

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 1 ✧ 2006

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ПРИКЛАДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

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

Издается с 1999 г.

Главный редактор

Мальцев П. П.

Зам. гл. редактора

Лучинин В. В.

Редакционный совет:

Аристов В. В.
Асеев А. Л.
Гапонов С. В.
Каляев И. А.
Климов Д. М.
Ковальчук М. В.
Лифшиц В. Г.
Мокеров В. Г.
Никитов С. А.
Чаплыгин Ю. А.
Шевченко В. Я.

Редакционная коллегия:

Абрамов И. И.
Антонов Б. И.
Астахов М. В.
Быков В. А.
Волчихин В. И.
Гоев А. И.
Горнев Е. С.
Градецкий В. Г.
Гурович Б. А.
Журавлев П. В.
Захаревич В. Г.
Кальнов В. А.
Карякин А. А.
Квардаков В. В.
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.
Сухопаров А. И.
Телец В. А.
Тодуа П. А.

Отв. секретарь

Лысенко А. В.

Редакция:

Безменова М. Ю.
Григорин-Рябова Е. В.
Чугунова А. В.

Учредитель:

Издательство "Новые технологии"

СОДЕРЖАНИЕ

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

Иванов А. А., Мальцев П. П., Телец В. А. О направлениях развития
микросистемной техники 2

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Запороцкова И. В. Структура и электронно-энергетические характеристики
модифицированных алициклических нанотрубуленов 13
Бахтизин Р. З., Ву К.-Х., Ще Ч.-Ж., Ще Ч.-К., Сакурай Т. Атомно-
масштабные исследования адсорбции и роста пленок благородных металлов
на поверхности GaN(0001) 19

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ МНСТ

Жуков А. А., Четверов Ю. С., Кудрявцев П. Н., Бирюлин П. В.,
Здобников А. Е., Бабаевский П. Г., Обижаев Д. Ю. Метод определения
теплофизических характеристик неохлаждаемых полупроводниковых
микроболометров 24
Мухуров Н. И., Ефремов Г. И. Моделирование и разработка перспективных
микроэлектромеханических структур на основе анодного оксида алюминия . 27

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Тополов В. Ю., Панич А. Е., Курбанов М. А. Особенности пьезоэлектрических
свойств 0—3-композигов на основе керамики типа ПКР. 34

ПРИМЕНЕНИЕ МНСТ

Сажнев С. В., Фомичёв М. А., Тимофеев В. Н. Применение нитевидных
первичных преобразователей в термоконвективных газовых расходомерах. . 39

СПРАВОЧНАЯ СТРАНИЦА

Яшин К. Д., Лацапнёв Е. В. Англо-русский терминологический словарь
по микро- и наносистемной технике 43

СТРАНИЧКА РФФИ 47

НОВОСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ 49

ИНФОРМАЦИЯ

Отчет по 8-й Международной специализированной выставке
"ЭкспоЭлектроника 2005" 54

Contents 56

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

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

ПОДПИСКА:

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

УДК 621.3.049.77

А. А. Иванов, канд. техн. наук,
МО РФ,

П. П. Мальцев, д-р техн. наук,
МИРЭА,

В. А. Телец, д-р техн. наук,
ФГУП "22 ЦНИИ МО РФ"

О НАПРАВЛЕНИЯХ РАЗВИТИЯ МИКРОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКИ

Рассматривается развитие микросистемной техники, связанное с проведением прикладных исследований по созданию компонентной базы МСТ и изделий на ее основе.

Изделия **микросистемной техники** (МСТ) представляют собой комплектующие изделия электронной техники, электронные модули и законченные функциональные системы на их основе (в том числе на мини- и микроплатформах-носителях):

- идентифицируемые по признаку интеграции в едином конструктивном исполнении электронной системы управления и микромеханических исполнительных устройств, принцип действия которых основан на электрофизических, электрохимических, электромеханических, электронно-оптических и фотоэлектронных процессах и явлениях, не подверженные несанкционированным изменениям в процессе применения;
- изготавливаемые по самостоятельным комплектам конструкторской и технологической документации, представляющие собой совокупность электрически и механически соединенных функциональных узлов, образующих конструктивно законченную сборочную единицу;
- предназначенные для реализации функций приема, преобразования, хранения, передачи информации, формирования (преобразования) энергии, исполнения функций конечного назначения;
- выполненные на основе несущей конструкции и обладающие свойствами конструктивной и функциональной взаимозаменяемости.

Создание в объеме или на поверхности твердого тела упорядоченной композиции областей с заданным составом, структурой и геометрией, статическая или динамическая совокупность которых обеспечивает реализацию процессов генерации, преобразования, движения, передачи энергии в интеграции с процессами восприятия, обработки,

трансляции и хранения информации при выполнении запрограммированных операций и действий в требуемых условиях эксплуатации с заданными функциональными, временными, энергетическими и надежностными показателями, представляет собой специализированное научно-техническое направление — **микросистемную технику**.

Изделия МСТ в функционально завершенном виде могут представлять собой информационно-управляющие системы различного назначения и базирования, структурно объединяющие подсистемы сбора и обработки информации в реальном масштабе времени для последующей выработки воздействий на исполнительные элементы и далее — на объект управления. Эти функции выполняются в заданных условиях и с требуемыми информационными, энергетическими, временными и надежностными показателями.

Развитие изделий МСТ стало экономически обоснованным и технически оправданным с появлением нового поколения высоко интегрированных электронных и механических компонентов, способных обеспечить работу функционально завершенных систем объемом в единицы кубических сантиметров.

Изделия МСТ на текущем этапе развиваются на основе научного, производственного и технологического заделов микроэлектроники — ее материалов, конструкций, компонентов, групповых прецизионных процессов, а также ряда других направлений электронной техники.

Принципиальное отличие изделия МСТ от изделий микроэлектроники состоит в трехмерности структур изделия микросистемной техники, исполнительные элементы которой обладают возможностью функционального механического перемещения.

При этом микросистемные технологии имеют, по крайней мере, три главные особенности [1]:

- это технологии массового производства все более сложных приборов и устройств, обеспечивающие повышение надежности и относительное снижение стоимости;
- это междисциплинарные технологии, которые позволяют объединить в одном приборе ранее не связанные технологии, относящиеся к микроэлектронике и механике, микроэлектронике и химии и др.;
- это технологии, которые обеспечивают производство систем и структур с характеристическими размерами порядка микрометра и которые не могли быть реализованы существовавшими до настоящего времени методами.

Функциональными элементами электронной части изделий МСТ являются:

- чувствительные элементы — преобразователи физических величин и компонентов датчиков (первичные преобразователи информации);
- усилители, аналоговые ключи и коммутаторы, схемы выборки и хранения, фильтры, делители частоты и др. (устройства коммутации и нормализации сигналов);
- преобразователи цифроаналоговые и аналогоцифровые, компараторы напряжения (вторичные преобразователи информации); микроконтроллеры, микропроцессоры и цифровые процессоры сигналов (средства обработки информации);
- цифровые и логические схемы, запоминающие устройства (устройства обрaмления); демультиплексоры (устройства вывода и распределения сигналов).

Функциональными исполнительными элементами МСТ являются микромеханические (микроэлектро-, микрооптоэлектро-, микроопто-, микроакустомеханические) устройства и их узлы (микро-размерные двигатели, элементы гидравлики, сопла, поршни, захваты, зацепы, редукторы, шестерни, зеркала, приводы, оконечные силовые устройства и пр.), технологически и конструктивно выполненные в объеме или на поверхности полупроводникового кристалла с применением базовых и модифицированных процессов и операций микро- и оптоэлектроники, функциональной электроники (пьезо-, акусто- и др.).

Отличительной особенностью изделий МСТ является необходимость обеспечения длительной их эксплуатации при переносе энергии заряда и информации в условиях стационарного твердого тела и в пространственно-временном контакте с внешней средой.

Изделия МСТ с интегрированными "интеллектуальной" — электронной и исполнительной — микромеханической частями, размещенные совместно с источниками питания и объектами управления (микрокапсулами с отравляющими и взрывчатыми веществами, источниками радио- и компьютерных помех, видеокамерами инфракрасного диапазона, микрофонами, радиомаяками) на мини- и микроплатформах-носителях, образуют боевые робототехнические средства нового поколения.

Факторами, способствующими развитию изделий МСТ, являются:

- интеграционные процессы в микроэлектронике и смежных областях электроники (опто-, фото-, сверхвысокочастотной, квантовой, силовой);
- наличие научной и технологической культуры, сформировавшейся в период становления и развития микроэлектроники;

- наличие базового оборудования, производственных мощностей и организационной инфраструктуры микроэлектронного производства, пригодных для реализации изделий МСТ;
- развивающийся рынок сенсорных систем различного функционального назначения (в том числе — военного) и конструктивного исполнения на основе нового класса изделий микроэлектроники — преобразователей физических величин и компонентов датчиков;
- формирование рынка миниатюрных недорогих медико-биологических диагностических изделий МСТ, используемых в военных целях, при выполнении антитеррористических и медико-биологических задач, "безлюдной" работы с радиоактивными, токсичными, взрывоопасными и другими веществами (в том числе в сверхмалых количествах и в ограниченных объемах);
- появление сверхбольших интегральных схем электронной части изделий МСТ (в том числе микроэлектронных сложно функциональных блоков, микропроцессоров с нейроподобной архитектурой), обеспечивающих качественно новый уровень "интеллектуальных" и скоростных возможностей обработки и передачи информации;
- появление микромеханических устройств, в которых гальванические связи находятся в тесном взаимодействии с механическими.

Изделия МСТ стали результатом эволюционного развития критически важных технологий электроники XX века:

70-е годы — разработка и освоение промышленной технологии объемного жидкостного травления кремния;

80-е годы — разработка и освоение технологии формирования объемных структур с использованием фотолитографии, синхронного излучения, гальванического осаждения и прецизионного литья полимерами, использование кремния как полупроводникового и конструкционно-механического материала;

90-е годы — разработка и освоение технологии изготовления трехмерных полупроводниковых структур (3D-структуры), интегрирование электрических и оптических связей в кремниевых структурах, начало освоения технологических базисов нано- и биомолекулярных технологий;

начало XXI века — разработка и освоение высоко интегрированных многоуровневых технологий с использованием базовых и модифицированных процессов микроэлектроники, интеграция физико-химических и технологических базисов микро- и биотехнологии, внедрение перспективных полупроводниковых широкозонных материалов и гетероструктур.

Терминология в области микросистемной техники

МСТ пока не имеет канонизированной терминологии, стандартизация микросистем (МС) только начинает формироваться. В связи с этим обстоятельством необходимо обсудить классификацию изделий МСТ.

Существует несколько определений микросистемы. В европейской периодике достаточно долго было принято определять МС так: "Микросистема — это интеллектуальная миниатюризованная система, обладающая сенсорными, процессорными и (или) актюаторными функциями. В ней обычно используется комбинация двух или больше устройств, действующих на основе использования электрических, механических, оптических, химических, биологических, магнитных или других свойств и интегрированных на одном чипе или мультичиповой плате".

В США чаще используется термин "микроэлектромеханические системы" (МЭМС): "МЭМС — это интегрированные микроустройства или системы, комбинирующие электрические и механические компоненты, изготовленные по технологиям, совместимым с технологией ИС и имеющие размеры от микрометров до миллиметров. Соединение в таких системах компьютерной обработки с чувствительными и актюаторными компонентами позволяет нам ощущать и контролировать окружающий мир".

В Японии чаще пользуются терминами "мехатроника" и "микромашин": "Микромашины состоят из функциональных элементов размером в несколько миллиметров и способных образовывать комплексное микроскопическое устройство".

Каждое из этих определений подчеркивает один из существенных признаков: размер, комплексность, интерфейс с окружающей средой и т. д. Разные наименования одних и тех же объектов вынудили западных экспертов объединить аббревиатуры МЭМС, МСТ, ММ в одну — М. Это удачное предложение, отражающее к тому же потенциальную трехмерность микросистемных конструкций, вряд ли приживется без принудительных мер стандартизации. Более того, процесс образования новых терминов продолжается: микроэлектрохимические системы (МЭХМС), наноэлектромеханические системы (НЭМС), микронанотехнологии (МНТ) и т. д.

Компания NEXUS ввела два понятия (термина): "микротехнология" и "микроструктурирование". Оба обозначают воздействие на материал в целях получения микрокомпонентов размером несколько микрометров. На этой основе дается следующее определение МС: "Микросистема — это комбинация нескольких микрокомпонентов, оптимизированная как целостная система для выпол-

нения одной или нескольких функций и содержащая в большинстве случаев микроэлектронное устройство". Это определение коррелирует с определением МСТ, которое в целом, на наш взгляд, имеет слишком широкие рамки.

При попытках сопоставить разноязычную терминологию часто возникают трудности.

Если термины МС и МЭМС практически однозначны в русском и английском вариантах, то русский термин "микросистемная техника" может иметь несколько переводов.

Учитывая, что термин *technique*, с одной стороны, означает технику (конкретное оборудование), а также технологии, причем близкие по исполнению к микросистемной (микроэлектронная и интегральная), но, с другой стороны, очень созвучен произношению и написанию слова "техника", то целесообразно переводить название журнала "Микросистемная техника" как "**Microsystems techniques**" Magazine.

С 2004 г. в России используется новый термин "наносистемная техника", отражающий развитие нанотехнологии для создания микросистемной техники, который по аналогии целесообразно переводить как "**Nanosystems techniques**" (NST). Кроме того, возможно применение и термина "наноэлектромеханические системы" — "**Nanoelectromechanical systems**" (NEMS).

Следовательно, новое название журнала "Нано- и микросистемная техника" целесообразно переводить как "**Nano- and Microsystems techniques**" Magazine.

В России термин "микросистемная техника" стал использоваться в официальных документах после принятия в 1996 г. "Перечня критических технологий Федерального уровня". В "Перечне критических технологий Российской Федерации", утвержденном Президентом Российской Федерации 30 марта 2002 г., микросистемная техника включена как самостоятельная критическая технология, содержание которой определено следующим образом: "Сверхминиатюрные механизмы, приборы, машины с ранее недостижимыми массогабаритными, энергетическими показателями и функциональными параметрами, создаваемые интегрально-групповыми экономически эффективными процессами микро- и нанотехнологии".

