

МСТ

МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 9 ◆ 2004**ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ПРИКЛАДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ**

Журнал выпускается при научно-методическом руководстве
Отделения информационных технологий и вычислительных систем
Российской Академии наук

Издаётся с 1999 г.
ISSN 1684-6419

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.
Астахов М. В.
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

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Шевченко В. Я. О терминологии: наночастицы, наносистемы, нанокомпозиты, нанотехнологии	2
Ландышев А. В., Лаврентьев А. А., Ландышев В. А. Исследование концентрационных неоднородностей в сплавах $Si_{0,68}Ge_{0,32}$	4
Щеглов Д. В., Родякина Е. Е., Латышев А. В., Асеев А. Л. Новые возможности нанолитографии зондом атомно-силового микроскопа	8
Дедков Г. В., Кясов А. А. Новые аспекты флуктуационно-электромагнитного взаимодействия движущихся нанозондов с поверхностью	16

ЭЛЕМЕНТЫ МИКРО- И НАНОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКИ

Шашкин В. И., Вопилкин Е. А., Востоков Н. В., Климов А. Ю., Рогов В. В., Гусев С. А., Шулешова И. Ю. Изготовление микроконсолей и управление их изгибом	22
---	----

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МСТ

Сеченов Д. А., Агеев О. А., Светличный А. М., Клово А. Г. Влияние режимов быстрой термообработки на температурные поля в гетерогенных структурах металл/карбид кремния	26
--	----

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МСТ

Шелепин Н. А. Основные принципы создания SPICE-моделей микроэлектромеханических систем	30
Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Коломейцева Н. В. Комбинированная двухзонная модель гетероструктуры с одним туннельным переходом и протяженными приконтактными областями	36

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И БИОЭЛЕКТРОНИКА

Агафонов В. М., Криштоп В. Г. Исследование АЧХ молекулярно-электронного преобразователя с новой геометрией	40
--	----

СТРАНИЧКА РФФИ	46
---------------------------------	----

ИНФОРМАЦИЯ	47
-----------------------------	----

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)

Нанотехнологии и зондовая микроскопия

УДК 621.38

В. Я. Шевченко, акад. РАН,
Институт химии силикатов РАН

О ТЕРМИНОЛОГИИ: НАНОЧАСТИЦЫ, НАНОСИСТЕМЫ, НАНОКОМПОЗИТЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

Рассматриваются вопросы терминологии: наноструктуры, наносистемы, нанокомпозиты, наноматериалы или нанотехнологии и их связь с технологией приготовления материала.

Прежде всего о терминологии. Названия наноструктуры, наносистемы*, нанокомпозиты, наноматериалы или нанотехнологии все-таки производные. Ученые оперируют понятием "вещество", которое является универсальным, а уже потом из этого вещества можно с помощью определенной технологии приготовить материал, а из него — изделие (структурную).

Проблема наносостояния не новая для материаловедения. Наверное, R. Zsigmondy в 1925 г. и T. Svedberg в 1926 г. были первыми, кто получил Нобелевские премии за важные наблюдения в химии дисперсных (нано) систем. До нынешних дней более десяти химиков получили премии за исследование тех или иных аспектов наносостояния. Химики внесли больший вклад в исследованную проблему, чем физики. К химикам-неорганикам и химикам-органикам следует подключить также и химиков-биологов. За 70—80 лет химики синтезировали несколько сот различных нанообъектов — частиц, материалов, структур. Это кентавры, коацерваты, тактоиды, фазоиды, аллофены, гигантские кластеры, фуллерены, фумароиды, нанотрубки и т. п. Важно, что все это многообразие форм существует в узком интервале размеров (наноразмеров) либо состоит из наноэлементов структуры.

Для неорганической химии переход в масштаб наноразмеров позволил обнаружить многие новые структурные типы, строение которых не соответствует незыблемым в макромире законам классической (обобщенной) кристаллографии.

*Под наносистемами мы подразумеваем ансамбли наночастиц, агрегаты наночастиц, структурные образования из атомных и молекулярных образований, кластеров и т. п.

Наночастицы демонстрируют самые разнообразные структурные элементы — одномерные, двумерные, трехмерные, фрактальные и всевозможные их комбинации. Что же предопределяет такое многообразие структур в наномире? Ответ на этот вопрос кроется в квантовом характере наносостояния и особых статистических законах, доминирующих в наномире. Наносистемы далеки от равновесия вследствие наличия развитой поверхности. Положения атомов вблизи поверхности отличны геометрически и физически от положений в объеме кристалла. Состав приповерхностного слоя не соответствует стехиометрическому составу химического соединения. Глубина модуляции структуры может простираться на несколько моноатомных слоев. Такие эффекты позволяют говорить о существовании неавтономных поверхностных фаз и о псевдоморфном сопряжении их с внутренней частью частицы.

Ограничение требований регулярности трансляционной симметрии приводит к появлению икосаэдрических форм упаковки с пентагональной симметрией для неорганических частиц. Реализуются также наночастицы — кентавры с когерентными границами раздела между структурными фрагментами различной симметрии. Для того чтобы представить, как это происходит, используют художественные образы, обращаясь к фантастическому (а теперь реальному) миру метаморфоз, развитых выдающимся голландским художником Морисом Эшером, в рисунках которого показано постепенное изменение симметрии при трансляции (метаморфозе).

Дуализм состояний наноструктуры, наночастиц определяет случайный характер их образования, что означает временную зависимость параметров системы. Для теоретического анализа наносостояния необходимо преодолеть трудности концептуального характера. Главное, что они известны.

В 1959 г. Нобелевский лауреат Р. Фейнман сказал, что "полно игрушек на полу в комнате", объясняя тем самым, что в области малых размеров много интересного. Многие считают это началом наноэпохи. Это все же не так.

В 1977 г. другой Нобелевский лауреат Илья Пригожин сказал, что "мы знаем, где дверь в эту комнату".

За последние 20 лет были развиты методы микроскопии высокого разрешения и методы изучения фемтосекундных физических и химических процессов. Это позволяет изучать наносостояние с открытыми глазами и определить многие свойства, необходимые для следующего шага — перехода

к нанотехнологиям. Так что можно утверждать — теперь дверь в комнату Р. Фейнмана открыта.

Итак, что же сейчас понимают под нанотехнологиями? Чисто формально в сферу этой деятельности попадают объекты с характерными размерами R (хотя бы вдоль одной координаты), измеряемыми нанометрами ($1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м} = 10 \text{ \AA}$). Реально диапазон рассматриваемых объектов и явлений гораздо шире — от отдельных атомов ($R < 0,1 \text{ нм}$) до их конгломератов и органических молекул, содержащих более 10^9 атомов и имеющих размеры гораздо более 1 мкм в одном или двух измерениях. В силу действия различных причин (как чисто геометрических, так и физических) вместе с уменьшением размеров падает и характерное время протекания разнообразных процессов в системе, т. е. возрастает ее потенциальное быстродействие, что очень важно для электроники и вычислительной техники. Реально уже сейчас достигнутое быстродействие — время, затрачиваемое на одну элементарную операцию в серийно производимых компьютерах, составляет около 1 нс (10^{-9} с), но может быть еще уменьшено на несколько порядков в рядеnanoструктур.

Наивно было бы думать, что до наступления эры нанотехнологии человек не сталкивался и не использовал объекты и процессы на наноуровне. Так, биохимические реакции между макромолекулами, из которых состоит все живое, получение фотографических изображений, катализ в химическом производстве, бродильные процессы при изготовлении вина, сыра, хлеба и другие происходят на наноуровне. Однако "интуитивная нанотехнология", первоначально развившаяся стихийно, без должного понимания природы используемых объектов и процессов, не может быть надежной основой в будущем. Поэтому первостепенное значение имеют фундаментальные исследования, направленные на создание принципиально новых технологических процессов и продуктов. Возможно, нанотехнологии смогут заменить некоторую часть морально устаревших и неэффективных технологий, но все-таки ее главное место — в новых областях, в которых традиционными методами в принципе невозможно достичнуть требуемых результатов.

Таким образом, в громадном и пока еще слабо освоенном зазоре между макроуровнем, где действуют хорошо разработанные континуальные теории сплошных сред и инженерные методы расчета и конструирования, и атомарным, подчиненным законам квантовой механики, находится обширный мезоиерархический уровень структуры материи (греч. *mesos* — средний, промежуточный). На этом уровне протекают жизненно важные биохимические процессы между макромолекулами

ДНК, РНК, белков, ферментов, субклеточных структур, требующие более глубокого понимания. Вместе с тем, здесь могут быть искусственно созданы невиданные ранее продукты и технологии, способные радикально изменить жизнь всего человеческого сообщества. При этом не потребуется больших затрат сырья и энергии, как и средств для их транспортировки, уменьшится количество отходов и загрязнение окружающей среды, труд станет более интеллектуальным и здоровым и т. п.

Иными словами, нанотехнология это новая стратегия в технологии: вместо обработки "сверху—вниз" (т. е. получения деталей или готовых изделий из заготовки путем отделения ненужных частей) сборка или самосборка (*self-assembly*) "снизу—вверх" (т. е. безотходный молекулярный дизайн изделия из элементарных "кирпичиков" природы — атомов и молекул).

Физическими основаниями для новой парадигмы в технологии являются глубокие знания свойств каждого атома вещества из таблицы Менделеева и наличие сил притяжения между ними при расстояниях $0,1 < r < 1 \text{ нм}$. Разумеется, для разных атомов количественные характеристики потенциалов взаимодействия будут отличаться, но общий вид и наличие минимума энергии W_0 на некотором расстоянии r_0 — их универсальное свойство. В результате действия этих сил могут образовываться атомные конфигурации с прочными связями (ковалентными, ионными, металлическими) или слабыми (ван-дер-ваальсовыми, водородными и др.).

Атомные ассоциаты, содержащие счетное число атомов, называют молекулами или атомами. Чем меньше частица и ниже температура, тем сильнее проявляются ее квантовые свойства. Однако сильные изменения свойств наночастиц по сравнению с макрочастицами того же вещества наступают, как правило, задолго до проявления квантовых пределов (при размерах $R_c \leq 10 \dots 100 \text{ нм}$). Для разных свойств (механических, электрических, магнитных, химических и др.) этот критический размер может быть разным даже для одного и того же вещества, как и характер их изменений при $R < R_c$.

Миграция атомов вдоль поверхности частиц или структур происходит намного быстрее, чем в объеме (особенно при повышенных температурах). Наличие сил притяжения между ними приводит к самоорганизации и самосборке островковых, столбчатых и других структур на подложке, что часто используют для создания упорядоченных гетероструктур. При достаточно малых размерах и низких температурах могут возникнуть специфические квантовые размерные эффекты, которые

могут быть использованы в электронике, оптике, вычислительной технике. Ярким проявлением подобного поведения являются так называемые квантовые точки, проволоки, кольца и т. п. Ввиду резкой зависимости свойств вещества от числа одинаковых атомов в кластере его иногда аллегорически называют даже третьей координатой таблицы Менделеева.

Будущее наномира не только в том, что будут названия наноэлектроника, или нанохимия, или нанобиология, указывающие на интервал наноразмеров частиц для исследуемого вещества. Важнейшим прикладным значением наносостояния явля-

ется возможность конвергенции неорганического, органического и биологического миров и создание невиданных ранее в природе новых веществ.

Список литературы

1. Шевченко В. Я. Исследования, разработки и инновации в области керамических и стекломатериалов // Стекло и керамика XXI. СПб.: Янус, 2001.
2. Feynmann R. There's plenty of Room at the Bottom // Engineering & Science. Caltech. 1960.
3. Пригожин И. Время, структура и флуктуации // Введение в термодинамику необратимых процессов. Москва—Ижевск. 2001.
4. Головин Ю. И. Введение в нанотехнологию. М.: Машиностроение. 2003.

УДК 539.216

А. В. Ландышев, канд. техн. наук,
А. А. Лаврентьев, д-р физ.-мат. наук,
В. А. Ландышев,
Донской государственный технический
университет

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В СПЛАВАХ $Si_{0,68}Ge_{0,32}$

Методам электронно-зондового анализа исследованы концентрационные неоднородности в твердом растворе состава $Si_{0,68}Ge_{0,32}$ в зависимости от способа его приготовления (кристаллизация из расплава, прессование порошка сплава, зонное выравнивание, механоактивационный синтез). Установлено, что в сплавах формируются участки с двумя преимущественными концентрациями основных компонентов. Определены законы и параметры распределения концентрации компонентов (дисперсия, асимметрия, эксцесс, математическое ожидание) в зависимости от способа приготовления. Наиболее высокой гомогенностью обладают сплавы, полученные механоактивационным методом и зонным выравниванием.

Твердые растворы Si—Ge находят применение в полупроводниковой технике и, в частности, как высокотемпературные термоэлектрические материалы. Недостатком этих сплавов являются трудности, связанные с получением концентрационно-однородных материалов, что не позволяет улучшить их физические свойства. В настоящее время имеется значительное число публикаций, например [1—3], посвященных влиянию различных способов синтеза на концентрационную однородность этих сплавов. Для контроля степени гомогенности

авторы этих работ использовали методы рентгеновской дифракции и электронно-зондового микронализа. Однако результаты анализа неоднородности носят в основном полукачественный характер, так как из-за значительного разброса концентраций на поверхности достаточно трудно установить количественную связь между содержанием компонентов в структурных составляющих и их долей в объеме сплава. В настоящей статье приводятся результаты количественных измерений концентрационных неоднородностей сплавов кремний—германий, приготовленных различными способами, в целях получения дополнительных сведений о механизме их гомогенизации. Для этого использовался количественный электронно-зондовый микронализ материала в большом числе (~200—300) случайных точек на поверхности образца с последующей статистической обработкой результатов измерений, аналогичной применяемой, например, в работе [4].

Для исследования был выбран сплав состава $Si_{0,68}Ge_{0,32}$, легированный фосфором 0,36 ат. % и бором 0,75 ат. %. При изготовлении образцов применялись:

- кристаллизация из расплава с последующим охлаждением вместе с печью;
- прессование при 1000—1100 °C порошков из измельченных слитков с дальнейшим отжигом при температуре 1000 °C;
- зонная перекристаллизация слитков сплавов;
- твердофазный синтез при механоактивации.

Отжиг спрессованных образцов проводился в инертной среде в течение 200 ч; кроме того, часть образцов дополнительно проходили термообработку при температуре 900 °C длительностью 1100 ч. Зонную плавку проводили при скоростях движения расплавленной зоны от 12 до 1 см/ч. Механо-

активационный синтез осуществлялся в планетарно-центробежной мельнице типа АГО-1 по технологии, приводимой в [2], после чего полученный порошок спрессовывали при температуре 1050 °C. Для исследования были выбраны образцы, полученные при шаровой загрузке 35 % и загрузке порошком 1 % со временем активации 10 и 40 мин.

Электронно-зондовые исследования проводились на рентгеновском микроанализаторе MAP-3 и растровом электронном микроскопе BS-300. Количественный анализ выполнялся по основным компонентам с использованием в качестве эталонов чистых германия и кремния по ZAF-методике [5]. Содержание бора и фосфора не измерялось, так как они были равномерно распределены в объеме образцов в количестве, близком к пределу обнаружения этих элементов и оценить неоднородность их распределения не представлялось возможным. Статистическая обработка включала: нахождение закона распределения измеренных концентраций германия и кремния; расчет математического ожидания (M), дисперсии (D), среднего квадратического отклонения (σ), центральных моментов 2-, 3- и 4-го (M_n) порядков с последующим вычислением асимметрии (A_s) и эксцесса (E_k) [4, 6]. Для нахождения закона распределения частичный интервал выбирался равным 4 отн. %, что соответствует удвоенной стандартной ошибке рентгеновского микроанализа. Для контроля в отдельных случаях проводилась рентгенографическая съемка образцов на дифрактометре ДРОН-3.

Как показали исследования, технология изготовления сплава существенно влияет на концентрационную однородность сплава. У большинства образцов, полученных в неравновесных условиях (например, кристаллизацией из расплава), наблюдались участки поверхности размером несколько десятков микрометров, различающиеся содержанием германия и кремния. Топография этих участков достаточно хорошо наблюдалась на изображениях поверхности во вторичных электронах, на которых контраст формировался за счет разности средних атомных номеров анализируемых областей. На рис. 1, *a* представлена поверхность образца, полученного прессованием. По характеру изменения почернения на фотографиях видно, что концентрация компонентов в разных местах сплавов изменяется как плавно, так и скачкообразно. На это указывает и форма записей характеристического рентгеновского излучения $GeK\alpha_1$ вдоль произвольно выбранного направления (рис. 1, *г*), что, вероятно, связано одновременно с процессами зарождения и роста зерен твердой фазы и взаимной диффузией компонентов. У образцов, полученных в условиях, близких к равновесным (зонной плавкой, механоактивационным синтезом),

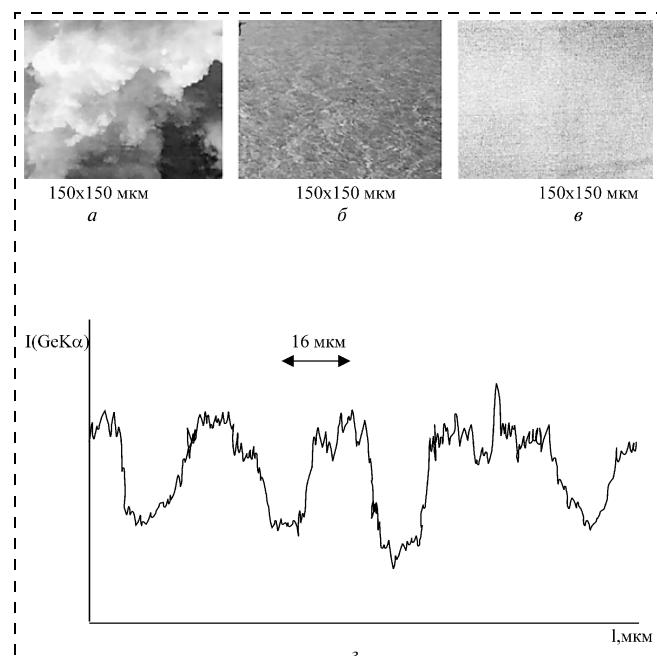


Рис. 1. Неоднородность в распределении компонентов в сплаве $Si_{0,68}Ge_{0,32}$. Изображение поверхности образцов, полученных различными способами, во вторичных электронах: *a* — прессованием; *б* — зонной плавкой при скорости движения зоны кристаллизации 1 см/ч; *в* — механоактивационным синтезом в течение 40 мин; *г* — изменение интенсивности (I) рентгеновского излучения $Ge(K\alpha_1)$ при сканировании поверхности электронным зондом в произвольном направлении

распределение основных компонентов более однородное (рис. 1, *б* и *в*).

Измерением содержания компонентов в случайных точках поверхности сплавов были найдены законы распределения измеренных концентраций для Si и Ge и построены для них соответствующие гистограммы. Наиболее характерные распределения для содержания германия приведены на рис. 2 для образцов состава $Si_{0,68}Ge_{0,32}$, полученных кристаллизацией из расплава (рис. 2, *а*), прессованием порошка (рис. 2, *б*), зонной плавкой при скоростях прохода зоны 1 см/ч (рис. 2, *в*) и механоактивационным синтезом (рис. 2, *г*). Видно, что на гистограммах рис. 2, *а*, *б* четко выделяются два горба (пика), соответствующие зернам с двумя преимущественными концентрациями германия и кремния, в то время как на гистограммах рис. 2, *в*, *г* явных максимумов не наблюдается, что качественно согласуется с результатами работ [1—3].

В табл. 1 представлены наиболее вероятные значения концентрации германия C_{Ge} % и вероятность P обнаружения этих участков с таким содержанием германия в образце или доля таких участков в объеме сплава. Там же указаны разности ΔC между преимущественным содержанием германия в зернах сплавов.

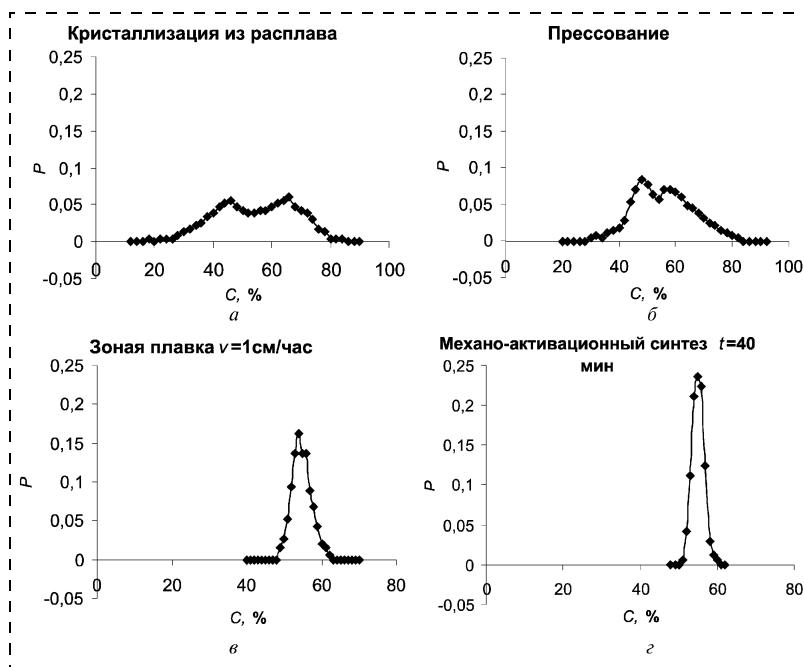


Рис. 2. Гистограммы распределения германия в образцах, полученных:
а — кристаллизацией из расплава; б — прессованием; в — зонной плавкой при скорости движения зоны кристаллизации 1 см/ч; г — механоактивационным синтезом в течение 40 мин; Р — вероятность присутствия в сплаве зерна заданного состава; С — концентрация

Из таблицы видно, что при использовании более равновесных условий синтеза расстояние между максимумами уменьшается с 20 до 2 %, а их значение возрастает от 0,05 до 0,18, при этом отношение их амплитуд пиков меняется незначительно.

Наличие двух пиков качественно можно объяснить неравновесными условиями синтеза, используя диаграмму состояния системы Si—Ge [7] и кон-

центрационные и температурные зависимости коэффициентов диффузии [8]. Так, при кристаллизации расплава исходного состава на начальной стадии образуются зародыши твердой фазы, состав которых соответствует линии солидуса. Этому способствует то, что с понижением температуры в твердой фазе растет содержание легкоплавкого германия, и это компенсирует уменьшение коэффициента диффузии германия при охлаждении расплава. В результате растут зерна, состав которых приближается к первому пику (см. табл. 1). В интервале 45–70 ат. % Ge зависимость коэффициента диффузии от концентрации более слабая, поэтому снижение температуры приводит к уменьшению скорости диффузии. В результате состав жидкой фазы расплава отклоняется от равновесного в сторону более богатой германием, и впоследствии идет кристаллизация расплава с более низким содержанием кремния, что соответствует второму пику (см. табл. 1). Приблизительное равенство амплитуд гистограмм для большинства исследованных сплавов, вероятно, связано с близостью объемных долей твердой и жидких фаз, соответственно обедненных и обогащенных германием относительно равновесных значений. В целом негомогенность сплавов Si—Ge связывается с низкой скоростью диффузии в твердой фазе между кристаллитами различного состава.

Из данных, приведенных в таблице, видно сближение максимумов гистограмм при применении прессования, направленной кристаллизации и механоактивационного синтеза. Это происходит в результате того, что при направленной кристаллизации с уменьшением скорости движения расплавленной зоны концентрация компонентов в жидкой и твердой фазах приближается к равновесному составу, соответствующему его значениям на линиях солидуса и ликвидуса диаграммы состояния. При прессовании порошка, полученного измельчением затвердевшего расплава, и при механоактивационном синтезе вклад в гомогенизацию, очевидно, вносит диффузия по границам зерен из-за развития их поверхности, что согласуется с выводами работы [3]. В то же время отжиг не оказывает существенного влияния на однородность сплава, по-видимому, из-за невысоких скоростей объемной диффузии $\sim 2,1 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2/\text{с}$ при температуре 900 °C.

Как следует из данных работы [3], механоактивационный синтез сплава Si—Ge происходит при достижении зернами размера ~ 50 –100 нм, в то время как область генерации рентгеновского излу-

Таблица 1

№	Способ приготовления и термообработка	Пик 1		Пик 2		$\Delta C, \%$
		$C_{\text{Ge}}, \%$	P	$C_{\text{Ge}}, \%$	P	
1	Кристаллизация из расплава	46	0,055	66	0,06	20
2	Прессование	48	0,085	58	0,074	10
3	Прессование с отжигом 900 °C	49	0,09	58	0,081	9
4	Зонная кристаллизация со скоростью: $v = 12 \text{ см}/\text{ч}$ $v = 3 \text{ см}/\text{ч}$ $v = 1 \text{ см}/\text{ч}$	50 54 54	0,11 0,16 0,16	58 58 56	0,09 0,15 0,14	8 4 2
5	Механоактивационный синтез. Время активации: 10 мин 40 мин	54	0,18	56	0,16	2
		Пик один, содержание германия 55 %				

чения составляет несколько кубических микрометров, т. е. значительно превышает размеры отдельных зерен. Это указывает на то, что метод электронно-зондового анализа не должен выявлять неоднородности подобных размеров. Поэтому наличие двух пиков на гистограмме для образца, полученного при синтезе в течение 10 мин, говорит о малом времени проведения процесса (см. строку 5 табл. 1). Так как размер зерен исходных порошков кремния и германия приблизительно составлял 100 мкм, то можно предположить, что измельчение зерен порошка не достигло необходимого уровня. Увеличение продолжительности процесса до 40 мин приводит к получению гомогенного материала в пределах разрешения локального микроанализа. В табл. 2 приводятся результаты статистической обработки результатов анализа.

Там же приводятся соответствующие значения параметров распределения для аппаратной функции, которая была получена путем измерения концентрации германия в 150 точках однородного сплава GeTe с весовым содержанием Ge — 36,3 % и Te — 63,7 %.

Из данных, приведенных в таблице, видно, что математическое ожидание в пределах ошибки измерений согласуется с введенным количеством германия. Среднее квадратическое отклонение, дисперсия, эксцесс и асимметрия существенно отличаются от нулевых значений и соответствующих значений аппаратной функции, что говорит об отклонении экспериментальных распределений компонентов сплавов от нормального закона и влиянии на них физических и технологических факторов. Начиная от кристаллизации расплава и заканчивая механоактивационным синтезом, отчетливо прослеживается уменьшения дисперсии, среднего квадратического отклонения (от 13,4 до 1,56 %) и эксцесса по модулю (от 0,725 до 0,14). Это качественно согласуется со смещением пиков на гистограммах (см. табл. 1). При этом при зонном выравнивании со скоростью 1 см/ч и после механоактивационного синтеза параметры распределения содержания германия в зернах сплавов получаются достаточно близкими и приближаются к соответствующим значениям аппаратной функции.

Результаты электронно-зондовых исследований качественно согласуются с результатами рентгеноструктурного анализа. Так, на рентгенограммах наблюдается слияние дифракционных линий и уменьшение ширины слившихся пиков, соответствующих кристаллографическим плоскостям (220), при гомогенизации материала.

Однако у образцов, полученных механоактивационным способом, ширина слившегося пика оказывается завышенной по сравнению с образцами, полученными направленной кристаллизацией и

Таблица 2

№	Способ приготовления и термообработка	$M, \text{вес \%}$	D	σ	E_k	A_s
1	Кристаллизация из расплава	54,4	180	13,4	-0,725	-0,174
2	Прессование	55,7	103	10,2	-0,430	0,180
3	Прессование с последующим отжигом при 900 °C	54,5	100	10,0	-0,440	0,170
4	Зонная кристаллизация со скоростью: $v = 12 \text{ см/ч}$ $v = 3 \text{ см/ч}$ $v = 1 \text{ см/ч}$	55,6 55,7 54,7	54,2 21,8 6,67	7,36 4,68 2,5	-0,380 -0,350 -0,188	0,237 0,212 0,230
5	Механоактивационный синтез. Время активации: 10 мин 40 мин	55,3 55,6	6,02 2,44	2,45 1,56	-0,250 -0,140	0,230 0,022
6	Аппаратная функция для сплава GeTe	35,8	0,706	0,84	-0,06	0,020

соответствует разбросу в 5—7 абс. % по основным компонентам. Такое расхождение, очевидно, обусловлено, с одной стороны, малым (меньше пространственного разрешения электронно-зондового анализа) размером зерен, образующихся при механоактивации, с другой стороны — насыщением зерен сплава структурными дефектами, что в алмазоподобных полупроводниках может приводить к увеличению параметров кристаллической решетки и расширению дифракционных максимумов. Очевидно, требуются дальнейшие экспериментальные исследования факторов, влияющих на ширину линий дифракции в сплавах, полученных механоактивационным синтезом.

Отрицательное значение эксцесса говорит о том, что разброс концентрации германия больше, чем если бы действовали только случайные факторы. Асимметрия во всех рассмотренных случаях, кроме сплавов, полученных механоактивационным способом в течение 40 мин и кристаллизацией из расплава, меняется незначительно и имеет положительное значение. Исключение составляют образцы, полученные кристаллизацией из расплава. Это можно объяснить тем, что при неравновесных условиях охлаждения кристаллизуется несколько большее число зерен из жидкости исходного состава. При условиях, приближающихся к равновесным, за счет взаимной диффузии происходит насыщение германием зерен, богатых кремнием, что приводит к сближению пиков на гистограммах и появлению у них положительной асимметрии. Подобная асимметрия прослеживается и на рентгенограммах у авторов [1].

Заключение

Установлено, что в процессе синтеза сплава системы кремний—германий состава $Si_{0,68}Ge_{0,32}$ формируются участки размером несколько десятков микрометров с двумя преимущественными концентрациями основных компонентов. Применение технологий, обеспечивающих более равновесные условия синтеза (зонное выравнивание) и увеличивающих скорость диффузии (прессование, механоактивационный синтез), позволяет повысить концентрационную однородность сплава. Наиболее высокой гомогенностью обладают сплавы, полученные механоактивационным методом и зонным выравниванием.

На основании результатов электронно-зондового анализа в большом числе случайных точек поверхности сплавов получены законы распределения содержания основных компонентов, параметры которых чувствительны к способу приготовления сплава. Их отклонение от нормального закона обусловлено неравновесными условиями кристаллизации и низкой скоростью диффузии основных компонентов.

