмазных пленок.

Оптические и электрофизические свойства нанокомпозитов на основе проводящих полимерных смесей

Номер проекта: 98-03-33378

Год представления отчета: 2000

Разработана методика синтеза и получены образцы высоконаполненных композиций, содержащих наночастицы полупроводников в проводящих полимерных матрицах, таких как полифениленвинилен, полианилин и полимерные смеси полианилина с полипропиленом, поливиниловым спиртом, целлюлозой и др. Композиции могут содержать нанокристаллы полупроводников *p*- и *n*-типов, наночастицы CuS, Cu₂S, CdS, PbS, Fe₃O₄ с весовой концентрацией до 150 %.

Проведены исследования электрофизических свойств полученных полимер-нанокомпозитов: температурные зависимости проводимости, нелинейные вольт-амперные характеристики (ВАХ). Установлена связь нелинейных ВАХ с образованием объемного заряда. Оценены подвижность и концентрация носителей в проводящих нанокомпозитах.

Проведены измерения оптических спектров поглощения. Исследуются фотопроводимость и фотовольтаический эффект в данных системах. Исследованы намагнитиченность и обнаруженное нами отрицательное гигантское магнитосопротивление (ГМС) композиций с наночастицами оксида железа. Наряду с отрицательным ГМС впервые обнаружено изотропное положительное магнитосопротивление, которое характеризуется более медленным временем отклика на изменение магнитного поля. Этот эффект, вероятно, связан с перестройкой кластерной магнитной структуры нанокомпозита.

Проведены исследования нанокомпозитов на основе оксидов железа посредством Мессбауэровской спектроскопии. Исследуется связь эффектов отрицательного и положительного ГМС с переходом суперпарамагнетик — ферромагнетик, происходящим для разных образцов при различных температурах от 77 до 293 К в зависимости от концентрации.

ИНФОРМАЦИЯ

Девятая международная научно-техническая конференция АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ И МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ ПЭМ-2004



ТПУ

пос. Дивноморское, Краснодарский край, Россия
12—17 сентября 2004

Тематика секций

- наноэлектроника;
- технология микроэлектроники;
- материалы электронной техники;
- микросхемотехника;
- проектирование приборов и микросхем;
- твердотельная электроника СВЧ;
- оптоэлектроника;
- микросистемная техника;
- планирование, менеджмент и экономика в электронике.

Председатель программного комитета проф. ТПУ Коноплев Б. Г.

Заявка на участие

Для участия в работе конференции следует направить в Оргкомитет следующие материалы:

- тезисы доклада (в электронном и отпечатанном виде) и заявку на участие (для каждого доклада) в электронном и отпечатанном виде, правила оформления — <http://www.fep.tsure.ru/win/conferenc/zayav.htm>;
- акт экспертизы;
- ксерокопию платежного поручения оплаты регистрационного взноса с отметкой банка.

Участникам конференции до 1.07.2004 г. будет направлено по электронной почте извещение.

Телефоны для справок

(8634) 37-16-29

Адрес оргкомитета

347928, Россия, г. Таганрог, ГСП-17А, Некрасовский, 44, ТПУ, деканат ФЭП
E-mail: pem@fep.tsure.ru

Секретариат

Поляков Вадим Витальевич
Супрунова Елена Федоровна

Данное и последующие информационные сообщения доступны в Internet по адресу:
<http://www.fep.tsure.ru> в разделе "КОНФЕРЕНЦИИ"

Министерство образования Российской Федерации
Северо-Кавказский государственный технический университет
Российская академия наук
Северо-Кавказское отделение академии технологических наук РФ (СКОАТН РФ)
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ)
Институт электроники Болгарской академии наук

IV международная научная конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии" 19—24 сентября 2004 г.



г. Кисловодск, Россия

Цель конференции

В настоящий момент микроэлектроника столкнулась с проблемой дальнейшей миниатюризации структурных элементов, связанной с разработкой новых технологий производства наноразмерных объектов. Необходимость применения подобных объектов обусловлена их принципиально новыми свойствами, связанными с возникновением квантово-размерных эффектов. Основой разработки таких технологий является дальнейшее развитие химии твердого тела как науки о материалах электронной техники и теоретического моделирования сложных процессов, происходящих в низкоразмерных твердотельных структурах.

Во время работы конференции планируется проведение школы молодых ученых "Современные микро- и нанотехнологии"

Тематика конференции:

- химия и физика низкоразмерных систем;
- физика и химия высокодисперсных систем и поверхностных явлений;
- структура, электрические и оптические свойства материалов;
- диагностика и моделирование квантово-размерных гетероструктур и наноструктур;
- наноустройства, наноэлектроника, наносенсоры;
- оптоэлектроника и широкозонные полупроводники;
- керамические материалы для современных микро- и нанотехнологий;

- тенденции и перспективы развития технологии получения наноматериалов и нанокмполитов.
- Языки конференции — русский и английский

Председатели программного комитета конференции:

- | | |
|--------------------------|---|
| Г. Г. Матишов | академик РАН, председатель Южно-го центра РАН, директор ММБИ, г. Ростов-на-Дону, Россия |
| Б. М. Синельников | проф, д-р хим. наук, действительный член АТН РФ, ректор СевКав-ГТУ, г. Ставрополь, Россия |

Календарный план

- Подача заявок на участие в конференции **до 15 мая 2004**
- Сроки представления тезисов **до 1 июля 2004**
- Сроки проведения конференции **19—24 сентября 2004**

Место и дата проведения конференции

Конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии" состоится с 19 по 24 сентября 2004 года в санатории "Целебный нарзан", г. Кисловодск, Ставропольский край, Россия.