Следует отметить, что для перевода на английский язык термина "микросистемная техника" из вышеназванного Перечня, вполне подходит термин "**Microsystems techniques**" (MST). Важно отметить, что в этом случае аббревиатура совпадает с термином "**Microsystems technologies**" (MST) и создает общность понимания в обсуждаемом вопросе.

Учитывая, что в 2000 г. Министерство образования Российской Федерации открыло подготовку инженеров по новой специальности — 201900

"Микросистемная техника" (в рамках направления подготовки дипломированного специалиста 654100 — "Электроника и микроэлектроника", приказ от 02 марта 2000 г. № 686), то было бы целесообразней использовать следующий перевод названия специальности: "**Microsystems engineering**" (по аналогии со специальностями **electrical engineering** — электротехника, **electronic engineering** — электронная техника, **radio engineering** — радиотехника). В данном случае перевод означает конечный продукт и процесс создания, заложенный в термине "engineering".

В настоящее время вопрос формирования единой позиции в области терминологии, стандартизации, нормативно-технического обеспечения микросистемной техники в России находится в стадии проработки. В научно-технической литературе известен ряд попыток решения данной проблемы [3—12].

Так, согласно [3], под микросистемой следует понимать изделие, представляющее собой совокупность связанных элементов, миниатюризация, по крайней мере, одного из которых до диапазона микрометровых размеров приводит к появлению новых функций или улучшению характеристик изделия. Элементы микросистемы интегрируются в определенное целое методами одного из видов групповой микрообработки.

При этом по структурному признаку микросистемы предлагается классифицировать на полные и неполные.

Характерным признаком *полных микросистем* является наличие в их составе:

- элементов, воспринимающих воздействия со стороны окружающей среды (чувствительных элементов, приемников излучения и т. д.);
- преобразующих элементов, которые преобразуют воздействие окружающей среды в информационный сигнал или меняют его (чувствительных элементов датчиков, электронных и оптических элементов схем обработки сигнала);
- элементов, превращающих внутренний информационный сигнал в воздействие на окружающую среду (актюаторы) или сигнал, поступающий во внешний информационный канал.

Неполные микросистемы могут содержать только один или два типа перечисленных выше элементов. К числу таких МС можно отнести микроканальные МС и биочипы.

В интересах обеспечения единства понимания излагаемого материала предлагается использовать следующие термины и определения.

МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ — совокупности методов обработки кристаллов кремния (а также других материалов, уже используемых в микросистемах) и изготовления в непрерывном технологическом цикле неразъемных механиче-

ских устройств с характеристическими пространственными размерами и, в том числе, для различных типов перемещений частей устройства в самом кристалле.

МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКАЯ СИСТЕМА — микроминиатюрное электронно-механическое устройство, элементы которого неразрывно связаны конструктивно, технологически, электрически и механически, обеспечивая различные типы перемещений частей устройства в самом кристалле.

МИКРООПТОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКАЯ СИСТЕМА — микроминиатюрное оптоэлектромеханическое устройство, элементы которого неразрывно связаны конструктивно, технологически, электрически, механически и оптически, обеспечивая различные типы перемещений частей устройства в самом кристалле и изменяя оптический сигнал, поступающий в систему и выходящий из нее.

БИОМИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКАЯ СИСТЕМА — микроминиатюрное биоэлектромеханическое устройство, элементы которого неразрывно связаны конструктивно, технологически, электрически и механически, обеспечивая перемещение химических веществ и биологических материалов в самом кристалле и изменение их свойств в системе или после выхода из нее.

МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА — область микроэлектроники, связанная с созданием и применением микроминиатюрных устройств, изготовленных в непрерывном технологическом цикле неразъемных электромеханических компонентов и узлов с характеристическими пространственными размерами в самом кристалле, в том числе и для различных перемещений отдельных частей системы.

Основные этапы развития МСТ

Начало работ по микросистемам обычно относят к 1948 г., когда был изобретен транзистор. Реально начало эры микросистемных технологий следует отнести к 1954 г., когда С. S. Smith открыл гигантский эффект пьезосопротивления в германии и кремнии, что послужило толчком к созданию сенсоров механических величин с применением полупроводниковых материалов [1]. Важнейшие этапы в развитии технологий микросистемотехники приведены в табл. 1.

К 1980—1990 годам был в целом разработан комплекс технологий, необходимых для проведения работ в области микросистемотехники. С этого времени начинается важнейший этап в развитии МСТ, связанный с проведением прикладных исследований по созданию как компонентной базы МСТ и изделий на ее основе, так и микроразмерных робототехнических комплексов различного целевого назначения.

Таблица 1

Важнейшие этапы в развитии технологий микросистемной техники

Годы	Основные этапы
1948	Изобретение транзистора (J. Berdeen, W. H. Brattain, W. Shockley)
1954	Открытие пьезорезистивного эффекта в германии и кремнии (C. S. Smith)
1958	Изготовление первой интегральной схемы (J. S. Kilby)
1962	Кремниевый интегральный тензопреобразователь (O. N. Tuft, P. W. Chapmen, D. Long)
1965	Изобретение поверхностной микромеханики: резонансный полевой транзистор, чувствительный к ускорению (H. C. Natanson, R. A. Wickstrom)
1968	Открытие электростатического соединения (D. I. Pomerantz); создание первых микромеханических изделий, выполненных методами микроэлектронной технологии — датчиков давления
1973	Объединение интегрального тензопреобразователя и транзисторного усилителя на одном кристалле (Fa. Integrated Transducer)
1976	Глубокое анизотропное травление в кремнии (H. A. Waggener, K. M. Finne, D. L. Klein)
1977	Первый емкостной акселерометр (Standard University)
1979	Первая микросистема на кремниевой шайбе: газовый хроматограф (S. C. Terry, J. H. Germon, J. B. Angell)
1982	Опубликование статьи "Кремний как механический материал", рассматривающей возможность использования приемов полупроводниковой микротехнологии (и кремния как конструкционного материала) не в микроэлектронных целях (K. Peterson)
1985	Развитие LIGA-технологии (W. Ehfeld)
1986	Метод прямого соединения кремниевых пластин (M. Shimbo)
1992	Поверхностная микромеханика SCREAM-Prozess (N. C. Mac-Donald, Cornell University)
1993	Применение микростероолитографии для изготовления сложных 3D-микроструктур с высоким характеристическим отношением; создание проекционного дисплея (Fa. Texas Instruments)
1994	Запатентовано глубокое реактивное ионное травление
1995	Быстрое развитие Bio-MEMS
2000	Широкое применение оптических MEMS

Характерным признаком данного этапа является значительное расширение круга стран, занимающихся проблемами микросистемотехники. В 1995 г. к соперничеству двух мировых лидеров в области МЭМС — США и Японии — активно подключились государства Европы и Юго-Восточной Азии. Важным аспектом при этом является принятие в ряде стран государственных программ проведения работ в данной области.

Широкие потенциальные возможности по реализации новых прогрессивных форм ведения боевых, разведывательных и обеспечивающих действий с использованием автономных и полуавтономных микроминиатюрных средств скрытого наблюдения и поражения живой силы и объектов противника, а также по созданию надежных и малоуязвимых средств разведки, освещения обстановки, связи, навигации, целеуказания и управле-

ния оружием, радиоподавления, охраны обусловили начало работ по тематике микросистемотехники в военных ведомствах различных стран.

Так, Управление перспективных исследований Министерства обороны США (DARPA) с 1998 г. развернуло программу "Microelectromechanical Systems" (MEMS) по созданию микросистем для оснащения войск. В основе ее лежат междисциплинарные исследования и разработки как перспективных микроэлектромеханических систем приборов, так и технологий в целях демонстрации инновационных системных концепций.

Со второй половины 1990-х годов наблюдается значительное повышение интереса к исследованиям в области микросистемной техники и в Российской Федерации. В этот период ряд федеральных органов исполнительной власти (Минпромнауки России, Минобразования России, РАСУ) открыли более 150 научно-исследовательских работ по данной тематике, периодически проводятся специализированные конференции и семинары, в вузах открывается подготовка кадров по специальности "Микросистемная техника".

Основные даты развития микросистемной техники в Российской Федерации приведены в табл. 2.

Имеющиеся в России на текущем этапе технологическая база, научно-технический и кадровый потенциалы в основном позволяют проводить скоординированные мероприятия как в области научных исследований, так и в сфере промышленного производства и использования объектов МСТ.

Анализ текущего состояния развития микросистемной техники

Одной из тенденций современного развития техники является дальнейшая микроминиатюризация отдельных или всех трех основных компонентов МС. Например, в американской "Национальной нанотехнологической инициативе" ставится общая задача уменьшения размеров МЭМС в 10 раз. Это одна из проблем, возникающая на данном этапе развития МСТ. В 1999 г. утверждалось, что область технологий с критическими размерами 3 — 1 мкм достаточна для успешного освоения МСТ на базе трансферта технологии микроэлектроники в МСТ. В связи с этим обстоятельством была сформулирована идея такого трансферта российской полупроводниковой технологии на незагруженных основной продукцией производственных линиях в область МСТ. Правомочность такого решения нашла свое подтверждение в практике крупнейших западных полупроводниковых компаний, которые активно включились в МСТ на базе "устаревших" микроэлектронных линий (Intel, Motorola, IBM и т. д.). Однако в настоящее время в условиях России это означает необходимость параллельного ос-

Основные даты развития микро- и наносистемной техники в Российской Федерации

Годы	Министерства Российской Федерации	Российская академия наук (РАН), IARP, SEMI	Общественная поддержка
1996	В Перечень критических технологий Федерального уровня включено направление "Микросистемная техника"		
1997, 1998		Проекты в рамках РФФИ РАН	
1999	Комплексная программа МСТ	Международный симпозиум "Микророботы, микромашины и микросистемы", ИПМ РАН, IARP, г. Москва	Вышел первый номер журнала "Микросистемная техника" (МСТ) (ISSN 1684-6419)
2000	Международная конференция "Сенсоры и микросистемы", СПбГЭТУ, г. Санкт-Петербург. Минобразованием России открыта специальность "Микросистемная техника" — 201900		Открыт сайт журнала "МСТ" в Интернете http://www.microsystems.ru
2001	Российским фондом технологического развития проведен конкурс в августе-декабре (3 проекта)	Международная конференция "Микро- и наноэлектроника", ФТИАН, г. Москва	Вышел первый электронный архив журнала "МСТ" на лазерном диске
2002	В Перечень критических технологий Российской Федерации до 2010 года включено направление "Микросистемная техника". РАСУ в феврале-марте проведен конкурс на 2002—2004 гг. (около 30 проектов). Минобразованием России в марте-апреле проведен конкурс (около 130 проектов)	Международный семинар "Atomic force microscope", ИФМ РАН, г. Нижний Новгород. Международная конференция "Актуальные проблемы твердотельной электроники и микроэлектроники", ТГРТУ, г. Таганрог. Международная конференция "Электроника и информатика", МГИЭТ (ТУ), Зеленоград	Открыта версия сайта журнала "МСТ" на английском языке в Интернете http://www.microsystems.ru
2003	Минобразованием России проведен конкурс на 2003—2004 гг. (около 100 проектов). Журнал "МСТ" включен в Перечень научных и научно-технических изданий ВАК России с апреля 2003 г.	Международный семинар "Atomic force microscope", ИФМ РАН, г. Нижний Новгород. Международный симпозиум "Микророботы, микромашины и микросистемы", ИПМ РАН, IARP, г. Москва. Журнал "МСТ" выпускается под научно-методическим руководством Отделения информационных технологий и вычислительных систем РАН с мая 2003 г.	Электронный архив журнала "МСТ" за 1999—2003 гг. доступен на сайте в Интернете
2004	Комплексная целевая программа МСТ. Министерством образования и науки РФ открыта подготовка по направлению 658300 "Нанотехнология". Совещание "Нанотехнологии — проблемы развития и подготовки кадров" проведено 22 октября 2004 г. межфракционным депутатским объединением "Наука и высокие технологии" под руководством Нобелевского лауреата, академика Ж. И. Алферова. "Концепция развития в Российской Федерации работ в области нанотехнологий на период до 2010 года" одобрена в основном Правительством Российской Федерации 18 ноября 2004 г.	Научная сессия "Микроэлектромеханические системы: технология, применение", ОИТВС РАН, г. Москва. Специализированная выставка "Нанотехнологии и материалы", организована Правительством 8—9 декабря 2004 г., г. Москва. Специализированная выставка "Наноиндустрия" организована Правительством Московской области 8—9 декабря 2004 г., г. Фрязино	Международная научная молодежная школа "Микросистемная техника—2004", НИИМВС ТГРТУ, ЦНИИРТК и журнал "МСТ". В "Электронную библиотеку" включен журнал "МСТ"
2005	"Круглый стол" на тему: "Проблемы законодательного регулирования и государственной политики по развитию нанотехнологий в Российской Федерации" проведен 31 марта 2005 г. в Совете Федерации с участием Нобелевского лауреата, академика Ж. И. Алферова	MEMS & MST Conference SEMI EXPO CIS 2005, г. Москва	Журнал получил расширенное название "Нано- и микросистемная техника" (ISSN 1813-8586. Подписные индексы: "Роспечать" — 79493; "Пресса России" — 27849)

воения области литографических размеров менее 0,5 мкм как для микроэлектроники, так и для МС коммерческого и специального назначения.

За рубежом перспектива широкого применения различных МС способствовала появлению ряда национальных и корпоративных программ по микросистемам, финансируемых, в том числе, и из военных бюджетов. Интенсивный рост числа фирм, вы-

пускающих МС или применяющих их в своих изделиях, привел к энергичному росту объема мирового рынка МС (с темпом 18—20 % в год), который по разным оценкам достиг в 2002 г. 17—18 млрд долл. США при общем числе изделий около 7 млрд шт. Большое число университетов и коммерческих компаний США, Японии, стран Европейского Союза и Юго-Восточной Азии, сконцентрировав

усилия на развитии технологий микросистемной техники, открыли широкий спектр их возможного применения.

О динамичности рынка МС, как части рынка изделий высоких технологий, свидетельствует также снижение цены типовых изделий МСТ в среднем в 2,6 раза за 5 лет при росте числа изделий в 4,3 раза (см. рисунок).

Показатели динамики основных сложившихся секторов рынка МС (периферийные устройства вычислительной техники, МС для медицины, транспорта, телекоммуникаций и т. д.) не уступают, а в ряде случаев и превосходят показатели рынка изделий микроэлектроники, вычислительной техники и телекоммуникаций.