Список литературы

1. Швангирадзе Р. Р., Криворучко С. П., Шамба Н. А. Особенности и последствия негомогенности высокотемпературного термоэлектрического сплава кремний—германий // Доклады VI Межгосударственного семинара "Термоэлектрики и их применение", Санкт-Петербург, 1999. С. 113–116.
2. Гогишвили О. Ш., Залдастанишивили М. И., Криворучко С. П., Сабо Е. П., Швангирадзе Р. Р. Кремний-германиевый термоэлектрический материал, полученный механоактивационным синтезом // Доклады VII Межгосударственного семинара "Термоэлектрики и их применение", Санкт-Петербург, 2000. С. 166–171.
3. Schilz J., Riffel M., Pixius K., Meyer H. J. Synthesis of thermoelectric materials by mechanical alloying in planetary ball mills // Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Institut für Werkstoff-Forschung, Linder Hohe, D-51147, Koln. E-mail, juergen.schilz@dir.de
4. Ландышев А. В., Селиверстенко С. И., Швангирадзе Р. Р. Влияние фазового состава сплавов на параметры гистограмм результатов рентгеноспектрального микроанализа // Журнал аналитической химии. 1985. Т. 40. Вып. 2. С. 258–262.
5. Физические основы рентгеноспектрального, локального анализа: Пер. с англ. / Под ред. И. Б. Боровского. М.: Наука, 1973. 269 с.
6. Гмурман В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высшая школа, 2003.
7. Хансен И., Андерко. Структура двойных сплавов. Т. 2. 1962. С. 822.
8. Mc Vay G. L., DuCharme A. R. Physical Review B // Solid State. 1974. V. 9. P. 627–631.

УДК 621.3:763:778.19

Д. В. Щеглов, Е. Е. Родякина, А. В. Латышев, д-р физ.-мат. наук, А. Л. Асеев, чл.-корр. РАН,
Институт физики полупроводников СО РАН, г. Новосибирск,
Новосибирский государственный университет

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ НАНОЛИТОГРАФИИ ЗОНДОМ АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА

Разработана принципиально новая технология наноструктурирования полупроводниковых систем (TINE&MEMO), основанная на одновременном локальном анодном окислении и механической модификации приповерхностного слоя проводящим зондом атомно-силового микроскопа при приложении повышенного потенциала. Данная технология позволила освоить принципиально новый масштаб размеров в изготовлении наноструктур (10–100 нм). Возможности разработанного метода нанолитографии демонстрируются на примере наномодификации пленок титана, арсенида галлия и кремния при формировании наноструктурных объектов.

Введение

Современный информационно-технический прогресс в глобальном смысле определяется так называемой информационной емкостью (т. е. количеством информации, приходящимся на единицу объема вещества), которая служит критерием уровня научно-

технического развития цивилизации в целом. Это обуславливает перспективное направление развития физики низкоразмерных структур, в первую очередь полупроводниковых и магнитных, для обеспечения темпов развития информационных технологий. Следует отметить, что с уменьшением геометрического размера ра-

бочего элемента не только повышается число элементов, приходящееся на единицу площади кристалла, но и проявляются принципиально новые свойства нанообъектов, которые описываются законами квантовой физики [1]. Прогресс нанофизики определяется главным образом развитием методов формирования наноструктурных объектов, а также исследованием объектов современным арсеналом аналитической и структурной диагностики с атомным разрешением.

В настоящее время существует ограниченное число методов, позволяющих формировать низкоразмерные структуры, среди которых следует выделить *методы самоорганизующейся атомной сборки и прецизионной литографии*. К первым методам относятся многочисленные технологии молекулярно-лучевой эпитаксии, которые позволяют контролировать создавать принципиально новые, не существующие в природе,

материалы с заданными характеристиками, включая двумерные, одномерные и нульмерные структуры [2]. Однако одной из ключевых проблем в современной нанофизике остается разработка методов *наноструктурирования*, основанных на применении литографии и селективного плазменного травления.

На современном этапе оптическая литография позволяет структурировать полупроводниковые структуры с характерным размером в 90 нм. Самые радужные перспективы развития оптической литографии, которые связаны с переходом в более глубокую ультрафиолетовую область или с использованием иммерсионных методов облучения (в воде), смогут улучшить разрешение еще в 2 раза. Электронная литография на основе масок также пока не позволяет добиться значительного улучшения качества получаемых структур с размерами менее 50 нм. При этом, как и ионная литография, она вносит существенные изменения в электрофизические свойства поверхности, которые на таких малых размерах могут оказаться критическими. Существование фундаментальных ограничений на предельное разрешение методов оптической и электронной литографии обуславливает поиск принципиально новых методов нанолитографии. К числу перспективных методов, позволяющих проведение литографии в нанометровом диапазоне, относятся методы нанолитографии на основе сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) [3–5].

В данной статье приводятся результаты исследования физических закономерностей локального анодного окисления поверхности титана, арсенида галлия и кремния проводящим зондом атомно-силового микроскопа. Особое внимание уделено особенностям оптимизации метода для создания наноразмер-

ных структур, демонстрирующих особенности переноса заряда в таких структурах.

Адаптирование СЗМ для нанолитографии

Экспериментальные исследования проводились с помощью СЗМ "Solver P-47H" (NT-MDT, г.Москва, Зеленоград), который был адаптирован нами для проведения нанолитографических работ. Атомно-силовой микроскоп (АСМ) так же, как и сканирующий туннельный микроскоп (СТМ), оперирует острой иглой в качестве зонда для идентификации свойств поверхности, но в отличие от СТМ в качестве сигнала обратной связи использует силу взаимодействия иглы с поверхностью, а не протекающий туннельный ток. Вследствие этого АСМ позволяет диагностировать в том числе и объекты, не обладающие проводящими свойствами [6]. Для регистрации сверхмалых сил (10^{-9} Н), необходимых для этой методики, АСМ-игла располагается на конце кантileвера — микроразмерной балки (~200 мкм длиной) с малой константой жесткости (~1 Н/м). В контактном режиме работы АСМ во время сканирования зонд и

поверхность находятся в непосредственном соприкосновении и система обратной связи приближает или отодвигает зонд от поверхности для сохранения постоянного изгиба балки, т. е. силы взаимодействия зонд—поверхность. В большинстве современных АСМ отклонение балки от заданного положения измеряется с помощью лазерного луча. Во время сканирования лазерный луч направляется на обратную сторону балки и после отражения фиксируется многосекционным фотодиодом (рис. 1).

Для устойчивой визуализации изображений поверхности с субангстрёмным разрешением, когда необходимо регистрировать отклонения балки кантileвера на величину, характеризующуюся ангстрёмным расстоянием, были приняты дополнительные меры по защите микромеханической и электронных частей микроскопа от внешних механических и электромагнитных воздействий. В частности, АСМ вместе с управляющим блоком были установлены в закрытую металлическую экранирующую камеру, дополнительно нагруженную грузом большого веса, расположенную на резиновых опорах и

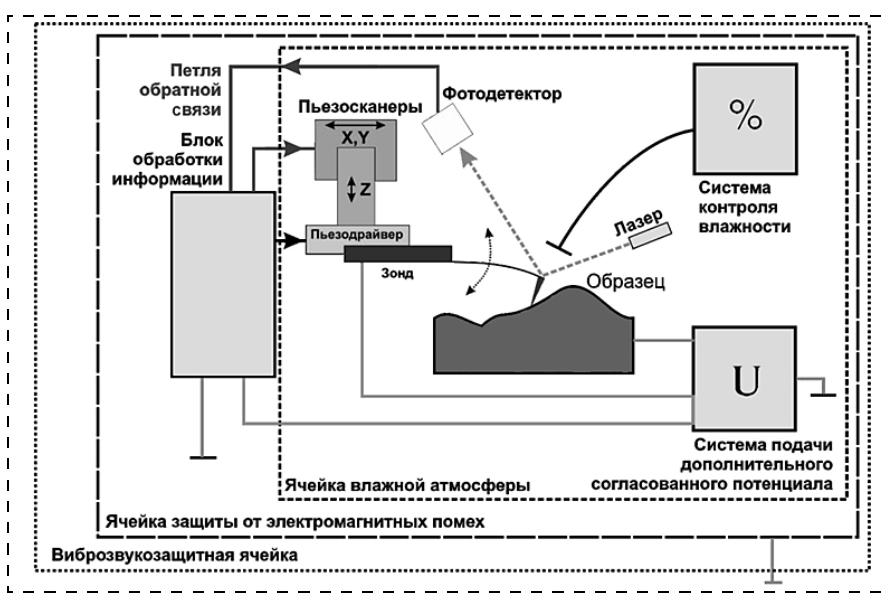


Рис. 1. Общая схема модернизированной установки для нанолитографии на основе сканирующего атомно-силового микроскопа "Solver P-47H"

надежно соединенную с заземляющими шинами. Камера позволяла контролировать изменять влажность воздуха, которая непрерывно диагностировалась, так же как и температура воздуха, при анализе топологии и литографических работах. Для проведения нанолитографии посредством электростимулированного наноокисления иглой кантилевера была разработана и адаптирована в микроскоп согласованная система подачи импульсного напряжения с амплитудой до 50 В между проводящим кантилевером и образцом (рис. 1).

На рис. 2 приведено типичное АСМ-изображение поверхности кремния (111) после термической обработки в сверхвысоковакуумной камере. Изображение получено в полуконтактной моде кремниевым кантилевером с резонансной частотой ≈ 150 кГц. Можно видеть систему плоских террас со средней шероховатостью менее 0,1 нм, разделенных моноатомными ступенями высотой 0,31 нм. Фазовая картина, представленная рис. 2, б, отчетливо показывает сбой фазы при прохождении моноатомной ступени осцилирующей иглой кантилевера при сканировании. Таким образом, фазовая картина дополняет топологическое АСМ-изображение, позволяя в отдельных случаях выявлять особенности рельефа или состава поверх-

ности, не зарегистрированные на топографических АСМ-изображениях поверхности полупроводников и металлов с предельным вертикальным разрешением [7].

Препарирование подложек для нанолитографии

Типичное значение высоты линии анодного окисления в методе СЗМ-литографии составляет несколько нанометров, а это накладывает ограничение на исходную шероховатость поверхности, которая должна быть существенно меньше высоты окисленной пленки [8]. Анализ литературных данных показал, что средняя шероховатость поверхности, на которой проводились экспериментальные исследования по наномодификации методами СЗМ, составляла не менее 0,3 нм, что приводило к значительной погрешности измеряемых величин и затрудняло однозначную интерпретацию полученных результатов (см., например, [9–14]). Получение гладких поверхностей с шероховатостью менее высоты одного монослоя представляет самостоятельный научный и технологический интерес и не всегда является практически возможным.

Подготовка гладких поверхностей кремния проводилась в сверхвысоковакуумной камере уникального отражательного электронного микроскопа, разработанного в Институте физики

полупроводников СО РАН на базе традиционного просвечивающего электронного микроскопа (100 кэВ) и не имеющего аналогов в Российской Федерации. Достоинством этого микроскопа является возможность визуализации отдельной моноатомной ступени высотой в 0,31 нм на поверхности кремния (111) при температуре выше 1000 °C [15]. После стандартной химической обработки атомарно-чистая поверхность кремния получалась высокотемпературным отжигом в сверхвысоковакуумной камере электронного микроскопа.

Кремниевый образец в виде прямоугольника нагревался прямым пропусканием электрического тока. Большие плоские террасы на поверхности кремния (111) образовывались в результате кинетической нестабильности при сублимации системы регулярных моноатомных ступеней, инициированной электромиграцией адсорбированных на поверхности атомов [16]. Прямая визуализация структурных процессов позволила оптимизировать получение больших сингулярных (без моноатомных ступеней) участков на поверхности кремния с характерными размерами в несколько микрометров. Средняя шероховатость полученных террас была оценена на основании статистического распределения точек АСМ-изображений по высотам и составила менее 0,06 нм.

На рис. 3 (см. третью сторону обложки) показаны АСМ-изображения (1×1 мкм) топографии поверхности кремния (а) и арсенида галлия (б). Средняя шероховатость поверхностей кремния, арсенида галлия, измеренная как полуширина соответствующего колоколообразного распределения точек изображения на полувысоте, составляет 0,058 и 0,129 нм соответственно. Таким образом, погрешность измерения рельефа, например для кремния, составит не более 0,1 нм.

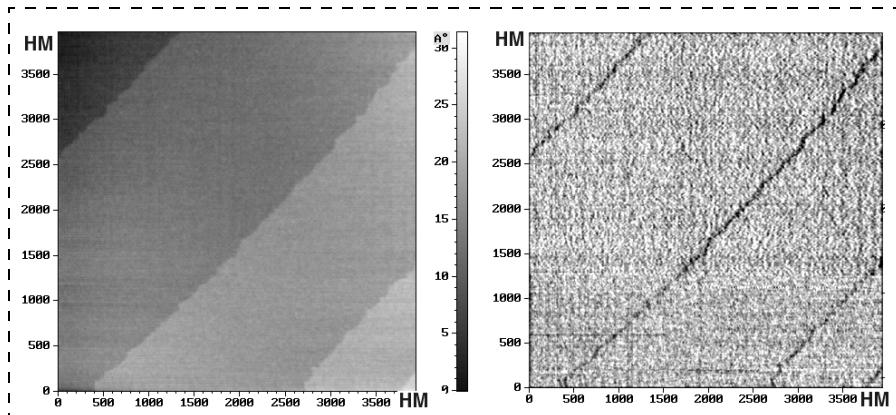


Рис. 2. Топографическое (слева) и фазовое (справа) АСМ-изображения ступенчатой поверхности Si(111)

Титановые пленки с толщинами в несколько нанометров на поверхности кремния (111) с моноатомными ступенями формировались при осаждении титана из электронно-лучевого испарителя в сверхвысоковакуумной камере при комнатной температуре. Для измерения толщины пленки осаждение титана проводилось на поверхность подложки через металлическую маску в виде сетки. ACM-изображение поверхности кремния (111), частично покрытой титановой пленкой толщиной в 4 нм, показано на рис. 4, *a* (см. третью сторону обложки). Граница поверхностей кремния (темный контраст) и титана (светлый контраст) приблизительно проходит по диагонали ACM-изображения. Видно, что на поверхности титановой пленки наблюдается система изогнутых линий со средним расстоянием между ними ~2 мкм. Спектр высот для такой поверхности, приведенный на рис. 4, *b* (см. третью сторону обложки), позволяет прецизионно измерить высоту между плоскими соседними участками (расстояние между пиками на спектре). Эта высота составляет $0,3 \pm 0,05$ нм, что близко к межплоскостному расстоянию для поверхности кремния (111) — 0,314 нм. Сравнение рельефа поверхности титановой пленки и исходной кремниевой поверхности позволяет сделать вывод, что титановая пленка, осажденная на ступенчатую кремниевую поверхность, реплицирует морфологию поверхности кремния, включая моноатомные ступени. Ширина пиков на полуысоте позволяет характеризовать среднюю шероховатость плоского участка, равную 0,1 нм.

Эксперименты по локальному анодному окислению на гетероструктурах на основе GaAs проводились на пленках толщиной от 1 до 100 нм, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Для выглажива-

ния поверхности пленок использовались дополнительные приемы [17].

Физико-химические аспекты ACM-литографии

Одним из наиболее распространенных методов нанолитографии с помощью зонда СЗМ является локальное анодное окисление поверхности. В этом процессе зонд ACM, находящийся под отрицательным электрическим потенциалом (чаще всего ~10 В) во влажной атмосфере, при приближении к заземленной поверхности полупроводника или металла вызывает его локальное окисление. Проводящий зонд ACM (кантителевер) представляется более предпочтительным для этого метода модификации, чем игла СТМ, так как одновременно может еще и диагностировать поверхность. Несмотря на то, что первые эксперименты по локальному анодному окислению были проведены именно СТМ-иглой [18, 19], находящейся под положительным потенциалом по отношению к модифицируемой поверхности, все же наибольшее распространение получил метод, в котором используется отрицательный потенциал на ACM-зонде. Высокое электростатическое поле (до 10^8 В/см) на острие ACM-зонда производит во влажной атмосфере кислородсодержащие анионы, которые образуют соединение с поверхностными атомами металла или полупроводника [20–22]. Интенсивность локального анодного окисления поверхности кристаллов металлов и полупроводников существенным образом зависит от таких параметров, как время окисления, влажность воздуха, вид окисляющего материала и анод-катодная разность потенциалов.

В настоящее время не существует единой модели, которая бы описывала полученные зависимости высоты анодного оксида от времени его роста. Имеющиеся

различия в экспериментальных результатах, полученные в различных группах, не позволяют прогнозировать интенсивность локального анодного окисления поверхности кристаллов даже для достаточно хорошо изученных материалов, таких как титан и арсенид галлия.

Нами проведено детальное изучение временных зависимостей интенсивности локального анодного окисления поверхности кристаллов, так как это позволяет прояснить основные механизмы локального анодного окисления ACM-зондом. На поверхностях пленок титана были созданы окисленные участки посредством локального анодного окисления зондом ACM приложением импульсов потенциала в 10 В с длительностью от 10 до 1000 мс. Окисленные участки могли быть визуализированы методом ACM за счет разбухания окисленных линий, что приводило к появлению рельефа высотой в несколько нанометров по сравнению с исходной поверхностью пленки [18]. Разбухание пленки связано с окислительным процессом перехода кристаллической структуры титановой пленки в аморфное состояние с более рыхлой структурой по сравнению с кристаллическим титаном. На рис. 5 представлены ACM-изображения оксидных линий на поверхности титановой пленки, которые формировались при изменении амплитуды (*a*) и длительности приложения анодного потенциала (*b*), инициирующего локальное анодное окисление. Характерные профили рельефа вдоль линий *a*—*b* и *c*—*d* показаны в нижних частях рисунков соответственно.

Аналогичные эксперименты по анодному окислению проводились на поверхности кремния (111) и арсенида галлия (001). Стабильное локальное анодное окисление поверхности кремния под зондом ACM наблюдалось в широких интервалах прилагае-

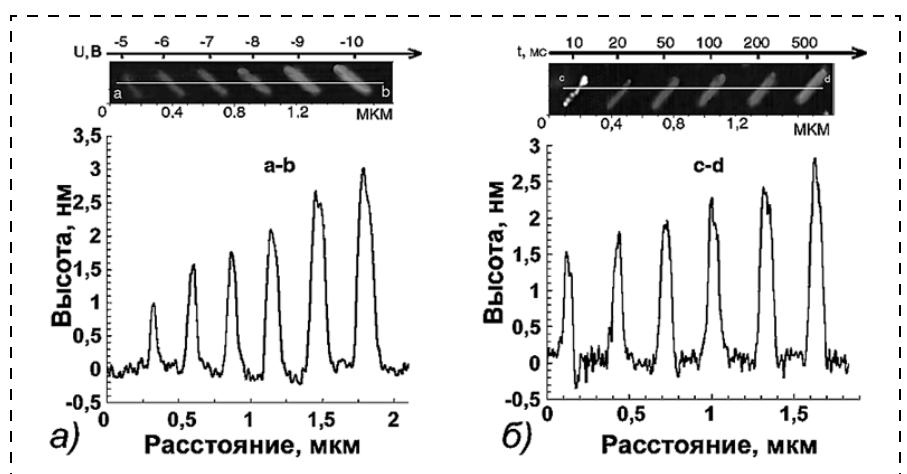


Рис. 5. Топографические ACM-изображения и кривые профилей поверхности титановой пленки на ступенчатой поверхности кремния с массивом из линий локального анодного окисления, полученных при изменении анодного потенциала (а) и времени приложения этого потенциала (б)

мого к зонду напряжения и времени приложения этого напряжения. Зависимости высоты оксидных линий для титана от времени окисления показаны на рис. 6. Было обнаружено, что процесс окисления на поверхности титана более интенсивный, чем на поверхностях кремния и арсенида галлия. Результаты всех измерений находятся в пределах погрешности в соответствии с первой моделью окисления Мотта [23] для $t \gg t_{trans}$:

$$h \propto h_c \ln(t/t_c),$$

где t_{trans} — некоторое время для разделения моделей; h — высота оксидной линии; h_c — длина, ко-

торая характеризуется энергией электрона; t — время окисления; t_c — пороговое время для окисления.

В ряде работ утверждается, что высота оксида находится в прямо пропорциональной зависимости от приложенного окисляющего потенциала, тогда как варианты зависимости высоты оксида от времени приложения импульса окисляющего напряжения предлагаются разные: $h \propto \log(t)$ [24—26, 38] или $h \propto t^{1/n}$ [27—31].

В предположении логарифмической зависимости высоты оксида от времени следует ожидать экспоненциальную зависимость интенсивности окисления от высоты [32]:

$$\frac{dh}{dt} \propto \exp\left(-\frac{h}{h_c}\right),$$

где $h_c = 1$ нм — некоторая характеристическая длина. Основываясь же на теории окисления Мотта—Кабреры [33], можно предсказать обратнологарифмическую зависимость [34]:

$$h \propto -\frac{1}{\ln t} \quad \text{и} \quad \frac{dh}{dt} \propto \exp\left(\frac{h_c}{h}\right),$$

где $h_c = 10$ нм.

Для выяснения механизма локального анодного окисления был проведен анализ полученных дан-

ных, учитывающий роль пространственного заряда в процессе локального анодного окисления. При использовании теории Фромхольда [35, 36] логарифмическая модель Мотта дополняется членами, отвечающими за пространственный заряд на границах раздела. Следствием этого является стремление значения h_c к 10 нм и энергии активации анодного окисления к 100 мэВ. Было отмечено различие в толщине оксида при приложении постоянного и импульсного анодного потенциала [37]. Эти данные согласуются в результатах многих рабочих групп.

Таким образом, полученная логарифмическая зависимость высоты линий окисления от длительности приложения на зонд ACM анодного потенциала позволяет сделать вывод, что процесс окисления регулируется обменом электронами. Минимальные времена (пороговое время) приложения на зонд потенциала 10 В, при которых регистрировалось локальное анодное окисление, для титана, арсенида галлия и кремния составили соответственно $1,4 \cdot 10^{-4}$, $6,5 \cdot 10^{-4}$ и $14,5 \cdot 10^{-4}$ с. Пороговая толщина оксида для титана, арсенида галлия и кремния составила $h_c \sim 0,4$ нм. Высота металлоксидного барьера для просачивания электрона может быть вычислена из формулы пороговой толщины оксида $h_c = \hbar(8m\chi_0)^{-1/2}$, предложенной Моттом. Таким образом, для титана, арсенида галлия и кремния эта величина составила ~ 60 мэВ. Эти результаты несколько меньше параметров, полученных в других работах [32, 34, 37].

Особенности прокисления ультратонких титановых пленок толщиной 4 нм были проанализированы в широком интервале длительности приложения окисляющего напряжения. Зависимость высоты оксидных линий от времени окисления при напряжении на зонде 10 В также представлена на рис. 6. Под высотой

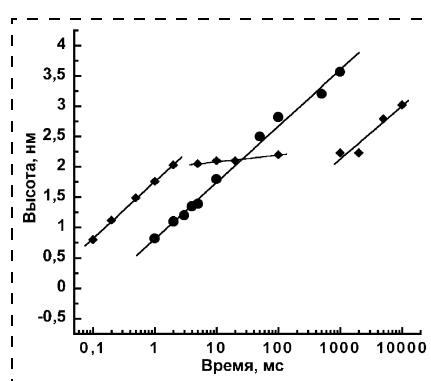


Рис. 6. Зависимости высоты линий локального анодного окисления от времени приложения окисляющего напряжения на зонд ACM для пленки титана на кремний; толщина пленки 4 нм — ◆ и 10 нм (●)

оксидных линий понимается высота линий над немодифицированной поверхностью. Видно, что для времени окисления вплоть до 5 мс, наблюдается логарифмический характер роста высоты оксида, что, как показано выше, согласуется с первой моделью окисления Мотта [23]. Наблюдаемое насыщение высоты оксида титановой пленки с увеличением времени приложения потенциала в интервале от 5 до 10^3 мс интерпретируется как полное прокисление титановой пленки толщиной 4 нм под зондом АСМ. Увеличение времени окисления более 10^3 мс приводило к дальнейшему увеличению высоты оксидной линии. Это связано, по-видимому, с начальной стадией процесса окисления кремниевой поверхности сквозь ~6-нанометровую пленку титанового оксида и естественный оксид кремния под ней.

Ранее было показано [38], что интенсивность окисления зависит от влажности атмосферы, но механизм влияния влажности не был изучен в деталях. В наших экспериментах также было обнаружено, что интенсивность окисления поверхности металлов и полупроводников в атмосферных условиях критически уменьшается при падении относительной влажности воздуха до 20–25 %, что согласуется с результатами других работ. Это указывает на определяющую роль в процессе окисления тока OH^- -ионов к поверхности из области непосредственно вокруг острия АСМ-зонда, где электростатическое поле является максимальным [39].

Локальное анодное окисление проводящей иглой АСМ исследовалось на поверхностях кремния и арсенида галлия [40], на tantalовой [41], алюминиевой [42], титановой [43] пленках, а также на ПММА-системе [44] и на поверхности кремния в атмосфере аммония [45]. Показана возможность локального окисления по-

верхности кремния с использованием проводящей иглы кантилевера в бесконтактном режиме АСМ [44]. К сожалению, метод модификации поверхности с помощью индуцированного иглой стандартного АСМ локального анодного окисления не позволяет получить глубину литографического воздействия больше, чем несколько нанометров. Это накладывает серьезные ограничения на более широкое использование метода дляnanoструктурирования объектов. Таким образом, следует отметить, что поскольку интенсивность локального анодного окисления поверхности кристаллов металлов и полупроводников существенным образом зависит от таких параметров, как время окисления, влажность воздуха, вид окисляемого материала и анод-катодная разность потенциалов, то, следовательно, необходимо проведение дополнительных исследований для оптимизации этих параметров для увеличения глубины модификации приповерхностного слоя.

Метод одновременной механической модификации и анодного окисления: TINE&MEMO (Tip Induced NanoElectro&MEchanical MODification)

Второй распространенный метод модификации поверхности посредством зонда АСМ — непосредственное механическое воздействие иглы на поверхность — "прямое процарапывание" [47]. Однако для относительно мягкого материала GaAs такой метод позволяет получать глубины лишь до 2 нм, после чего начинает наблюдаться критическая деконволюция иглы зонда АСМ [48]. Таким образом, ни анодное окисление, ни "процарапывание" не позволяют достичь характерной глубины модификации поверхности более десяти нанометров.

Исследование кинетики роста и структуры оксидных линий, по-

лученных АСМ-литографией, установило три лимитирующих фактора процесса наноокисления:

- существование естественного оксида на поверхности, который существенно ограничивает взаимную диффузию ионов, определяющую интенсивность окисления [14];
- возникновение механических напряжений в объеме полупроводника при разрастании оксида, обусловленных разными молярными объемами самого полупроводника и его оксида [38];
- малая разность потенциалов (≤ 10 В), которая традиционно используется при анодном окислении, так как при повышении напряжения окисление проходит крайне неустойчиво и, что главное, отсутствует воспроизводимость результатов модификации.

Для уменьшения влияния этих лимитирующих факторов на основе детального анализа физико-химических аспектов АСМ-литографии нами был предложен метод одновременной механической модификации и анодного окисления поверхности при повышенных потенциалах: TINE&MEMO (Tip Induced NanoElectro&MEchanical MODification). Другими словами, реализован метод одновременного приложения на иглу как механического, так и электрического напряжений. "Прямое процарапывание" поверхности иглой АСМ во время роста анодного оксида, с одной стороны, снимет естественный оксид с поверхности полупроводника, а с другой стороны, позволит снять механические напряжения в объеме анодного оксида.

На рис. 7, а (см. четвертую сторону обложки) представлено АСМ-изображение поверхности GaAs с линиями локального анодного окисления при одинаковом анодном потенциале (10 В), но при разных прижимных силах иглы к поверхности. Видно, что

максимальная высота линии локального анодного окисления в 10 нм достигается в режиме одновременного царапания поверхности (линия В). В этом режиме игла прижимается к поверхности с такой силой, что и без приложения инициирующего потенциала на поверхности создаются канавки глубиной 1–2 нм, разрушая при этом слой естественного оксида. Вторая по высоте линия С была получена также при повышенной прижимной силе, однако этой силы не хватило бы для механической модификации поверхности в отсутствие анодного потенциала. Таким образом, линия А, полученная в стандартном режиме локального анодного окисления, оказалась в 3,4 и 1,6 раза меньше по высоте, чем линии В и С соответственно (рис. 7, б, см. четвертую сторону обложки). Очевидно, что недостатком этой техники можно считать достаточно большое отношение ширина/высота линии (~20). Однако, как показали эксперименты, такой способ модификации гарантированно разрезает приповерхностный слой до 30 нм в глубину.

Рис. 8, а (см. четвертую сторону обложки) представляет топографическое изображение точек локального анодного окисления поверхности иглой АСМ при приложении к системе игла—поверхность дополнительного анодного потенциала (от 7 до 40 В). Как видно из рис. 8, б (см. четвертую сторону обложки), высота линии локального анодного окисления составила более 30 нм, причем для этих линий наблюдается хорошее отношение ширина/высота (~3), что делает его перспективным для создания наноструктур.

На основе детального анализа зависимости высоты линий локального окисления от времени приложения окисляющего напряжения к зонду были оптимизированы параметры для создания на поверхности металлов и полупроводников наноразмер-

ных структур [49, 50]. Возможности нанолитографии зондом АСМ проиллюстрируем на примере создания электронного интерферометра посредством разрезания проводящего слоя гетероэпитаксиальной системы на основе гетероструктуры AlGaAs/GaAs. На рис. 9, а (см. четвертую сторону обложки) показано топографическое изображение поверхности AlGaAs-гетероструктуры с действующимnanoструктурным объектом, полученного АСМ-литографией с радиусом внутреннего канала около 100 нм. Анализ профиля рельефа вдоль линии АВ показывает, что диэлектрические оксидные линии на поверхности имеют толщину не более 10 нм (рис. 9, б, см. четвертую сторону обложки). Период осцилляций Ааронова—Бома ($\Delta V = 0,16$ Тл), зарегистрированные в данном интерферометре, соответствует эффективному радиусу в 90 нм. Столь малые размеры дали возможность повысить рабочую температуру интерферометра почти на порядок (до 16 К) [51].

Заключение

Изучены основные физические закономерности локального анодного окисления поверхностей титана, кремния и арсенида галлия в атмосферных условиях под зондом атомно-силового микроскопа. Обнаружено существование критического значения относительной влажности воздуха (25 %), ниже которого не происходит анодного окисления даже для больших времен приложения окисляющего потенциала в 10 В. Показано насыщение роста оксидной линии при прокислении всей толщины тонкой титановой пленки. Высота оксидных линий на поверхности изучалась в зависимости от времени приложения на зонд атомно-силового микроскопа окисляющего напряжения, от его значения, а также от вида окисляемого материала. Приведены оценки энергии для проса-

чивания электронов через границу раздела для титана, кремния и арсенида галлия. Особенности локального анодного окисления рассматривались в рамках современных теорий анодного окисления. Показаны возможности локального анодного окисления при повышенных механических и электрических напряжениях. Представлен образец действующего наноструктурированного полупроводникового прибора в виде электронного интерферометра нанометрового диапазона.