Оплата проезда, проживания и питания — за счет участников конференции. Одновременно возможен бесплатный курс лечения в санатории (при проживании не менее 7 дней).

Организационный взнос на проведение конференции составляет 1000 руб.

Контактные телефоны:

Каргин Николай Иванович	8-865-2-94-41-50
Хорошилов Александр Алексеевич	8-865-2-95-65-49
Родный Александр Александрович	8-865-2-95-65-49

E-mail: konf@stv.runnet.ru rector@ncstu.ru

CONTENTS

Babaevsky P. G., Zhukov A. A., Zhukova S. A. *Effect of Chemical Treatment on Structure Properties on Thin Polyimide Films and Coatings and on HF-plasma Etching Rate of "Sacrificial" Layers in Microsystem Technology* 2

The research deals with problem of optimization of "sacrificial" polyimide layer etching process in manufacture of Microsystems on the basis of multilevel patterns. It is determined, that the physico-chemical modification of thin polyimide films and coatings by plasma-chemical hexametyldisilazane vapor treatment propagates through to all their thickness, changing their bond character, surface and bulk properties and nature of interphase interaction.

Dragunov V. P. *Nonlinearity of Elastic Elements of Micromechanical Systems* 7

Deflection of thin diaphragms of the circular, square, triangular and hexagonal forms with clamped edges under various loads is studied. This research is limited to deflection $W \leq h$. It is shown, that, changing the sizes diaphragms MMS, it is possible to change a parity effective rigidity and maximal deflections of diaphragms of the different form. Is established, that in nonlinear approach under influence of an electrical field the size of a critical deflection of diaphragms is determined not only initial gap between electrodes, but also thickness of diaphragm.

Evlyukhin A. B., Gerke M. N., Evlyukhina E. V. *Theoretical Model of Probe Radiation in Near-Field Optical Microscopy of Single-Layer Nanostructure* 13

Modeling of radiation distribution inside thin dielectric layer based in near wave zone of small source has been carried out. Near-field radiation is considered to be the second waves emitted by mesoscopic dielectric object which interacts with external electromagnetic wave. Theoretical model is based on the integral equations obtained from Maxwell equations by Green's function method. Numerical results are obtained in unretardation approach due to the fact that all distances in question system are much smaller than wave length of the external field. It was shown that the distribution of electric field intensity in the layer can notably depend on the field com-

ponents which are perpendicular to surfaces of the layer. It takes place even when these components are absent in the external waves.

Nokhrin A. V., Makarov I. M., Lopatin Yu. G. *Peculiarities of Research Technique for Investigation of Deformation-Induced Grain Growth in Nano- and Microcrystalline Superplastic Aluminum Alloys Using Atomic-Forced Microscopy* 20

The basic methodical and technical approaches for investigation of grain-structure evolution of nano- and microcrystalline materials using atomic-forced microscopy have been developed. In particular, structure evolution of Al—Mg—Sc—Zr and Al—Zn—Mg—Sc—Zr alloys produced by equal channel angular pressing has been studied. As a preliminary treatment, the samples of Al—Mg—Sc—Zr and Al—Zn—Mg—Sc—Zr alloys were exposed to heat treatments (annealings) and superplastic deformation.

Dalidchik F. I., Grishin M. V., Kovalevskii S. A. *Features of Electronic Structures of Interacting Nanocarbon Particles* 29

New topographic and spectroscopic phenomena due to weak exchange interaction of carbon atoms of different low-dimensional nanosystems (point defects, ensembles of ordered nanotubes on graphite, Moire patterns) are found and explained.

Adamov Yu. F., Somov O. A., Shevchenko E. A. *Systems on Chip in Modern Microelectronics* 34

Analytical survey of VLSI systems and design methodology literature is proposed in this paper. The design systems evolution forecast is made. They will progress in direction of design flows consolidation between systems on circuit boards and systems on chips based on standard Macroblocks (IP-blocks) using.

Erokhin V. V. *Architecture-Specific BIST for IP Blocks* 39

Possible approaches to built-in self-testing (BIST) of microprocessors are discussed. Micro Program Stimuli Source BIST method (MSS BIST) is presented. Possible applications of the method for non-microprogram controlled IPs (FSM-based) are discussed. The MSS BIST method combined with method of simulating of external environment provides high fault coverage percentage and small hardware overhead.

For foreign subscribers:

Joint-stock company MK-Periodica. E-mail: info@periodicals.ru Tel.: +7(095) 284-5008. Fax: +7(095) 281-3798

The journal bought since november 1999.

Editor-in-Chief Ph. D. Petr P. Maltsev

ISSN 1684-6419.

Address is: 4, Stromynsky Lane, Moscow, 107076, Russia. Tel./Fax: +7(095) 269-5510.

E-mail: it@novtex.ru; <http://www.microsystems.ru>

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромынский пер., 4. Телефон редакции журнала (095) 269-5510. E-mail: it@novtex.ru

Журнал зарегистрирован в Государственном Комитете Российской Федерации по печати. Свидетельство о регистрации № 018929 от 10.06.99.

Дизайнер Т.Н. Погорелова. Технический редактор И.С. Павлова. Корректор А. В. Лабудь

Сдано в набор 02.03.2004. Подписано в печать 14.04.2004. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 5,88. Усл. кр.-отт. 7,84. Уч.-изд. л. 7,13. Заказ 661. Цена договорная

Отпечатано в Подольской типографии ГУП ЧПК, 142110, г. Подольск, ул. Кирова, 25