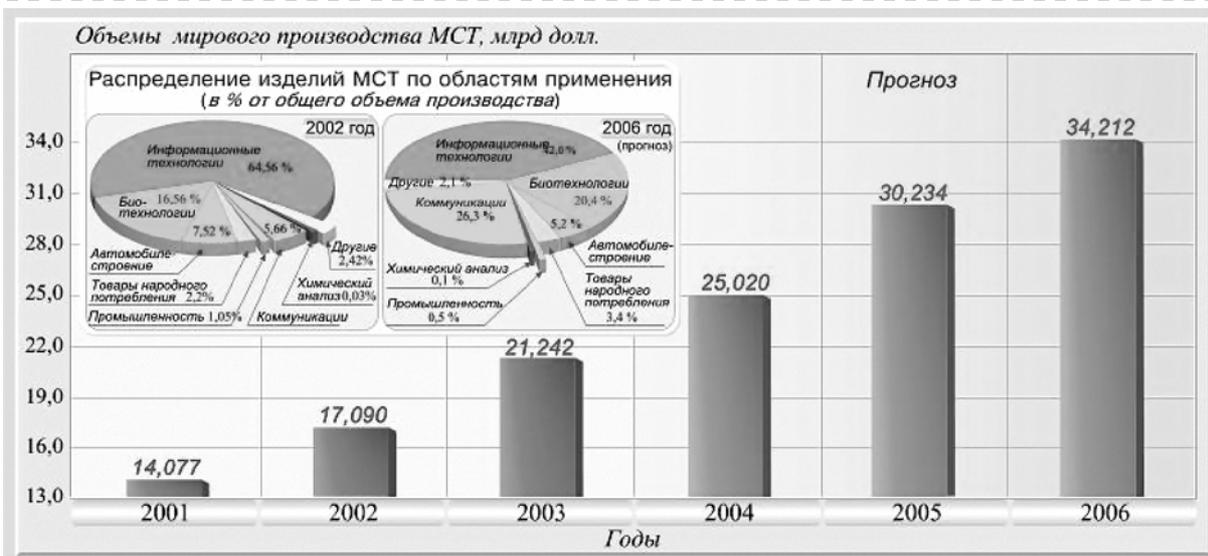
Появление МСТ исторически связано с технологией микроэлектроники. Наиболее распространенной формой производственной линии МСТ является соединение типовой технологической линии микроэлектроники (например, КМОП-технологии, т. е. планарной технологии) с дополнительным специфическим модулем МСТ для создания трехмерных структур. Перспективность кремниевой технологии связывают именно с возможностью размещения на одном кристалле функциональной части МС компонентов электронной обработки сигнала, т. е. с созданием систем на кристалле (SoC). Температурная несовместимость некоторых технологических процессов, возникающая при этом, заставляет разработчиков МС искать новые материалы для подложек (Si—Ge, SiC, кремний на изоляторе и др.), однако преодолеть все трудности оказалось не простой задачей. Поэтому в большинстве МС используется гибридная технология (многокристалльная, или "мультичиповая" сборка). В связи с этим на западе значитель-

ное внимание в производстве МС уделяют вопросам конструкций сборок и корпусирования, а также проблемам измерений, испытаний и надежности МС. К сожалению, в России этим вопросам пока уделяют недостаточное внимание.

В отличие от технологии современной микроэлектроники, в области МСТ стоимость оборудования пока ниже. Это позволяет создать технологическую линию МСТ стоимостью на 2—3 порядка ниже стоимости субмикрометрового производства ИС (1—3 млрд долл.). Она доступна для малых фирм и стран, которые никогда не были в числе лидеров микроэлектроники (Швейцария, Дания, Норвегия и т. д.) Доступность МСТ — это еще одно ее преимущество. Конечно, общая тенденция снижения топологических норм касается и МСТ. Здесь также следует ожидать в дальнейшем переход в нанометровый диапазон топологических норм. Уже известны попытки создания датчиков по нанотехнологии, датчиков на основе фуллеренов и отдельных молекул.

При освоении новой научно-технической области основные трудности возникают на стадии перехода к производству, поскольку на стадии освоения производственных технологий, как и в любом другом производстве, в МСТ существует набор основных технологий, которые позволяют изготовить все необходимые компоненты, детали и выполнить их сборку.

В настоящее время более 250 организаций различных форм собственности специализируются на проведении работ в области разработки и производства изделий микросистемотехники [2]. Сведения о ведущих зарубежных организациях представлены в табл. 3.



Динамика роста объемов производства изделий микросистемной техники

Ведущие зарубежные организации в области МСТ

Название учреждения	Статус	Области индустрии	Род занятий и предоставляемые услуги	Разрабатываемые и производимые изделия	Используемые технологии	Особая роль в МСТ-сообществе, профилирующее направление
IntelliSense Corporation (США)	Не указан	Автоматизация производства и контроля, производственное и научное оборудование, телекоммуникации, аэрокосмические приложения, контроль среды	Производитель, исследовательская лаборатория, центр разработки, обучение и стажировка специалистов, разработка САПР для МЭМС	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микромоторы, микронасосы, микрозеркала, дисплеи	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, стекло, керамика, кварц); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*)	Предоставляет поддержку организациям по всему миру в разработке изделий МСТ, поставляя средства разработки, моделирования, создания прототипов
ХАСТIX, Inc. (США)	Частная коммерческая организация	Телекоммуникации, медицинские применения МЭМС, производственное и исследовательское оборудование	Производитель, производитель оборудования, исследовательская лаборатория, центр разработки	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, переключатели, реле, микрозеркала	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, кварц, стекло, керамика, элементы III—V гр.); — поверхностной микро-механики (подложка: Si, элементы III—V гр.); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si; Si*; Si/Ge)	Производитель оборудования для МСТ, биомедицинские приложения МЭМС
Center for Automation Technologies (США)	Частная коммерческая организация	Телекоммуникации, медицина, аэрокосмические исследования, автоматизация контроля и производства	Исследовательская лаборатория, обучение и стажировка специалистов	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, дисплеи, микромоторы, микронасосы	Для упаковки и соединений: • стандартные ИС; • микросборка; • 3D-упаковка	Не указано
Piezo Solutions (США)	Не указано	Телекоммуникации, медицина, аэрокосмические исследования, автоматизация контроля и производства, научное и производственное оборудование	Исследовательская лаборатория, центр разработки, поставщик оборудования и материалов, разработка САПР для МЭМС, анализ надежности и отказа, тестирование	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, дисплеи, микромоторы, микронасосы	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, керамика); — поверхностной микро-механики (подложка: пьезоэлектрическая керамика); — поверхностной микро-механики (активный слой: пьезоэлектрическая керамика)	Консультант по разработке и производству различных изделий с использованием керамики и пьезоэлектрических материалов
Univ. of So. Florida/Center for Ocean Technology (США)	Вуз	Научное и производственное оборудование, медицина, контроль среды	Исследовательская лаборатория, центр разработки, тестирование	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, дисплеи, микромоторы, микронасосы	Не указано	Океанография, медицинская масс-спектрометрия
Analog Devices Inc. (Великобритания)	Общественная коммерческая организация	Автоматизация производства и контроля, производственное и научное оборудование, телекоммуникации, аэрокосмические приложения, контроль среды	Производитель, исследовательская лаборатория, центр разработки, исследования и анализ надежности и отказа	Сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*)	Оптические приложения МЭМС

Название учреждения	Статус	Области индустрии	Род занятий и предоставляемые услуги	Разрабатываемые и производимые изделия	Используемые технологии	Особая роль в МСТ-сообществе, профилирующее направление
Defense Evaluation and Research Agency (Великобритания)	Государственная организация	Телекоммуникации, аэрокосмические приложения, медицинские применения МЭМС, производственное и исследовательское оборудование	Производитель, исследовательская лаборатория, центр разработки, обучение и стажировка специалистов	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, микронасосы, дисплеи	Технология: — объемной микро-механики (подложка Si, кварц, стекло); — поверхностной микро-механики (подложка: Si, КНИ, кварц, стекло); — поверхностной микро-механики (активный слой Si, Si*, Si/Ge, КНИ)	Решения для коммерческих и военных применений МСТ от идей до прототипов и производства. Поддержка разработки и производства. Оптические МЭМС
Applied Microengineering Ltd. (Великобритания)	Частная коммерческая организация	Телекоммуникации, медицинские применения МЭМС, производственное и исследовательское оборудование	Исследовательская лаборатория, центр разработки, разработка САПР для МЭМС	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, кварц, стекло); — поверхностной микро-механики (подложка Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*)	Независимая организация, занимающаяся разработками изделий МСТ и МЭМС
Walsin Lihwa Corp. (Taiwan)	Международная организация	Телекоммуникации, медицинские приборы, производство ИС	Производитель, лаборатория по исследованию и разработке, анализ надежности	Сенсоры давления (поставляет), сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, элементы гр. III—V, стекло, металлы); — поверхностной микро-механики (подложка: Si, элементы гр. III—V); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*, элементы гр. III—V)	Разработка высоких технологий для оптических и полупроводниковых компонентов, создание своей МСТ лаборатории
National Tsing Hua University (Taiwan)	Государственный вуз	Автоматизация производства и контроля, производственное и научное оборудование, мониторинг среды	Исследовательская лаборатория, обучение и стажировка специалистов	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, переключатели, реле, микрозеркала	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*)	Создание техники исследования и разработки изделий МСТ, техническая поддержка для нужд исследователей
ASM Lithography (Нидерланды)	Общественная коммерческая организация	Телекоммуникации, медицинские приборы, аэрокосмические приложения, производство ИС	Производитель оборудования	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, дисплеи	Технология: — поверхностной микро-механики (подложка: Si, элементы гр. III—V); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*, α -Si, элементы гр. III—V)	Решения для микролитографии в производстве МСТ изделий
Institute of Electron Technology (Польша)	Исследовательский центр	Производство ИС	Исследовательская лаборатория, производитель изделий МСТ, разработка САПР для МЭМС, тестирование, обучение и стажировка специалистов	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, переключатели, реле, микро-моторы, микронасосы, микрозеркала	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*)	Не указано

Название учреждения	Статус	Области индустрии	Род занятий и предоставляемые услуги	Разрабатываемые и производимые изделия	Используемые технологии	Особая роль в МСТ-сообществе, профилирующее направление
Cooperative Research Center for MicroTechnology (Австрия)	Исследовательский центр	Автоматизация производства и контроля, производственное и научное оборудование, телекоммуникации, аэрокосмические приложения, контроль среды, системы безопасности	Исследовательская лаборатория, центр разработки, обучение и стажировка специалистов	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, переключатели, реле, гироскопы, микромоторы, микронасосы, микрозеркала, дисплеи	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, элементы гр. III—V, стекло, металлы, керамика, кварц); — поверхностной микро-механики (подложка: Si, элементы гр. III—V); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*, элементы гр. III—V, a-Si, Si/Ge)	Тесное сотрудничество с производителями, исследования в различных областях МСТ
Royal Philips Electronics N. V. (Нидерланды)	Частная коммерческая организация	Телекоммуникации, компьютерная периферия, медицинские приложения	Исследовательская лаборатория	Сенсоры ускорения, переключатели	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, стекло, керамика, кварц); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si*)	Создание новых электронных продуктов с высокой степенью интеграции на основе технологии тонких и толстых полимеров, МСТ переключателей
Yokogawa Electric Corporation (Япония)	Частная коммерческая организация	Автоматизация контроля и производства, производственное и научное оборудование, телекоммуникации, контроль среды, оборудование для офисов и компьютерная периферия	Производитель МСТ, производитель оборудования	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, дисплеи	Технология: — объемной механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*)	Разработка кремниевых датчиков давления для коммерческих применений на протяжении 10 лет
Saab Micro-Tech AB (Швеция)	Частная коммерческая организация	Телекоммуникации, аэрокосмические приложения, медицинские применения МЭМС	Производитель, исследовательская лаборатория, центр разработки, исследования и анализ надежности и отказа, обучение и стажировка специалистов	Сенсоры давления, сенсоры ускорения, гироскопы, переключатели, реле, микрозеркала, дисплеи	Технология: — объемной микро-механики (подложка: Si, элементы гр. III—V, стекло); — поверхностной микро-механики (подложка: Si); — поверхностной микро-механики (активный слой: Si, Si*, элементы гр. III—V)	Разработка изделий МСТ для телекоммуникаций, поддержка проектов от идеи до окончательного продукта

Потенциал России в области микросистем можно условно разделить на три составные части:

- интеллектуальные ресурсы и уровень научно-исследовательской деятельности;
- материально-техническая база;
- квалифицированные кадры и менеджеры, способные эффективно управлять процессами обеспечения качества, производства и продаж.

Среди ведущих организаций в области создания МСТ в Российской Федерации необходимо отме-

тить Научно-производственный комплекс "Технологический центр" МИЭТ, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Институт физики микроструктур РАН, Государственный научно-исследовательский институт физических проблем им. Ф. В. Лукина, Научно-исследовательский институт молекулярной электроники и завод "Микрон", Центральный научно-исследовательский ин-

ститут робототехники и кибернетики, Физико-технологический институт РАН, Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, ЗАО "Гирооптика", ФГУП "ЦНИИ "Электроприбор", Таганрогский государственный радиотехнический университет, ОАО "Раменское приборостроительное конструкторское бюро", Институт автоматики и электрометрии СО РАН.

Ниже представлен далеко не полный перечень проводимых в нашей стране разработок, который дает представление о характере и направлениях исследований:

- системы типа "электронный язык" и "электронный нос";
- биосенсоры или ферментные сенсоры в микроэлектронном исполнении, обеспечивающие высокую чувствительность и селективность;
- адаптивный газоанализатор на основе банка селективных сенсоров;
- технологии и полупроводниковые материалы фотоприемников в селективных областях арсенида галлия, выращенных в окнах кремниевых подложек, микро- и наноструктур на изолирующих подложках;
- сканеры магнитных полей на основе интегральных матриц;
- математические модели оптимизации параметров преобразователей;
- адаптивный газоанализатор для определения состава и концентрации паров органических соединений в воздухе;
- мобильный гравиметр для использования в самолетных, вертолетных и морских геофизических комплексах разведки полезных ископаемых по данным измерения гравитационных аномалий поля тяготения Земли, в системах навигации по геофизическому полю;
- высокостабильные, чувствительные элементы для измерения параметров газовых смесей и анализа поверхностных процессов, системы химического анализа равновесных процессов адсорбции из газовой фазы монолитными и микропористыми адсорбентами;
- микрофлюидные чип-анализаторы медицинской диагностики, генетического, экологического гигиенического и технического анализа;
- датчики сверхнизкого давления для исследования верхних слоев атмосферы, обеспечения космических технологий, для установок сверхвысокого вакуума;
- безынерционные навигационные системы на основе трехосных акселерометров и гироскопов и др.