Авторы выражают благодарность Д. Х. Квону, В. А. Ткаченко, Е. Б. Ольшанецкому, А. М. Медведеву и В. Л. Альперовичу за помощь в проведении экспериментов.

А. В. Латышев выражает благодарность за поддержку "Фонду содействия отечественной науке". Эта работа была выполнена при частичной поддержке РFFИ, программ Минпромнауки, Университеты России (01.01.030) и межвузовской программы интеграции (И765/785).

Список литературы

1. Алферов Ж. И., Асеев А. Л., Гапонов С. В., Копьев П. С., Панов В. И., Полторацкий Э. А., Сибельдин Н. Н., Сурик Р. А. Наноматериалы и нанотехнологии // Микросистемная техника. 2003. № 8. С. 3–13.
2. Pchelyakov O. P., Bolkhovityanov Yu. B., Dvurechenskii A. V., Nikiforov A. I., Yakimov A. I., Voigtlaender B. Molecular beam epitaxy of silicon-germanium nanostructures // Thin Solid Films. 2000. N 367. P. 75–84.
3. Sarid D. Scanning Force Microscopy // Oxford series in optical and imaging sciences. Oxford: Oxford University Press. 1994.
4. Wiesendanger R. Fabrication of nanometer structures using STM // Appl. Surf. Sci. 1992. V. 54. P. 271–277.
5. Востоков Н. В., Волгунов Д. Г., Дряхлушкин В. Ф., Климов А. Ю., Рогов В. В., Суходоеев Л. В., Шашкин В. И. Разработка методов атомно-силовой литографии для создания наноразмерных элементов // Поверхность. 2000. № 7. С. 76–78.
6. Быков В. А. Микромеханика для сканирующей зондовой микроскопии и нанотехнологий // Микросистемная техника. 2000. № 1. С. 21–33.
7. Kosolobov S. S., Nasimov D. A., Shelegov D. V., Rodyakina E. E., Latyshev A. V.

- Atomic force microscopy stepped surface // Phys. Low-Dim. Struct. 2002. N 5/6. P. 231—239.
8. Sheglov D. V., Prozorov A. V., Nasimov D. A., Latyshev A. V. and Aseev A. L. Peculiarities of nanooxidation on flat surface // Phys. Low-Dim. Struct. 2002. N 5/6. P. 239—247.
 9. Szekeres A., Lytvyn P., Alexandrova S. AFM surface imaging of thermally oxidized hydrogenated crystalline silicon // Appl. Surf. Sci. 2002. V. 191. N 1—4. P. 148—152.
 10. Vallee C., Cardinaud C., Rolland L., Peignon M.-C. Roughness and chemistry of silicon and polysilicon surfaces etched in high-density plasma: XPS, AFM and ellipsometry analysis // Appl. Surf. Sci. 2000. V. 164. N 1—4. P. 147—155.
 11. Lee S. M., Lee H., Rabala J. W., Ada E. T., Kulik J. Growth of Ti and TiSi₂ films on Si(III) by low energy Ti⁺ beam deposition // Surface Science. 2000. V. 453. N 1—3. P. 159—170.
 12. Sheu J. T., You K. S., Wo C. H., Chang K. M. Single-electron transistor structures based on silicon-on-insulator silicon nanowire fabrication by scanning probe lithography and wet etching // J. Vac. Sci. Technol. B. 2002. V. 20. P. 2824—2828.
 13. Соколов Д. В. Механизм нанооксидирования n-In_{0,53}Ga_{0,47}As с помощью атомно-силового микроскопа // ЖТФ. 2002. Т. 72. № 1. С. 60—65.
 14. Ma Y.-R., Yu C., Yao Y.-D., Liou Y., Lee S.-F. Tip-induced local anodic oxidation on the native SiO₂ layer of Si(111) using an atomic force microscope // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 195324—195329.
 15. Крошков А. А., Баранова Э. А., Якушенко О. А., Латышев А. В., Асеев А. Л., Стенин С. И. Устройство для дифференциальной сверхвысоковакуумной откачки электронного микроскопа // Приборы и техника эксперимента. 1985. № 1. С. 199—202.
 16. Latyshev A. V., Aseev A. L., Krasnikov A. B. and Stenin S. I. Transformation on clean Si(111) stepped surface during sublimation // Surf. Sci. 1989. V. 213. P. 157—169.
 17. Gusev G. M., Kvon Z. D., Litvin L. V., Nastaushev Yu. V., Kalagin A. K. and Toropov A. I. Aharonov—Bohm oscillations in a 2D electron gas with a periodic lattice of scatterers // JETP Lett. 1992. V. 55. P. 123—125.
 18. Dagata J. A., Schneier J., Harrary H. H., Evans C. J., Postek M. T., Bennet J. Modification of hydrogen-passivated Silicon by a scanning tunneling microscope operating in Air // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 56. P. 2001—2003.
 19. Dagata J. A. Device fabrication by scanned probe oxidation // Science. 1995. V. 270. P. 1625—1626.
 20. Snow E. S., Campbell P. M. Fabrication of Si nanostructures with an atomic force microscope // Appl. Phys. Lett. 1994. V. 64. P. 1932—1934.
 21. Snow E. S., Juan W. H., Pang S. W., Campbell P. M. Si nanostructures fabricated by anodic oxidation with an atomic force microscope and etching with an electron cyclotron resonance source // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 66. P. 1729—1731.
 22. Calleja M., Anguita J., Garcia R., Birkelund K., Peres-Murano F., Dagata J. A. Nanometer-scale oxidation of silicon surfaces by dynamic force microscopy: Reproducibility, Kinetics and Nanofabrication// Nanotechnology. 1999. V. 10. P. 34—38.
 23. Mott N. F. Reactions in solids // Rep. Prog. Phys. 1939. V. 6. P. 186—211.
 24. Sugimura H., Kitamura N., Masuhara H. Modification of n-Si(100) Surface by scanning tunneling microscope tip-induced anodization under nitrogen atmosphere // Jpn. J. Appl. Phys. 1994. V. 33. P. 143—145.
 25. Perez-Murano F., Abadal P. G., Barniol J. N., Aymerich X., Servat J., Gorositoza G. P., Sanz F. Nanometer-scale oxidation of Si(100) surfaces by tapping mode atomic force microscopy // J. Appl. Phys. 1995. V. 78. N 11. P. 6797—6801.
 26. Snow E. S., Jernigan G. G., Campbell P. M. The kinetics and mechanizm of scanned probe oxidation of Si // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. P. 1782—1784.
 27. Yasutake M., Ejiri Y. Y., Hattori T. Modification of silicon surface using atomic force microscope with conducting probe // Jpn. J. Appl. Phys. 1993. V. 32. P. L1021—L1024.
 28. Teuschler T., Mahr K., Miyazaki S., Hundhausen M., Ley L. Nanometer-scale modification of the tribological properties of Si(100) by scanning force microscope // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 66. N 19. P. 2499—2501.
 29. Dubois E., Bubbendorff J.-L. Kinetic of scanned probe oxidation: space-charge limited growth // J. Appl. Phys. 2000. V. 87. P. 8148—8154.
 30. Ley L., Teuschler T., Mahr K., Miyazaki S., Hundhausen M. Kinetics of field-induced oxidation for Hydrogen-terminated Si(111) by means of a scanning force microscope // J. Vac. Sci. Technol. B. 1996. V. 14. P. 2845—2849.
 31. Dagata J. A., Peres-Murano F., Abadal G., Morimoto K., Inoue T., Itoh J., Yokoyama H. Predictive model for scanned probe oxidation kinetics // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. P. 2710—2712.
 32. Avouris P., Hertel T., Martel R. Atomic force microscope tip-induced local oxidation of silicon: kinetics, mechanism, and nanofabrication // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71. N 2. P. 285—287.
 33. Cabrera N., Mott N. F. Theory of the oxidation of metals // Rep. Prog. Phys. 1948. V. 12. P. 163—184.
 34. Stievenard D., Fontaine P. A., Dubois E. Nanooxidation using a scanning probe microscope: An analytical model based on field induced oxidation // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 70. P. 3272—3274.
 35. Fromhold A. T. The anodic behavior of metal and semiconductor series // Ed. by J. W. Diggle, A. K. Vijh, Marsel Dekker, Inc., New York, 1976.
 36. Fromhold A. T. Theory of metal oxidation // VI: Fundamentals, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1976.
 37. Dagata J. A., Inoue T., Itoh J., Matsumoto K., Yokoyama H. Role of space charge in scanned probe oxidation // J. Appl. Phys., 1998. V. 84. P. 6891—6900.
 38. Avouris P., Martel R., Hertel T., Sandstrom R. Afm-tip-induced and cur-
 - rent-induced local oxidation of Silicon and Metals // Appl. Phys. A. 1998. V. 66. P. 659—667.
 39. Lemeshko S., Gavrilov S., Shevakov V., Roschin V. and Solomatenko R. Investigation of tip-induced ultrathin Ti film oxidation kinetics // Nanotechnology. 2001. V. 12. N 3. P. 273—276.
 40. Nagahara L. A., Thundat T. and Lindsay S. M. Nanolithography on semiconductor surfaces under an etching solution // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 57. N 3. P. 270—272.
 41. Thundat T., Nagahara L. A., Oden P. L., Lindsay S. M., George M. A., Glaunsinger W. S. Modification of tantalum surfaces by scanning tunneling microscopy in an electrochemical cell // J. Vac. Sci. Tech. A. 1990. V. 8. N 4. P. 3537—3541.
 42. Notargiacomo A., Foglietti V., Cianci E., Capellini G., Adami M., Faraci P., Evangelisti F., Nicolini C. Atomic force microscopy lithography as a nanodevice development technique // Nanotechnology. 1999. V. 10. N 4. P. 458—463.
 43. Held R., Heinzel T., Studerus P., Ensslin K. Nanolithography by local anodic oxidation of metal films using an atomic force microscope // Physica E. 1998. V. 2. P. 748—752.
 44. Dubois E., Bubbendorff J.-L. Nanometer scale lithography on silicon, titanium and PMMA resist using scanning probe microscopy // Solid State Electronics. 1999. V. 43. P. 1085—1089.
 45. Workman R. K., Peterson C. A., Sarid D. Current-dependent growth of silicon nitride lines using a conducting tip AFM // Surf. Sci. 1999. V. 423. P. L227—L279.
 46. Garcia R., Calleja M., Perez-Murano F. Local oxidation of silicon surfaces by dynamic force microscopy: Nanofabrication and water bridge formation // Appl. Phys. Lett. 1998. V. 72. P. 2295—2297.
 47. Bertrand-Lambotte P., Loubet J. L., Verpy C., Pavan S. Nano-indentation, scratching and atomic force microscopy for evaluating the mar resistance of automotive clear coats: study of ductile scratches // Thin Solid Films. 2001. V. 398—399. P. 306—312.
 48. Allers W., Hahn C., Lohndorf M., Lucas S., Pan S., Schwarz U. D. and Wieden-danger R. Nanomechanical investigations and modifications of thin films based on scanning force methods // Nanotechnology. 1997. V. 7. P. 346—350.
 49. Sheglov D. V., Latyshev A. V. and Aseev A. L. Nanopatterning on flat surfaces by AFM tip // AIP proceedings, Scanning Tunneling Microscopy / Spectroscopy and Related Techniques: 12th International Conf. 2003. CP696. P. 550—553.
 50. Sheglov D. V., Nastaushev Yu. V., Latyshev A. V. and Aseev A. L. Nanopatterning of silicon based nanostructures by AFM probe // International Journal of Nanoscience. 2004 (in press).
 51. Ткаченко В. А., Квон З. Д., Шеглов Д. В., Латышев А. В., Торопов А. И., Ткаченко О. А., Бакшеев Д. Г., Асеев А. Л. Амплитуда осцилляций Ааронова—Бома в малых баллистических интерферометрах // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 93. В. 3. С. 168—172.

УДК 621.38

Г. В. Дедков, д-р физ.-мат. наук, проф.,
А. А. Кясов, канд. физ.-мат. наук,
 Кабардино-Балкарский государственный
 университет, г. Нальчик
 e-mail: gv dedkov@mail.ru

НОВЫЕ АСПЕКТЫ ФЛУКТУАЦИОННО- ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВИЖУЩИХСЯ НАНОЗОНДОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ

Рассматривается влияние эффекта запаздывания на скорость теплового нагрева и тангенциальную флуктуационно-диссипативную силу, действующую на малую частицу, движущуюся параллельно плоской поверхности с нерелятивистской скоростью V. Численные расчеты проведены для случая металлической частицы и металлической поверхности. Анализируется соотношение между скоростью теплового нагрева (охлаждения) нанозонда сканирующего микроскопа, колеблющегося по гармоническому закону, и скоростью диссипации механической энергии.

Введение

В наших недавних работах [1, 2] была развита релятивистская теория флуктуационно-электромагнитного взаимодействия (ФЭВ) между движущейся частицей (нанозондом) и поверхностью, включающая расчет консервативно-диссипативных сил и скорость нагрева (охлаждения) частицы при ее движении параллельно границе плоской поверхности, ограничивающей полубесконечную поглязирующуюся среду. В данной работе мы ставим две цели: 1) выяснение роли эффекта запаздывания при расстояниях от частицы до поверхности в диапазоне от нуля до нескольких сотен микрометров; 2) установление соотношения между скоростью теплового нагрева (охлаждения) частицы, колеблющейся по гармоническому закону, и мощностью диссипации ее механической энергии. Кроме того, обсуждается вопрос о влиянии теплового нагрева на диссиацию механической энергии колеблющегося кантилевера сканирующего зондового микроскопа (СЗМ).

Помимо практического интереса, связанного с проблематикой СЗМ, затрагиваемые в статье вопросы принципиально важны в теоретическом плане — в связи с анализом роли и вклада эффекта запаздывания в тангенциальную силу и скорость

нагрева (охлаждения) частицы, а также в связи с исследованием механизма туннелирования нерадиационных фотонов между наночастицей и поверхностью [3–5]. Вопрос о передаче теплоты вnanoструктурах имеет первостепенное значение при установлении соотношения между информационным и тепловым (энтропийным) потоками, которое может лимитировать скорость передачи (обмена) информацией в будущих поколениях устройств памяти наноскопического масштаба. Авторы [4, 5] сообщали о чрезвычайно сильном влиянии эффекта запаздывания (на тепловой обмен и тангенциальную силу) даже в случае расстояний зонда от поверхности 1...10 нм (в случае контакта металлических тел), тогда как наши расчеты [6, 7] эти выводы не подтверждают. В данной работе эти вопросы рассматриваются более детально.

Теория

Как и в работах [6, 7], запишем диэлектрические функции контактирующих (немагнитных) материалов зонда и поверхности в виде

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi\sigma i}{\omega} \equiv 1 + ai, \quad (1)$$

где σ — частотно-независимая проводимость. Чтобы воспользоваться общими результатами [6, 7], необходимо также иметь выражения для функций диэлектрического отклика поверхности:

$$\Delta_e(\omega) = \left(\frac{\varepsilon(\omega)q_0 - q}{\varepsilon(\omega)q_0 + q} \right); \quad (2)$$

$$\Delta_m(\omega) = \left(\frac{q_0 - q}{q_0 + q} \right), \quad (3)$$

где $q_0 = (\mathbf{k}^2 - \omega^2/c^2)^{1/2}$, $q = (\mathbf{k}^2 - \varepsilon(\omega)\omega^2/c^2)^{1/2}$, а ω , \mathbf{k} и c — частота, волновой вектор и скорость света в вакууме, соответственно. Функции $\Delta_{e,m}(u, a)$ идентичны френелевским коэффициентам отражения электромагнитных волн, имеющих P - и S -поляризацию. Соответствующие волны имеют преимущественно электрическую и магнитную природу. Вводя новые переменные $t = \mathbf{k}c/\omega$ и $u^2 = |1 - t^2|$, причем $u^2 = t^2 - 1$ — для радиационных мод ($\omega < \mathbf{k}c$), и $u^2 = 1 - t^2$ — для нерадиационных ($\omega > \mathbf{k}c$), из (1)–(3) получим следующие выражения для мнимых частей функций (2) и (3):

$$\Delta_e''(u, a) = -\frac{u}{a} \frac{a^2(2u^2-1)u + (2-a^2)(2u^2+1)u \mp (aA_1 + (2a^2u^2+2u^2+1)A_2)}{a^2u^4 + (2u^2+1)^2}; \quad (4)$$

$$\Delta_m''(u, a) = -\frac{2u^2}{a} \pm \frac{2u}{a} A_2; \quad (5)$$

$$A_1 = \left(\frac{\sqrt{a^2 + u^4} - u^2}{2} \right)^{0,5}; \quad (6)$$

$$A_2 = \left(\frac{\sqrt{a^2 + u^4} + u^2}{2} \right)^{0,5}. \quad (7)$$

Верхние знаки в формулах (4)–(7) берутся для нерадиационных, а нижние — для радиационных мод электромагнитного поля.

Для поляризуемости сферической частицы радиуса R используем соотношения

$$\alpha(\omega) = R^3 \frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + 2}; \quad (8)$$

$$\alpha(\omega) = R^3 \left(1 + \frac{3(1 - \kappa R \coth(\kappa R))}{2(\varepsilon(\omega) - 1)(1 - \kappa R \coth(\kappa R) + \varepsilon(\omega)(\kappa R)^2)} \right), \quad (9)$$

где $\kappa^2 = \frac{4}{\pi} \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s}$, r_s — параметр электронного газа в модели "желе" (в атомных единицах). Формула (9) была получена в приближении Томаса—Ферми для сферического металлического кластера [8] и учитывает эффект экранирования внешнего поля электронным газом частицы. Полагая $R = 10$ нм (типичное значение для СЗМ), получим $\kappa R \gg 1$. Поэтому в низкочастотном пределе ($a \gg 1$) формулы (8), (9) сводятся к виду

$$\alpha''(\omega) \approx \frac{3R^3}{a} = \frac{3R^3}{4\pi\sigma} \omega; \quad (10)$$

$$\alpha''(\omega) \approx \frac{3}{2} \frac{R^3}{(\kappa R)} \frac{1}{a^3} = \frac{3}{2} \frac{R^3}{(\kappa R)} \frac{\omega^3}{(4\pi\sigma)^3}. \quad (11)$$

Используя (2)–(11) и общие формулы [7], для тангенциальной силы, которая действует на металлическую частицу, движущуюся со скоростью V параллельно плоской металлической поверхности, и скорости ее нагрева получим (используется Гауссова система единиц):

$$F_x = \frac{3R^3 \hbar V}{4\pi^2 \sigma} \int_0^\infty \left(\frac{\omega}{c} \right)^5 d\omega \int_{0 \leq u < \infty, 0 \leq u \leq 1} (1 \pm u^2) du \times \\ \times [\exp(-2\omega u z_0/c), \sin(-2\omega u z_0/c)] \times \\ \times \left\{ (A(\beta_1) - A(\beta_2))[(\pm 2u^2 + 3)\Delta_e''(u, a) + \right. \\ \left. + 3\Delta_m''(u, a)] - B(\beta_1)[(\pm 2u^2 + 1)\Delta_e''(u, a) + \right. \\ \left. + \Delta_m''(u, a)] \right\}; \quad (12)$$

$$\dot{Q} = -\frac{3R^3 \hbar}{2\pi^2 \sigma} \int_0^\infty \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \omega^2 d\omega \int_{0 \leq u < \infty, 0 \leq u \leq 1} du \times \\ \times [\exp(-2\omega u z_0/c), \sin(-2\omega u z_0/c)] \times \\ \times \left\{ (A(\beta_1) - A(\beta_2)) \times \right. \\ \left. \times \left[(\pm 2u^2 + 1)\Delta_e''(u, a) + \Delta_m''(u, a) + \right. \right. \\ \left. \left. + \beta_2(1 \pm u^2)((\pm 2u^2 + 5) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \Delta_e''(u, a) + 5\Delta_m''(u, a)) \right] - \right. \\ \left. - (V/c)^2 4B(\beta_1)(1 \pm u^2)[(1 \pm u^2)\Delta_e''(u, a) + \right. \\ \left. + \Delta_m''(u, a)] \right\}, \quad (13)$$

где z_0 — расстояние частицы от поверхности, \hbar и k_B — константы Планка и Больцмана, $A(x) = 1/(\exp(x) - 1)$, $B(x) = x \exp(x)/(\exp(x) - 1)^2$, $\beta_{1,2} = \omega \hbar / k_B T_{1,2}$. В общем случае температуры частицы (T_1) и поверхности (T_2) предполагаются различными. Необходимо также уточнить, что верхние знаки, функции $\exp(-2\omega u z_0/c)$ в квадратных скобках (12), (13) и пределы интегрирования $0 \leq u < \infty$ отвечают вкладам нерадиационных электромагнитных мод, а для радиационных, соответственно, нужно брать нижние знаки, функции $\sin(-2\omega u z_0/c)$ и пределы интегрирования $0 \leq u \leq 1$.

Вводя безразмерные параметры $\alpha = 4\pi\sigma\hbar/k_B T$ и $b = 2k_B T z_0/\hbar c$, интегралы в правых частях формул (12), (13) представим как функции параметров α и b , которые далее находим численным интегрированием. Для нормальных металлов ($\sigma = 10^{17} \text{ C}^{-1}$) при $T \leq 300$ К будем иметь $\alpha \geq 30000$ и $b \leq 0,26 z_0$, где z_0 выражено в микрометрах. Параметр b определяет относительную роль эффекта запаздывания. При этом очевидно, что роль данного эффекта на малых расстояниях от поверхности может быть велика лишь при достаточно высоких температурах, в то время как на больших расстояниях запаздывание может оказаться существенным и при более

низких температурах. Если эффект запаздывания не учитывается, то $c = \infty$ и $b = 0$. В последнем случае вклад радиационных мод исчезает, так как $\Delta_e'' = 2/a$, $\Delta_m'' = 0$.

Как видно из (12), движущаяся частица нагревается поверхностью ($\dot{Q} > 0$) даже при $T_1 = T_2 = T$, но этот эффект является релятивистским ($\dot{Q} \sim (V/c)^2$). При $T_1 \neq T_2$ доминирующим является не зависящий от скорости вклад в тепловой поток. Соответственно, частица охлаждается при $T_1 > T_2$ ($\dot{Q} < 0$) и нагревается при $T_1 < T_2$ ($\dot{Q} > 0$), а тангенциальная сила является тормозящей. Более общие формулы для тангенциальной силы [7] допускают и возможность существования ускоряющей силы при более специфическом (резонансном) характере диэлектрических функций. Детальный анализ этого случая, однако, требует специального рассмотрения.

В случае малого запаздывания, когда $b = 2k_B T z_0 / \hbar c \ll 1$, из (12), (13) можно получить аналитические формулы, описывающие радиационные вклады в соответствующие интегралы. Так, с приемлемой точностью внутренние интегралы в (12), (13) аппроксимируются зависимостью $C(x/\alpha)^{1/2}$, где $x = \omega\hbar/k_B T$, C — численная константа. Тогда после вычисления внешних интегралов (12) получим

$$F_x^{(\text{rad})} \approx -720 \frac{\hbar V R^3 z_0}{\sigma^{3/2} c^6} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{15/2}; \quad (14)$$

$$\dot{Q}^{(\text{rad})} \approx -170 \frac{\hbar R^3 z_0}{\sigma^{3/2} c^4} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{15/2} (1 - \beta^2). \quad (15)$$

При комнатной температуре, в частности, $b = 1$ при $z_0 = 3,8$ мкм, поэтому формулы (14), (15) справедливы при $z_0 \ll 3,8$ мкм.

Результаты численного расчета

Результаты расчета F_x и \dot{Q} в зависимости от расстояния частицы до поверхности показаны на рис. 1, *a*—*в* и рис. 2, *a*—*в*, соответствующих малым ($0 < z_0 < 20$ нм), промежуточным ($0,1$ мкм $< z_0 < 5$ мкм) и большим (5 мкм $< z_0 < 100$ мкм) расстояниям. В первом из указанных интервалов эффекты запаздывания пренебрежимо малы, однако в случае больших расстояний наблюдается заметное возрастание F_x и \dot{Q} по сравнению с нерелятивистским приближением (см. рис. 1, *б* и рис. 2, *б*). Наличие участков линейного возрастания вкладов $F_x^{(\text{rad})}$ и $\dot{Q}^{(\text{rad})}$ при увеличении расстояния z_0 в соответствии с (14), (15) приводит к их локальному превалированию по сравнению с вкладами нерадиационных мод в области расстояний 10 мкм $\leq z_0 \leq 60$ мкм для $F_x^{(\text{rad})}$, и 10 мкм $\leq z_0 \leq 90$ мкм для $\dot{Q}^{(\text{rad})}$ (см. рис. 1, *в* и рис. 2, *в*). Однако результатирующие зависимости латеральных сил и тепловых потоков являются монотонно убывающими во всем рассмотренном диапазоне расстояний. Из

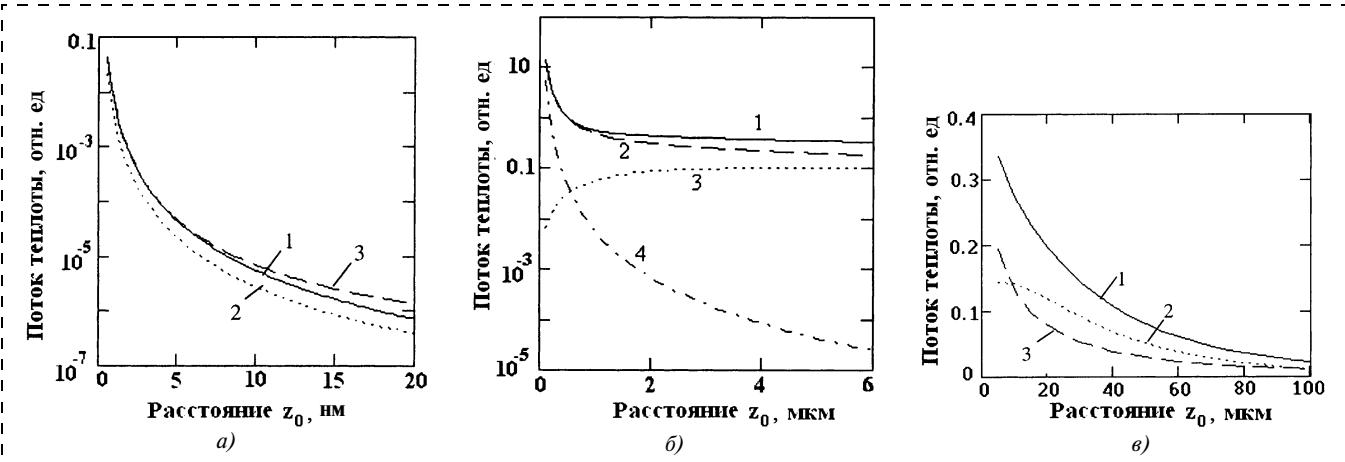
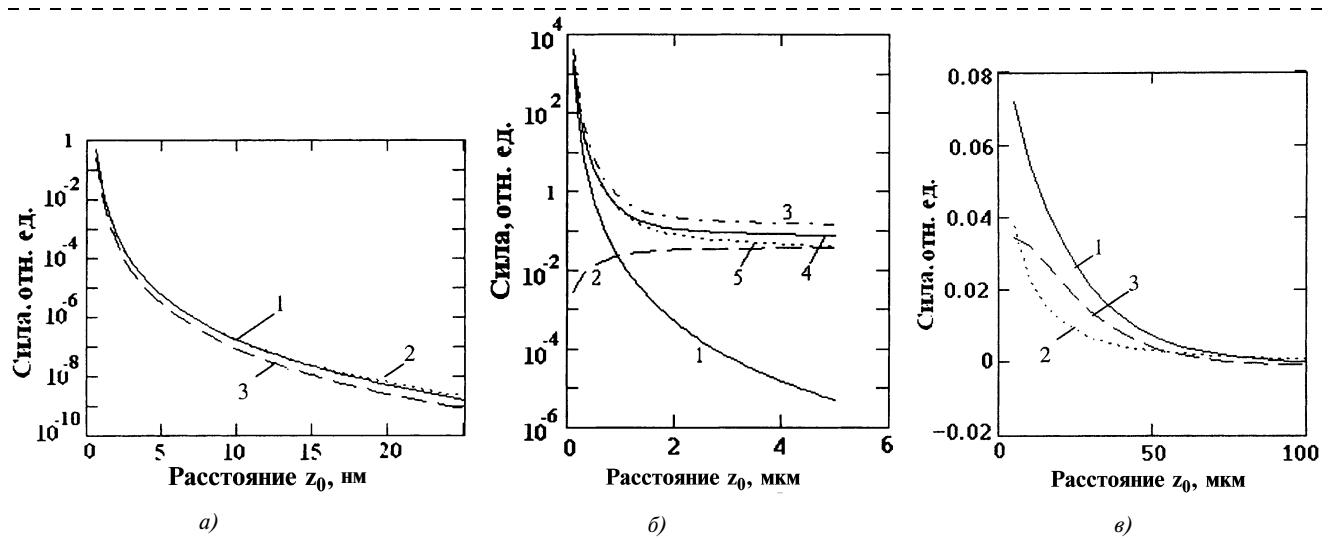


Рис. 1. Зависимость теплового потока от расстояния:

а — при $k = 2 \cdot 10^{19}$, кривая 1 — $\alpha = 10^4$, $T = 300$ К; кривая 2 — $\alpha = 2 \cdot 10^4$, $T = 300$ К; кривая 3 — $\alpha = 10^4$, $T = 1200$ К; *б* — при $k = 2 \cdot 10^{10}$, 1 — сумма радиационного и нерадиационного вкладов; 2 — вклад нерадиационных мод; 3 — вклад радиационных мод; 4 — нерелятивистское приближение; во всех случаях $\alpha = 10^4$, $T = 300$ К; *в* — то же, что на рис. 2, *б*. Кривые 1, 2, 3 соответствуют кривым 1, 2, 3 на рис. 2, *б*.

Во всех случаях поток теплоты направлен от частицы к поверхности.

Для получения абсолютных значений в эрг/с необходимо данные графиков умножить на величину $k \frac{\hbar}{\sigma} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 R^3$.

**Рис. 2.** Зависимость тангенциальной (тормозящей) силы от расстояния:

a — при $k = 2,4 \cdot 10^{32}$ и предположении, что частица имеет температуру $T_1 = T$, а среда — $T_2 = 0$; *1* — $\alpha = 10^4$, $T = 300$ К; *2* — $\alpha = 10^4$, $T = 1200$ К; *3* — $\alpha = 2 \cdot 10^4$, $T = 300$ К; *б* — при $k = 2,4 \cdot 10^{17}$, кривая *1* — нерелятивистское приближение при $T_1 = T_2 = T = 300$ К, $\alpha = 10^4$; кривая *2* — радиационный вклад; кривая *3* — нерадиационный вклад; кривая *4* — сумма радиационного и нерадиационного вкладов; в случае кривых *2—4* предполагается $\alpha = 10^4$, $T_1 = 300$ К, $T_2 = 0$; кривая *5* соответствует $T_1 = T_2 = T = 300$ К, $\alpha = 10^4$; *в* — то же, что на рис. 2, *б*. Кривые *1*, *2*, *3* соответствуют кривым *1*, *2*, *3* на рис. 2, *б*.