Движущими силами развития отечественных изделий микросистемной техники являются:

- потребности экспортных отраслей экономики, прежде всего — продажа вооружения и военной техники;
- развитие автоматизированных систем управления и информационно-измерительных систем в оборонной, добывающих и обрабатывающих отраслях промышленности;
- развитие потребностей космонавтики и авионики;
- экология и мониторинг среды крупных мегаполисов и регионов, театров боевых действий и техногенных катастроф;
- борьба с терроризмом.

При этом важнейшим практическим условием развития изделий МСТ является создание отечественной материаловедческой и технологической базы.

Список литературы

1. **Гридин В. А., Драгунов В. П.** Физики микросистем: Учеб. пос. В 2 ч. Ч. 1. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. 416 с. (Сер. "Учебники НГТУ").
2. **Горнев Е. С., Зайцев Н. А., Равилов М. Ф., Романов И. М., Ранчин С. О., Былинкин Д. А.** Анализ разработанных зарубежных изделий микросистемной техники // Микросистемная техника. 2002. № 7. С. 6—11.
3. **Вернер В. Д.** К терминологии в микросистемной технике // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 9. С. 6—7.
4. **Бурдаков С. Ф., Кириченко О. В., Коротынский А. В., Смольников Б. А., Чистяков В. М.** Классификация зарубежных мини- и микроробототехнических систем военного назначения на основе структурно-функционального подхода // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 4. С. 37—42.
5. **Стреж С. В., Трошин Е. В.** Создание космических систем на базе микроаппаратов // Микросистемная техника. 2003. № 11. С. 35—41.
6. **Космическая съемка Земли** / Под ред. А. А. Кучейко. М.: Радиотехника, 2001. 140 с.
7. **Власов Ю. Н., Мазничко А. А., Зоря В. В., Решетиллов А. Н.** Применение биосенсорных методов для контроля поражающих факторов химической и биологической природы // Микросистемная техника. 2001. № 9. С. 20—24.
8. **Ермак С. Н.** Аспекты стратегии разработки микроспутниковых систем. Зарубежный опыт // Матер. конф. "Высокие технологии XXI века" (19—23 апреля 2004 г.). М. 2004. С. 158—161.
9. **Paddle В. М.** Biosensors for chemical and biological agents of defence interest // Review article. Резюме. Biosensors and Bioelectronics. 1996. V. 11, N 11. P. 1079—1113.
10. **Вернер В. Д., Мальцев П. П., Сауров А. Н., Чаплыгин Ю. А.** Синергетика миниатюризации: микроэлектроника, микросистемная техника, наноэлектроника // Микросистемная техника. 2004. № 7. С. 23—29.
11. **Мальцев П. П.** О терминологии в области микро- и наносистемной техники // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 9. С. 2—5.
12. **Вернер В. Д.** К терминологии в микросистемной технике // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 9. С. 6—8.

УДК 539.2:530.145

И. В. Запороцкова, канд. физ.-мат. наук,
Волгоградский государственный университет
E-mail: irinaz@rbcmail.ru

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ АЛИЦИКЛИЧЕСКИХ НАНОТУБУЛЕНОВ

В рамках модели молекулярного кластера с замыканием нескомпенсированных валентностей псевдоатомами водорода и полуэмпирической расчетной схемы MNDO-PM3 с полной оптимизацией геометрических параметров исследованы электронное строение и спектр одноэлектронных состояний гипотетических (к настоящему времени не синтезированных) нанотрубок с насыщенной углерод-углеродными связями (полиалициклические тубулены). Рассмотрены модификации этих нанотубуленов, образованные замещением наружных атомов водорода в пределах центрального слоя вдоль периметра трубки на радикальные функциональные группы CH_3 -, NH_2 -, PH_2 -, OH -, SH -, F -, NO_2 -, CN - и функциональные группы с переходными элементами $(\text{O})_2\text{Ti}(\text{Cl})_2$, $(\text{O})_2\text{Cr}(\text{O})_2$, $(\text{O})_2\text{Mn}(\text{O})_2\text{OH}$, $(\text{O})_2\text{Fe}$, $(\text{O})_2\text{Ni}$ и $(\text{O})_2\text{Mo}(\text{Cl})_2$. Обсуждены особенности электронно-энергетического строения данного класса нанотрубок.

Введение

Открытие углеродных нанотрубок [1–5] стало одним из наиболее важных достижений науки последнего времени. Их уникальные физико-химические свойства определили широчайшие перспективы использования нанотубуленов в микро- и наноэлектронике. В числе уже созданных приборов нанодиоды, транзисторы, элементы памяти, логические схемы и др. Однако углеродные нанотрубки — не единственно возможная форма существования нанотубулярных структур. Успехи в синтезе углеродных нанотрубок (УНТ) инициировали работы по получению иных веществ в тубулярной форме. К числу наиболее надежных в смысле получения можно отнести УНТ на основе слоистых борсодержащих фаз — гексагонального нитрида бора, карбида и карбонитрида. К настоящему времени синтезированы нанотрубы на основе

слоистых дихалькогенидов, изучаются возможности получения тубулярных наноструктур кремния, карбидов металлов и др. [6]. Поэтому прогностические исследования строения и физико-химических свойств неуглеродных, смешанных или иных возможных нанотубулярных структур чрезвычайно актуальны.

Алициклические углеродные нанотрубки: структура и электронное строение

Можно предположить, что при скручивании "плоских" (гофрированных) полиалициклов могут образовываться нанотубулярные структуры, которые можно назвать алициклическими углеродными нанотрубками (АУН). Эти наноструктуры пока не синтезированы, однако их существование вполне вероятно, особенно в случае, когда при скручивании "напряжение" связей будет не очень большим. Такая ситуация

может иметь место, если число структурных элементов (шести-членных циклов, или гексагонов) по длине окружности трубки будет достаточно велико.

За основу структуры алициклической углеродной нанотрубки был выбран цилиндрический углеродный нанотубулен, содержащий восемь гексагонов по периметру. Из него может быть образована алициклическая углеродная нанотрубка, если половину атомов углерода исходного тубулена, расположенных через один атом друг относительно друга, вытянуть "наружу" трубки, а другую половину втянуть "внутрь" и замкнуть эти атомы углерода атомами водорода вдоль направления деформации нанотубулена. Полученная этим способом структура моделировалась молекулярным кластером (МК), разорванные связи в котором замыкались псевдоатомами водорода. Выбранный таким образом кластер включал 112 атомов углерода и 128 атомов водорода (рис. 1, а, б).

Для расчета электронного строения и энергетического спектра алициклического углеродного тубулена применена полуэмпирическая квантово-механическая схема MNDO-PM3 [7, 8], хорошо зарекомендовавшая себя при исследованиях большого числа многоатомных твердотельных структур. Выбор данной схемы продиктован как увеличением скорости выполнения расчетов по сравнению с "ab initio" (результаты расчетов, полученные методами MNDO и PM3, соответствуют результатам неэмпирических расчетов), так и корректным описанием электронной структуры нанотрубок. Выполненные расчеты с полной оптимизацией геометрических параметров показали, что зарядовое распределение в центральном слое кла-

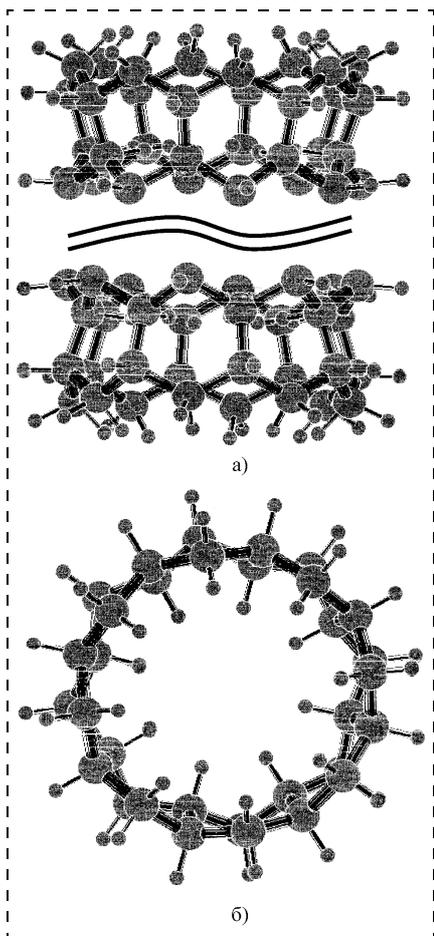


Рис. 1. Модель ациклического углеродного нанотрубулена (бездефектный вариант): *a* — вид сбоку; *b* — вид сверху. Атомы водорода показаны шариками малого размера, остальные — атомы углерода

стера и двух прилегающих к нему слоев совпадают с точностью до $0,005|e|$, что свидетельствует о незначительном влиянии граничных условий на электронные характеристики "внутренней" части МК. Это позволяет ограничиться рассмотрением кластера выбранного размера без его увеличения вдоль продольной оси.

Для построенного таким образом ациклического нанотрубулена найден минимум полной энергии, что говорит о возможности устойчивого существования такой структуры. При этом средняя энергия связи нанотрубулярной ациклической системы оказалась равной примерно 7,2 эВ, что вполне сопоставимо с энер-

гией связи фуллеренов и углеродных нанотрубок, чья стабильность не подвергается сомнению [1—3]. Оптимальные расстояния $R(C - C)$ оказались равными 1,55 Å (0,155 нм) и 1,59 Å (0,159 нм), а углы между углерод-углеродными связями 124° и 114° для "внутренних" атомов углерода и 108,5° и 102° для "наружных" атомов углерода, соответственно.

На рис. 2, *a, б* представлены диаграммы энергетических уровней электронов для АУН и УНТ. Анализ диаграмм показывает, что при переходе от углеродной нанотрубки к АУН граница зоны заполненных состояний опускается, а вакантных состояний поднимается, что приводит к увеличению ширины запрещенной щели (от 2,9 до 12,1 эВ). Это соответствует переходу от ненасыщенной квази- π -электронной структуры к

насыщенной σ -электронной. Таким образом, ациклическая углеродная нанотрубка представляет собой диэлектрик (даже с учетом ожидаемого завышения значения ширины запрещенной зоны на 20 % для моделей молекулярного кластера [5]).

Ациклические углеродные нанотрубки, модифицированные радикальными функциональными группами

Известно, что проводящие свойства углеродных трубуленов сильно зависят от допирования (модифицирования) исходных структур отдельными атомами и функциональными группами [5, 9, 10]. Поэтому представляется интересным рассмотреть вопрос о влиянии замещающих (модифицирующих) функциональных групп на электронное строение

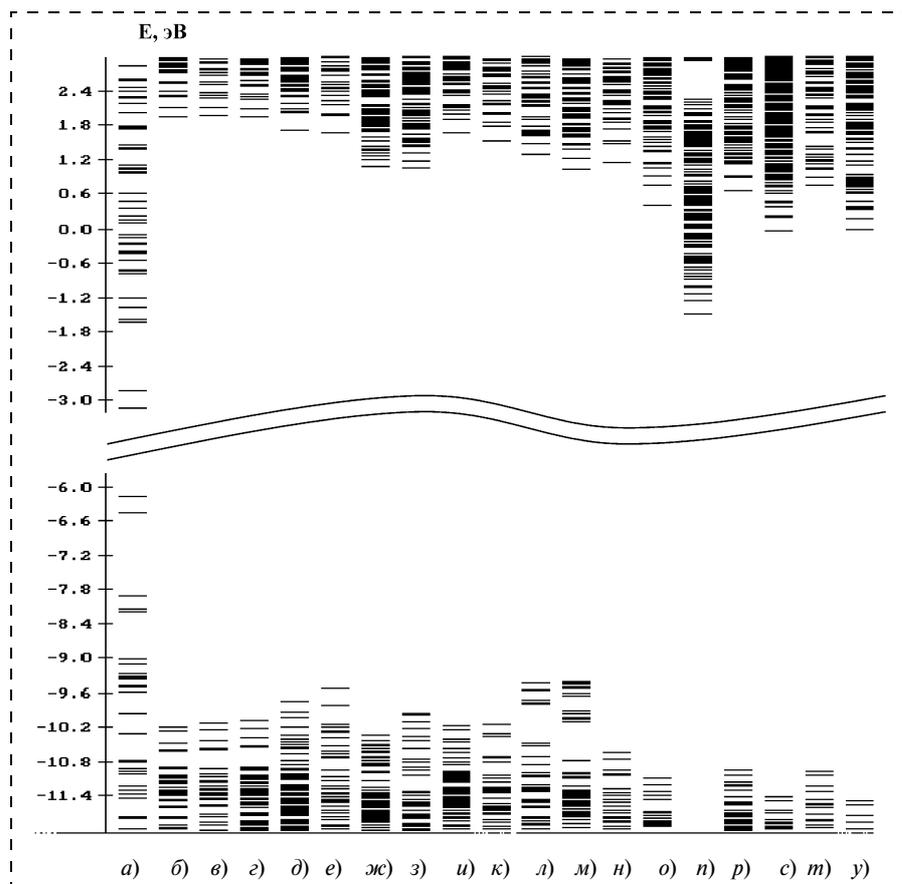


Рис. 2. Спектры одноэлектронных состояний бездефектных нанотрубуленов: УНТ (*a*); АУН (*б*) и трубуленов с дефектами в пределах одного или двух слоев соответственно CH_3 (*в, г*); NH_2 (*д, е*); PH_2 (*ж, з*); OH (*и, к*); SH (*л, м*); F (*н, о, п*) — внешние атомы водорода замещались на атомы фтора в пределах одного слоя, двух слоев и всего трубулена; NO_2 (*р, с*); CN (*т, у*)

алициклических тубуленов. С этой целью были рассмотрены структуры на их основе, получающиеся замещением наружных атомов водорода в пределах одного или двух слоев на радикальные функциональные группы CH_3 , NH_2 , PH_2 , OH , SH , F , NO_2 , CN . Соответствующие энергетические диаграммы также приведены на рис. 2. Анализ этих диаграмм установил следующее.

1. Замещение атомов водорода на метильные группы не оказывает существенного влияния на исходный энергетический спектр. Замещение H на группы NH_2 приводит к появлению в запрещенной щели уровней как над потолком валентной зоны (отвечают неподеленным парам электронов атомов азота), так и ниже дна зоны проводимости (соответствуют разрыхляющим орбиталям углерод-углеродных связей). Смещение этих уровней вглубь запрещенной зоны невелико (0,5 эВ).

2. Введение PH_2 -групп приводит к появлению уровней, близко примыкающих к валентной зоне (соответствуют неподеленным парам электронов атомов фосфора) и уровней, отвечающих разрыхляющим орбиталям $\text{P}-\text{H}$ и $\text{P}-\text{C}$ связей, расположенных ниже дна зоны проводимости примерно на 1 эВ.

3. Гидроксидные группы на поверхности тубулена также слабо деформируют структуру энергетического спектра, при этом в состоянии, соответствующие верхней границе валентной зоны, преимущественный вклад вносят орбитали неподеленных пар атомов кислорода.

4. Присутствие тиольных групп приводит к более значительному сужению запрещенной щели за счет появления уровней, расположенных на 1 эВ выше верхней границы валентной зоны и на 1 эВ ниже дна зоны проводимости невозмущенного АУН. Они отвечают неподеленным парам атомов серы (~50 %) и разрых-

ляющим орбиталям связей $\text{C}-\text{S}$ и $\text{S}-\text{H}$ (~20 %) соответственно.

5. Введение фтора в структуры АУН существенно деформирует его энергетический спектр. Уровни энергии как занятых, так и вакантных состояний опускаются в область более низких энергий, и тем в большей степени, чем больше атомов водорода замещено на атомы фтора. Состояния, преимущественный вклад в которые вносят орбитали атомов F , оказываются в глубине валентной зоны и зоны проводимости.

6. Качественно аналогичная ситуация имеет место в NO_2 - и CN -замещенных АУН. При этом верхним занятым состояниям отвечают орбитали неподеленных пар атомов кислорода NO_2 групп, а нижним вакантным состояниям — разрыхляющие орбитали NO - и $\text{C}-(\text{NO}_2)$ связей (для NO_2 -замещенных структур).

Алициклические углеродные нанотрубки, модифицированные функциональными группами с атомами переходных металлов

Среди известных в настоящее время нанотубуленов с атомами замещения и внедрения (дефектами строения) особое место занимают углеродные нанотрубки, содержащие переходные металлы [1—4]. Эти структуры представляют большой интерес для исследователей, обусловленный как особенностями строения, так и возможностью синтеза на их основе перспективных материалов электронной техники.

Далее в работе представлены результаты полуэмпирических расчетов алициклических углеродных нанотубуленов с атома-

ми переходных элементов. Можно ожидать появления интересных особенных оптических и электрических свойств таких АУН. Исследуются алициклические углеродные нанотрубки, содержащие атомы $3d$ - и $4d$ -металлов, и изучаются их электрические и оптические свойства в зависимости от структуры и состава введенного дефекта. Расчеты также выполнены с помощью схемы MNDO-PM3 и программного пакета HyperChem 6.03, позволяющего проводить исследования систем с d -элементами [11—25].

Рассмотрены зигзагообразные цилиндрически симметричные АУН, содержащие двенадцать колец по окружности трубки с насыщенными $\text{C}-\text{C}$ связями. Молекулярный кластер такой нанотрубки был геометрически замкнут по окружности. Вдоль оси тубулена кластер содержал шесть слоев элементарных циклов и включал 168 атомов углерода и 192 атома водорода. Расстояние между ближайшими двумя атомами углерода (длина $\text{C}-\text{C}$ связи) принималось равным $\sim 1,53 \dots 1,55 \text{ \AA}$ (следствие оптимизации "чистого" углеводородного нанотубулена). Рассматривались наноструктуры, образованные замещением наружных атомов водорода в пределах одного, центрального слоя тубулена на функциональные группы $(\text{O})_2\text{Ti}(\text{Cl})_2$, $(\text{O})_2\text{Cr}(\text{O})_2$, $(\text{O})_2\text{Mn}(\text{O})_2\text{OH}$, $(\text{O})_2\text{Fe}$, $(\text{O})_2\text{Ni}$ и $(\text{O})_2\text{Mo}(\text{Cl})_2$ (рис. 3). Оптимизация геометрии выбранных систем с так называемыми дефектными группами, проводилась путем минимизации полной энергии системы с параметром сходимости 0,01 ккал/моль/атом.

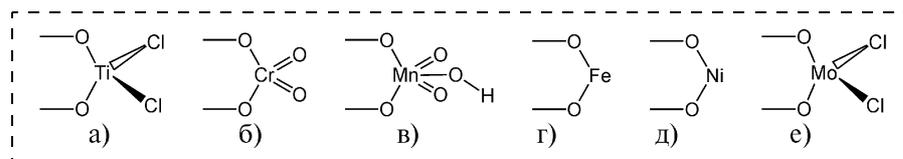


Рис. 3. Функциональные группы замещения наружных атомов водорода вдоль окружности НТ центрального слоя трубки:

$a - (\text{O})_2\text{Ti}(\text{Cl})_2$; $b - (\text{O})_2\text{Cr}(\text{O})_2$; $v - (\text{O})_2\text{Mn}(\text{O})_2\text{OH}$; $z - (\text{O})_2\text{Fe}$; $d - (\text{O})_2\text{Ni}$; $e - (\text{O})_2\text{Mo}(\text{Cl})_2$

Таблица 1

Оптимальные длины валентных связей в изучаемых АУН

Тип структуры	d-атом функциональной группы, Z	R(Z-O), Å	R(Z=O), Å	R(Z-Cl), Å	R(C-O), Å	R(H-O), Å	R(Z-O), Å (для Z = Mn)
(O) ₂ Ti(Cl) ₂	Ti	1,94	—	2,28	1,46	—	—
(O) ₂ Cr(O) ₂	Cr	1,79	1,62	—	1,48	—	—
(O) ₂ Mn(O) ₂ OH	Mn	1,85	1,67	—	1,45	0,97	1,89
(O) ₂ Fe	Fe	1,76	—	—	1,48	—	—
(O) ₂ Ni	Ni	1,84	—	—	1,45	—	—
(O) ₂ Mo(Cl) ₂	Mo	1,85	—	-2,32	1,47	—	—

Таблица 2

Значения энергии уровней, обусловленных дефектными группами, относительно границ зоны проводимости ($E_c - E_{\text{деф}}$) и валентной зоны ($E_{\text{деф}} - E_v$) и энергетическая щель ΔE_g для разных типов функциональных групп

Тип структуры	($E_{\text{деф}} - E_v$), эВ	($E_c - E_{\text{деф}}$), эВ	ΔE_g , эВ
(O) ₂ Ti(Cl) ₂	-0,66	3,50	9,64
(O) ₂ Cr(O) ₂	-0,05	4,33	8,19
(O) ₂ Mn(O) ₂ OH	-0,90	4,17	9,21
(O) ₂ Fe	0,44	4,57	7,47
(O) ₂ Ni	-0,15	5,74	6,89
(O) ₂ Mo(Cl) ₂	0,72	3,98	7,78

Данные о длинах валентных связей приведены в табл. 1.

На рис. 4 приведен пример модели МК нанотрубулена, содержащего дефектные группы типа (O)₂Ni.

Можно получить интересные и важные результаты, если установить связь изменений электронной структуры с вызывающими их изменениями геометрии рассмотренных объектов.

В табл. 2. приведены значения энергии уровней молекулярных орбиталей алициклических тубуленов с рассмотренными выше типами дефектных групп относительно граничных значений энергий уровней, соответствующих потолку валентной зоны (ВЗ) и дну зоны проводимости (ЗП) соответствующего бездефектного нанотрубулена, и значения энергетической щели ΔE_g между наи-

высшей занятой молекулярной орбиталью (верхняя граница валентной зоны) и нижней вакантной МО (нижняя граница зоны проводимости) для этих АУН. Диаграммы одноэлектронных уровней исследуемых замещенных алициклических углеродных тубуленов приведены на рис. 5.

Расчеты показали, что уровни молекулярных орбиталей группируются в зоны: четко обозначены валентная зона и зона проводимости, разделенные запрещенной энергетической щелью. Анализ данных табл. 2 и рис. 5 установил, что наличие функциональных групп вызывает возмущение энергетических зон бездефектной нанотрубки. Это возмущение проявляется в том, что энергетический зазор между валентной зоной и зоной проводимости уменьшается, т. е. увеличивается проводимость нанотрубулена — АУН становится более "металлическим". Причем тем больше, чем выше заряд ядра d-атома дефекта нанотрубки.

Рассмотрим характер группирования локальных дискретных уровней в энергетическом зазоре, обусловленных атомами дефектных групп, и оценим их природу.

1. При замещении наружных

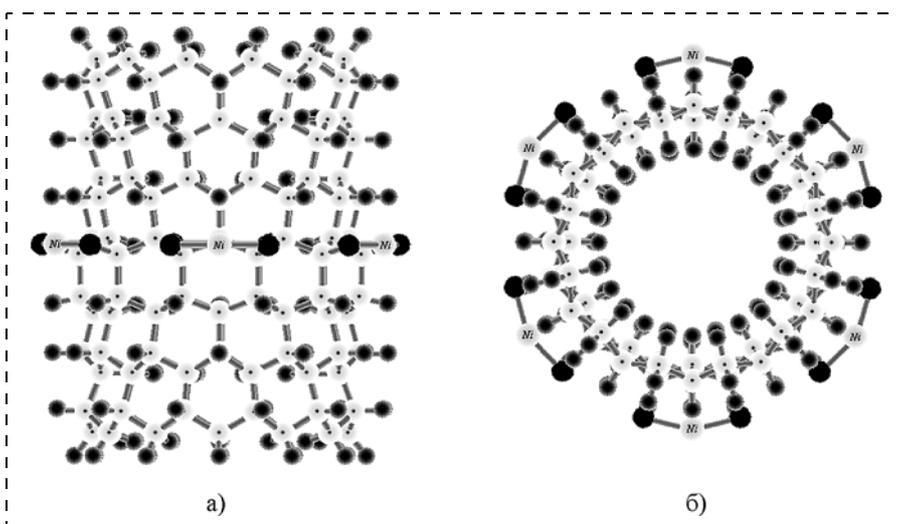


Рис. 4. Модель молекулярного кластера алициклического нанотрубулена, содержащего дефектные группы (O)₂Ni:

a — вид сбоку; б — вид сверху

Атомы углерода показаны светло-серыми шариками, атомы водорода — маленькими темными, кислорода — большими черными; подписанные шарiki — атомы никеля

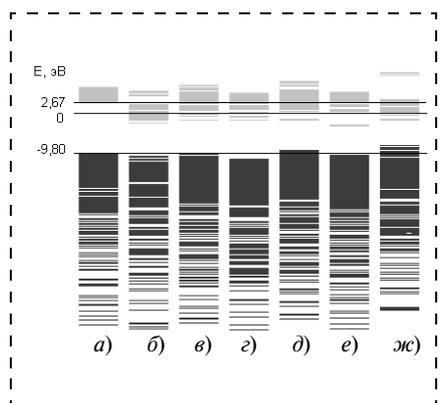


Рис. 5. Спектры одноэлектронных состояний бездефектного нанотрубулена (a) и тубуленов с дефектными группами, содержащие 3d- и 4d-металлы, вдоль длины окружности исходной нанотрубки в пределах одного слоя соответственно: (O)₂Ti(Cl)₂ (б); (O)₂Cr(O)₂ (в); (O)₂Mn(O)₂OH (г); (O)₂Fe (д); (O)₂Ni (е); (O)₂Mo(Cl)₂ (ж). Темным показаны занятые состояния, светлым — свободные

атомов водорода вдоль периметра однослойного тубулена в пределах одного центрального слоя трубки на функциональные группы $(\text{O})_2\text{Ti}(\text{Cl})_2$ с $3d$ -атомом Ti (см. рис. 3, а) в запрещенной энергетической щели появляются вакантные состояния (донорные уровни), расположенные примерно на 3,5 эВ ниже дна зоны проводимости соответствующего бездефектного АУН. Их положение отражено на рис. 5, б. Эти уровни обусловлены групповыми d -атомными орбиталями (АО) титана ($\approx 55\%$) с небольшой примесью p -орбиталей атомов хлора ($\approx 6\%$). С продвижением вглубь зоны проводимости (примерно на 1 эВ выше дна ЗП модифицированного АУН) наблюдается увеличение групповых вкладов в молекулярные орбитали (МО) от соответствующих $3d$ -АО титана ($\sim 65\%$). В еще более высокие одноэлектронные состояния основной вклад вносят разрыхляющие орбитали групповых С—О связей (общий вклад АО углерода в них $\approx 20\%$); вклады же от $3d$ -АО титана постепенно снижаются до нуля. Уровни, преимущественный вклад в которые дают АО кислорода и хлора, попадают в валентную зону (на $\sim 0,66$ эВ ниже потолка валентной зоны бездефектного АУН). Они отвечают, в основном, групповым p -АО хлора ($\approx 30\text{--}90\%$) и, отчасти, неподеленным парам электронов атомов кислорода ($\sim 11\%$). Характерные длины валентных связей в группе $(\text{O})_2\text{Ti}(\text{Cl})_2$ приведены в табл. 1.