Для получения абсолютных значений сил в динах данные графиков нужно умножить на $k (R^3 V k_B T / \sigma)$

расчетов следует также возрастание ФЭВ для более резистивных материалов (сравните, например, рис. 1, *а* и 2, *а*). Это согласуется как с результатами наших расчетов [6, 7], так и с работой [3], в которой отмечалось, что в области нанометровых расстояний вклад *S*-моды в тепловом потоке является пренебрежимо малым (для немагнитных материалов). Напротив, в недавних работах [4, 5] утверждалось, что учет *S*-моды и эффектов запаздывания (для нормальных металлов) приводит к резкому увеличению теплового потока и латеральной силы по сравнению с нерелятивистским приближением (учитывающим только вклад *P*-моды) уже на расстояниях 1—10 нм. В этой связи заметим, что в расчетах латеральной силы авторы работ [4, 5] не учли вклад тока магнитной поляризации ($j_m = c \cdot \text{rot} \mathbf{M}$), \mathbf{M} — вектор магнитной поляризации, который в лабораторной системе имеется даже у частицы, обладающей в собственной системе отсчета только флукуационным электрическим дипольным моментом. Кроме того, следует отметить, что в работах [3, 4] тепловой поток был вычислен лишь в частном случае нулевой относительной скорости зонда и поверхности.

Возвращаясь к результатам наших численных расчетов, заметим, что асимптотика рассчитанных зависимостей $\dot{Q}(z_0)$ при $z_0 \rightarrow \infty$ не обнаруживает наличия не зависящих от расстояния вкладов, характерных для теплового излучения абсолютно черного тела. Это вполне согласуется с тем, что соответствующий тепловой поток обусловлен имен-

но ФЭВ между частицей и поверхностью и, соответственно, должен исчезать в пределе $z_0 \rightarrow \infty$, когда между ними нет взаимодействия. Сравнение величины $\dot{Q}(z_0)$ со скоростью излучения абсолютно черного тела в вакууме \dot{Q}_{BR} показывает, что $\dot{Q}(z_0)/\dot{Q}_{BR} = p \sim R$, причем $p \gg 1$ даже на весьма больших удалениях от поверхности. В частности, в соответствии с данными рис. 2 при $T_1 = 300$ К, $T_2 = 0$, $\sigma = 10^{17}$ с⁻¹, $R = 1$ нм будем иметь $p = 2 \cdot 10^8$ при $z_0 = 5$ нм и $p = 2 \cdot 10^4$ при $z_0 = 1$ мкм. И лишь на расстояниях в несколько сот микрометров получим $p \leq 1$.

Вычисления F_x и \dot{Q} с использованием поляризуемости (12) (по сравнению с (11)) приводят к значительно меньшим численным значениям вследствие наличия в (12) малого обрезающего фактора $(kR)^{-1}(\omega/4\pi\sigma)^2$. В итоге получаются зависимости, аналогичные показанным на рис. 1, 2, но абсолютные значения меньше с коэффициентом $\sim 10^2(kR)^{-1}\alpha^{-2} \ll 1$, а формулы, аналогичные (14), (15), имеют дополнительный температурный множитель T^2 . Таким образом, учет экранирования кардинально изменяет результаты расчета F_x и \dot{Q} в меньшую сторону.

Соотношение между тепловым нагревом нанозонда СЗМ и диссипацией механической энергии кантилевера в динамическом контакте с поверхностью

Нерешенной до настоящего времени проблемой остается теоретическая интерпретация наблю-

даемых диссипативных потерь энергии осциллятора СЗМ в динамическом режиме с постоянной амплитудой возбуждения, когда исключены явления фрикционного гистерезиса [9, 10]. В этом случае основную роль может играть флуктуационное электромагнитное взаимодействие зонда с поверхностью, но результаты теоретических расчетов ожидаемых диссипативных потерь для контактов кремний (зонд) — слюда (поверхность) и алюминий (зонд) — золото (поверхность) оказались на два и 10 порядков меньше наблюдаемых [11, 12]. Связано ли это расхождение с неучтеными в теории факторами или с особенностями экспериментов, еще предстоит выяснить. В недавней работе [13], например, мы обратили внимание на оставшуюся в тени важную особенность флуктуационно-электромагнитного взаимодействия: при малом расстоянии частицы от поверхности даже при небольшом различии температуры ($\Delta T \ll 1$ К) между ними возникает интенсивный тепловой поток, обусловленный туннелированием "нерадиационных" фотонов, принадлежащих ближним модам флуктуационного электромагнитного поля. В частности, как будет показано ниже, отношение усредненной (по периоду колебаний) мощности диссипации механической энергии к скорости теплообмена имеет порядок величины f^2/f_W^2 , где f и f_W — частота колебаний зонда и частота Вина. При комнатной температуре $f_W = kT/\hbar = 3,9 \cdot 10^{13}$ Гц, а типичное значение $f = 3 \cdot 10^5$ Гц, откуда $f^2/f_W^2 \approx 10^{-16}$, поэтому в типичной для СЗМ ситуации не зависящий от скорости зонда вклад в тепловой поток, пропорциональный ΔT , должен всегда превалировать над динамическим вкладом, не зависящим от ΔT .

Поскольку наличие на поверхности образца локальных вариаций температуры на уровне 1...100 мК представляется весьма вероятным даже при общем условии изотермичности системы, то возникающий поток теплоты способен инициировать дополнительные механизмы диссипативных потерь, например, путем активации процессов электронного и атомного обменов, перестройки атомной и электронной структур, фононных возбуждений, или (и) изменения внутреннего затухания кантилевера. Заметим, что такие механизмы могут "включаться" безотносительно к знаку ΔT .

Ограничивааясь нерелятивистским приближением [11, 12] и предполагая, что температуры зонда и образца равны $T + \Delta T$ и T , соответственно, для потока теплоты зонд — поверхность и диссипативной силы на зонде — малой сферической частице радиуса R , получим

$$\dot{Q} = -\frac{9\zeta(4)}{\pi^3} \frac{R^3}{z_0^3} \frac{\hbar}{\sigma^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^4 \frac{\Delta T}{T} + \frac{9\chi\zeta(2)R^3\hbar V^2}{16\pi^3 z_0^5 \sigma^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2; \quad (16)$$

$$F_d = -\frac{9\chi\zeta(2)\hbar R^3 V}{32\pi^3 \sigma^2 z_0^5} \left(\frac{k_B T_2}{\hbar}\right)^2, \quad (17)$$

где $\zeta(n) = \sum_{i=1}^{\infty} 1/i^n$; V — скорость частицы; z_0 — расстояние от поверхности; χ — числовой фактор, зависящий от направления движения. При параллельном к поверхности движении $\chi = 1$, а при перпендикулярном, соответственно, $\chi = 2$ [14]. Принимая гармоническое приближение для колебаний кантилевера в экспериментах [9, 10] (A и f — амплитуда и частота колебаний)

$$z(t) = A \cos(2\pi ft); \quad (18)$$

$$V = \dot{z}(t) = -2A\pi f \sin(2\pi ft),$$

найдем усредненные по периоду движения мощность диссипации механической энергии \bar{P} и тепловой поток $d\bar{Q}/dt$:

$$\bar{P} = f \int_0^{1/f} |F_d(z(t), \dot{z}(t), d)| \dot{z}(t) dt; \quad (19)$$

$$d\bar{Q}/dt = f \int_0^{1/f} \dot{Q}(z(t), \dot{z}(t), d) dt. \quad (20)$$

В случае нанозонда параболического сечения с радиусом кривизны R , материала которого характеризуется диэлектрической функцией (1), подставляя (12) и (13) (в пределе $c \rightarrow \infty$) в (19), (20), и учитывая (18), после интегрирования по объему зонда и усреднения по периоду колебаний получим (d — начальное расстояние апекса зонда от поверхности, $d < A$)

$$\bar{P}(A, d) = -\frac{9\zeta(2)\hbar R}{32\pi} \frac{A^2 f^2}{(d^2 - A^2)^{3/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar\sigma}\right)^2; \quad (21)$$

$$d\bar{Q}/dt = \frac{27\hbar R}{4\pi^3 (d^2 - A^2)^{1/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar\sigma}\right)^2 \times \\ \times \left(-\zeta(4) \frac{\Delta T}{T} (k_B T/\hbar)^2 + \frac{\pi^2 A^2 \zeta(2)}{24(d^2 - A^2)} f^2\right). \quad (22)$$

Для расчета потери механической энергии (потока теплоты) за один период колебаний правые части формул (21) и (22) нужно разделить на частоту f .

Сравнение величины \bar{P} и динамического вклада в $d\bar{Q}/dt$, пропорционального f^2 , показывает, что они одинаковы. Для условий работы [10] (динамический контакт алюминиевого зонда с поверхностью (111) золота) из (21), (22) следует, что при $d - A = z_{\min} = 0,5 \text{ нм}$ $\bar{P} = 4,2 \cdot 10^{-30} \text{ Вт}$, что на 17 порядков меньше, чем следует из эксперимента. Но наряду с этим не зависящий от скорости зонда вклад в тепловой поток (первый член формулы (22)) оказывается на много порядков величины больше даже при небольшой разности температур ΔT , поскольку $d\bar{Q}/dt = 2,4 \cdot 10^{-16} \cdot \Delta T \text{ Вт}$. Отметим также сильную зависимость \bar{P} и $d\bar{Q}/dt$ от проводимости материалов: для плохих проводников ($\sigma \approx 10^{10} \text{ С}^{-1}$) обе оценки могут возрасти на ~ 14 порядков величины по сравнению со случаем нормальных металлов ($\sigma \approx 10^{17} \text{ С}^{-1}$). Нужно еще отметить, что для нормальных металлов расчеты должны основываться на использовании диэлектрических функций более общего вида, учитывающих пространственную дисперсию (ПД) поверхностных возбуждений. Как вытекает из расчетов [13], при учете ПД значения диссипативных сил и теплового потока возрастают на 3...8 порядков величины. Тогда для условий работы [10] численные расчеты дают $\bar{P} = 5,7 \cdot 10^{-24} \text{ Вт}$ и $d\bar{Q}/dt = 2,2 \cdot 10^{-9} \Delta T \text{ Вт}$ (с полным учетом ПД). Соответственно, за один цикл колебаний зонд может получить (потерять) порцию тепла $\Delta\bar{Q} = 5,1 \cdot 10^4 \Delta T \text{ эВ}$. Для сравнения заметим, что механическая энергия кантileвера с жесткостью 40 Н/м и амплитудой колебаний 20 нм составляет $5 \cdot 10^4 \text{ эВ}$, а потеря механической энергии вследствие внутреннего затухания кантileвера — 1...30 эВ за один период. Поэтому наличие столь большого теплового потока между зондом и образцом может инициировать дополнительные механизмы диссипативных потерь до установления теплового равновесия. Этот вопрос предполагается рассмотреть в дальнейшем.

Заключение

Результаты численных расчетов тепловых потоков и тангенциальных сил, обусловленных флукуационно-электромагнитным взаимодействием в системе "малая частица—плоская поверхность" в случае материалов с металлической проводимостью показывают, что эффект запаздывания становится существенным только в микрометровой области расстояний частицы от поверхности. В целом и поток теплоты между частицей и поверхно-

стью, и тангенциальная сила, действующая на частицу, являются монотонно убывающими функциями расстояния, начиная от совсем малых расстояний порядка 1 нм и кончая большими расстояниями порядка 1 мм.

Сравнение значения механических потерь зонда СЗМ в динамическом контакте с поверхностью (в отсутствие контактных сил и гистерезиса) со значением теплового потока между ними (вследствие флукуационно-электромагнитного взаимодействия) показывает, что даже при очень малой разности температур (менее 1 К) тепловые эффекты оказываются на много порядков величины больше. Это может привести к появлению новых механизмов демпфирования осциллятора СЗМ в бесконтактном режиме взаимодействия зонда с поверхностью.

Список литературы

1. Kyasov A. A., Dedkov G. V. Relativistic theory of fluctuating electromagnetic slowing down of neutral spherical particles moving in close vicinity to a flat surface // Nucl. Instr. Meth. 2002. V. B195. N 3—4. P. 247—259.
2. Дедков Г. В., Кясов А. А. Флукуационно-электромагнитное взаимодействие релятивистской частицы с плоской поверхностью // Письма ЖТФ. 2003. Т. 29. № 1. С. 36—41.
3. Pendry J. B. Radiative exchange of heat between nanostructures // J. Phys.: Cond. Matter. 1999. V. 11. P. 6621—6633.
4. Volokitin A. I., Persson B. N. J. Radiative heat transfer between nanostructures // Phys. Rev. 2001. V. B63. 205404. P. 1—11.
5. Volokitin A. I., Persson B. N. J. Dissipative van der Waals interaction between a small particle and a metal surface // Phys. Rev. 2002. V. B65. 115419. P. 1—10.
6. Дедков Г. В., Кясов А. А. Об эффекте теплообмена между пробной наночастицей и поверхностью через ближнепольные модели флукуационного электромагнитного поля // Письма ЖТФ. 2002. Т. 28. № 23. С. 50—57.
7. Дедков Г. В., Кясов А. А. Релятивистская теория флукуационно-электромагнитного взаимодействия движущихся нейтральных частиц с плоской поверхностью // ФТТ. 2003. Т. 45. № 10. С. 1729—1741.
8. Smirnov M. B., Krainov V. P. Dynamic polarizability of metal Thomas—Fermi clusters // Laser Phys. 2000. V. 10. N 3. P. 816—819.
9. Gotsmann B., Seidel C., Añczukowski B., Fuchs H. Conservative and dissipative tip—sample interaction forces probed with dynamic AFM // Physical Review. 1999. V. B60. N 15. P. 11051—11061.
10. Gotsmann B., Fuchs H. Dynamic force spectroscopy of conservative and dissipative forces in an Al—Au (111) tip-sample forces // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 85. P. 375—378.
11. Дедков Г. В., Кясов А. А. Электромагнитные и флукуационно-электромагнитные силы взаимодействия движущихся частиц и нанозондов с поверхностями // ФТТ. 2002. Т. 44. № 10. С. 1729—1751.
12. Dedkov G. V., Kyasov A. A. Nonrelativistic Theory of electromagnetic forces on particles and nanoprobes moving near a surface // Phys. Low-Dim. Struct. 2003. V. 1—2. P. 1—86.
13. Дедков Г. В., Дедкова Е. Г. Тепловой нагрев и диссипативные потери механической энергии зонда сканирующего микроскопа в динамическом контакте с поверхностью // Письма ЖТФ. 2004. Т. 30. № 6. С. 52—61.
14. Дедков Г. В., Кясов А. А. Флукуационно-электромагнитное взаимодействие нейтральной частицы с плоской поверхностью при перпендикулярном движении // Письма ЖТФ (в печати).

ЭЛЕМЕНТЫ МИКРО- И НАНОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКИ

УДК 621.3.049.77

В. И. Шашкин, канд. физ.-мат. наук,
Е. А. Вопилкин, **Н. В. Востоков**, **А. Ю. Климов**,
В. В. Рогов, **С. А. Гусев**, **И. Ю. Шулешова**,
Институт физики микроструктур РАН,
г. Н. Новгород
e-mail:vopilkin@ipm.sci-nnov.ru

ИЗГОТОВЛЕНИЕ МИКРОКОНСОЛЕЙ И УПРАВЛЕНИЕ ИХ ИЗГИБОМ

Изготовлены микроконсоли из оксида тантала размерами $12 \times 2 \times 0,2$ мкм и из арсенида галлия размерами $36 \times 1,5 \times 1,3$ мкм, расположенные на субмикрометровом расстоянии от подложки. С помощью атомно-силового микроскопа исследованы упругие статические и резонансные колебательные свойства данных консолей. Показана возможность управления начальным изгибом микроконсолей. Путем последовательного напыления различных металлов на консоль удалось дважды изменить изгиб данных консолей на обратный.

Введение

Начало нового века в приборостроении ознаменовалось бурным развитием нового направления микроэлектромеханических систем (МЭМС), объединивших несколько технических областей: от микроинструмента до микросамолетов. Важное место в МЭМС имеют интегральные датчики первичной информации. Наиболее ответственным узлом интегральных датчиков является чувствительный элемент. Микроразмерные консоли (микроконсоли, cantilevered microbeam) являются основными конструктивными элементами, из которых формируются чувствительные элементы микроэлектромеханических сенсоров. Микроконсоли изготавливаются, как правило, с помощью планарной технологии и селективного травления [1].

Однако одной только планарной технологии часто бывает недостаточно для получения необходимой трехмерной структуры. В ряде случаев требуется изменить пространственное положение микрообъекта, например, сблизить консоль и подложку. Для решения этой проблемы используются так называемые *самопозиционирующиеся* системы [2]. Они получаются при изготовлении микроконсолей из напряженных пленок с последующим травлением и высвобождением пленки, которая приобретает новое равновесное положение.

Основные принципы этого метода можно использовать для получения технологии управляемого изгиба микрообъектов. Для этого целесообразно применять консоли, сформированные из изначально ненапряженных материалов. На верхнюю

сторону полученной микроконсоли можно напылять различные металлы. Зная различие упругих напряжений, можно отгибать консоль в заранее выбранную сторону. Кроме того, можно надеяться, что изгиб консоли будет обратимым, т. е. последующее напыление сможет скорректировать изгиб и даже изменить его на противоположный предыдущему. Для проверки этой гипотезы были проведены следующие эксперименты.

Изготовление микроконсолей

В качестве материала для изготовления консоли была использован оксид тантала Ta_2O_5 . Сначала на ситалловую подложку методом магнетронного распыления был нанесен слой ванадия толщиной 400 нм. Поверх него был нанесен слой Ta_2O_5 толщиной 200 нм, на котором методом взрывной фотолитографии формировался рисунок консоли. Слой Ta_2O_5 наносился методом реактивного магнетронного распыления в смеси аргона с кислородом. После формирования рисунка на слое Ta_2O_5 проводилось травление ванадия в растворе перекиси водорода.

Другой вариант изготовления микроконсоли использовал технологию GaAs. На подложку GaAs методом металлоорганической газофазной эпитаксии был нанесен слой AlAs толщиной 150 нм и слой GaAs толщиной 1,3 мкм, на котором методом фотолитографии и травления формировалась мезоструктура будущей консоли. После этого выполнялось селективное вытравливание AlAs в растворе HF из-под консоли.

На рис. 1 показано схематическое изображение микроконсоли. Это ожидаемая структура, которая должна получиться в том случае, если в слое Ta_2O_5 (GaAs) нет упругих напряжений. На рис. 2 приведено изображение микроконсоли из Ta_2O_5 , полученное с помощью отраженных электронов в электронном микроскопе LEO EVO 40. Поскольку микроконсоль и подложка являются диэлектриками, наблюдение равновесной формы такого объекта в электронном микроскопе представляет определенную сложность, связанную с накоплением им заряда, возникающего под действием зондирую-

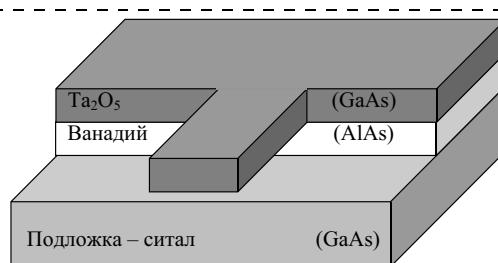


Рис. 1. Вид структуры с ненапряженным слоем микроконсоли Ta_2O_5 (GaAs)

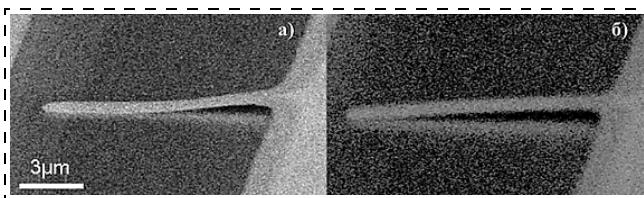


Рис. 2. Вид микроконсоли Ta_2O_5 при разных скоростях сканирования электронного пучка:
а — медленной; б — быстрой

щего электронного пучка. Для уменьшения этого эффекта используются различные способы [3]:

- напыление на объект проводящих слоев (пленок), что наиболее эффективно предотвращает эффекты зарядки;
- получение изображения при пониженном ускоряющем напряжении или в низком вакууме.

В данном случае применить напыление проводящего слоя было нельзя, так как это могло повлиять на форму микроконсоли. Приведенные на рис. 2 микрофотографии микроконсоли получены без какой-либо предварительной подготовки ее с применением режима пониженного вакуума при ускоряющем напряжении 20 кВ.

Как видно из приведенных микрофотографий, полностью избавиться от электростатических эффектов при получении изображения не удалось. Под действием электронного пучка массивная подложка и тонкая консоль приобретают различный по знаку заряд. Чем больше доза облучения электронами, тем больше заряд и, соответственно, сила взаимного притяжения микроконсоли и подложки. Поэтому видимая в электронном микроскопе форма консоли зависит от скорости сканирования зондом при получении изображения (ср. рис. 2, а и б). При медленном сканировании консоль сильно прижата к подложке (рис. 2, а), а при максимальной скорости сканирования консоль лишь слегка касается подложки свободным концом. Исходя из этого, можно предположить, что равновесное положение консоли близко к идеальному, изображеному на рис. 1, т. е. она прижата к подложке не более, чем это видно на рис. 2, б.

Механические свойства микроконсолей

Для измерения резонансной частоты микроконсоли зонд кантилевера в полуконтактном режиме позиционировался на поверхность микроконсоли вблизи основания, а также на поверхность основания в нескольких микрометрах от края. В обоих случаях режим удержания над поверхностью без изменения положения зонда менялся на контактный. После этого на пьезокерамическую пластину в держателе кантилевера подавался возбуждающий сигнал с цифрового синтезатора, под действием которого она вибрировала и заставляла вибрировать кантилевер, находящийся в контакте

с поверхностью. Выполнялось сканирование по частоте. Переменная составляющая сигнала с четырехсекционного фотодиода, обусловленная колебаниями кантилевера, усиливалась и попадала на вход синхронного детектора, который формировал измеряемый сигнал, пропорциональный амплитуде колебаний. В том случае, когда зонд находился в контакте с поверхностью микроконсоли, колебания кантилевера передавались ей, и при изменении частоты этих колебаний фиксировалась резонансная частота микроконсоли. Для сравнения, та же процедура проделывалась на неподвижном участке поверхности — на основании вдали от его края, чтобы отличить резонанс микроконсоли от других возможных резонансов механической системы.

Полученные результаты показаны на рис. 3. Сплошной линией показана амплитудо-частотная характеристика (АЧХ) кантилевера на микроконсоли, пунктирной линией — на основании. На рисунке видно, что основной резонанс микроконсоли из Ta_2O_5 наблюдается на частоте $f_0 = 876.975$ Гц. Присутствие резонанса на той же частоте в случае, когда зонд находится в контакте с основанием, можно объяснить существованием слабой акустической связи между прижатыми к основанию зондом и микроконсолью, так как в этом случае расстояние от точки контакта до начала микроконсоли составляло всего несколько микрометров. Поскольку микроконсоль имеет форму балки с прямоугольным поперечным сечением, то используя формулу для нижней резонансной частоты такой консоли [4]

$$f_0 = \frac{0.88h}{\pi l^2} \sqrt{\frac{E}{3\rho}}, \quad (1)$$

где $h = 200$ нм — толщина консоли; $l = 12$ мкм — длина консоли; $\rho = 8,35 \cdot 10^3$ кг/м³ — плотность Ta_2O_5 ; E — модуль Юнга, и подставляя в нее измеренное значение резонансной частоты, получим

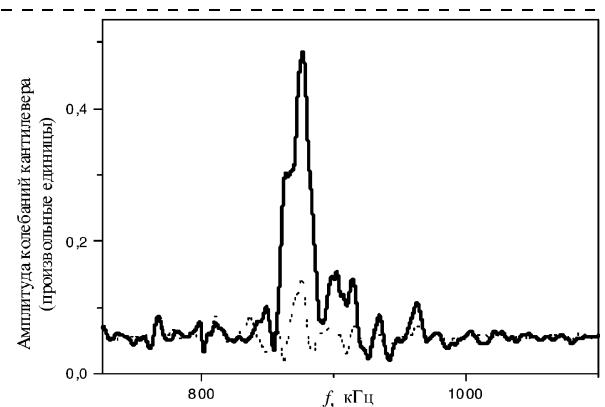


Рис. 3. АЧХ колебаний кантилевера, прижатого к микроконсоли Ta_2O_5 — сплошная линия и прижатого к поверхности основания — пунктирная

для модуля Юнга Ta_2O_5 значение $E = 127,3$ ГПа, что близко к справочным данным для подобных материалов [5]. Резонансная частота консоли из GaAs была также измерена и составляла $f_0 = 818\,580$ Гц, что близко к расчетным значениям [5].

Для измерения жесткости микроконсоли из Ta_2O_5 зонд в полуkontakteчном режиме позиционировался последовательно в трех точках поверхности микроконсоли на разных расстояниях от ее начала, а также на поверхность основания в нескольких микрометрах от края. После позиционирования в каждую из точек режим удержания над поверхностью изменялся на контактный. Затем отключалась обратная связь и сканер перемещал образец, удаляя его от зонда. При этом изгиб кантилевера менялся, отраженный от кантилевера луч лазера, попадающий на четырехсекционный фотодиод, смешался и менялся усиленный разностный сигнал фотодиода. Этот сигнал регистрировался и позволял определять угловое отклонение кантилевера, пропорционально действующей на него силе изгиба. Таким образом измерялась жесткость системы микроконсоль плюс кантилевер k в относительных единицах. Жесткость микроконсоли k_m можно вычислить через измеренную жесткость системы микроконсоль плюс кантилевер k и жесткость кантилевера k_c , используя формулу для жесткости последовательно соединенных пружин:

$$k_m = \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k_c} \right)^{-1}. \quad (2)$$

Используя жесткость кантилевера в относительных единицах и зная реальную жесткость кантилевера, можно перевести относительные единицы в размерные (Н/м). По данным производителя (NT-MDT, г. Москва, Зеленоград) жесткость кантилевера может составлять от 20 до 90 Н/м. На рис. 4 представлены значения k_m , вычисленные для случая $k_c = 20$ Н/м (квадратные метки) и $k_c = 90$ Н/м (треугольные метки) при трех различных расстояниях от точки касания зонда до начала микроконсоли. Зависимость жесткости микроконсоли от длины выражается формулой [4]

$$k_m = \frac{Eh^3d}{l^3}, \quad (3)$$

где $d = 2$ мкм — ширина консоли. Рассчитанная по этой формуле зависимость показана на рис. 4 сплошной линией. Модуль Юнга $Ta_2O_5 E = 127,3$ ГПа взят из результатов резонансных измерений. Наилучшее совпадение вычисленной из данных измерений жесткости k_m с этой линией получается для жесткости кантилевера $k_c = 30,4$ Н/м (круглые метки на рис. 4), что совпадает с данными производителя. Таким образом, данные резонансных измерений совместно с измерением жесткости микроконсоли про-

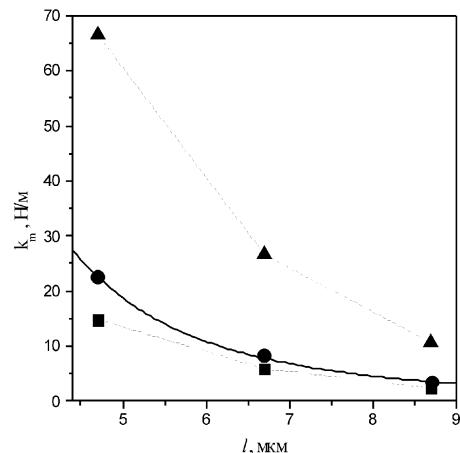


Рис. 4. Значения жесткости k_m микроконсоли Ta_2O_5 , вычисленные для случая $k_c = 20$ Н/м (квадраты), $k_c = 90$ Н/м (треугольники) и $k_c = 30,4$ Н/м (кружки) при трех различных расстояниях от точки касания зонда до основания микроконсоли. Сплошная линия — зависимость, рассчитанная по формуле (3)

стой формы с известными размерами позволяют также с хорошей точностью вычислить жесткость кантилевера. Точное значение жесткости кантилевера необходимо для измерений жесткости подвижных элементов МЭМС со сложной геометрией.

Обращение изгиба микроконсоли

Для различных применений целесообразно иметь возможность варьировать кривизну и направление изгиба микроконсоли. В целях получения изгиба по направлению к подложке на консоль из Ta_2O_5 методом магнетронного напыления был нанесен слой тантала толщиной 30 нм. Толщина этой металлической пленки значительно превышает необходимую толщину проводящего слоя (обычно 5—7 нм), который наносят на непроводящие объекты для предотвращения электростатических эффектов при электронно-микроскопических исследованиях. Изображение системы, полученное в электронном микроскопе с помощью вторичных электронов, приведено на рис. 5, а. В данном случае консоль отогнута в сторону подложки и касается ее свободным концом не за счет электростатических сил, а за счет упругих напряжений, возникающих в биморфной системе Ta/Ta_2O_5 .

Нанесением материала с другими упругими напряжениями можно поменять направление изгиба консоли. Для проверки этого поверх слоя тантала был нанесен слой хрома толщиной 30 нм. Изображение этой трехслойной структуры, полученное в сканирующем электронном микроскопе, показано на рис. 5, б. Хорошо видно, что консоль сильно отогнута вверх от подложки. Расстояние между свободным концом консоли и подложкой составляет более 8 мкм. Далее можно опять вернуть микроконсоль в исходное, как на рис. 5, а, положение.

Для этого поверх слоя хрома был нанесен слой тантала толщиной 100 нм. Микрофотография полученной в результате структуры показана на рис. 5, *в*. Видно, что консоль вернулась в положение, в котором она была после нанесения первого слоя тантала (рис. 5, *а*). Варьируя толщину наносимого слоя, легко управлять и радиусом изгиба. На рис. 5, *г* приведена микрофотография консоли с одиночным слоем никеля толщиной 20 нм. В этом случае консоль лишь слегка отогнута вверх.