2. Введение в нанотрубку групп $(\text{O})_2\text{Cr}(\text{O})_2$ с $3d$ -атомами Cr (см. рис. 3, б) приводит к появлению в спектре одноэлектронных состояний АУН более глубоко расположенных (по сравнению с предыдущим случаем) одноэлектронных уровней — на $\sim 4,3$ эВ ниже дна зоны проводимости. Основной вклад в эти уровни дают $3d$ -АО одиночных атомов хрома ($\approx 30\text{--}45\%$) с небольшой при-

месью (до $\sim 10\%$) p -АО этих же атомов Cr (рис. 5, в). В эти же состояния вносят свои вклады p -орбитали атомов кислорода, прилегающие к данному хрому ($\approx 15\text{--}35\%$ для атома O двойной связи и $\approx 3\text{--}8\%$ для связующих атомов O), и разрыхляющие атомные орбитали С—О связей ($\approx 13\%$). При рассмотрении состояний, находящихся по энергии выше, можно обнаружить тенденцию к уменьшению вкладов от $3d$ -АО хрома и увеличению вкладов от p -АО кислорода двойной связи. В состоянии, локализованные у потолка ВЗ, основной вклад вносят разрыхляющие АО групповых С—О связей ($\approx 20\%$); вклады от $3d$ -АО хрома незначительны ($\approx 2\%$). Состояния, обусловленные орбиталями неподеленных пар атомов кислорода, также лежат в валентной зоне. В рассмотренных модифицированных наноструктурах наблюдается понижение уровня Ферми на $\sim 1\text{--}2$ эВ.

3. Анализируя электронную конфигурацию АУН с дефектными группами типа $(\text{O})_2\text{Mn}(\text{O})_2\text{OH}$ с $3d$ -атомами марганца (см. рис. 3, в), можно обнаружить более сильное понижение уровня Ферми (до ~ 3 эВ), т. е. уровни вакантных незанятых состояний опускаются в область низких энергий. Поэтому состояния, вклад в которые вносят связывающие орбитали С—О связей и орбитали атомов кислорода двойной связи, оказываются в глубине валентной зоны (на ~ 1 эВ ниже потолка ВЗ бездефектного АУН) (рис. 5, г); по относительным вкладам ситуация напоминает предыдущую (т. е. с группами $(\text{O})_2\text{Cr}(\text{O})_2$). Стоит отметить, что $3d$ -АО марганца ($\approx 20\text{--}30\%$, приходящиеся на "парные" атомы) локализованы на ~ 4 эВ ниже дна ЗП нанотрубки (с примесью вкладов О—Н связей ($15\text{--}25\%$)). С проникновением вглубь зоны проводимости наблюдается увеличение вкладов от d -орбиталей Mn и

уменьшение от p -АО Mn. Таким образом, наличие марганца не приводит к появлению локальных акцепторных состояний в запрещенной зоне. Эти состояния оказываются внутри валентной зоны и увеличивают плотности существующих состояний. Изменение проводимости АУН в таком случае возможно только за счет появления дырок в ВЗ.

4. Когда алициклический тубулен модифицирован функциональными группами $(\text{O})_2\text{Fe}$ (см. рис. 3, г), в запрещенной зоне появляются примесные уровни, обусловленные $3d$ -АО атомов железа (для одиночного атома Fe: до $\sim 75\%$ у потолка ВЗ и до $\sim 27\%$ у дна ЗП) и граничными атомами кислорода ($\approx 10\text{--}20\%$) (рис. 5, д). Т. е. запрещенная щель частично заполняется d -состояниями железа. В нижние вакантные одноэлектронные состояния преимущественный вклад вносят s -АО Fe (до $\sim 50\%$), который постепенно уменьшается с ростом энергии. Вклад от p -орбиталей железа в эти состояния незначителен ($\approx 2\text{--}6\%$). О степени "углубления" уровней говорят данные табл. 2 и рис. 5.

5. Качественно аналогичная ситуация имеет место в Ni-содержащих алициклических нанотрубках (см. рис. 3, д, рис. 4, рис. 5, е): введение групп $(\text{O})_2\text{Ni}$ приводит к появлению уровней, прилегающих к ВЗ, которые соответствуют неподеленным парам электронов атомов кислорода ($\approx 7\text{--}18\%$) и связывающим орбиталям С—О связей (до $\sim 10\%$), и более глубоко (на $\sim 5,7$ эВ) расположенных уровней под дном ЗП (основной вклад в эти уровни вносят групповые s -АО атомов Ni (около 40%) с небольшой примесью $3d$ -АО никеля (до 20%)). Уменьшение ΔE_g в этом случае (с $12,5$ до $6,9$ эВ) происходит за счет сдвигов границ возмущенных валентной зоны и зоны проводимости.

6. При модифицировании АУН

группами $(O)_2Mo(Cl)_2$ (молибден относится к $4d$ -элементам) (см. рис. 3, *e*) происходит "стягивание" заполненных и свободных МО (повышение заполненных и понижение вакантных уровней) к уровню Ферми, положение которого остается почти неизменным (рис. 5, *ж*). Для такого типа дефекта в запрещенном энергетическом зазоре появляются как электроноакцепторные, так и электронодонорные состояния, что приводит к наиболее заметному (из всех рассмотренных случаев) изменению энергетического спектра электронов. Таким образом, в запрещенной зоне появляются дополнительные состояния, увеличивающие общую проводимость системы. Состояниям вблизи верхней границы валентной зоны отвечают молекулярные орбитали, преимущественный вклад в которые вносят $4d$ -АО атомов молибдена Mo и граничных с ним p -АО атомов хлора Cl (~25 % и ~70 %, соответственно). По мере углубления внутрь ВЗ увеличиваются вклады от АО хлора и уменьшаются вклады от АО молибдена. Вглубь валентной зоны попадают и орбитали атомов кислорода. Дно зоны проводимости составлено из МО, основной вклад в которые дают $4d$ -АО молибдена (~70 %) и соседних с ним p -АО атомов хлора и кислорода (~8 % для Cl и ~18 % для O). Состояния, вклад в которые вносят групповые s -орбитали атомов молибдена (~28 %), оказываются в зоне проводимости на ~0,1 эВ выше ее границы; по мере углубления в ЗП происходит чередование вкладов от s - и d -АО Mo. Длины связей Mo—O и Mo—Cl приведены в табл. 1.

На основании выполненных модельных квантовохимических расчетов можно дать качественную оценку изменения электропроводности и оптических свойств рассматриваемых систем, обусловленных дефектами различных типов. Итак, химическое модифи-

цирование или допирование одного или нескольких участков АУН группами, содержащими атомы переходных элементов, позволяет варьировать положения одноэлектронных состояний относительно границ валентной зоны и зоны проводимости. В частности, присоединение к нанотрубке функциональных групп, содержащих атомы $4d$ -металла молибдена, существенно изменяет электронную структуру "чистого" нанотубулена с насыщенными углерод-углеродными связями. Таким образом, согласно проведенным расчетам, переход к функционально замещенным структурам с атомами $3d$ - и $4d$ -элементов приводит к уменьшению запрещенной зоны за счет возникновения состояний, способных оказывать влияние на ряд свойств изучаемых систем. Это, в свою очередь, приводит к значительному повышению, например, электропроводности нанопроводов, которые могут найти применение при разработке довольно сложных электронных устройств (интегральных схем современных вычислительных машин). Существует также возможность увеличения собственной проводимости диэлектрика (каковым является АУН) за счет перехода электронов с донорных уровней в зону проводимости (электронный ток) или с уровней валентной зоны на акцепторные уровни (дырочный ток). Такие электронные переходы определяют появление соответствующих полос примесного поглощения (центры окраски). Результатом этого является возникновение определенной окраски оптически прозрачных диэлектрических материалов.

Основные результаты и выводы

1. Полиалициклические углеродные нанотрубки — вполне устойчивые, термодинамически стабильные (имеют отрицательную энергию образования) структуры, уступающие, однако, по ста-

бильности графитоподобным углеродным нанотрубкам вследствие больших деформаций ("напряжения") валентных углов между углерод-углеродными связями. При переходе от АУН к УНТ запрещенная щель существенно снижается.

2. Модифицирование радикальными функциональными группами (переход к функционально замещенным в пределах одного или двух слоев структурам) приводит, как правило, к сужению запрещенной щели, при котором уровень Ферми, интерпретируемый в данном случае как центр запрещенной зоны, почти не изменяется. Исключение составляют F-, NO_2 и CN-замещенные АУН, в которых при неизменной ширине запрещенной щели (или при небольшом ее сужении) уровень Ферми снижается примерно на 1÷2 эВ.

3. Модифицирование одного или нескольких участков АУН группами, содержащими атомы переходных элементов, позволяет варьировать положения одноэлектронных состояний относительно границ валентной зоны и зоны проводимости. Так переход к функционально замещенным структурам с атомами $3d$ - и $4d$ -элементов приводит к уменьшению запрещенной зоны за счет возникновения в ней примесных (донорных или акцепторных) состояний, способных оказывать влияние на ряд свойств изучаемых систем (электропроводность, центры окраски и т. п.). Соответствующим образом модифицированные структуры могут найти применение во многих областях науки и техники.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-03-96501).

Список литературы

1. Дьячков П. Н. Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии в теории фуллеренов и на-

нотрубок. Теоретическая неорганическая химия. 2001. Т. 46. № 1. С. 101.

2. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis structure properties, and applications. Springer-Verlag, 2000. 464 p.

3. Harris P. J. F. Carbon nanotubes and related structures: new materials for the twenty-first century. Cambridge University Press, 1999. 296 p.

4. Ивановский А. А. Квантовая химия в материаловедении. Нанотрубчатые формы вещества. Екатеринбург: ИХТТ УрО РАН, 1999. 176 с.

5. Запорожкова И. В. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Волгоград: ВолГУ, 1997.

6. Захарова Г. С., Волков В. Л., Ивановская В. В., Ивановский А. Л. Нанотрубки и родственные наноструктуры оксидов металлов. Екатеринбург, 2005. 240 с.

7. Dewar M. J. S., Thiel W., Amer J. // Chem. Soc. 99. 1997. P. 4899.

8. Dewar M. J. S., Thiel W. Theoret. Chim. Acta. 46. 1977. P. 89.

9. Запорожкова И. В., Литинский А. О., Чернозатонский Л. А. Вестник ВолГУ. Серия: Математика. Физика. 1997. Вып. 2. С. 100.

10. Запорожкова И. В., Лебедев Н. Г., Чернозатонский Л. А. Физика твердого тела. 46. Вып. 6. 2004. С. 1137.

11. Hehre W. J., Stewart R. F., Pople J. A. // J. Chem. Phys. 1969. V. 51. P. 2657.

12. Stewart R. F. // J. Chem. Phys. 1970. V. 52. P. 431.

13. Hehre W. J., Ditchfield R., Pople J. A. // J. Chem. Phys. 1972. V. 56. P. 2257.

14. Hariharan P. C., Pople J. A. // Theor. Chem. Acta. 1973. V. 28. P. 213.

15. Collins J. B., Schleyer P. V., Binkley J. S., Pople J. A. // J. Chem. Phys. 1976. V. 64. P. 5142.

16. Dunning T. H., Hay P. J. In Modern Theoretical Chemistry. Plenum. N.-Y., 1976.

17. Binkley J. S., Pople J. A., Hehre W. J. // J. Am. Chem. Soc. V. 102. 1980. P. 939.

18. Gordon M. S. // Chem. Phys. Lett. 1980. V. 102. P. 163.

19. Krishnan R., Kinkley J. S., See-ger R., Pople J. A. // J. Chem. Phys. 1980. V. 72. P. 650.

20. McLean A. D., Chandler G. S. // J. Chem. Phys. V. 72. 1980. P. 5639.

21. Gordon M. S., Binkley J. S., Pople J. A., Pietro W. J., Hehre W. J. // J. Am. Chem. Soc. 1982. V. 104. P. 2797.

22. Pietro W. J., Francl M. M., Hehre W. J., Defrees D. J., Pople J. A., Binkley J. S. // J. Am. Chem. Soc. 1982. V. 104. P. 5039.

23. Thiel W. Semiempirical methods: current status and perspectives // Tetrahedron. 1988. V. 44. N 24. P. 7393.

24. Stewart J. J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods. 1. Methods // J. Comput. Chem. 1989. V. 10. N 2. P. 209.

25. Stewart J. J. P. Optimisation of parameters for semiempirical methods. 2. Applications // J. Comput. Chem. 1989. V. 10. N 2. P. 221.

УДК 621.38

Р. З. Бахтизин¹⁾, К.-Х. Ву²⁾, Ч.-Ж. Шце²⁾, Ч.-К. Шце³⁾, Т. Сакурай²⁾

¹⁾ Башгосуниверситет, г. Уфа, Россия
E-mail: raouf@bsu.bashedu.ru

²⁾ Институт проблем материаловедения университета Тохоку, г. Сендай, 980-7785, Япония

³⁾ Мезоскопический центр института физики АН КНР, г. Пекин, Китай

АТОМНО-МАСШТАБНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АДСОРБЦИИ И РОСТА ПЛЕНОК БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ GaN(0001)

Методами сканирующей туннельной микроскопии и дифракции быстрых электронов на отражение в условиях сверхвысокого вакуума исследовались адсорбция и начальные стадии роста пленок благородных металлов (Au, Ag) на поверхности GaN(0001) со структурой жидкой фазы '1 × 1 - Ga'. Как атомы Au, так и Ag показывают очень высокую подвижность и характеризуются большой диффузионной длиной, что приводит к образованию островков значительных размеров при суб-монослойных покрытиях. Показано, что атомы Au отличаются большей химической активностью, причем фаза c(2 × 12), представляющая собой поверхностный сплав, сосуществует с монослойными Au островками. В противоположность этому атомы Ag менее активны, не образуют поверхностного сплава с Ga, но характеризуются большей диффузионной подвижностью и образуют кристаллы Ag линейного типа.

Введение

Контакты полупроводника с металлом являются обязательными элементами любого полупроводникового прибора, поэтому разработка технологии создания высококачественных контактов к полупроводниковому кристаллу является вопросом первостепенной важности, а исследование свойств таких контактов к широкозонным полупроводникам составляет одну из фундаментальных проблем физики полупроводников [1]. В этой связи безусловный интерес представляет изучение на атомном уровне процесса образования резкой межфазной границы металл — нитрид галлия (GaN) и исследование лежащих в его основе таких базовых явлений, как механизм адсорбции, режим роста пленок и возможные реконструкции поверхности GaN, возникающие при адсорбции металлов [2, 3]. Наибольший интерес при этом вызывает атомная плоскость (0001), поскольку именно на ней выращиваются пленки GaN высокого качества. Атомарно чистая поверхность GaN(0001), сохраняющая объемную структуру, обычно оказывается неупорядоченной на атомном уровне, однако после нанесения дополнительного количества Ga на ней могут быть получены различные сверхструктуры от 2×2 , 4×4 , 5×5 , $5v3 \times 2v13$, $v7 \times \sqrt{7}$, 10×10 до наиболее обогащенной Ga структуры псевдо '1 × 1' [4, 5]. Последняя фаза вызывает особый интерес благодаря своей уникальной "жидкой" структуре [6] и тому, что представляет собой фронт роста в технологиях роста MBE

и *MOCVD*, где играет роль слоя посредника, содействующего двумерному режиму роста пленок [7].

Вместе с тем GaN и другие широкозонные полупроводники III-нитриды являются наиболее перспективными материалами для разработки новых типов оптоэлектронных устройств, работающих в сине-зеленой области спектра (в первую очередь, светодиодов и лазерных диодов), оптических накопителей информации, мощных высокочастотных приборов, солнечно-слепых детекторов излучения, а также приборов спинтроники, для которых чрезвычайно важно увеличение времени жизни спиновых состояний. Так, несмотря на значительную концентрацию дефектов, времена жизни спиновых токов в GaN составляют ~20 нс при температуре 5 К [8], что благодаря высокой плотности состояний в зоне проводимости и малому спин-орбитальному взаимодействию, на три порядка больше, чем в GaAs [9].

В данной работе приведены результаты сравнительного исследования адсорбции и начальных стадий роста субмонослойных пленок Ag и Au на Ga-полярной поверхности гексагонального GaN со структурой жидкой фазы псевдо $1 \times 1 - \text{Ga}$.

Методика эксперимента

Эксперименты проводили в комбинированной установке, включающей сверхвысоковакуумный ($2 \cdot 10^{-11}$ Тор) сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) с атомным разрешением на линии с камерой молекулярно-лучевой эпитаксии (*MBE*) [10], которая давала возможность *in-situ* изучать процессы адсорбции и роста пленок Au и Ag. В технологии *MBE* рост пленок GaN осуществляли в метастабильных условиях с использованием активированной в высокочастотном разряде азотной плазмы. Поток атомов Ga из ячейки Кнудсена и концентрацию азота задавали такими, чтобы обеспечить режим двумерного роста пленки, а приготовленная таким образом поверхность GaN демонстрировала террасы, характерные для режима движения моноатомных ступеней. Такой подход позволил после насыщения поверхности галлием получать совершенные атомно-плоские участки большой площади со структурой псевдо $1 \times 1 - \text{Ga}$, что подтверждалось наблюдением дополнительного рефлекса на картине дифракции быстрых электронов на отражение. На СТМ-изображении такая поверхность выглядит атомно-гладкой (рис. 1), а ее отжиг в течение 5 мин при 700 °С приводил к образованию плоских террас шириной до нескольких десятков нанометров, однако на атомном уровне структура такой поверхности оставалась неупорядоченной, что и неудивительно, поскольку фаза 1×1 энергетически нестабильна. Как серебро, так

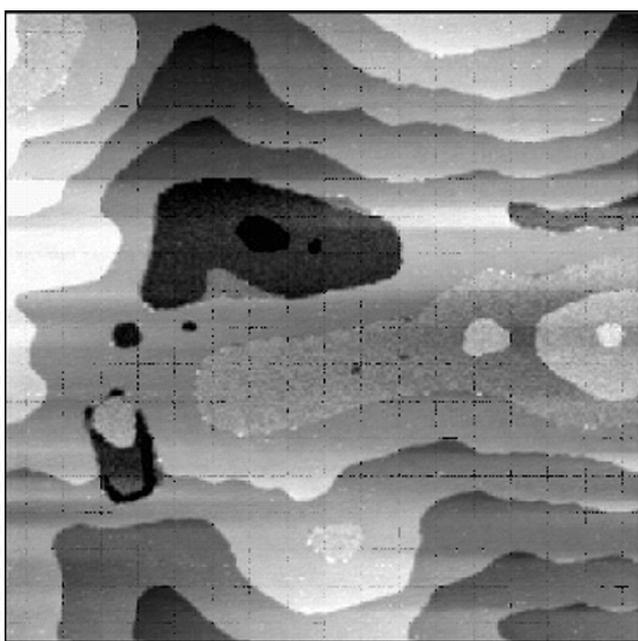


Рис. 1. СТМ-изображение поверхности жидкой фазы псевдо $1 \times 1 - \text{Ga}$, полученной в процессе роста пленки GaN(0001) в условиях насыщения Ga.

Площадь сканирования $2500 \times 2500 \text{ \AA}$, напряжение смещения $V_s = +0,1 \text{ В}$, туннельный ток $I_t = 5 \cdot 10^{-11} \text{ А}$

и золото наносили путем термического испарения соответственно серебряных и золотых навесок, закрепленных на предварительно обезгаженной вольфрамовой нити.

Результаты и их обсуждение

Адсорбция золота по поверхности GaN со структурой псевдо $1 \times 1 - \text{Ga}$. В этом случае наблюдаются две новые фазы, вызванные адсорбцией Au на поверхности псевдо $1 \times 1 - \text{Ga}$: соразмерная структура $c(2 \times 12)$ (или α -фаза) и несоразмерная β -фаза. В действительности фаза $c(2 \times 12)$ — это поверхностный сплав, который состоит из смеси атомов Au и Ga на вершине слоя адатомов Ga со структурой 1×1 . Ее образование связано со структурным переходом между несоразмерной и соразмерной поверхностными фазами. Как было ранее показано в работе [11], несоразмерная β -фаза представляет собой монослойный островок Au. Одновременное наблюдение доменов β -фазы и участков непокрытой поверхности указывает на высокую подвижность и большую диффузионную длину атомов золота. Разница высот между β -фазой и подложкой, определенная из профилей сканирования, составляет $\sim 2,0 \text{ \AA}$ (0,2 нм).

Монослойные островки серебра. В противоположность Au при адсорбции серебра наблюдалось

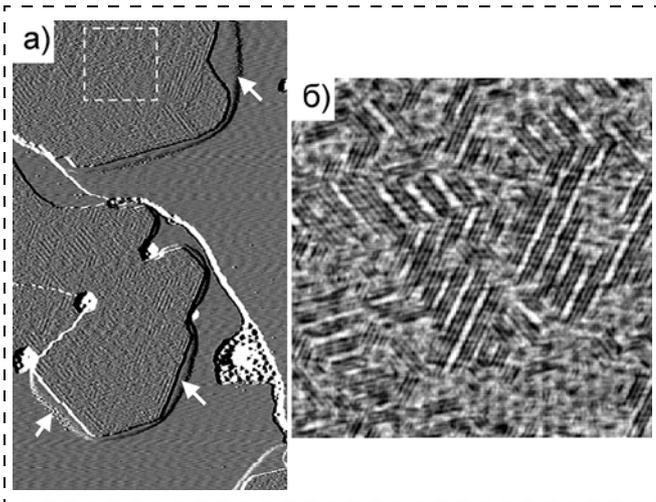


Рис. 2. СТМ-изображения поверхности GaN(0001) со структурой псевдо 1×1 -Ga', покрытой 0,5 монослоя Ag, площадь сканирования $1600 \times 2500 \text{ \AA}$; изображение модифицировано (продифференцировано), чтобы более отчетливо выделить диффузионную область (а). Увеличенное изображение участка той же поверхности, показывающее ее неупорядоченную структуру и появление модуляционной структуры, площадь сканирования $50 \times 50 \text{ \AA}$ (б)

образование только одной поверхностной фазы — двумерных эпитаксиальных островков Ag. В качестве примера на рис. 2, а показан островок Ag монослойной высоты и шириной более 100 нм (1000 \AA), сформировавшийся на террасе со структурой жидкой фазы псевдо 1×1 -Ga'. Размеры островков Ag велики, а их плотность низкая, причем на каждой террасе обычно присутствует только один или два фрагмента такого островка. Это позволяет предположить, что атомы Ag на поверхности со структурой жидкой фазы псевдо 1×1 -Ga' характеризуются большой диффузионной длиной, вследствие чего адатомы Ag перемещаются по такой поверхности достаточно свободно до тех пор, пока не найдут участок с более низкой энергией и не присоединятся к одному из уже существующих островков серебра. На рис. 2, б приведено увеличенное изображение участка поверхности, показанной на рис. 2, а, демонстрирующее его неупорядоченный характер и зарождение модулированной структуры на краю островка Ag.

Высокая подвижность атомов серебра является причиной другой особенности, наблюдавшейся на СТМ-изображениях, — появления "диффузионной области", окружающей края монослойных островков Ag, как это указано стрелками на рис. 2, а и детально продемонстрировано на рис. 3, а и 3, б. Кроме этого укажем еще на два обстоятельства:

1. Разница в высотах между этой областью и поверхностью фазы псевдо 1×1 -Ga' составляет $\sim 1,0 \text{ \AA}$ (0,1 нм), что отчетливо видно из сравнения профилей сканирования двух областей (рис. 3, в).

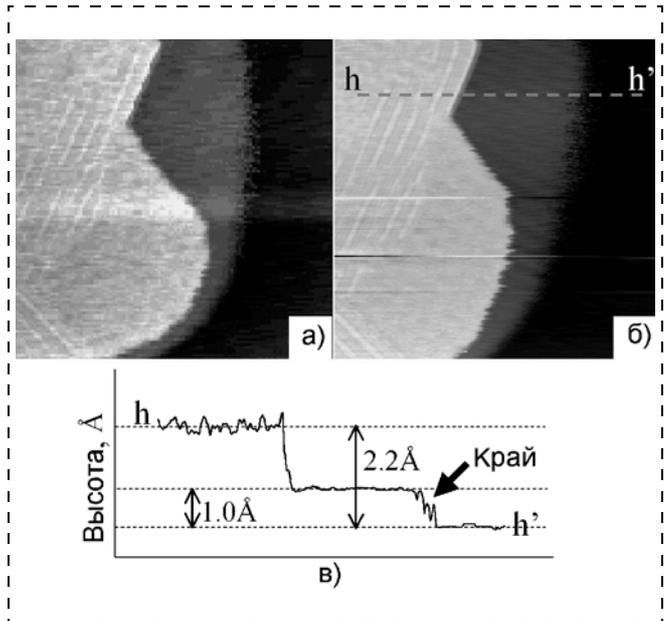


Рис. 3. Увеличенные СТМ изображения фрагмента поверхности Ag островка, снятые с интервалом 10 мин (а, б) и профиль сканирования (в), снятый вдоль штриховой линии $h-h'$

2. Островок Ag сам по себе оказывается весьма подвижным. На рис. 3, б приведено СТМ-изображение той же самой области, что и на рис. 3, а, но снятое с интервалом сканирования 10 мин. Хорошо видно, что форма островка Ag заметно изменилась, а выступающая часть стала меньше. Это означает, что атомы Ag отрываются от угловых участков и заполняют участки изломов. Ширина диффузионной области составляет приблизительно $10\text{--}30 \text{ \AA}$ (1–3 нм), но в области излома она увеличивается и может достигать более 100 \AA (10 нм), значит, в отличие от угловых участков, более низкий поверхностный потенциал в окрестности участков изломов способствует накоплению атомов Ag [12]. В то же самое время за пределами диффузионной области плотность атомов Ag быстро спадает до нуля, что является следствием достаточно резкого края диффузионной области (отметим, что хотя край диффузионной области довольно резкий, он все же более плавный, чем край обычного островка, что хорошо видно на профиле сканирования на рис. 3, в).

Кристаллы Ag линейного типа. Другое важное наблюдение, которое демонстрирует необычную (аномально высокую) подвижность атомов Ag на поверхности псевдо 1×1 -Ga' — это образование кристаллов Ag линейного типа размерами несколько сотен нанометров (иногда порядка 1 мкм) и высотой $20\text{--}60 \text{ \AA}$ (2–6 нм), т. е. 5–30 монослоев, которые часто наблюдались одновременно с монослойными островками Ag. Учитывая небольшую толщину серебряного покрытия (всего 0,5 моно-

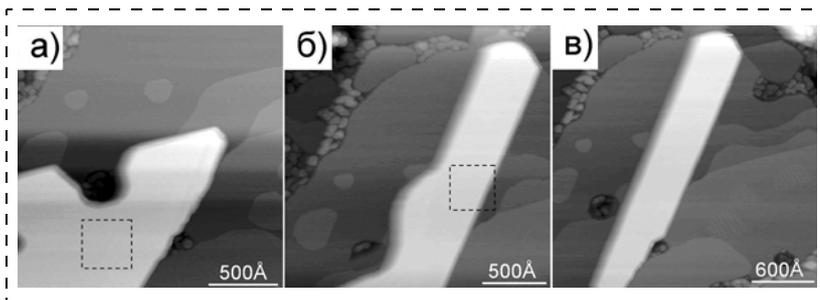


Рис. 4. STM-изображения поверхности кристалла Ag линейного типа, полученные после нанесения 0,5 монослоя Ag и снятые:

a — спустя 30 мин; *б* — 100 мин; *в* — 120 мин

слоя), образование кристаллов подобных тому (что оказалось неожиданным!), который показан на рис. 4, требует сбора всех атомов Ag в пределах области площадью $\sim 1 \text{ мкм}^2$. В ходе экспериментов выяснилось, что для получения кристаллов линейного типа необходимо иметь бездефектную поверхность со структурой псевдо '1 × 1—Ga' большой площади. В тех случаях, когда плотность дефектов (дырок, трещин, больших ступеней) была велика, образовывалось всего лишь несколько таких кристаллов или они не появлялись вообще. Это обстоятельство указывает на то, что критический размер зародыша трехмерного кристалла Ag гораздо больше, чем в случае двумерных островков, поэтому для поверхности с плохой морфологией, когда размеры доменов малы, число атомов Ag в пределах островка оказывалось недостаточным для формирования трехмерного зародыша. Следует отметить, что в отличие от роста островков Ag на подложках Si(111)-7 × 7 или GaAs(110) [13—14], на поверхности GaN нами не было обнаружено никаких признаков проявления значений магических высот островков, хотя во многих случаях атомные ступеньки наблюдались на поверхности одного и того же островка, следовательно, квантования электронных состояний в вертикальном направлении не происходило, что в итоге не позволяло установить их оптимальную толщину. Полученные результаты показывают, что при комнатной температуре рост пленок Ag на подложке GaN(0001) происходит в режиме Странского—Крастанова, как это имеет место для большинства металлов на полупроводниковых поверхностях. Благодаря различному характеру связи (металлическая/кова-

лентная или ионная) и заметной разнице в коэффициентах диффузии, механизм роста будет скорее определяться кинетическими, а не энергетическими параметрами. Для системы Ag/GaN(0001) расхождение решеток составляет всего 2,2 % и кинетика роста предполагает значительную диффузию атомов Ag по поверхности GaN(0001) и таким образом образование трехмерных островков.