Аналогичная процедура была проделана для микроконсоли из арсенида галлия. На рис. 6 показано изображение этой консоли, полученное в электронном микроскопе после последовательного напыления на нее различных металлических слоев. Сначала методом магнетронного напыления был нанесен слой никеля толщиной 5 нм, который, как видно на рис. 6, *а*, не вызвал изгиба микроконсоли. Поверх этого слоя никеля был напылен слой хрома толщиной 30 нм. Результат показан на рис. 6, *б*. Видно, что консоль сильно отогнута вверх от подложки. Расстояние между свободным концом консоли и подложкой составляет более 10 мкм. Далее можно опять вернуть микроконсоль в исходное, как на рис. 6, *а*, положение. Для этого поверх слоя хрома был нанесен слой тантала толщиной 100 нм. Микрофотография полученной в результате структуры показана на рис. 6, *в*. Видно, что консоль вернулась в положение, в котором она была после нанесения первого слоя никеля (рис. 6, *а*).

Таким образом, экспериментальные результаты показывают, что путем напыления на консоли слоев различных металлов, можно менять пространственное положение консолей. Подбирая толщину

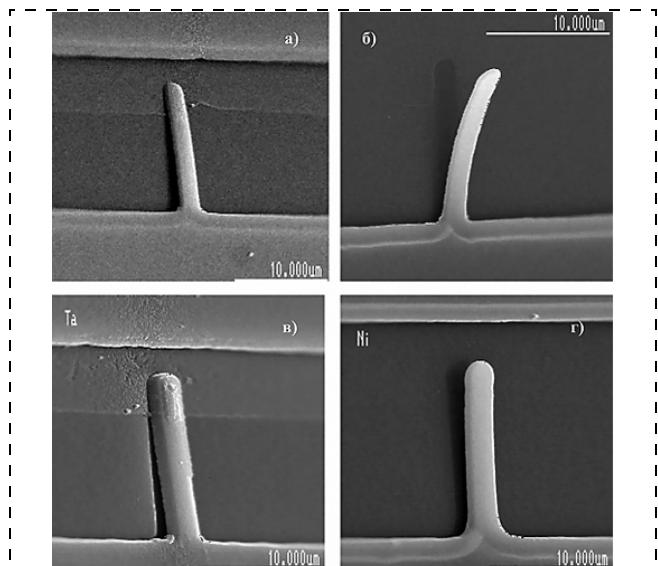


Рис. 5. Вид микроконсоли Ta_2O_5 :
а — после напыления 30 нм Ta; *б* — после напыления 30 нм Cr дополнительно; *в* — после напыления 100 нм Ta дополнитель но; *г* — после напыления 20 нм Ni

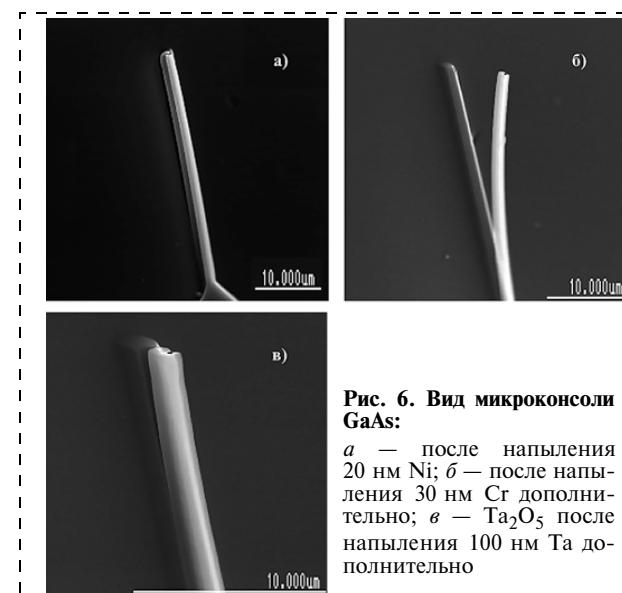


Рис. 6. Вид микроконсоли GaAs:

а — после напыления 20 нм Ni; *б* — после напыления 30 нм Cr дополнительно; *в* — Ta_2O_5 после напыления 100 нм Ta дополнительно

металлических слоев, можно точно регулировать направление, кривизну изгиба консолей и расстояние между свободным концом консоли и подложкой, что очень важно для сенсоров МЭМС.

Тепловые измерения

Измерения изгиба микроконсоли из Ta_2O_5 при изменении температуры проводились на структуре, показанной на рис. 5, *г*. Коэффициент теплового расширения никеля много больше, чем коэффициент теплового расширения оксида тантала, поэтому при нагревании микроконсоль должна отгибаться в сторону подложки. Для этого образец приклеивался к нагревателю и помещался в интерферометр. Нагревание проводилось до тех пор, пока микроконсоль не оказывалась параллельна подложке. Разница температур регистрировалась с помощью термопары. Эта разница составляла 142 °C. Ожидаемую зависимость отклонения от длины за счет теплового изгиба $z(x)$ данной биморфной консоли можно оценить, решая уравнение [6]

$$\frac{d^2z}{dx^2} = 6(\alpha_1 - \alpha_2) \left(\frac{t_1 + t_2}{t_2^2 K} \right) (T - T_0), \quad (4)$$

где $K = 4 + 6n + 4n^2 + \phi n^3 + (\phi n)^{-1}$; α_1 , α_2 — коэффициенты теплового расширения; t_1 , t_2 — толщины слоев; $n = t_1/t_2$; $\phi = E_1/E_2$ — отношение модулей Юнга. Решая это уравнение с граничными условиями в точке $x = 0$, $z = 0$, $dz/dx = 0$, получим зависимость

$$z(x) = cx^2, \quad \text{где } c = 3(\alpha_1 - \alpha_2) \left(\frac{t_1 + t_2}{t_2^2 K} \right) (T - T_0). \quad (5)$$

Подставляя значения $t_1 = 20$ нм, $t_2 = 200$ нм, $T - T_0 = 142$ К, $E_1 = 200$ ГПа, $E_2 = 127,3$ ГПа,

$\alpha_1 = 13 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, $\alpha_2 = 0,8 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ ($1 - \text{Ni}$, $2 - \text{Ta}_2\text{O}_5$), получим для $x = l = 12$ мкм значение изгиба $z = 0,4$ мкм. Это значение совпадает с экспериментально наблюдаемым изгибом. Свободный конец микроконсоли отогнут приблизительно на 0,5 мкм относительно уровня основания, а в результате нагрева он отгибается обратно до этого уровня.

Заключение

Изготовлены микроконсоли из оксида тантала и арсенида галлия, предназначенные для сенсоров МЭМС. С помощью атомно-силового микроскопа измерена их резонансная частота f_0 и статическая жесткость. Для GaAs $f_0 = 818\ 580$ Гц, для Ta_2O_5 $f_0 = 876\ 975$ Гц.

Разработаны методы управления изгибом микроконсолей. Показано, что путем напыления различных металлов (Ta, Cr, Ni) на консоль можно управлять направлением и радиусом ее изгиба, причем обратимым образом. Показано также, что изгибом биморфной консоли можно управлять путем изменения ее температуры. Данные методы

могут быть использованы для получения контролируемого субмикрометрового зазора между электродами, что необходимо для реализации различных первичных сенсоров [7].

Работа выполнена при поддержке Программ фундаментальных исследований ОФН РАН.

Список литературы

1. Yamaguchi H., Dreyfus R., Hirayama Y. Excellent electric properties of freestanding InAs membranes // Appl. Phys. Lett. 2001. V. 78. N 16. P. 2372–2374.
2. Nikishkov G. P., Khmyrova I., Ryzhii V. Finite element analysis of self-positioning microstructures and nanostructures // //Nanotechnology. 2003. N 14. P. 820–823.
3. Prack E. R. An introduction to process visualization in ESEM // Microscopy Research and Technique. 1993. V. 25. P. 487–492.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1965.
5. Физические величины / Под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
6. Lai J., Perazzo T., Shi Z., Majumdar A. Optimization and performance of highresolution micro-optomechanical thermal sensors // Sensors and Actuators. 1997. A 58. P. 113–119.
7. Шашкин В. И., Востоков Н. В., Вопилкин Е. А., Климов А. Ю., Волгунов Д. Г., Рогов В. В., Лазарев С. Г. О возможных конструкциях датчиков туннельно-эмиссионных акселерометров // Микросистемная техника. 2003. № 5. С. 3–6.

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МСТ

УДК 621.3.032.9

Д. А. Сеченов, д-р техн. наук,
О. А. Агеев, канд. техн. наук,
А. М. Светличный, канд. техн. наук,
А. Г. Клово, канд. физ.-мат. наук,
Таганрогский государственный радиотехнический
университет (ТРГУ)

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ БЫСТРОЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПОЛЯ В ГЕТЕРОГЕННЫХ СТРУКТУРАХ МЕТАЛЛ/КАРБИД КРЕМНИЯ

Рассмотрены вопросы влияния неоднородностей оптических свойств материалов и условий облучения на формирование температурных полей в гетерогенных структурах металл/карбид кремния при быстром нагреве некогерентным инфракрасным излучением. Определены режимы и условия нагрева с минимальными температурными градиентами.

Введение

Перспективы развития приборов микросистемной техники тесно связаны как с применением но-

вых материалов и их композиций, так и с внедрением технологических процессов, позволяющих повысить выход годных изделий и снизить их себестоимость [1–3].

Одним из перспективных технологических процессов микроэлектроники, позволяющих прецизионно воздействовать на структуру приборов и интегральных схем (ИС), является быстрая термообработка (БТО) некогерентным ИК-излучением [4, 5]. Однако наличие многослойных структур в составе приборов и ИС требует особого внимания к совместимости электрофизических и физико-механических свойств материалов для предотвращения дефектообразования и появления в структуре избыточных напряжений при изготовлении и эксплуатации приборов. Эти вопросы особенно актуальны для микромеханических систем, проектируемых для экстремальных условий эксплуатации при повышенных температурах. В таких системах в качестве основного материала используется карбид кремния [2–3].

Кроме того, увеличение стоимости материалов, натурных экспериментов и этапов разработки новых ИС и технологических процессов их производства повышают актуальность применения математического моделирования процессов, происходя-

щих в многослойных структурах ИС при изготовлении и эксплуатации [5].

Целью работы является определение условий и режимов БТО, которые характеризуются минимальными температурными градиентами и отсутствием условий генерации дефектов в гетерогенных структурах металл/SiC. Решение поставленной задачи проводилось методами моделирования температурных полей в структурах с различной степенью неоднородности оптических свойств.

Математическая модель

В расчетах предполагается, что прямоугольные структуры металл/SiC (P_1) расположены регулярно на поверхности подложки (P_2) (рис. 1). На такую структуру распространяется действие ряда предложений, позволяющих корректно сформулировать задачу расчета температурных полей при нестационарном нагреве [5, 6]:

- при длительности БТО $10\ldots10^2$ с реализуется режим теплового баланса с отсутствием температурных градиентов по толщине подложки;
- регулярность топологии определяет симметричность температурного поля по поверхности подложки;
- вследствие малой толщины металлических слоев теплофизические свойства карбида кремния являются определяющими при нагреве.

При этом задача сводится к расчету температурного поля в квадратной области (P_2), которая будет симметрично повторяться по всей поверхности подложки при облучении однородным потоком некогерентного излучения.

Постановка задачи и метод решения подробно описаны в работах [5, 6]. Закономерности температурных зависимостей оптических свойств карбида кремния рассматриваются в работах [6, 7]. В расчетах были использованы нелинейные температурные зависимости теплопроводности и теплоемкости [8, 9].

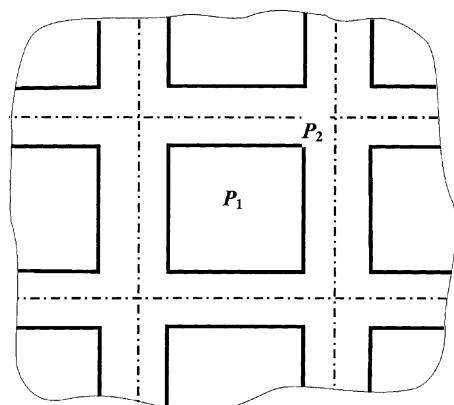


Рис. 1. Фрагмент топологии структуры

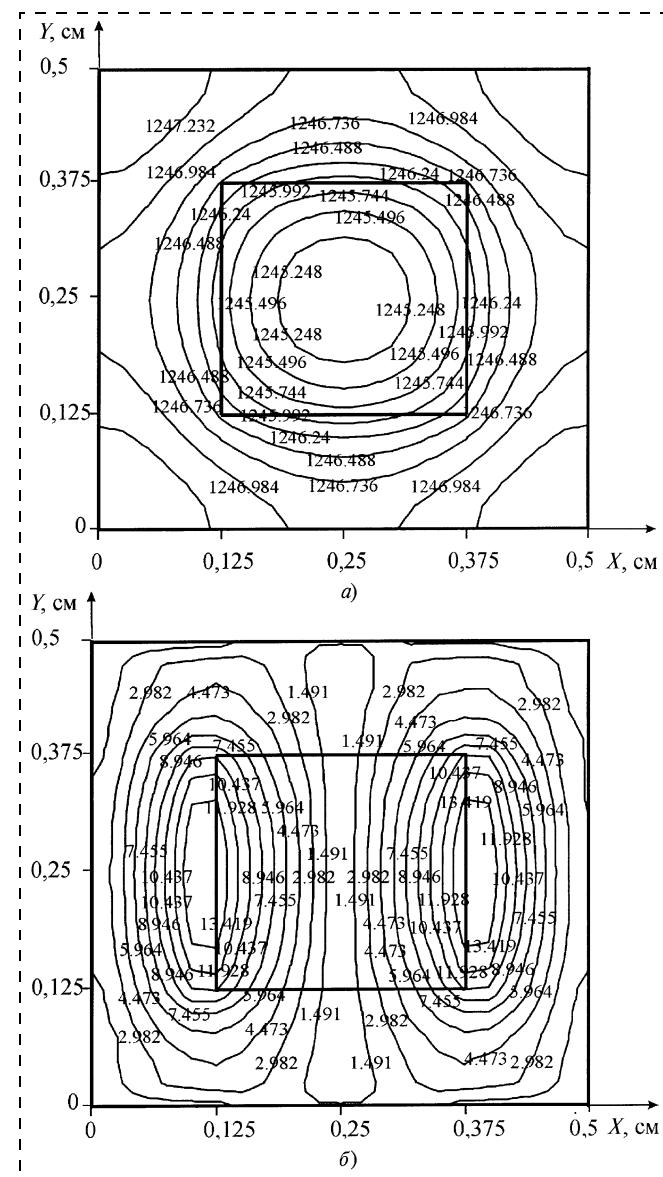


Рис. 2. Распределение температуры (в кельвинах) (а) и температурный градиент в направлении X (б) по поверхности структуры Ni/W/SiC n -типа проводимости с концентрацией азота 10^{18} см^{-3} при облучении лицевой стороны

На границе раздела металл/SiC при нагреве происходят сложные процессы формирования и преобразования метастабильных фаз силицидов и карбидов металлов, что сопровождается изменением оптических свойств пленочных покрытий, которое сложно учесть при расчетах [6]. Поэтому предполагалось, что между металлом и SiC находится тонкий слой металла, не взаимодействующего с SiC до температуры порядка 1400 К и выполняющего роль диффузационного барьера. Таким металлом может быть, например, вольфрам [10].

На рис. 2, а представлено рассчитанное распределение температуры на поверхности структуры Ni/W/SiC размером $0,5 \times 0,5$ см с 25 %-ным запол-

нением металлом площади подложки в режиме теплового баланса при облучении лицевой стороны с плотностью мощности $60 \text{ Вт}/\text{см}^2$. В расчетах предполагалось, что подложка из 6H-SiC легирована азотом до концентрации $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

На рис. 2, б и рис. 3 представлены распределения температурных градиентов в направлениях X , Y , XY . Видно, что температурные градиенты центрально симметричны. В направлениях X и Y их максимальные значения достигаются в центре границы пленочного покрытия, а в направлении XY — в углах покрытия.

На рис. 4 представлены временные зависимости температуры в центре и максимального температурного градиента в структуре Ni/W/SiC при об-

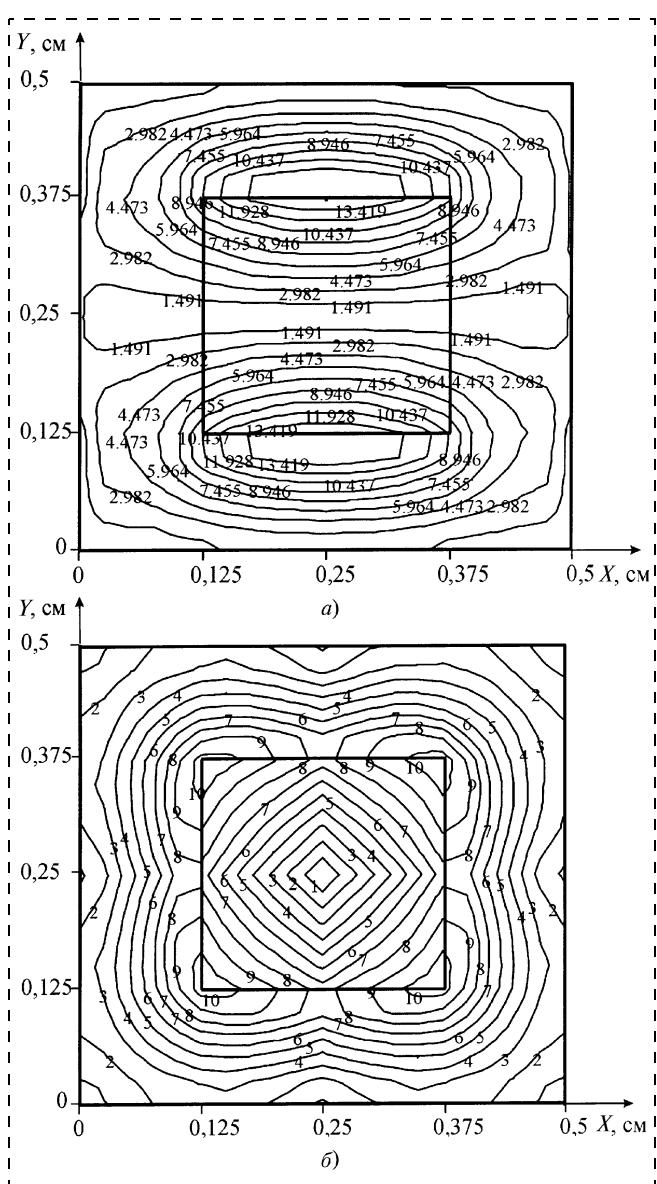


Рис. 3. Распределение температурных градиентов в направлении Y (а) и XY (б) по поверхности структуры, представленной на рис. 2, а

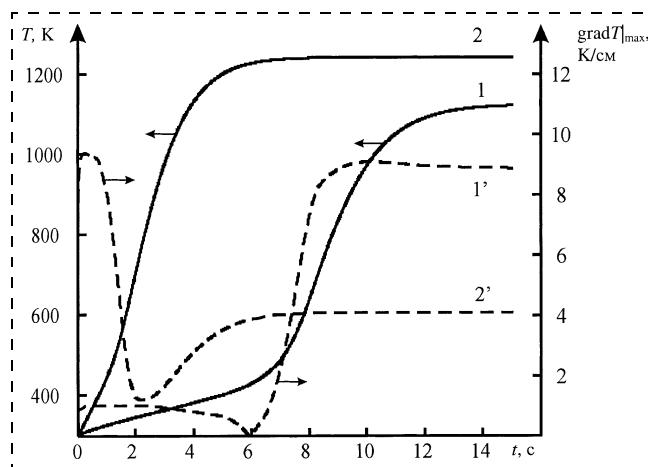


Рис. 4. Зависимости температуры (1, 2) и максимального температурного градиента (1', 2') от времени в структуре Ni/W/SiC n -типа проводимости с концентрацией азота 10^{18} см^{-3} при облучении лицевой (1, 1') и обратной (2, 2') стороны

лучении лицевой и обратной стороны и плотности мощности источника излучения $40 \text{ Вт}/\text{см}^2$.

Из представленных зависимостей следует, что температурные градиенты формируются на этапе нагрева (динамические, $\text{grad } T_{\text{din}}$) и в режиме теплового баланса (статические, $\text{grad } T_{\text{st}}$), что согласуется с данными работ [5, 6]. Сложный характер формирования температурных градиентов определяется суперпозицией потоков энергии, поглощающихся в областях с различными оптическими свойствами и отводимых за счет излучения, конвекции и теплопроводности.

Из рис. 4 следует, что при облучении лицевой стороны динамические температурные градиенты, зависящие от скорости нагрева, практически отсутствуют. Это связано с тем, что на начальном этапе (от 0 до 6 с) заметного нагрева структуры не происходит, поскольку область, покрытая металлом, практически полностью отражает излучение, а подложка, свободная от покрытий, пропускает его [5—7]. При температурах выше 500 К происходит увеличение коэффициента поглощения 6H-SiC, скорости нагрева подложки и температурного градиента в структуре [6]. Однако потери энергии за счет излучения и конвекции увеличиваются, а также происходит "выравнивание" температурного фронта за счет высокого коэффициента теплопроводности SiC, что вызывает стабилизацию температурного градиента на уровне $9 \text{ K}/\text{см}$. Эти процессы проходят в режиме теплового баланса, и максимальное значение температурного градиента зависит от температуры нагрева [5—7].

При облучении с обратной стороны в структуре проходят аналогичные процессы. Однако коэффициент поглощения излучения в области, покрытой металлом, больше чем в подложке, что определяет формирование динамических температурных гра-

дентов, максимальное значение которых зависит от скорости нагрева [5—7].

Необходимо отметить, что максимальные значения динамических градиентов формируются при низких значениях температуры, которым соответствуют большие значения критического напряжения пластической деформации [12]. При этом в подложке не возникает условий для генерации дислокаций, однако могут проходить процессы деформации и отслаивания пленочных покрытий.

На рис. 5 представлены зависимости температуры и максимального температурного градиента от времени в структуре Ni/W/SiC при двустороннем облучении для различной плотности мощности излучения. Анализ показывает, что формируются два пика динамических температурных градиентов, характеризующиеся разными знаками градиентов и температурой. Температура формирования второго пика (900...1000 K) соответствует началу резкого уменьшения критического напряжения пластической деформации [10], а значит, при этих режимах БТО возможно дефектообразование в подложке.

На рис. 6 представлены зависимости максимальных значений температурных градиентов в структуре Ni/W/6H-SiC от температуры и максимальной скорости нагрева при БТО. Анализ показывает, что при увеличении площади покрытия подложки металлом снижаются значения температурных градиентов, что объясняется повышением оптической однородности структуры.

Из представленных зависимостей следует, что при двустороннем облучении формируются температурные градиенты, меньшие, чем при одностороннем облучении. Следовательно, для снижения вероятности генерации дефектов в приборах и уве-

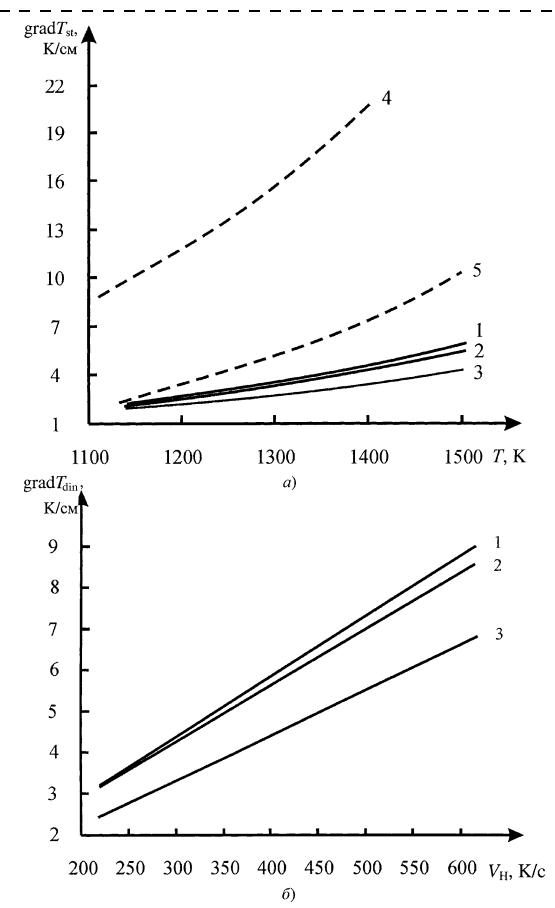


Рис. 6. Зависимости максимальных статических температурных градиентов от температуры (а) и динамических градиентов температуры от скорости нагрева (б) структуры Ni/W/6H-SiC *n*-типа проводимости с концентрацией азота 10^{18} см^{-3} для различной степени заполнения структуры — 1, 4, 5 — 25%; 2 — 50%; 3 — 75%, и облучения:

1, 2, 3 — двустороннего; 4 — с лицевой стороны; 5 — с обратной стороны

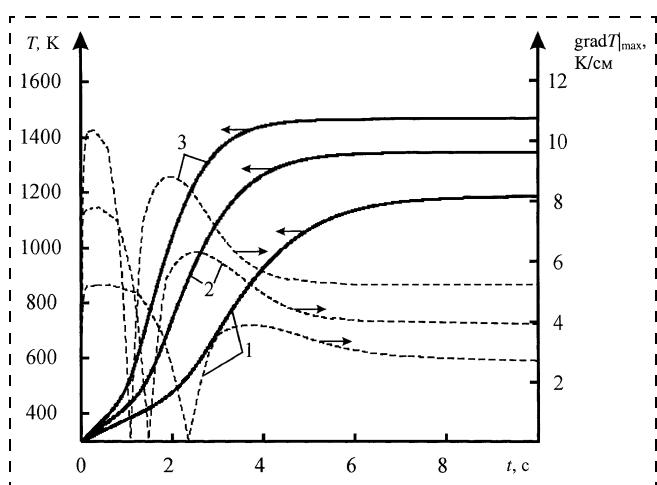


Рис. 5. Зависимости, аналогичные представленным на рис. 4, для двустороннего облучения при различной плотности мощности источника излучения ($\text{Вт}/\text{см}^2$):
1 — 40; 2 — 60; 3 — 80

личения выхода годных изделий необходимо использовать реакционные камеры с двусторонним облучением. При использовании камер с односторонним расположением световых панелей необходимо облучать подложки с обратной стороны.

Заключение

В работе установлено, что различия в оптических и теплофизических свойствах материалов, составляющих структуры интегральных микросхем (ИМС), приводят к формированию в них при БТО температурных градиентов даже при равномерной облученности. Предложена методика оптимизации режимов БТО структур ИМС на основе SiC, основанная на моделировании температурных полей, термоупругих напряжений и дефектообразования.

Установлено, что динамика формирования температурных полей и максимальные температурные градиенты в полупроводниковых структурах при

БТО зависят от соотношения оптических и теплophysical свойств материалов подложки и слоев, а также режимов БТО. При этом в структурах формируются статические и динамические температурные градиенты, максимальные значения которых зависят от температуры и скорости нагрева соответственно, а также условий облучения (одно- и двухстороннее).

Сравнение результатов расчетов с данными, полученными в [5] для структур Pt/Si, показывает, что хотя основные закономерности формирования температурных полей сохраняются, структуры металл/карбид кремния характеризуются меньшими температурными градиентами при БТО, что объясняется более высоким значением коэффициента теплопроводности у карбида кремния.

Список литературы

1. Мальцев П. П., Никифоров А. Ю. Технологии и изделия микроэлектромеханики // Микросистемная техника. 2001. № 10 С. 18–23.
2. Корляков А. В., Лучинин В. В., Мальцев П. П. Микроэлектромеханические структуры на основе композиции "карбид кремния — нитрид алюминия" // Микроэлектроника. 1999. Т. 28. № 1. С. 201–212.
3. Лучинин В. В., Таиров Ю. М., Васильев А. А. Особенности материаловедческого и технологического базиса микросистем // Микросистемная техника. 1999. № 1. С. 7–11.
4. Райнова Ю. П. Быстрые термические процессы: специфика, перспективы, проблемы // Известия вузов. Электроника. 2000. № 2. С. 25–31.
5. Сеченов Д. А., Касимов Ф. Д., Агаев Ф. Г., Светличный А. М., Агеев О. А. Активируемые процессы микроэлектронной технологии. Баку: ЭЛМ, 2000. 258 с.
6. Агеев О. А. Быстрая термообработка некогерентным ИК-излучением контактов к карбиду кремния. Таганрог: Изд-во ТРГУ, 2003. 128 с.
7. Agueev O. A., Svetlichny A. M., Soloviev S. I. Simulation of incoherent radiation absorption in 3C-, 6H-, and 4H-SiC at rapid thermal processing // Semiconductor Physics. Quantum Electronics & Optoelectronics. 2000. V. 3. N 3. P. 379–382.
8. Таиров Ю. М., Цветков В. Ф. Полупроводниковые соединения Al_xV_y. В кн.: Справочник по электротехническим материалам. Под ред. Ю. В. Корицкого, В. В. Пасынкова, Б. М. Тареева. Л.: Энергоатомиздат, 1988. Т. 3. С. 446–472.
9. Harris G. L. (Ed.) Properties of Silicon Carbide. London: INSPEC. 1995.
10. Goesmann F., Schmid-Fetzer R. Metals on 6H-SiC: contact formation from the materials science point of view // Materials Science and Engineering. 1997. B46. P. 357–362.
11. Samant A. V., Zhou W. L., Pirouz P. Effect of test temperature and strain rate on the yield stress of monocrystalline 6H-SiC // Phys. stat. sol. (a). 1998. 166. P. 155–169.

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МСТ

УДК 621.3.049

Н. А. Шелепин, д-р техн. наук,
ГУ НПК "Технологический центр" МИЭТ

ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ SPICE-МОДЕЛЕЙ МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Рассмотрены проблемы моделирования сложных функциональных микроэлектромеханических систем, в которых требуется совместный анализ функционирования микромеханической и электронной частей системы. Разработаны общие принципы создания SPICE-моделей тензорезистивных и емкостных преобразователей физических величин. Показаны возможности анализа характеристик датчика давления, состоящего из тензорезистивного преобразователя и инструментального усилителя, и емкостного акселерометра, чувствительный элемент которого представляет собой дифференциальный микромеханический конденсатор с подвижной средней обкладкой.

Введение

На современном этапе развития микросистемной техники (МСТ) и, соответственно, микроэлектромеханических систем (МЭМС) как одного из ее

разделов значительно возросла актуальность качественного моделирования и расчета параметров при их проектировании. Следует отметить, что ситуация развивается аналогично тому пути, который прошли системы моделирования и проектирования СБИС. В настоящее время при разработке сверхсложных интегральных схем, получивших название "система на кристалле", возможность их высококачественного и адекватного моделирования не просто обеспечивает сокращение затрат на экспериментальную отработку и доведение схемы до функционирования, а обуславливает принципиальную возможность их создания. При этом важнейшее значение приобретает возможность использования отработанных ранее сложных функциональных блоков (СФ блоков) при проектировании систем на кристалле.

Сегодня аналогичная ситуация начинает складываться и в области создания сложных функциональных МЭМС (СФ МЭМС), в которых электронная схема не только считывает сигналы с микромеханических электронных компонентов (резисторов, конденсаторов), но и управляет ими (например, поддерживает равенство номиналов емкостей на дифференциальном конденсаторе прецизионного акселерометра за счет сил электростатического взаимодействия). При этом ситуация значительно усложняется тем, что для их анализа зачастую недостаточно статических или динамических расче-

тров только микромеханической части системы. Необходимо обеспечить анализ, в том числе динамический, функционирования всей электронной схемы ФС МЭМС, чтобы определить ее характеристики. Отсюда следует вывод, что для реализации подобного анализа необходимо разработать модели электронных элементов МЭМС, учитывающие воздействие физических величин, которые можно было бы включить в состав системы для анализа и расчета электронных схем.

Модели электронных компонентов, разработанные компанией MICROSIM для системы моделирования PSPICE, являются практически мировым стандартом и используются в последующих поколениях систем моделирования БИС. В настоящей статье рассмотрены возможности создания SPICE-моделей для микроэлектромеханических преобразователей физических величин тензорезистивного и емкостного типов, которые могут быть использованы для моделирования характеристик соответствующих датчиков совместно с электронной схемой формирования сигнала.

1. Модели тензорезистивных преобразователей физических величин

1.1. Основные соотношения

Электрическая схема современных интегральных тензопреобразователей, как правило, представляет собой мост Уитстона, состоящий из четырех диффузных резисторов, сопротивления двух из которых увеличиваются, а двух уменьшаются вследствие возникновения в кристалле механических напряжений при воздействии соответствующей механической величины.

Не рассматривая изменение каждого тензорезистора, значение выходного сигнала чувствительной мостовой схемы можно представить в виде квадратичной зависимости с погрешностью, не превышающей 0,05 % от диапазона:

$$U_{\text{вых}} = U_M(V_0 + Sp + Qp^2), \quad (1)$$

где p — значение воздействующей физической величины; U_M — напряжение, приложенное к мостовой схеме; V_0 — "нулевой сигнал", т. е. значение выходного сигнала при отсутствии воздействия измеряемой физической величины, появляющийся вследствие технологического разброса параметров тензорезисторов и остаточных механических напряжений; S — чувствительность преобразователя, т. е. линейная составляющая передаточной характеристики; Q — коэффициент, определяющий нелинейность передаточной характеристики.

Данное утверждение основано на многочисленных экспериментальных данных, полученных в процессе разработок серии интегральных тензорезистивных преобразователей физических величин

(давления, ускорения, микроперемещения, силы) [1—3]. Очевидно, что три параметра (V_0 , S , Q) выражения (1) нормированы к напряжению питания мостовой схемы (т. е. должны быть определены для $U_M = 1$ В). Кроме того, эти параметры также зависят от температуры, и данная зависимость, в свою очередь, может быть выражена квадратным трехчленом, что обеспечивает достаточно высокую точность аппроксимации (не хуже 0,02 %):

$$V_0 = V_{00}(1 + K_{01}(T - T_0) + K_{02}(T - T_0)^2); \quad (2)$$

$$S = S_0(1 + K_{S1}(T - T_0) + K_{S2}(T - T_0)^2); \quad (3)$$

$$Q = Q_0(1 + K_{Q1}(T - T_0) + K_{Q2}(T - T_0)^2), \quad (4)$$

где T — температура, задаваемая для моделирования; T_0 — температура, при которой осуществляются измерения характеристик в нормальных условиях. Девять коэффициентов аппроксимации могут быть определены по результатам измерений передаточных характеристик преобразователей при нескольких значениях температуры.

1.2. Описание модели

Передаточная характеристика (1) с температурными зависимостями "нуля", чувствительности и нелинейности (2)–(4) в системе PSPICE может быть реализована различными способами. Наиболее простым является получение эквивалентной модели путем добавления к мостовой резистивной схеме двух зависимых источников напряжения (рис. 1).

Воздействие физической величины задается зависящим от времени параметром PD модели (табл. 1), а источники $U/2$ определяются с использованием математического аппарата PSPICE, как зависимые от PD (т. е. от физической величины), температуры и соответствующих коэффициентов, являющихся параметрами модели, значения которых определяются в соответствии с выражениями (1)–(4).

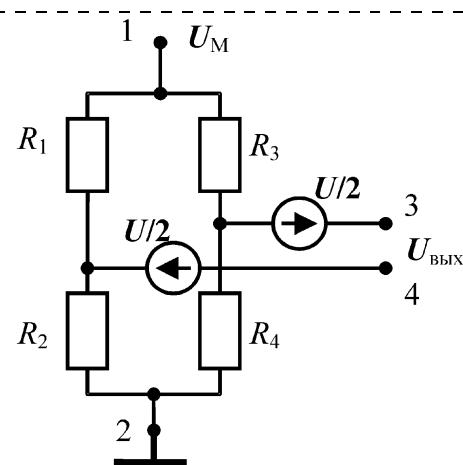


Рис. 1. Эквивалентная схема модели тензорезистивного преобразователя физических величин

Таблица 1

Параметры модели тензорезистивного преобразователя

Обозначение параметра	Наименование (обозначение в формулах (2)–(4))	Размерность	Значение по умолчанию
u0	Значение "нулевого сигнала" при температуре T_0 (V_{00})	В	0,0
Tk1u0	Линейный коэффициент температурной зависимости "нулевого сигнала" (K_{01})	$1/^\circ\text{C}$	0,0
Tk2u0	Квадратичный коэффициент температурной зависимости "нулевого сигнала" (K_{02})	$1/^\circ\text{C}^2$	0,0
s	Чувствительность преобразователя при температуре T_0 (S_0)	В/кПа	0,001
Tk1s	Линейный коэффициент температурной зависимости чувствительности (K_{S1})	$1/^\circ\text{C}$	-0,002
Tk2s	Квадратичный коэффициент температурной зависимости чувствительности (K_{S2})	$1/^\circ\text{C}^2$	0,0
q	Значение нелинейного (квадратичного) коэффициента характеристики преобразования при температуре T_0 (Q_0)	В/кПа 2	0,0
Tk1q	Линейный коэффициент температурной зависимости нелинейного коэффициента характеристики преобразования (K_{Q1})	$1/^\circ\text{C}$	0,0
Tk2q	Квадратичный коэффициент температурной зависимости нелинейного коэффициента характеристики преобразования (K_{Q2})	$1/^\circ\text{C}^2$	0,0
TEMPO	Температура T_0 Сопротивления резисторов мостовой схемы (R_1, R_2, R_3, R_4) Линейный температурный коэффициент резисторов мостовой схемы Квадратичный температурный коэффициент резисторов мостовой схемы	$^\circ\text{C}$ кОм $^\circ\text{C}^{-1}$ $^\circ\text{C}^{-2}$	0 3,0 0,776 · 10 $^{-3}$ 1,1127 · 10 $^{-5}$

Описанная модель не учитывает законы и особенности движения отдельных деталей МЭМС, т. е. предполагает однозначную зависимость выходного сигнала тензорезистивного моста от воздействия физической величины, без учета частотных характеристик. Это вполне допустимо для большинства областей применения тензорезистивных преобразователей давления, силы, микроперемещения. Очевидно, что для тензорезистивных преобразователей ускорения, так же как и для других типов акселерометров, необходима соответствующая доработка моделей.

На рис. 2 показаны передаточные характеристики преобразователя давления ТДМ, изготовленного на основе кристалла интегрального преобразователя давления ИПД-9. Маркерами обозначены экспериментальные значения, сплошными линиями — результаты расчета в PSPICE.

В качестве примера возможности совместного моделирования преобразователя и электронной схемы в системе SPICE на рис. 3 показана схема датчика давления, "собранная" из представленной

выше модели преобразователя и инструментального усилителя. Задавая в модели преобразователя изменение давления от нуля до 40 кПа, получаем соответствующее изменение значения выходного сигнала датчика от нуля до 5 В при подобранных значениях сопротивления RX1. Анализ схемы, в частности, показывает, что применение в схеме инструментального усилителя резисторов с номиналами 15, 20 и 40 кОм с температурным коэффициентом сопротивления, равным 0,0001, а резистора для установки номинального выходного сигнала при калибровке датчика (в данном случае 1 кОм) с температурным коэффициентом сопротивления 0,0025 обеспечивает компенсацию температурного коэффициента чувствительности (ТКЧ) преобразователя. Значение ТКЧ для датчика в целом составило не более $\pm 0,02 /^\circ\text{C}$ при значении соответствующего коэффициента преобразователя — $0,21 /^\circ\text{C}$.

2. Модели емкостных элементов

Среди МЭМС, на основе которых создаются приборы для управления движением, — акселерометры и датчики угловых скоростей (ДУС) или микрогироскопы, подавляющее большинство занимают емкостные микромеханические системы (ЕМС), в которых или съем сигнала об измеряемой физической величине, или электростатическое воздействие на подвижный элемент, или оба действия вместе реализуются с помощью одиночного или дифференциального микромеханического конденсатора. В одиночном конденсаторе одна обкладка является неподвижной, а вторая подвижной относительно твердотельной части системы. В дифференциальном конденсаторе подвижный электрод с точки зрения электронной схемы объединяет в себе две "внутренние" обкладки пары последовательно соединенных конденсаторов. Так как модели ЕМС в первую очередь предназначены для анализа акселе-

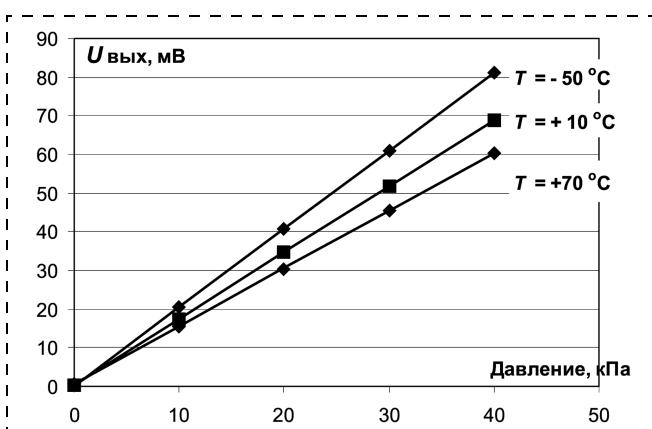


Рис. 2. Передаточные характеристики преобразователя давления ТДМ

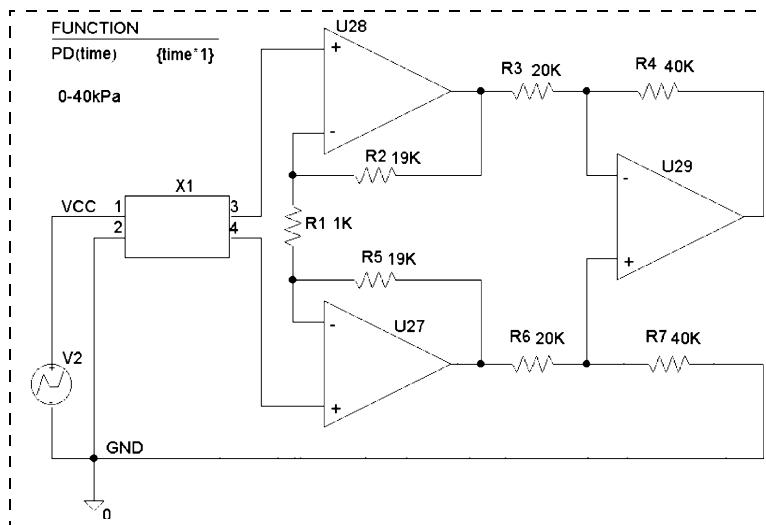


Рис. 3. Схема датчика давления (четырехполюсник с узлами (1, 2, 3, 4) — модель преобразователя давления с диапазоном измерения 40 кПа)

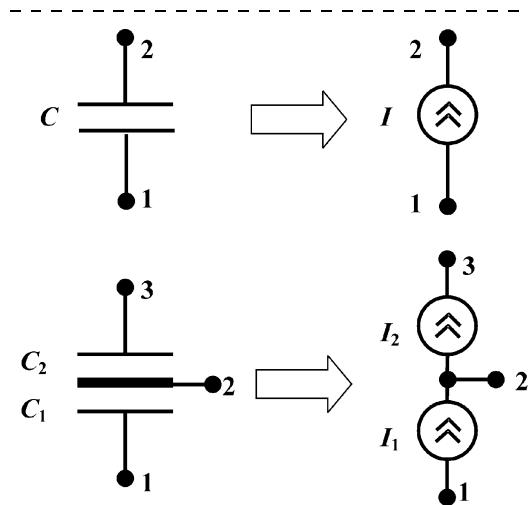


Рис. 4. Схемы замещения одиночного и дифференциального конденсаторов EMC зависимыми источниками тока

рометров или ДУС, то практический интерес представляет создание динамической модели, обеспечивающей получение зависимости перемещения подвижных элементов EMC от времени при воздействии сил упругости, инерции и электростатики.

2.1. Основные принципы построения SPICE-макромоделей EMC

Согласно математическому аппарату PSPICE, конденсатор EMC можно представить как "аналоговый функциональный блок", который может быть смоделирован с помощью источников напряжения (E) или тока (G). Очевидно, что для конденсатора зависимость между приложенным напряжением, протекающим током и изменяющейся во времени емкостью в более простом для моделирования виде выражается зависимостью тока от напряжения и емкости:

$$I = -\frac{dQ}{dt} = -\left(V \frac{dC}{dt} + C \frac{dV}{dt}\right). \quad (5)$$

Аналогичным образом схема дифференциального микромеханического конденсатора замещается трехполюсником с двумя источниками тока. При этом функциональная зависимость источников определяется выражениями

$$I_1 = -\frac{dQ_1}{dt} = -\left(V_{21} \frac{dC_1}{dt} + C_1 \frac{dV_{21}}{dt}\right); \quad (6)$$

$$I_2 = -\frac{dQ_2}{dt} = -\left(V_{32} \frac{dC_2}{dt} + C_2 \frac{dV_{32}}{dt}\right). \quad (7)$$

Схемы замещения показаны на рис. 4.

Расчет потенциалов в узлах схемы и их производных осуществляется в любой системе анализа электронных схем и соответственно в PSPICE. Следовательно, дальнейшим этапом разработки

динамических моделей EMC является математическое описание уравнений движения подвижных элементов EMC и соответствующее получение выражений для емкости.

Рассмотрим методику получения моделей для акселерометра на основе дифференциального микромеханического конденсатора. Практически все конструктивные варианты подобных акселерометров с точки зрения описания движения подвижного электрода можно разделить на два типа. К первому типу относятся конструкции с линейным перемещением подвижного электрода между жестко закрепленными неподвижными электродами (рис. 5).

В этом случае уравнение линейного перемещения в направлении, перпендикулярном плоскостям акселерометра, в системе координат, привязанной к неподвижным элементам акселерометра, определяется следующими силами:

- силой инерции вследствие воздействия внешнего ускорения;
- силой торможения, пропорциональной скорости движения, вызванной демпфированием, трением и другими видами потери энергии;
- силой упругости подвеса;
- силой электростатического притяжения вследствие разности потенциалов между обкладками конденсатора.

Поскольку все эти силы в данном случае описываются тривиальными выражениями, то общее уравнение выглядит следующим образом:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = ma - \eta \frac{dx}{dt} - kx + \frac{\epsilon S V_{12}^2}{2(x_0 + x)^2} - \frac{\epsilon S V_{32}^2}{2(x_0 - x)^2}. \quad (8)$$

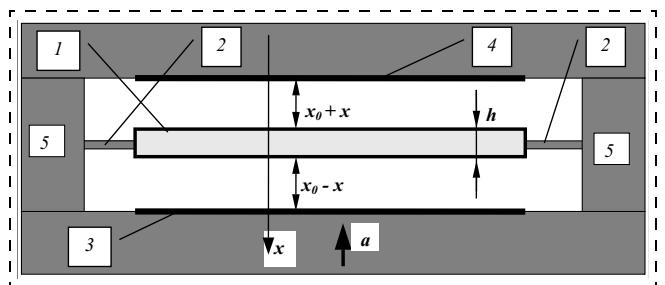


Рис. 5. Схема акселерометра на основе плоского микромеханического дифференциального конденсатора:

1 — кремниевый подвижный электрод; 2 — упругий подвес; 3 — подложка с первым управляемым электродом (напряжение V_{12} относительно подвижного электрода); 4 — подложка со вторым управляемым электродом (напряжение V_{32} относительно подвижного электрода); 5 — рамка крепления упругого подвеса

Математический аппарат и технические возможности PSPICE обеспечивают составление эквивалентной схемы и решение уравнения (8).

На рис. 6 показаны результаты расчета зависимости смещения подвижного электрода от времени в результате воздействия внешнего ускорения величиной $40g$ на акселерометр, характеристики которого представлены в табл. 2 при постоянном напряжении между подвижным и неподвижным электродами равном 5 В.

Полученная зависимость $x(t)$ определяет значения емкостей C_1 и C_2 :

$$C_1 = \frac{\varepsilon S}{(x_0 - x)}; \quad C_2 = \frac{\varepsilon S}{(x_0 + x)}, \quad (9)$$

что, в свою очередь, обеспечивает нахождение функциональных зависимостей (6) и (7).

Таким образом, на основе представленных соотношений получена эквивалентная SPICE-модель акселерометра на основе микромеханического дифференциального конденсатора. Модель обеспечила возможность совместного моделирования меха-

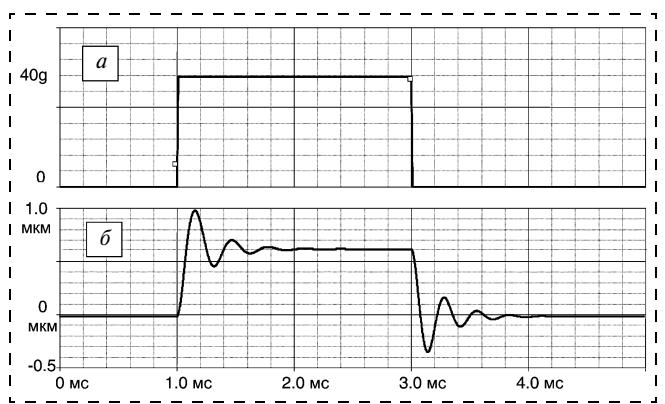


Рис. 6. Моделирование смещения подвижного электрода емкостного акселерометра в системе PSPICE:

a — воздействие ускорения; *б* — смещение

Таблица 2
Параметры модели емкостного акселерометра

Обозначение параметра	Наименование (обозначение в формуле (8))	Размерность	Значение
m	Масса подвижного электрода	кг	$5,256 \cdot 10^{-9}$
η	Коэффициент силы торможения (демпфирования)	$\text{Н} \cdot \text{с}/\text{м}$	$3,26 \cdot 10^{-5}$
k	Коэффициент жесткости упругого подвеса	Н/м	4,81
S	Площадь электродов	м^2	$123,75 \cdot 10^{-9}$
x_0	Расстояние между подвижным и неподвижным электродами в состоянии покоя	м	$2,0 \cdot 10^{-6}$
ε	Диэлектрическая постоянная	$\Phi/\text{м}$	$8,85 \cdot 10^{-12}$

нического движения подвижного электрода ЕМС и процессов в электрической схеме. Проведенное моделирование при подстановке различных параметров, изменении действующего ускорения и напряжений между электродами показали правильность сделанных предположений и совпадение результатов моделирования с оценками и расчетами, сделанными другими методами.

Разработанная методика применима к любой ЕМС, для которой определена математическая модель, аналогичная представленной выше уравнениями (6)–(9) для плоского дифференциального конденсатора.

Рассмотрим получение данной модели для второго конструктивного типа емкостного акселерометра, схема которого показана на рис. 7. В данной конструкции подвижный электрод может совершать вращательное (угловое) перемещение относительно оси, проходящей через центры торсионов упругого подвеса. Соответственно основными параметрами вместо смещения x и массы m будут угол поворота α и момент сил M .

Воздействие поперечного к поверхности кристалла ускорения будет поворачивать массу относительно торсионов вследствие разного размера левой и правой половинок маятника — L_1 и L_2 соответственно. Пусть W — ширина маятника и нижних электродов; X_1 , X_2 и X_3 , X_4 — координаты соответствующих границ управляемых электродов 3 и 4; $d(x, \alpha)$ — расстояние от маятника до поверхности электродов.

Рассмотрим моменты сил действующие на маятник:

- момент сил упругости вследствие кручения торсионов

$$M_{\text{уп}} = -f\alpha, \quad (10)$$

где f — модуль кручения торсионов;

- моменты, действующие на маятник вследствие внешнего ускорения a ,

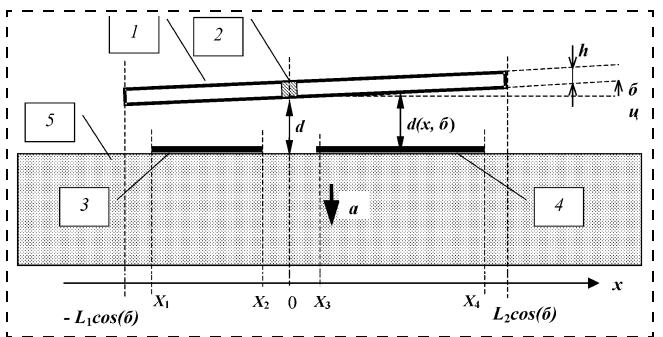


Рис. 7. Эскиз конструкции маятникового акселерометра:
1 — кремниевый маятник (подвижный электрод); 2 — торсионы подвеса; 3 — первый управляющий электрод (напряжение V_{12} относительно маятника); 4 — второй управляющий электрод (напряжение V_{32} относительно маятника); 5 — подложка

$$M(a) = \int_{-L_1 \cos(\alpha)}^{L_2 \cos(\alpha)} x a dm = a \rho W h \int_{-L_1 \cos(\alpha)}^{L_2 \cos(\alpha)} x dx = \\ = \frac{1}{2} a \rho W h (L_2^2 - L_1^2) \cos^2 \alpha, \quad (11)$$

где ρ — плотность; W и h — соответственно ширина и толщина маятника;

- моменты, действующие на маятник вследствие сил электростатического притяжения $F_{\text{эс}}$,

$$M_{\text{эс}_1} = \int_{X_1}^{X_2} x dF_{\text{эс}} = \int_{X_1}^{X_2} x \frac{\varepsilon V_{12}^2 W}{2(d + x \operatorname{tg} \alpha)^2} dx = \\ = \frac{\varepsilon V_{12}^2 W}{2(\operatorname{tg} \alpha)^2} \left[\ln \frac{1 + (X_2/d) \operatorname{tg} \alpha}{1 + (X_1/d) \operatorname{tg} \alpha} + \frac{1}{1 + (X_2/d) \operatorname{tg} \alpha} - \frac{1}{1 + (X_1/d) \operatorname{tg} \alpha} \right]; \quad (12)$$

$$M_{\text{эс}_2} = \frac{\varepsilon V_{32}^2 W}{2(\operatorname{tg} \alpha)^2} \left[\ln \frac{1 + (X_4/d) \operatorname{tg} \alpha}{1 + (X_3/d) \operatorname{tg} \alpha} + \frac{1}{1 + (X_4/d) \operatorname{tg} \alpha} - \frac{1}{1 + (X_3/d) \operatorname{tg} \alpha} \right]; \quad (13)$$

$$M_{\text{эс}} = M_{\text{эс}_1} + M_{\text{эс}_2}. \quad (14)$$

Следовательно, уравнение угловых колебаний маятника будет выглядеть следующим образом:

$$I \frac{d^2 \alpha}{dt^2} = M(a) - \lambda \frac{d\alpha}{dt} - f\alpha + M_{\text{эс}}, \quad (15)$$

где λ — коэффициент силы торможения (демпфирования);

$I = \frac{1}{3} \rho Wh (L_1^3 + L_2^3)$ — момент инерции маятника относительно оси торсионов.

Как и следовало ожидать, уравнение колебаний маятника (15) выглядит аналогично уравнению (8) при более сложной зависимости отдельных его составляющих от искомой функции. Для завершения математической модели к представленным уравнениям необходимо добавить зависимость емкостей от угла α :

$$C_1 = \int_{X_1}^{X_2} \frac{\varepsilon W dx}{d(x, \alpha)} = \left(\frac{\varepsilon W}{\operatorname{tg} \alpha} \ln \frac{d + X_2 \operatorname{tg} \alpha}{d + X_1 \operatorname{tg} \alpha} \right); \quad (16)$$

$$C_2 = \int_{X_3}^{X_4} \frac{\varepsilon W dx}{d(x, \alpha)} = \left(\frac{\varepsilon W}{\operatorname{tg} \alpha} \ln \frac{d + X_4 \operatorname{tg} \alpha}{d + X_3 \operatorname{tg} \alpha} \right). \quad (17)$$

Данные выражения имеют неопределенность при значениях $\alpha = 0$. Поэтому в области малых значений углового смещения (т. е. именно в области функционирования акселерометра) их вид для практических расчетов при моделировании должен быть изменен согласно правилам нахождения пределов функции при $\alpha \rightarrow 0$:

$$C_1 = \varepsilon W \left(\frac{X_2}{d + X_2 \operatorname{tg} \alpha} - \frac{X_1}{d + X_1 \operatorname{tg} \alpha} \right); \quad (18)$$

$$C_2 = \varepsilon W \left(\frac{X_4}{d + X_4 \operatorname{tg} \alpha} - \frac{X_3}{d + X_3 \operatorname{tg} \alpha} \right). \quad (19)$$

Выводы

Разработаны методы получения SPICE-моделей тензорезистивных и емкостных преобразователей физических величин. На примере кремниевого преобразователя давления показан метод экстракции параметров разработанной модели и смешанного расчета передаточной характеристики электронной схемы датчика, состоящего из модели преобразователя и инструментального усилителя. Разработана общая методика получения моделей для емкостных микроэлектромеханических систем, которая представлена на примере двух типов акселерометров. Показана практическая возможность моделирования смещения подвижного электрода микромеханического конденсатора и совместного моделирования преобразователя при воздействии физических величин и электронных схем формирования сигнала.

Список литературы

- Галушкин А. И., Зимин В. Н., Чаплыгин Ю. А., Шелепин Н. А. Кремниевые интегральные датчики физических величин на основе технологий микроэлектроники // Электронная промышленность. 1995. № 4—5. С. 95—101.
- Сауров А. Н., Зимин В. Н., Уманцев А. В., Шелепин Н. А. Микродатчики давления и микросистемы на их основе // Датчики и системы. 1999. № 4. С. 28—32.
- Шелепин Н. А. Кремниевые микросенсоры и микросистемы // Микросистемная техника. 2000. № 1. С. 40—43.
- Разевич В. Д. Система проектирования OrCAD 9.2. М.: Солон-Р, 2001. 519 с.

УДК 621.382

И. И. Абрамов, д-р физ.-мат. наук, проф.,
И. А. Гончаренко, Н. В. Коломейцева,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники (Минск)

КОМБИНИРОВАННАЯ ДВУХЗОННАЯ МОДЕЛЬ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ С ОДНИМ ТУННЕЛЬНЫМ ПЕРЕХОДОМ И ПРОТЯЖЕННЫМИ ПРИКОНТАКТНЫМИ ОБЛАСТЯМИ

Предложена комбинированная двухзонная численная модель гетероструктуры с одним туннельным переходом и протяженными приконтактными областями с учетом междолинного рассеяния. Результаты сравнения вольт-амперных характеристик для прибора на GaAs/AlAs, полученных с помощью разработанных однозонной и двухзонной моделей, показали не только существенное количественное, но и качественное различие характеристик с ростом прикладываемых смещений.

Введение

Одно из наиболее перспективных направлений наноэлектроники — разработка приборов и элементов ИС на основе гетероструктур [1, 2]. Физика и моделирование таких приборных структур чрезвычайно сложны вследствие дополнительного влияния на транспорт в них гетерограниц, так как физические процессы на данных границах изучены явно недостаточно. В ряде публикаций, например [3, 4], показано, что в гетероструктурах имеет место междолинное рассеяние, которое может оказывать существенное влияние на транспорт носителей заряда, поэтому для адекватного анализа разнообразных наноэлектронных приборов и элементов ИС на основе гетероструктур необходимо разрабатывать многозонные модели. Более того, необходимо учитывать, что в реальных структурах наноэлектроники кроме активных областей, как правило, включающих наноструктуры, существуют и будут существовать достаточно протяженные (макроскопические или классические) области. Их взаимодействие может быть также важным, поэтому целесообразно разрабатывать в соответствии с классификацией [5] комбинированные модели приборов наноэлектроники [6] на основе полуклассического и квантовомеханического подходов.

Целью статьи является описание предложенной комбинированной двухзонной модели относительно простого прибора — гетероструктуры с одним туннельным переходом и протяженными приконтактными областями.

Модель

Модель разработана на основе однозонной комбинированной модели [6] и двухзонной модели [3, 7]. Она позволяет рассчитывать волновые функции, самосогласованный заряд и потенциал, коэффициент прозрачности, вольт-амперные характеристики (ВАХ) в зависимости от конструктивно-технологических и электрофизических параметров приборной структуры. Ее главная особенность — возможность учета взаимодействия различных классических и квантовомеханических областей исследуемого прибора, а также учет Г-Х междолинного рассеяния.

Рассмотрим предложенную модель. Важным в ней является представление исследуемого прибора в виде трех типов областей: контактных, приконтактных и активной. В активную область нами включены непосредственно потенциальный барьер и спейсеры.

Влияние контактов учитывалось с помощью контактной разности потенциалов [5]. В приконтактных областях вместо приближения Томаса—Ферми для подвижных носителей заряда [3, 7] используется более простая Больцмановская аппроксимация статистики Ферми—Дирака, в которой учтено влияние эффектов сильного легирования [5], а именно:

$$n = n_{ie} \exp\left(\frac{(\Phi - F_n)q}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где n_{ie} — эффективная собственная концентрация; Φ — электростатический потенциал; F_n — квазипотенциал Ферми электронов; k_B — постоянная Больцмана; T — температура; q — заряд электрона.

На первом этапе в модели осуществляется самосогласованное решение уравнения Шредингера для основной зоны в активной области прибора и уравнения Пуассона в области прибора между контактами следующего вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) + V\psi = E\psi; \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_S \epsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = -q(N_D - n), \quad (3)$$

где \hbar — приведенная постоянная Планка; m^* — эффективная масса электрона; ψ — волновая функция; E — энергия электрона; V — потенциальная энергия электрона; ϵ_S — относительная диэлектрическая проницаемость среды; ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума; N_D — концентрация ионизированных доноров. Таким образом, как и в работах [3, 4, 6–8], нами использовался формализм волновых функций, а также одночастичное приближение и метод эффективной массы.

В активной области концентрация электронов n вычисляется с привлечением волновых функций

$\psi(E_k)$ и концентрации электронов для каждого из состояний k по известной формуле [7], которая в нашем случае принимает вид:

$$n = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_k |\psi(E_k)|^2 \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_k + \Delta E_C - q(\Phi - F_n)}{k_B T} \right) \right), \quad (4)$$

где ΔE_C — разрыв основной зоны проводимости барьера относительно квантовой ямы.

Опишем метод реализации модели. Начальное приближение для потенциала Φ задается исходя из предположений: электронейтральности и справедливости для подвижных носителей заряда больцманновской аппроксимации (1) для всего прибора; постоянства квазипотенциала Ферми в приконтактных областях и его линейного изменения в активной области. Последнее предположение применяется и далее в процессе самосогласованного расчета.

Для вычисления заряда в активной области решается уравнение Шредингера (2) в виде задачи переноса [6, 8]. С этой целью на границах области решения в точках с индексами 0 и p волновые функции задаются как комбинация падающей (прошедшей) и отраженной волн, а именно:

$$\psi_0 = \exp(i k_e x) + A^- \exp(-i k_e x), \quad (5)$$

$$\psi_p = B^+ \exp(i k_c x), \quad (6)$$

где k_e , k_c — волновые векторы в эмиттере и коллекторе; A^- , B^+ — амплитуды отраженной и про-

шедшей волн. В ряде же известных моделей самосогласованный потенциал рассчитывается для задачи с фиксированными значениями волновых функций на границах активной области, что приводит к определенным погрешностям [7].

После решения уравнения Шредингера проводится нормировка волновых функций. Затем решается линеаризованное уравнение Пуассона относительно поправки $\delta\Phi$ для всего прибора (приконтактные и активная области) следующего вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_S \varepsilon_0 \frac{\partial \delta\Phi}{\partial x} \right) - q \frac{\partial n(\Phi)}{\partial \Phi} \delta\Phi = \\ = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_S \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + q(N_D - n(\Phi)) \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Данный процесс продолжается до полной сходимости. Таким образом, уравнение Шредингера для основной зоны и уравнение Пуассона совместно решаются с помощью системного метода последовательной концепции [5, 6]. При этом согласно (7) учитывается нелинейная зависимость заряда от электростатического потенциала как в классических (приконтактных), так и в квантовомеханических областях с помощью производной $\partial n(\Phi)/\partial \Phi$. Определение последней осуществляется на основе формул (1) и (4) соответственно.

На втором этапе в модели с целью учета влияния междолинного Γ - X рассеяния решаются два связанных уравнения Шредингера [3, 7], которые в нашем случае принимают вид:

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^\Gamma} \frac{\partial}{\partial x} + V^\Gamma - q\Phi(x) - E + \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m^\Gamma} & \alpha\delta(x) \\ \alpha\delta(x) & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^X} \frac{\partial}{\partial x} + V^X - q\Phi(x) - E + \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m^X} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi^\Gamma \\ \psi^X \end{bmatrix} = 0, \quad (8)$$

где m^Γ и m^X — эффективные массы для Γ - и X -зон в соответствующем слое материала; ψ^Γ и ψ^X — волновые функции Γ - и X -зон; k_{II} — поперечный волновой вектор; V^Γ — высота барьера в Γ -зоне; V^X — высота барьера в X -зоне; α — константа взаимодействия; δ — функция Дирака; $\Phi(x)$ — электростатический потенциал, вычисленный на первом этапе.

Опишем конечно-разностные аппроксимации для уравнений Шредингера и Пуассона, используемые в разработанной численной модели. Для их вывода использовался интегриоинтерполяционный подход Тихонова—Самарского [5].

Так, в более сложном случае двух зон аппроксимация для уравнений Шредингера (8) для внутренних узлов сетки пространственной дискретизации i имеет вид:

$$\psi_{i+1}^R = \left[\frac{h_{i+1} m_i^R (h_i + h_{i+1}) \left(V_i^R - E + \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m_i^R} \right)}{\hbar^2} + \frac{h_{i+1}}{h_i} + 1 \right] \psi_i^R - \frac{h_{i+1}}{h_i} \psi_{i-1}^R + \frac{m_i^R h_{i+1} (h_i + h_{i+1})}{\hbar^2} \alpha\delta_i \psi_i^P, \quad (9)$$

где в величине V_i^R учтен электростатический потенциал.

Во внутренних граничных точках i используются соотношения:

$$\psi_i^{R-} = \psi_i^{R+}, \quad (10)$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_R} \frac{\partial}{\partial x} \psi_i^{R-} - \frac{1}{m_R} \frac{\partial}{\partial x} \psi_i^{R+} \right] + \alpha \psi_i^P = 0, \quad (11)$$

что позволяет получить следующую аппроксимацию для уравнений Шредингера на гетерограницах:

$$\begin{aligned} \psi_{i+1}^R &= \left(\frac{h_{i+1} m_i^{R+}}{\hbar^2} \left(h_i (V_i^{R-} - E + \frac{\hbar^2 k_H^2}{2m_i^{R-}}) + \right. \right. \\ &+ h_{i+1} (V_i^{R+} - E + \frac{\hbar^2 k_H^2}{2m_i^{R+}}) \left. \right) + \frac{h_{i+1}}{h_i} \frac{m_i^{R+}}{m_i^{R-}} + 1 \times \\ &\times \psi_i^R - \frac{h_{i+1}}{h_i} \frac{m_i^{R+}}{m_i^{R-}} \psi_{i-1}^R + \frac{\alpha h_{i+1} m_i^{R+}}{\hbar^2} (h_i \delta_i^- + \\ &\left. + h_{i+1} \delta_i^+ + 2) \psi_i^P. \right. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь для Γ -зоны $R = \Gamma$, $P = X$, для X -зоны $R = X$, $P = \Gamma$; индексами $R-$ и $R+$ обозначены значения в граничной точке по разные стороны от границы раздела; i — номер узла сетки пространственной дискретизации; h_i — шаг сетки, равный $x_i - x_{i-1}$, x_i — узел сетки пространственной дискретизации.

В результате конечно-разностной аппроксимации два связанных уравнения Шредингера (8) сводятся к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида:

$$A\psi = f, \quad (13)$$

где A — пятидиагональная матрица (несимметрическая); ψ — вектор-столбец, включающий значения волновой функции ψ_i в узлах сетки пространственной дискретизации для двух зон; f — вектор-столбец правых частей. СЛАУ (13) решается с помощью прямого численного метода, учитывающего вид матрицы коэффициентов.

Конечно-разностная аппроксимация для уравнения Пуассона во внутренних граничных точках i имеет вид:

$$\begin{aligned} \Phi_{i-1} \frac{2\epsilon_S^{\Gamma-}}{h_i(h_i + h_{i+1})} + \Phi_i \left(-\frac{2\epsilon_S^{\Gamma-}}{h_i(h_i + h_{i+1})} - \right. \\ - \frac{2\epsilon_S^{\Gamma+}}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} + \frac{2D_{Si}}{h_i + h_{i+1}} \left. \right) + \\ + \Phi_{i+1} \frac{2\epsilon_S^{\Gamma+}}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} = \frac{2D_{Si}\Phi^0\pi}{h_i + h_{i+1}} - \\ - \frac{q}{\epsilon_0} \left(\frac{h_i}{h_i + h_{i+1}} (N_{Di}^{\Gamma-} - n_i^{\Gamma-}) + \right. \\ \left. + \frac{h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}} (N_{Di}^{\Gamma+} - n_i^{\Gamma+}) \right), \end{aligned} \quad (14)$$

где D_S — энергетическая плотность состояний; $\Phi^0\pi$ — электростатический потенциал поверхности в равновесных условиях в предположении отсутствия поверхностных состояний; $\Gamma-$ и $\Gamma+$ — значения в граничной точке по разные стороны от границы раздела. Узлы сетки пространственной дискретизации приходятся на границы раздела двух сред, так же как и для уравнений Шредингера. Аппроксимация для внутренних точек i является частным случаем (14), т. е. $\epsilon_S^{\Gamma-} = \epsilon_S^{\Gamma+}$, $N_{Di}^{\Gamma-} = N_{Di}^{\Gamma+}$, $n_i^{\Gamma-} = n_i^{\Gamma+}$, $D_{Si} = 0$.

Решение СЛАУ относительно вектора поправки $\delta\Phi$, следующего из (7) после описанной конечно-разностной аппроксимации, осуществляется с помощью метода прогонки.

Расчет коэффициента прозрачности проводится по формуле

$$T = |1/B^+|^2 (k_{\kappa}^R m_{\Theta}^R) / (k_{\Theta}^R m_{\kappa}^R), \quad (15)$$

где k_{Θ}^R и k_{κ}^R — волновые векторы основной зоны в областях эмиттера и коллектора, m_{Θ}^R и m_{κ}^R — эффективные массы в областях эмиттера и коллектора для основной зоны.

Далее плотность тока вычисляется на основе формулы Тсу—Есаки [9].

Отметим, что в разработанной модели уравнение (8) решается только один раз, что позволяет значительно экономить время расчета на ЭВМ. Это допустимо вследствие того, что электростатический потенциал определяется, главным образом, подвижными носителями заряда основной зоны, что также предполагалось и в модели [3, 7].

На основе предложенной модели была разработана программа, включенная в систему моделирования наноэлектронных приборов NANODEV [10]. Все приводимые ниже результаты получены с ее использованием.

Результаты моделирования

Исследования проводились для гетероструктуры с одним туннельным переходом, изготовленной на основе GaAs/AlAs. Барьер AlAs шириной 4 нм (40 Å) расположен между спайсерными слоями GaAs с шириной 5 нм (50 Å), к которым прилегают протяженные приконтактные области с шириной 100 нм (1000 Å), т. е. структура симметрична. Приконтактные области (эмиттер и коллектор) легированы донорной примесью 10^{18} см^{-3} , а спайсеры — 10^{14} см^{-3} . Поверхностные состояния на границе раздела двух сред в (14) в данных исследованиях не учитывались. Все расчеты проводились для случая равномерной сетки с шагом 0,14 Å (0,014 нм).

При вычислениях использовались следующие значения параметров [3]: высота барьеров для Г-зон (основная) и X-зон в GaAs и AlAs $V_{\text{GaAs}}^{\Gamma} = 0$ эВ, $V_{\text{AlAs}}^{\Gamma} = 1,0$ эВ, $V_{\text{GaAs}}^X = 0,48$ эВ, $V_{\text{AlAs}}^X = 0,19$ эВ; эффективные массы для Г- и X-зон в GaAs и AlAs $m_{\text{GaAs}}^{\Gamma} = 0,067m_0$, $m_{\text{AlAs}}^{\Gamma} = 0,15m_0$, $m_{\text{GaAs}}^X = 1,30m_0$, $m_{\text{AlAs}}^X = 1,10m_0$, где m_0 — масса покоя электрона; диэлектрические проницаемости областей для GaAs и AlAs $\epsilon_S = 12,91$ и $\epsilon_S = 10,06$; константа взаимодействия $\alpha = 0,175$ эВ· \AA , поперечный волновой вектор $k_H = 2 \cdot 10^8$ м $^{-1}$.

На рис. 1 приведены результаты расчета коэффициента прозрачности, полученные с помощью однозонной (кривая 1) и двухзонной (кривая 2) моделей, при напряжении на приборе $U = 0,3865$ В и температуре $T = 77$ К. Отметим качественное отличие результатов. Так, двухзонная модель дает ярко выраженные резонансные пики в коэффициенте прозрачности. Их наличие объясняется междолинным рассеянием, приводящим к интерференции ψ^{Γ} и ψ^X волн. Данные результаты неплохо согласуются с результатами, приведенными на рис. 2, а работы [3]. В то же время результаты с $\alpha = 0$ эВ· \AA (кривая 1) практически совпадают с результатами однозонной модели [6] для исследуемого прибора.

Рис. 2 иллюстрирует результаты расчета ВАХ прибора, полученные с помощью однозонной (кривая 1) и двухзонной (кривая 2) моделей. Как следует из рисунка, они хорошо согласуются лишь при малых напряжениях $U \leq 0,25$ В. При больших U результаты различаются качественно. Так, ВАХ для двухзонной модели имеет вид, характерный для резонансно-туннельного диода (РТД), т. е.

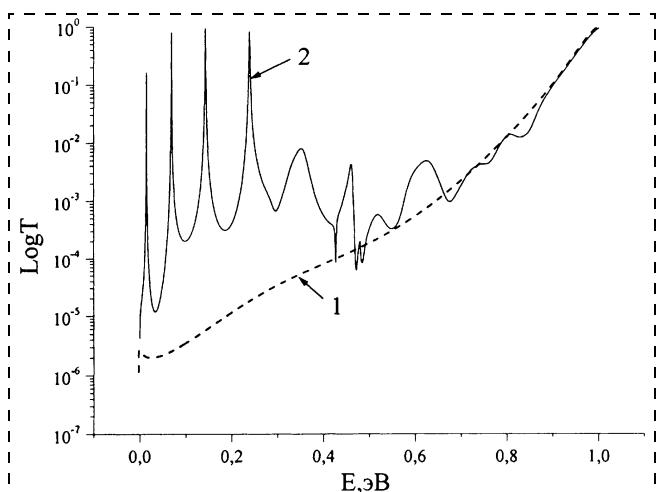


Рис. 1. Коэффициент прозрачности T , вычисленный с помощью двухзонной модели:

1 — $\alpha = 0$ эВ· \AA ; 2 — $\alpha = 0,175$ эВ· \AA

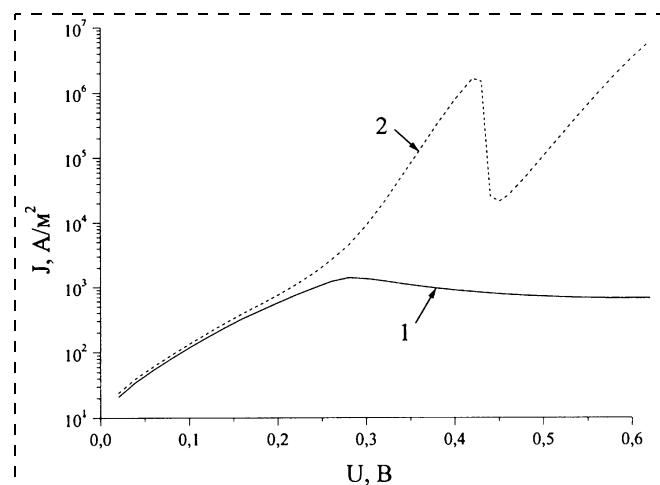


Рис. 2. ВАХ прибора, рассчитанные с использованием однозонной (1) и двухзонной (2) моделей

прибора с большим числом барьеров. Напомним, что рассматриваемая приборная структура с одним барьером. Полученные результаты могут быть объяснены с помощью данных рис. 1. Причина такого качественного совпадения с ВАХ РТД связана с резонансным характером (см. рис. 1) прохождения носителей через однобарьерную структуру, причем при относительно небольших энергиях, вследствие Г-Х-рассеяния носителей заряда на гетерогранице. Туннелирование заряда через барьер и взаимодействие носителей Г-зоны и X-зоны приводит также к существенному (на несколько порядков!) увеличению пикового значения тока. Заметим, что наличие области отрицательной дифференциальной проводимости в приборе на гетероструктуре с одним туннельным переходом подтверждается экспериментально [11] и теоретически [12]. Приведенные данные свидетельствуют об адекватности предложенной двухзонной модели.

Заключение

Разработана комбинированная двухзонная численная модель гетероструктуры с одним туннельным переходом и протяженными приконтактными областями, основанная на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Модель характеризуется повышенной эффективностью. На ее основе разработана программа, включенная в систему моделированияnanoэлектронных приборов NANODEV. Результаты моделирования для прибора на GaAs/AlAs, полученные с помощью разработанных однозонной и двухзонной моделей, показали существенные различия (качественные и количественные) ВАХ с ростом прикладываемого напряжения. Предложенная двухзонная численная модель может быть легко модифицирована для анализа многобарьерных резонансно-туннельных структур, в частности РТД.

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность проф. George I. Haddad за любезно предоставленные оттиски работ.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Республиканских государственных научно-технических программ фундаментальных исследований "Электроника" и "Нанотех".

Список литературы

1. Алферов Ж. И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. 32(1). С. 3—18.
2. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compano. European Commission, IST programme, Future and Emerging Technologies. 2000. 104 p.
3. Sun J. P., Mains R. K., Yang K., Haddad G. I. A self-consistent model of Г-Х mixing in GaAs/AlAs/GaAs quantum well structures using the quantum transmitting boundary method // J. Appl. Phys. 1993. 74(8). P. 5053—5060.
4. Караваев Г. Ф., Воронков А. А. Влияние собственного поля электронов и Г-Х междолинного рассеяния на резонансное туннелирование в двухбарьерных структурах // Известия высших учебных заведений. Физика. 2003. № 1. С. 78—85.
5. Абрамов И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск: БГУ, 1999. 189 с.
6. Абрамов И. И., Гончаренко И. А. Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Электромагнитные волны и электронные системы. 2002. 7(3). С. 54—60.
7. Sun J. P. Modeling of semiconductor quantum devices and its applications // Ph. D. Theses, Dep. of EECS, Univ. of Michigan, Ann Arbor. 1993. Р. 35—41.
8. Абрамов И. И., Гончаренко И. А. Расчет ВАХ двухбарьерных резонансно-туннельных структур на различных сетках пространственной дискретизации // Новые технологии изготовления многоクリстальных модулей: Материалы Международной научно-техн. конф., Минск, 2000. С. 90—92.
9. Tsu R., Esaki L. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Lett. 1973. 22(11). P. 562—564.
10. Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Игнатенко С. А., Королев А. В., Новик Е. Г., Рогачев А. И. Система моделированияnanoэлектронных приборов — NANODEV // Микроэлектроника. 2003. 32(2). С. 124—133.
11. Beresford R., Luo L. F., Wang W. I., Mendez E. E. Resonant tunneling through X-valley states in GaAs/AlAs/GaAs single-battier heterostructures // Appl. Phys. Lett. 1989. 55. P. 1555—1557.
12. Liu H. C. Resonant tunneling through single layer heterostructures // Appl. Phys. Lett. 1987. 51(13). P. 1019—1021.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И БИОЭЛЕКТРОНИКА

УДК 623.4.084.2

В. М. Агафонов, В. Г. Криштоп,
Московский физико-технический институт,
г. Долгопрудный, Московская обл.

ИССЛЕДОВАНИЕ АЧХ МОЛЕКУЛЯРНО-ЭЛЕКТРОННОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ С НОВОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ

Молекулярно-электронные преобразователи (МЭП) применяются в качестве чувствительных элементов сейсмоприемников и промышленных акселерометров. В работе обсуждается один из возможных способов адаптации геометрии МЭП для изготовления с использованием стандартных микроэлектронных технологий. Теоретически исследуется амплитудно-частотная характеристика (АЧХ) молекулярно-электронного преобразователя с цилиндрическими электродами. Проводится сравнение теоретического расчета с экспериментальными данными для стандартных МЭП на высоких частотах.

Введение

Молекулярно-электронные преобразователи (МЭП) широко применяются в качестве чувствительных элементов сейсмоприемников и промышленных акселерометров. Приборы на основе МЭП не содержат элементов точной механики, и в то же время их характеризует высокая эффективность

преобразования механического сигнала в электрический на уровне происходящих в МЭП физических процессов, а не только с помощью корректирующей электроники, что позволяет им успешно соперничать со значительно более дорогими прецизионными электромеханическими и магнитомеханическими приборами.

В настоящее время электродные узлы для МЭП изготавливают из платиновой сетки с диаметром проволоки 20...100 мкм. Существующая технология накладывает ограничения на дальнейшее уменьшение геометрических размеров электродного узла, таких, например, как расстояние между электродами, или диаметр проволоки. Кроме того, механические допуски на параметры имеющихся в продаже сеток достаточно велики, и изготовленные преобразователи имеют значительный разброс параметров и требуют обязательной индивидуальной настройки сопутствующей электроники, что не всегда приемлемо в массовом производстве. В рамках существующей тенденции к применению все более миниатюрных акселерометров, пусть даже ценой некоторого ухудшения характеристик, становится целесообразным изготовление электродных узлов МЭП с использованием стандартных микроэлектронных технологий. Это позволило бы значительно миниатюризовать электродный узел одновременно с расширением частотного диапазона, а также ликвидировать разброс параметров, снизить энергопотреб-

ление и существенно уменьшить стоимость готовых преобразователей.

Существующие теоретические модели были разработаны для некоторых конфигураций, близких к существующим электродным системам, с использованием аналитических [3, 4, 5] и численных [6, 7, 8] методов, и все они относятся к области низких частот (от сотых долей до единиц герц), что связано с преимущественным использованием датчиков на основе МЭП в длиннопериодной сейсмологии. Но, во-первых, в точности воспроизвести плетеную сеточную структуру электродов по микроэлектронной технологии не представляется возможным, и во-вторых, существенное уменьшение линейных размеров преобразователя повлечет за собой смещение рабочего диапазона в область значительно более высоких частот (1...100 кГц), где существующие модели вообще говоря, неверны.

Таким образом, возникает задача разработки такой геометрии электродного узла, которая была бы, во-первых, выполнимой с точки зрения микроэлектронной технологии, во-вторых, позволяла бы провести построение правдоподобной теоретической модели, и в третьих, обладала бы некоторой преемственностью по сравнению с существующими геометриями электродных узлов. В данной работе исследуется модель электродного узла с катодом, который представляет собой решетку из круглых штифтов, и удаленным анодом, задающим некоторый градиент концентрации около катода, расположенным внутри канала с размерами в сечении много больше диаметра катода.

Теоретический анализ основан на совместном решении уравнений гидродинамики и конвективной диффузии при протекании через молекулярно-электронный преобразователь переменного потока электролита. Было получено распределение гидродинамической скорости вблизи цилиндра, а затем при известной гидродинамической скорости найдено решение нестационарного уравнения конвективной диффузии. Окончательный результат представляет собой достаточно сложное интегральное выражение для выходного тока преобразователя, содержащее две характерных частоты: $\omega_D = D/R^2$ и $\omega_v = v/R^2$, где $\omega = 2\pi f$, f — частота сигнала; R — радиус электрода; D — коэффициент диффузии; v — вязкость электролита.

Показано, что при условии $\omega > \omega_D$ модель применима к сеточной геометрии электродов. Это обстоятельство позволило использовать полученные теоретические зависимости для интерпретации экспериментальных амплитудно-частотных характеристик существующих молекулярно-электронных преобразователей в области высоких частот. Надо отметить, что полученные результаты достаточно универсальны, поскольку сделанные в работе допущения не накладывают существенных ограничений на взаимное расположение электродов и их форму.

Теоретический анализ

Частотная характеристика преобразователя как зависимость выходного тока I_{out} от механического ускорения a может быть представлена в виде произведения характеристики механической системы $W_{mech} = u/a$, где u — скорость протекания жидкости через преобразующую ячейку, и характеристики электрохимического преобразующего элемента $W_{el-ch} = I_{out}/u$:

$$W = \frac{I_{out}}{a} = W_{el-ch} W_{mech}. \quad (1)$$

Естественно предположить, что частотная характеристика механической системы имеет вид, стандартный для колебательной системы с затуханием. Тогда в интересующей нас в данной работе области высоких частот:

$$W_{mech} \approx G/\omega, \quad (2)$$

где G — не зависящий от частоты коэффициент, определяемый конкретными параметрами механической системы.

Для вычисления W_{el-ch} необходимо подробно рассмотреть процессы, происходящие в преобразователе. В общем случае перенос носителей в МЭП описывается уравнением конвективной диффузии [1]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c - \mathbf{v} \cdot \nabla c, \quad (3)$$

где c — концентрация активного компонента электролита; \mathbf{v} — гидродинамическая скорость жидкости; D — коэффициент диффузии. В качестве граничных условий к (3) обычно задают концентрации на поверхностях электродов и равенство нулю потока на диэлектрических поверхностях, ограничивающих МЭП, если таковые присутствуют в исследуемой геометрии. Для известного распределения концентрации токи через электроды могут быть найдены согласно выражению:

$$I = -Dq \oint_S (\nabla c \cdot d\mathbf{s}), \quad (4)$$

где q — заряд, переносимый через электрод в единичной реакции, и интеграл берется по всей поверхности S соответствующего электрода.

Распределение скоростей, необходимое для решения (3), может быть получено из уравнения Навье—Стокса и условия непрерывности. При расчете линейного отклика достаточно использовать приближение малых чисел Рейнольдса, дополнив его в нашем случае уравнением непрерывности для несжимаемой жидкости [1]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = v \Delta \mathbf{v} + \frac{\nabla p}{\rho}; \quad (5)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (6)$$

где v — вязкость жидкости; p — давление, ρ — плотность жидкости. Граничными условиями к (5), (6)

являются равенство нулю скорости на твердых поверхностях и, в зависимости от способа постановки задачи, скорость или давление на бесконечности.

Рассмотрим катод в форме бесконечного цилиндра радиуса R , удаленный от остальных электродов на расстояние, значительно превышающее гидродинамическую и диффузционную длины задачи. Наша задача состоит в том, чтобы найти решение уравнений (3), (5), (6) в окрестности этого катода. Прежде всего, найдем распределение гидродинамической скорости. Предположим, что скорость жидкости направлена перпендикулярно образующей цилиндра, на большом расстоянии от рассматриваемого электрода пространственно однородна и изменяется по гармоническому закону с частотой ω :

$$\mathbf{v}_\infty = u \mathbf{e}^{i\omega t}. \quad (7)$$

Согласно [1], представим решение уравнения (5) в виде:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\infty + \operatorname{rot}[\nabla f \times \mathbf{v}_\infty] = (\mathbf{u} + \operatorname{rot} \cdot \operatorname{rot}(f\mathbf{u})) \mathbf{e}^{i\omega t}, \quad (8)$$

где $f = f(r)$, r — расстояние до оси цилиндра. Тогда уравнение (5) с учетом (6) принимает следующий вид:

$$\frac{i\omega}{v} \Delta(\nabla f) + \Delta^2(\nabla f) = 0. \quad (9)$$

Вычислять саму функцию f нет необходимости, так как в выражение для скорости (8) входят только ее производные. Решая (9) и выбирая ограниченное на бесконечности решение, получим:

$$f_r'' = a H_0^{(1)}(mr) - \frac{a}{mr} H_1^{(1)}(mr) - \frac{b}{mr^2}; \quad (10)$$

$$f_r' = \frac{a}{m} H_1^{(1)}(mr) + \frac{b}{mr}; \quad (11)$$

$H_0^{(1)}(mr)$ и $H_1^{(1)}(mr)$ — функции Ганкеля первого рода нулевого и первого порядков, соответственно; m — комплексное число, равное по модулю гидродинамической длине, $m = e^{i\frac{3\pi}{4}\sqrt{\omega/v}}$, a, b — постоянные интегрирования. Подставляя (10), (11) в (8), получим распределение скоростей в пространстве:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\parallel &= u \left[1 - \frac{a H_0^{(1)}(mr)}{2} + \frac{\cos 2\varphi}{2} \left(a H_0^{(1)}(mr) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{2a H_1^{(1)}(mr)}{mr} - \frac{2b}{mr^2} \right) \right]; \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\perp &= \frac{u}{2} \sin 2\varphi \left(a H_0^{(1)}(mr) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2a H_1^{(1)}(mr)}{mr} - \frac{2b}{mr^2} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

где $\mathbf{v}_\parallel, \mathbf{v}_\perp$ — компоненты скорости, направленные соответственно параллельно и перпендикулярно вектору \mathbf{u} , угол φ отсчитывается против часовой стрелки от направления \mathbf{u} . Условие "прилипания" $\mathbf{v}|_{r=R} = 0$, приводит к следующим выражениям для коэффициентов a и b :

$$a = \frac{2}{H_0^{(1)}(mR)}; \quad (14)$$

$$b = mR^2 \left(1 - \frac{2H_1^{(1)}(mR)}{mRH_0^{(1)}(mR)} \right). \quad (15)$$

Подставляя (14), (15) в (12), (13), найдем окончательно для распределения скорости:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\parallel &= u \left[1 - \frac{H_0^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \right. \\ &\quad \left. \cos 2\varphi \left(\frac{H_2^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \frac{R^2}{r^2} \frac{H_2^{(1)}(mR)}{H_0^{(1)}(mR)} \right) \right], \end{aligned} \quad (16)$$

$$\mathbf{v}_\perp = -u \sin 2\varphi \left[\frac{H_2^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \frac{R^2}{r^2} \frac{H_1^{(1)}(mR)}{H_0^{(1)}(mR)} \right]. \quad (17)$$

Перейдем теперь к решению уравнения конвективной диффузии (3) для распределения концентрации активных ионов. При малых скоростях протекания электролита второе слагаемое в правой части уравнения (3) значительно меньше первого и решение уравнения конвективной диффузии можно искать в виде ряда, где каждое последующее слагаемое пропорционально скорости течения электролита u в более высокой степени. В настоящей работе мы будем искать только линейный отклик системы и поэтому ограничимся первыми двумя членами разложения:

$$c = c_0 + c_1 \cdot \mathbf{e}^{i\omega t}, \quad (18)$$

где c_0 — распределение концентрации в неподвижной жидкости; c_1 — добавка к концентрации, линейная по гидродинамической скорости и изменяющаяся по гармоническому закону, аналогично (7). Тогда уравнение (3) преобразуется в следующую систему:

$$\Delta c_0 = 0, \quad (19)$$

$$i\omega c_1 = D \Delta c_1 - \mathbf{v} \nabla c_0. \quad (20)$$

Найдем решение уравнения (19). Обозначим $\mathbf{A} = (\nabla c_0)_\infty$ — значение градиента концентрации на большом удалении от электрода. Предположим, что в системе протекает предельный ток, тогда концентрация на поверхности катода равна нулю. Решение (19), удовлетворяющее таким граничным условиям, может быть записано в виде:

$$c_0 = (\mathbf{A}, \mathbf{r}) \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) + p \ln \left(\frac{r}{R} \right). \quad (21)$$

Используя (2), параметр p можно представить следующим образом: $p = I_0/2\pi RD$, где I_0 — стационарный ток, протекающий через единицу длины рассматриваемого электрода. Отметим, что нас интересует не сама концентрация c_0 , а ее градиент, поскольку именно он входит в правую часть (20). Дифференцируя (21), получим:

$$\nabla c_0 = \mathbf{A} \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) + \frac{2(\mathbf{A}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}}{r^2} \frac{R^2}{r^2} + \frac{q}{r} \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (22)$$

Таким образом, подставляя (16), (17), (22) в (20), получаем следующее уравнение:

$$i\omega c_1 - D\Delta c_1 = uA Q_0(r) + uq \cos\varphi Q_1(r) + uA \cos 2\varphi Q_2(r), \quad (23)$$

где для краткости обозначено

$$Q_0(r) = -1 + \frac{H_0^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \frac{R^2}{r^2} \left(\frac{H_2^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \frac{R^2}{r^2} \frac{H_2^{(1)}(mR)}{H_0^{(1)}(mR)} \right), \quad (24)$$

$$Q_1(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{H_2^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \frac{R^2}{r^2} \frac{H_2^{(1)}(mR)}{H_0^{(1)}(mR)} \right), \quad (25)$$

$$Q_2(r) = - \frac{H_0^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) + \left(\frac{H_2^{(1)}(mr)}{H_0^{(1)}(mR)} - \frac{R^2}{r^2} \frac{H_2^{(1)}(mR)}{H_0^{(1)}(mR)} \right). \quad (26)$$

По смыслу задачи уравнение (23) определено при $r > R$. Для дальнейшего удобно доопределить его при $r \leq R$, добавив в правой части некоторую функцию $g(\mathbf{r})$, равную 0 при $r > R$. Тогда вместо (23) получим:

$$i\omega c_1 - D\Delta c_1 = uA Q_0(r) + uq \cos\varphi Q_1(r) + uA \cos 2\varphi Q_2(r) + g(\mathbf{r}). \quad (27)$$

Если функцию $g(\mathbf{r})$ выбрать так, чтобы удовлетворить нулевым граничным условиям для c_1 при $r = R$, то в силу теоремы единственности, решение (24) будет одновременно являться решением (23) с требуемыми граничными условиями. Решение (24) ищем методом преобразования Фурье:

$$c_1(\mathbf{k}) = \frac{Q(\mathbf{k})}{i\omega + Dk^2} + \frac{g(\mathbf{k})}{i\omega + Dk^2}, \quad (28)$$

$$\text{где } Q(\mathbf{k}) = \sum_{n=0}^2 2\pi i^n \cos n\psi \int_R^\infty Q_n(r) r J_n(kr) dr, \quad (k, \psi) -$$

полярные координаты вектора \mathbf{k} . Предположим, что функция $g(\mathbf{r})$ отлична от нуля только при $r = R$, т. е. $g(\mathbf{r}) = \frac{g(\varphi)\delta(r-R)}{R}$, где $\mathbf{r} = (r, \varphi)$ — в полярных координатах. Тогда, представляя $g(\varphi)$ в виде ряда Фурье

$$g(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \cos n\varphi,$$

где, в силу симметрии задачи, сохранены только члены, четные по φ , получим

$$g(\mathbf{k}) = 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} g_n i^n \cos n\psi J_n(kR). \quad (29)$$

Обратное преобразование Фурье в (28) дает:

$$c_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^2 i^n \cos n\varphi \int_0^\infty k c_{1,n}(k) J_n(-kr) dk, \quad (30)$$

$$\text{где } c_{1,n}(k) = \frac{2\pi i^n}{k^2 D + i\omega} \left(g_n J_n(kR) + \int_R^\infty r Q_n(r) J_n(kr) dr \right).$$

Учитывая, что $c_1(R) = 0$, для g_n находим:

$$g_n = - \frac{1}{G_n(-R, R)} \int_R^\infty r Q_n(r) G_n(-R, r) dr, \quad (31)$$

где $G_n(r_1, r_2) = \int_0^\infty \frac{k J_n(kr_1) J_n(kr_2)}{k^2 + i\omega/D} dk$. Тогда, подставляя (31) в (30), для распределения концентрации получим следующее выражение:

$$c_1(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^2 (-1)^n \cos n\varphi \int_0^\infty \frac{k J_n(-kr)}{Dk^2 + i\omega} \left[\int_R^\infty Q_n(t) \times \right. \\ \left. \times J_n(kt) dt - \frac{J_n(kR)}{G_n(-R, R)} \int_R^\infty Q_n(t) G_n(-R, t) dt \right] dk, \quad (32)$$

где t — переменная интегрирования.

Вычисляя сигнальный ток согласно формуле (4), с учетом выражения (32), найдем после подстановки $G_n(r_1, r_2)$, интегрирования по k и упрощений:

$$I_1 = - \frac{2\pi quAL}{K_0 \left(R \sqrt{\omega/D} e^{i\pi/4} \right)^2} \int_R^\infty r Q_0(r) K_0(r \sqrt{\omega/D} e^{i\pi/4}) dr. \quad (33)$$

Здесь I_1 — сигнальный ток, протекающий через электрод; L — его полная длина; $K_0(x)$ — функция Кельвина нулевого порядка.

В общем случае интеграл из (33), с учетом явного вида для функции $Q_0(r)$ из (24), не является табличным и его значение нужно искать численными методами. Однако при практически значимых параметрах системы выражение (33) может быть упрощено.

1. При низких частотах, когда выполняется со-

отношение $\sqrt{\omega/D} \cdot R \ll 1$, используя разложения для функций Ганкеля при малых значениях аргумента, и полагая $\ln(mr)$ слабо зависящим от радиуса по сравнению с быстро убывающей функцией Кельвина, для тока через электрод получаем:

$$I_1 = 2\pi quALC_0 R \sqrt{\frac{D}{\omega}} e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{K_1\left(R\sqrt{\omega/D}e^{\frac{i\pi}{4}}\right)}{K_0\left(R\sqrt{\omega/D}e^{\frac{i\pi}{4}}\right)}, \quad (34)$$

где константа $C_0 = 1 + \ln(\lambda_v)/\ln(\lambda_D)$, где λ_v и λ_D — гидродинамическая и диффузионная длина соответственно.

Раскладывая далее функции Кельвина в ряд при низких частотах, получим для тока:

$$I_1 = 2\pi quALC_0 \frac{D}{\omega} \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\ln\left(R\sqrt{\omega/D}e^{\frac{i\pi}{4}}\right)}, \quad (35)$$

а передаточная функция W с учетом (2) выглядит так:

$$W = 2\pi qALC_0 G \frac{D}{\omega^2} \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\ln\left(R\sqrt{\omega/D}e^{\frac{i\pi}{4}}\right)}. \quad (36)$$

В практических расчетах слабой логарифмической зависимостью от частоты можно пренебречь и при указанных условиях считать $W \sim \omega^{-2}$.

2. При высоких частотах, когда выполняется соотношение $\sqrt{\omega/D} \cdot R \gg 1$, для $r \geq R$, используя для функции Кельвина асимптотику, соответствующую большим значениям аргумента, интеграл в (33) вычисляем аналитически, что приводит к следующему выражению для тока:

$$I_1 = -6\pi quAL \frac{D}{\omega} \sqrt{\frac{D}{v}} \frac{H_1^{(1)}\left(\sqrt{\omega/v}Re^{\frac{3\pi i}{4}}\right)}{H_0^{(1)}\left(\sqrt{\omega/v}Re^{\frac{3\pi i}{4}}\right)}, \quad (37)$$

и передаточной функции W соответственно:

$$W = -6\pi qALG \frac{D}{\omega^2} \sqrt{\frac{D}{v}} \frac{H_1^{(1)}\left(\sqrt{\omega/v}Re^{\frac{3\pi i}{4}}\right)}{H_0^{(1)}\left(\sqrt{\omega/v}Re^{\frac{3\pi i}{4}}\right)}. \quad (38)$$

Имеет смысл рассмотреть два следующих предела:

A. $\sqrt{\frac{\omega}{v}} R \ll 1$, тогда разложение функций Ганкеля в числителе и знаменателе (37) при малых значениях аргумента дает:

$$W = -\frac{6\pi qAG}{R} e^{-\frac{3\pi i}{4}} \frac{D^{3/2}}{\omega^{5/2}} \frac{L}{\ln\left(\sqrt{\frac{\omega}{v}} \frac{R}{2}\right)}. \quad (39)$$

Аналогично (36) следует при указанных условиях полагать, что $W \sim \omega^{-5/2}$.

B. $\sqrt{\frac{\omega}{v}} R \gg 1$, тогда для передаточной функции получим

$$W = -6\pi qAGL \frac{D}{\omega^2} \sqrt{\frac{D}{v}} e^{-\frac{i\pi}{2}}. \quad (40)$$

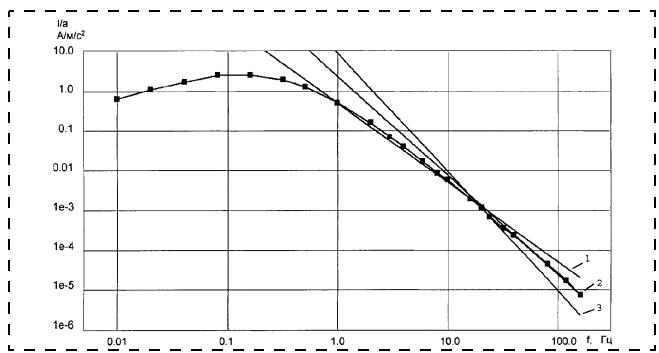
Уменьшение крутизны спада характеристики в выражении (40), по сравнению с (39), объясняется интенсификацией гидродинамического переноса электрореактивных носителей вблизи поверхности электрода с ростом частоты. В высокочастотном пределе, когда гидродинамическая длина много меньше характерных размеров обтекаемого тела, интенсивность гидродинамического переноса носителей в приповерхностной области нарастает с ростом частоты воздействия $\sim \sqrt{\omega}$, что несколько компенсирует спад характеристики, обусловленный общим уменьшением области, из пределов которой частицы успевают диффундировать на электрод в течение периода изменения сигнала. Следует отметить, что в формулу (40) не входит ни радиус проволоки, из которой изготовлен электрод, ни расстояние между отдельными нитями. Это обстоятельство накладывает определенный предел на высокочастотную чувствительность преобразователя, который не может быть преодолен в рамках сеточной технологии изготовления электродов путем варьирования геометрических параметров системы.

Эксперимент и сравнение теории с экспериментом

Полученные в настоящей работе выражения были использованы для интерпретации экспериментальных амплитудно-частотных характеристик (АЧХ) молекулярно-электронных преобразователей механического движения, полученных с использованием магнитогидродинамического (МГД) калибратора.

При реально используемых параметрах электродного узла (для оценки положим $v = 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $D = 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, расстояние между отдельными проволоками электродной сетки $d = 10^{-4} \text{ м}$) предположения $\lambda_D \ll d$, $\lambda_v \ll d$, при которых справедливы сделанные в работе допущения, выполняются для частоты сигнала, значительно превышающей $f_0 \approx \approx 10 \text{ Гц}$. При этом выполняется соотношение $\sqrt{\omega/D} R \gg 1$ и применима формула (38) и ее аппроксимации (39), (40).

Как показано в работе [2], ток, протекающий через МГД ячейку, создает механическое воздействие, полностью эквивалентное действию внешнего ус-



Амплитудно-частотная характеристика микромеханического акселерометра. Квадратами показаны экспериментальные точки. Прямые 1, 2, 3 – зависимости $W \sim \omega^{-2}$, $W \sim \omega^{-5/2}$, $W \sim \omega^{-3}$, соответственно

корения. При этом эквивалентное ускорение может быть представлено в виде: $a_{eq} = KI_{mhd}$, где I_{mhd} – ток, пропускаемый через магнитогидродинамическую ячейку, коэффициент K выражает эффективность магнитогидродинамического преобразования, в общем случае зависит от значения индуктивности магнитного поля и геометрии ячейки и для обычно используемых устройств лежит в диапазоне 0,5...3 м/с²/А. Достоинством калибровки с использованием магнитогидродинамического эффекта является возможность сравнительно просто получение АЧХ в широком диапазоне частот, не всегда доступном механическим калибровочным платформам. На рисунке приведены полученные таким образом АЧХ (экспериментальные точки показаны квадратиками) в полосе частот 0,01...160 Гц.

На рисунке прямая 2 соответствует теоретически полученной зависимости $W \sim \omega^{-5/2}$. Видно, что теоретическая зависимость с высокой точностью ложится на экспериментальные точки для всех частот, начиная с 16 Гц. На том же рисунке приведены зависимости $W \sim \omega^{-2}$ (прямая 1, см. например [7], [8], [9]), а также $W \sim \omega^{-3}$ (прямая 2). Видно, что эти зависимости значительно хуже соответствуют экспериментальным данным, что предсказывает соответственно более медленное и быстрое убывание коэффициента передачи преобразователя с частотой. Стоит отметить, что зависимость, описываемая выражением (40), относится к области еще более высоких частот, которые не могли быть достигнуты с помощью имеющейся экспериментальной установки.

Основные выводы

Таким образом, в настоящей работе теоретически исследовано поведение частотных характеристик молекулярно-электронного преобразователя механических движений с новой геометрией. Получено общее выражение для амплитудно-частотной характеристики преобразователя с электродами в форме длинных цилиндрических штифтов. Показано, что характеристика такого преобразователя следующим образом зависит от частоты:

$$1) \text{ если } \sqrt{\frac{\omega}{D}} R \ll 1, \text{ то } W \sim \omega^{-2}; \quad (41)$$

$$2) \text{ если } \sqrt{\frac{\omega}{D}} R \gg 1, \text{ то:}$$

$$\text{а) если } \sqrt{\frac{\omega}{v}} R \ll 1, \text{ то } W \sim \omega^{-5/2}; \quad (42)$$

$$\text{б) если } \sqrt{\frac{\omega}{v}} R \gg 1, \text{ то } W \sim \omega^{-2}. \quad (43)$$

Поскольку в существующих преобразователях с сеточными электродами, начиная с частоты выше 10 Гц, влиянием соседних проволок в сетке можно пренебречь, то формулы (38), а также (39) и (40) вполне пригодны для описания АЧХ существующих преобразователей в пределе высоких частот. При реальных значениях параметров системы приближения, сделанные в работе, справедливы для частот порядка десятков-сотен герц. Сравнение с экспериментом подтверждает хорошее соответствие между полученными теоретическими зависимостями и экспериментальными данными существующих датчиков в указанном диапазоне.

Обнаруженное в настоящей работе уменьшение скорости спада в области самых высоких частот показывает, что чувствительность молекулярно-электронного преобразователя на высоких частотах будет выше, чем можно было бы ожидать, непосредственно экстраполируя имеющиеся экспериментальные зависимости в сторону увеличения частоты. Это обстоятельство значительно снижает требования к характеристикам вторичной электроники высокочастотных преобразователей. Вместе с тем, результаты, полученные в настоящей работе, показывают, что существует предел для чувствительности преобразователей с сетчатыми электродами, который не может быть преодолен варьированием геометрических параметров.

Авторы считают своим приятным долгом выразить признательность проф. Козлову В. А. за многочисленные плодотворные дискуссии по теме данной работы.

Список литературы

- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
- Харламов А. В. Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. Долгопрудный, 2000. 19 с.
- Larcam C. W. // J. Acous. Soc. Amer. 1965. Vol. 37. N 4. P. 664–678.
- Введение в молекулярную электронику / Под ред. Н. С. Лидоренко. М.: Энергоатомиздат, 1984.
- Графов Б. М. // Электрохимия. 1968. Т. 4. С. 542–545.
- Козлов В. А., Терентьев Д. А. // Электрохимия. 2002. Т. 38. С. 1104.
- Козлов В. А., Терентьев Д. А. // Электрохимия. 2003. Т. 39. С. 443.
- Васелев М. Р., Ми��атахов А. Г., Султанов Э. И. // Электрохимия. 2002. Т. 38. С. 239.
- Захаров И. С., Козлов В. А. // Электрохимия. 2003. Т. 39. С. 438.
- Бабанин А. В., Козлов В. А., Петъкин Н. В. // Электрохимия. 1990. Т. 26. С. 601.
- Ньюман Дж. Электрохимическая кинетика. М.: Мир, 1977.

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

Функции магниточувствительных структур в прокариотных клетках

Номер проекта: 98-04-48337

Год представления отчета: 1999

Известны три типа магнитных соединений в бактериальных клетках. Они представлены: 1) кристаллами магнитных минералов у магнитотактных бактерий; 2) различными магнитными соединениями, которые широко распространены в клетках на уровне микроконцентраций; 3) магниточувствительными структурами (МЧС), описанными ранее авторами данного проекта. Проект посвящен исследованиям МЧС. Отчет представляет плановые исследования, выполненные в 1998 г.:

- выращивание и сбор биомассы "магнитных бактерий", т. е. клеток бактериальных и археальных культур, которые содержали высокие концентрации МЧС;
- выделение фракции МЧС из клеток;
- химические анализы МЧС;
- исследования влияния различных факторов на формирование МЧС.

Несмотря на существенное сокращение финансовой поддержки, исследователи получили принципиально новые результаты. В рамках осуществления данного проекта должны быть отмечены следующие:

• показано, что формирование и химический состав МЧС определяются химическим составом питательной среды. В зависимости от условий культивирования состав МЧС в магнитных бактериях можно содержать (помимо основного компонента — железа) ряд других неорганических элементов, включая фосфор, марганец и кремний. Таким образом, функции МЧС не исчерпываются их магнитными свойствами, но могут быть использованы прокариотами для аккумуляции различных химических элементов в клетках;

• показано, что культивирование бактерий, содержащих МЧС, в магнитном поле и/или приложение магнитного поля к бактериальной биомассе вело к разрушению этих клеток, сопровождаемому образованием более мелких клеточных форм ("фильтрующихся форм" или "наноклеток"). По меньшей мере некоторые из наноклеток были способны возвращаться в дальнейшем к реверсированию исходной морфологии.

Применение сканирующей зондовой микроскопии для исследования микроорганизмов в почвах и грунтах

Номер проекта: 98-04-49020

Год представления отчета: 2001

В работе была поставлена основная задача оценки метода изучения микроорганизмов с использованием сканирующей зондовой микроскопии (атомно-силовой микроскопии — АСМ) применительно к индикации и исследованию микроорганизмов в естественных природных средах (почвах и грунтах), в том числе непосредственно *in situ* в образцах грунта.

Проделана методическая работа по выбору оптимальных подложек, условий и режимов сканирования микроорганизмов, минеральных частиц и смешанных суспензий. Показана возможность использования некоторых режимов сканирования

(литография, режим сил трения) для дифференциации клеток и минеральных частиц в смешанных моделях.

Доказана перспективность применения методов АСМ для исследования физиологических морфотипов клеток спорообразующих и неспорообразующих бактерий. Методами АСМ с применением двух модификаций атомных силовых микроскопов, различных по своим характеристикам, изучены морфологические формы бактерий, отличающиеся своим физиологическим состоянием. При этом помимо вегетативных клеток и спор исследовались покоящиеся формы у неспорообразующих бактерий, полученные методами аутогенерации анабиоза как у коллекционных форм бактерий, так и у изолятов из почвы и грунтов, а также так называемые "мумифицированные" клетки, которые не дают роста в оптимальных условиях культивирования на питательных средах. Возможность наблюдения клеток в водной или водосодержащей гетерофазной среде методами АСМ обеспечивает уникальную перспективу визуального наблюдения процессов активизации анабиотических, а также жизнеспособных некультивируемых клеток (ЖНК).

Значительное внимание было уделено отработке методов наблюдения микроорганизмов в водной среде: выбору способов адгезии клеток и режимов наблюдения. Исследована сравнительная топография поверхности клеток в воздушно-сухой среде. Отработаны методические аспекты получения изображений микроорганизмов в суспензиях грунта *in situ* при исследовании в воздушно-сухой и водной средах, т. е. продемонстрированы возможности использования методов АСМ для выявления и исследования микроорганизмов в естественных грунтах. Показано, что высокая разрешающая способность АСМ позволяет выявить постоянное присутствие в природных средах трудно поддающихся изучению нанобактерий размером 50—200 нм, а также исследовать их морфологию, используя специфические для метода АСМ критерии, позволяющие дифференцировать клетки и минеральные частицы. Результаты данной работы демонстрируют безусловную перспективность методов АСМ для индикации и исследования микроорганизмов в естественных средах обитания вплоть до субмикрометровых размеров.

Механизмы сенсорного обучения в задачах обнаружения и опознания зрительных объектов

Номер проекта: 98-04-48558

Год представления отчета: 2001

Процесс обучения исследовали в психофизических экспериментах в задачах обнаружения и опознания формы теста в присутствии дополнительных объектов. Для выявления возрастной зависимости обучения исследования проводили на взрослых наблюдателях и детях разных возрастных групп.

В задачах типа краудинг-эффект (ухудшение восприятия теста, окруженного дополнительными объектами) исследовали способность наблюдателей определять ориентацию тестового кольца Ландольта, окруженного элементами разной формы на различном удалении от теста. Критерием обучения было сужение тормозных зон, т. е. области, в пределах которой наблюдалось ухудшение опознания тестового стимула, а также увеличение остроты зрения. Показано, что в результате длительной тренировки взрослых наблюдателей тормозные зоны сужаются до

предела, обусловленного оптической функцией рассеяния. Исследование зависимости краудинг-эффекта от различных характеристик как самого стимула, так и дополнительных объектов позволило сделать предположение о том, что краудинг-эффект — это проявление функционирования самых высокочастотных пространственных элементов, осуществляющих первичную фильтрацию изображения. Такими элементами являются так называемые детектор полосы и края.

Модельные эксперименты показали соответствие теоретических и экспериментальных маскировочных кривых, описывающих ухудшение восприятия тестового стимула в зависимости от расстояния до окружающих объектов. Динамика изменения характеристик детектора полосы была изучена в ходе тренировки. Было показано, что в ходе тренировки увеличивается избирательность к предъявляемому стимулу. Пространственно-частотная характеристика элемента в ходе тренировки стала более высокочастотной, амплитуда ее увеличилась. Сдвиг в высокочастотную область соответствует увеличению остроты зрения, а сужение частотной характеристики объясняет сужение тормозных зон краудинг-эффекта в ходе тренировки. Процесс обучения при выполнении задачи краудинг-эффекта также был исследован у детей от трех до десяти лет. Первичное обучение проходило у многих детей достаточно быстро, уже в течение первой серии. При увеличении возраста увеличивалось число детей, у которых наблюдалось сужение тормозных зон. Группы детей также были проверены повторно, с интервалом 0,5–1 год.

Показано влияние предварительного знакомства с задачей на восприятие. У повторно тестируемых детей размеры зон были меньше, чем у групп детей того же возраста, но тестируемых в первый раз при сохранении того же уровня остроты зрения. После первичного обучения размер тормозной зоны не достигал значения, полученного для взрослых в начале опытов, без обучения. Методика одновременного измерения остроты зрения и размера тормозных зон краудинг-эффекта у разных возрастных групп позволила показать согласованность нейронных (развитие нейронных структур в онтогенезе) и периферических (развитие оптического аппарата глаза) факторов в формировании тормозных зон. Показано, что острота зрения достигает уровня, полученного для взрослых наблюдателей к семи годам, но размер тормозных зон все еще превышает размер, полученный для взрослых. Это свидетельствует о том, что к десяти годам еще не созрели структуры мозга, участвующие в выполнении этой зрительной задачи.

Влияние сложности экспериментальной процедуры исследовали при выполнении задачи различия направления смещения в стимуле Верньера, а также для задачи краудинг-эффект при использовании различного набора дополнительных элементов в одном опыте. Использование большого набора стимулов приводит к практическому отсутствию обучения. Показано, что в условиях увеличения неопределенности о значении стимула обучение существенно затруднено.

ИНФОРМАЦИЯ

Состоялось объединенное заседание учебно-методических комиссий по специальностям 200100, 201900, 202100, 073800 и УМС по направлению 658300 "Нанотехнология" в Пензенском государственном университете 29–30 июня 2004 г.

Повестка заседания

1. Об открытии подготовки бакалавров и магистров по направлению 554500 "Нанотехнология" в соответствии с приказом Министерства образования и науки РФ № 1922 от 23.04.04.
Докл. проф. Таиров Ю. М.
2. Об обеспеченности учебной литературой и лабораторной базой процесса подготовки выпускников по специальности 201900 – "Микросистемная техника".
Докл. проф. Лучинин В. В.
3. Об обеспеченности учебной литературой и лабораторной базой процесса подготовки инженеров, бакалавров и магистров по направлению "Нанотехнология".
Докл. проф. Горбацевич А. А., проф. Астахов М. В.
4. Об обеспеченности лабораторной базой процесса подготовки инженеров, бакалавров и магистров по направлению "Нанотехнология".
Докл. проф. Пархоменко Ю. Н.
5. О формировании авторских коллективов для написания учебников и учебных пособий по общепрофессиональным дисциплинам ГОС направления "Электроника и микроэлектроника" и специальным дисциплинам специальностей 200100 и 201900.
Докл. проф. Таиров Ю. М.
6. Анализ действующего перечня специализаций подготовки инженеров по специальностям 200100 и 201900 и выработка рекомендаций по его совершенствованию.
Докл. проф. Таиров Ю. М., проф. Соломонов А. В.
7. Опыт МИЭТ (ГУ) по использованию международных учебных центров при подготовке специалистов в области электронной техники.
Докл. проф. Королев М. А.
8. Разное.

Адрес: 440026, г. Пенза, ул. Красная, 40, Госуниверситет, корпус № 8, 6-й этаж, кафедра
Микроэлектроники (зав. каф. проф. Печерская Р. М.)
Телефон для справок – (8412) 368-261 доц. Аверин Игорь Александрович

Ученые секретари УМК по специальностям 200100, 201900, 202100, 073800 проф. Сорокин В. С.,
доц. Корляков А. В., проф. Герасименко Н. Н., доц. Крашенинников М. Г.; ученый секретарь
УМС по направлению 658300 "Нанотехнология", доц. Казак-Казакевич А. З.

CONTENTS

Landyshev A. V., Lavrentjev A. A., Landyshev V. A. Research Concentration Heterogeneity in Alloys $Si_{0.68}Ge_{0.32}$	4
To method electron-probe the analysis concentration heterogeneity is investigated in a solid solution of structure $Si_{0.68}Ge_{0.32}$ depending on a way of its preparation (crystallization from liquid, pressing of a powder of an alloy, zone melting, mechanical alloying). It is established, that in alloys grains with two primary concentration of the basic components of an alloy are formed. Laws and parameters of distribution of concentration of components (a dispersion, asymmetry, an excess, expected value) are determined depending on a way of preparation. The highest homogeneity the alloys received by zone melting and mechanical alloying.	
Sheglow D. V., Rodyakina E. E., Latyshev A. V. and Aseev A. L. New Scope of AFM-Tip-Induced Nanolithography	8
The advanced AFM-tip-induced nanoelectro-mechanical modification technology (TINE&MEMO) is developed to realize the principle new scale of modification depth, up to 100 nm, for manufacturing electronic and mechanic nanodevices. The novel method of AFM-tip-induced modification under simultaneously stress and voltage applying with nanometer scale resolution are demonstrated for nanostructures fabrication on silicon, titanium and gallium arsenide substrates. Peculiarities of local anodic oxidation kinetics and mechanic scratching are under consideration. The fabrication processes are analyzed in details to minimize the spatial resolution and to increase the depth of modified films.	
Dedkov G. V., Kyasov A. A. New Aspects of Fluctuation Electromagnetic Interactions of Nanoprobes Moving Near a Surface	16
The retardation effect of heating rate and tangential fluctuation — dissipative force on a particle moving with velocity V parallel to a flat surface is considered. The numerical estimations performed for metal particle and metal surface. Relation between the heating (cooling) rate and rate of dissipation of mechanical energy of an oscillating nanoprobe is studied. The calculations show that retardation effects become important only in the range of the tip — surface separations of about several microns. Both the heating rate and energy dissipation power of the tip near a surface are monotonously decreasing functions of the distance in the range of 1 nm to 1 mm. A comparison of the heating rate and rate of the tip mechanical energy dissipation in dynamic regime (without contact forces and hysteresis) demonstrates that the first one is much greater (by many orders of magnitude) even at small temperature difference between the tip and sample surface. This can activate new mechanisms of energy dissipation in the tip — sample system.	
Shashkin V. I., Vopilkin E. A., Vostokov N. V., Klimov A. Yu., Rogov V. V., Gusev S. A., Shuleshova I. Yu. Fabrication and Controlled Bending of Microconsoles	22
The Ta_2O_5 microconsole with dimensions $12 \times 2 \times 0,2 \mu m$ and the GaAs microconsole with dimensions $36 \times 1,5 \times 1,3 \mu m$ are fab-	
ricated. The gap between the console and the basis is less than $1 \mu m$. The static stiffness and resonant frequency of the consoles are measured by the AFM. The possibility of controlled bending of consoles is shown. By the successive sputtering of various metals the bending was reversed.	
Sechneov D. A., Ageev O. A., Svetlichnui A. M., Klovo A. G. Influence of Rapid Thermal Processing Modes on the Thermal Fields in the Metal/Silicon Carbide Heterohen Structures	26
In this paper we have investigated the influence of the optical properties differences and irradiation conditions on thermal fields of the metal/SiC heterohen structures under rapid thermal annealing by infra red radiation. Modes and conditions of the heating with minimum thermal gradients was defined.	
Shelepin N. A. General Principles of SPICE Models Creation of Microelectromechanical Systems	30
Problems of modelling of complicated functional microelectromechanical systems (CF MEMS) were considered. Joint analysis of functioning of micromechanical and electronical parts is required in such systems. General principles of creation of SPICE models realizing piezoresistive and capacitive sensors of physical magnitudes are elaborated. Possibilities of analysis of piezoresistive sensor characteristics are demonstrated for the pressure sensor inclusive instrumental amplifier and capacitive accelerometer which has sensitive element representing differential micromechanical condenser with active middle plate.	
Abramov I. I., Goncharenko I. A., Kolomeitseva N. V. Combined Two-Band Model of Heterostructure with One Tunnel Junction and Expanded Near Contact Regions	36
Combined two-band model of heterostructure with one tunnel junction and expanded near contact regions taking into account intervalley scattering is proposed. The model based on self-consistent solving of Schrödinger and Poisson's equations. The model is characterized by high efficiency. On the basis of the model a program was developed. The program was included in the nano-electronic device simulation system NANODEV and volt-ampere characteristics of GaAs/AlAs device were calculated using the program. It was made a comparison of volt-ampere characteristics obtained by single-band and two-band models. Our work shows as applied biases increased there are considerable quantitative as well as qualitative differences of volt-ampere characteristics.	
Agafonov V. M., Krishtop V. G. Frequency Response of Molecular Electronic Transducers with New Spatial Pattern of Sensors	40
One of the ways to adapt a spatial pattern of the sensors of the molecular electronic transducers (MET) for making these sensors using standard lithographic technologies is being discussed in this work. The frequency response of a MET transducer with gauze electrodes. The calculation is compared with experiment.	

For foreign subscribers:

Joint-stock company MK-Periodica. E-mail: info@periodicals.ru Tel.: +7(095) 284-5008. Fax: +7(095) 681-3798

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., 4/1. 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 23.06.2004. Подписано в печать 04.08.2004. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 5,88. Усл. кр.-отт. 7,84. Уч.-изд. л. 7,18. Заказ 1301. Цена договорная

Отпечатано в Подольской типографии филиал ОАО ЧПК, 142110, г. Подольск, ул. Кирова, 15