На рис. 4, *a* приведено STM-изображение поверхности GaN, полученное спустя 30 мин после нанесения Ag (вследствие конструктивных ограничений STM мы не могли сканировать поверхность *in situ* в процессе напыления), однако со временем морфология поверхности кристалла Ag значительно изменялась. Хорошо видно, что нижняя часть линейного кристалла вначале имеет грубую гексагональную форму (см. рис. 4, *a*), но затем форма островка становится удлиненной (см. рис. 4, *б* и *в*). Такое своеобразное поведение является весьма специфическим, поскольку как подложка GaN, так и поверхность Ag(111) характеризуются тройной симметрией. В этом случае равновесная форма островка должна быть треугольной, как и в случае монослойного островка Ag.

Такое нарушение симметрии может быть объяснено появлением полосчатой модуляционной картины на поверхности островка Ag (см. рис. 2, *б*). Если внимательно проанализировать полученное изображение, то на поверхности Ag(111) можно увидеть модуляционную картину, важнейшей особенностью которой является ее резкое изменение с изменением формы кристалла. В начальной фазе модуляции полосчатого типа характеризуются тремя четко обозначенными доменами в направлениях

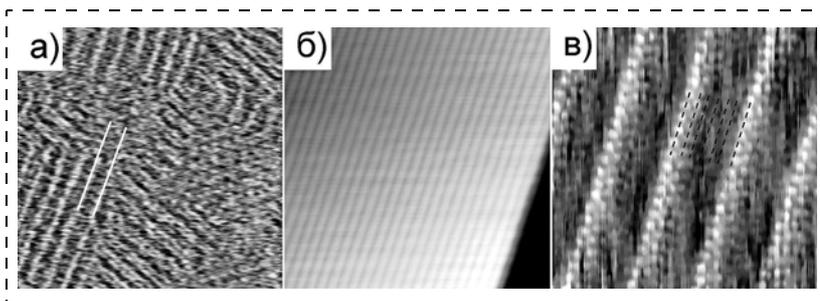


Рис. 5. Модуляционные картины на поверхности кристалла Ag линейного типа:

a — начальная модуляционная картина, наблюдавшаяся на поверхности кристалла, показанного на рис. 4, *a*; *б* — картина модуляции 1 × 6, наблюдавшаяся на поверхности кристалла, показанного на рис. 4, *б* и *в*

$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ (рис. 5, а), однако со временем одно из этих направлений становится доминирующим, и в итоге по всей поверхности формируется однородная модуляционная картина 1×6 (рис. 5, б). На рис. 5, в приведено СТМ-изображение поверхности такого кристалла с атомным разрешением. Отметим, что направление модуляционных полосок было всегда параллельно направлению кристаллов Ag линейного типа. На основе сделанных наблюдений можно предположить, что образование модуляционной картины 1×6 (рис. 5, б) понижает поверхностную энергию кристалла Ag, причем это понижение оказывается наиболее значительным, когда ориентация кристалла Ag и направление полос модуляции совпадают. Вследствие термодинамических флуктуаций один из трех вращательных модуляционных доменов становится доминирующим, но как только это произойдет, симметрия нарушится, а тенденция к понижению поверхностной свободной энергии заставит кристалл удлиняться. При этом взаимодействие между кристаллом Ag и жидкой подложкой из Ga оказывается достаточно слабым [15] и позволяет большому кристаллу двигаться довольно свободно. Другими словами, этим продемонстрирован специальный случай, когда модуляция поверхности действует как движущая сила, приводящая к перемещению трехмерного кристалла по поверхности. Однако это может произойти лишь на такой уникальной "жидкой" поверхности, где взаимодействие подложки и адсорбата оказывается достаточно слабым.

Заключение

В данной работе проведены сравнительные исследования адсорбции и начальных стадий роста пленок благородных металлов на поверхности широкозонного полупроводника GaN со структурой жидкой фазы '1 × 1—Ga'. Показано, что в диапазоне субмонослойных покрытий атомы как Ag, так и Au характеризуются высокой подвижностью и значительной (до 1 мкм и более) диффузионной длиной, что приводит к образованию островков больших размеров. При этом атомы Au проявляют большую химическую активность и образуют поверхностную фазу $c(2 \times 12)$, сосуществующую с островками. Атомы Ag химически менее активны, но отличаются большей диффузионной подвижностью, что проявляется в образовании диффузионной области вблизи краев островков и появлении кристаллов линейного типа.

Работа выполнялась при полной поддержке Федеральной программы "Университеты России" (грант № УР 01.01.007) Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

1. Шретер Ю. Г., Ребане Ю. Т., Зыков В. А., Сидоров В. Г. Широкозонные полупроводники. СПб.: Наука. 2001. 125 с.
2. Liu Q. Z., Lau S. S. A review of the metal-GaN contact technology // Solid State Electronics. 1998. V. 42. P. 677—691.
3. Barinov A., Gregoratti L., Casalis L., Kiskinova M. Au/GaN interface: Initial stages of formation and temperature-induced effects // Physical Review B 2001. V. 63. P. 085308—085313.
4. Smith A. R., Feenstra R. M., Greve D. W., Shin M. S., Skowronski M., Neugebauer J., Northrup J. E. Reconstructions of GaN(0001) and (0001) surfaces: Ga-rich metallic structures" // J. Vac. Sci. Technol. B. 1998. V. 16. P. 2242—2249.
5. Бахтизин Р. З., Ще Ч.-Ж., Ще Ч.-К., Ву К.-Х., Сакурай Т. Сканирующая туннельная микроскопия гетероэпитаксиального роста пленок III-нитридов // Успехи физических наук (УФН). 2004. Т. 174. № 4. С. 383—405.
6. Northrup J. E., Neugebauer J., Feenstra R. M., Smith A. R. Structure of GaN(0001): The laterally contracted Ga bilayer model // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 9932—9935.
7. Mula G., Adelman C., Moehl S., Oullier J., Daudin B. Surfactant effect of gallium during molecular-beam epitaxy of GaN on AlN (0001) // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 195406—195417.
8. Beschoten B., Johnston-Halperin E., Young D. K., Poggio M., Grimaldi J. E., Keller S., DenBaars S. P., Mishra U. K., Hu E. L., Awschalom D. D. Spin coherence and dephasing in GaN // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. P. 121202—121205.
9. Krishnamurthy S., Van Schilfgaarde M., Newman N. Spin lifetimes of electrons injected into GaAs and GaN // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 83. N. 9. P. 1761—1763.
10. Бахтизин Р. З., Сакурай Т., Хашицуме Т., Ще Ч.-К. Атомные структуры на поверхности GaAs(001), выращенной методами молекулярно-лучевой эпитаксии // Успехи физических наук (УФН). 1997. Т. 167. № 11. С. 1227—1241.
11. Бахтизин Р. З., Ву К.-Х., Ще Ч.-Ж., Нарао Т., Сакурай Т. Атомно-масштабные исследования роста пленок благородных металлов на поверхности GaN(0001) в условиях сверхвысокого вакуума: Тезисы доклада III Всероссийской конференции "Нитриды галлия, индия и алюминия — структуры и приборы". М.: МГУ. 2004. С. 47—48.
12. Hitosugi T., Suwa Y., Matsuura S., Heike S., Onogi T., Watanabe S., Hasegawa S., Kitazawa K., Hashizume T. Direct Observation of One-Dimensional Ga-Atom Migration on a Si(100)-2 × 1-H Surface: A Local Probe of Adsorption Energy Variation // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 4116—4119.
13. Gavioli L., Kimberlin K. R., Tringides M. C., Wendelken J. F., Zhang Z. Y. Novel Growth of Ag Islands on Si(111): Plateaus with a Singular Height // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 129—132.
14. Smith A. R., Chao K.-J., Niu Q., Shih C.-K. Formation of Atomically Flat Silver Films on GaAs with a "Silver Mean" Quasi Periodicity // Science. 1996. V. 273. P. 226—230.
15. Pearton S. J., Zolper J. C., Shul R. J., Ren F. GaN: Processing, defects, and devices" // Journal of Applied Physics. 1999. V. 86. N. 1. P. 1—78.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 535.231.6+621.382

А. А. Жуков*, д-р техн. наук,
Ю. С. Четверов*, канд. техн. наук,
П. Н. Кудрявцев*,
П. В. Бирулин*, канд. техн. наук,
А. Е. Здобников*, канд. техн. наук,
П. Г. Бабаевский**, д-р техн. наук,
Д. Ю. Обижаев**,

*Открытое акционерное общество
«ЦНИИ "ЦИКЛОН"», г. Москва
**"МАТИ" — Российский Государственный
Технологический Университет
им. К. Э. Циолковского, г. Москва

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НЕОХЛАЖДАЕМЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИКРОБОЛОМЕТРОВ

Представлен метод определения теплофизических характеристик неохлаждаемых полупроводниковых микроболометров, основанный на использовании импульсного режима со стабилизацией тока. Исследованы микроболометры со следующими характеристиками: размер пикселя — 48×48 мкм, толщина — $0,45$ мкм, ширина балок — $1,6-2,0$ мкм, расстояние до кремниевой подложки — $2,0-2,5$ мкм, сопротивление чувствительного элемента на основе оксида ванадия — $100-150$ кОм. Показано, что при остаточном давлении ниже $2,5 \cdot 10^{-3}$ Па коэффициент теплопроводности микроболометров составляет $(1,54-2,93) \cdot 10^{-7}$ Вт/К, теплоемкость — $(1,55-1,92) \cdot 10^{-9}$ Дж/К, тепловая постоянная времени (время релаксации) — $5,7-12,4$ мс.

В последние годы в тепловизионных системах все шире используют неохлаждаемые матричные микроболометрические ИК приемники, обладающие рядом преимуществ по сравнению с фотоэлектрическими ИК приемниками с криогенным охлаждением — относительной дешевизной, малыми энергопотреблением, массой и габаритными размерами. Благодаря тому, что при изготовлении микроболометрических приемников применяется стандартная технология производства БИС, открываются широкие возможности для их массового производства [1–4].

Оптимизация параметров микроболометрических матричных приемников пу-

тем целенаправленного выбора конструкции и материалов невозможна без контроля их теплофизических характеристик — теплопроводности, теплоемкости и времени релаксации. В настоящее время известны методики определения теплофизических характеристик микроболометров, основанные на измерении электрических величин, изменяющихся при разогреве микроболометра за счет протекания импульса электрического тока [5–8]. В этих методиках, как правило, к микроболометру прикладываются импульсы постоянного напряжения, что не исключает возможности выхода из строя полупроводниковых микроболометров с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления из-за неконтролируемого возрастания тока и выделяемой мощности.

Целью данной работы является разработка метода определения теплофизических характеристик полупроводниковых микроболометров, основанного на использовании режима, при котором через микроболометр пропускается импульс электрического тока постоянной величины и учитывается изменение выделяемой вследствие протекания тока мощности.

Режим постоянного тока обеспечивали с помощью разработанного электронного блока, схема которого представлена на рис. 1. Исследуемый микроболометр включается в цепь отрицательной обратной связи операционного усилителя ОУ1. При подаче на вход усилителя от генератора импульсов напряжения $U_{ВХ}$ через микроболометр протекает постоянный ток $U_{ВХ}/R_0$. Сопротивление токозадающего резистора R_0 выбирают примерно равным сопротивлению микроболометра при температуре окружающей среды. При этом коэффициент усиления ОУ1 близок к -1 . Сигнал с выхода ОУ1 поступает на вход сумматора на основе операционного усилителя ОУ2. На другой вход сумматора подается входное напряжение $U_{ВХ}$. На сумматоре разностное напряжение усиливается с коэф-

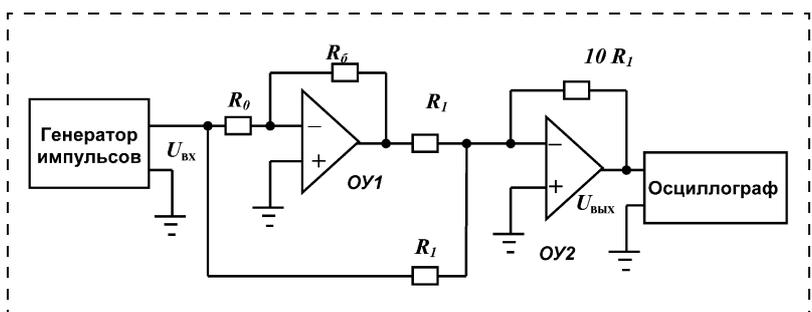


Рис. 1. Принципиальная электрическая схема электронного блока

фициентом усиления 10. Сигнал на выходе ОУ2 описывается выражением

$$U_{\text{ВЫХ}} = 10U_{\text{ВХ}}(R_6(t)/R_0 - 1). \quad (1)$$

Здесь $R_6(t)$ — сопротивление микроболометра в момент времени t :

$$R_6(t) = R_6(1 - \alpha\Delta T), \quad (2)$$

где R_6 — сопротивление микроболометра при температуре окружающей среды; α — температурный коэффициент сопротивления; $\Delta T = T - T_{\text{ср}}$ — разность температур микроболометра и окружающей среды.

Зависимость выходного сигнала от времени наблюдается на экране осциллографа. При этом благодаря вычитанию постоянного напряжения и усилению разностного сигнала можно достаточно точно регистрировать небольшие изменения сопротивления болометра, вызываемые протеканием электрического тока. Форма импульсного напряжения на входе и сигнала на выходе показана на рис. 2. Длительность импульсов выбиралась такой, чтобы в конце действия импульса имела место стабилизация выходного напряжения, а период следования — достаточно большим, чтобы к началу следующего импульса сопротивление микроболометра успевало восстановиться.

Для расчета теплофизических характеристик использовалось уравнение теплового баланса

$$P - C \frac{d\Delta T}{dt} - G\Delta T = 0, \quad (3)$$

где C — теплоемкость микроболометра; G — коэффициент теплопроводности микроболометра; P — мощность, выделяемая в микроболометре при протекании импульса электрического тока.

В конце действия импульса тока устанавливает-

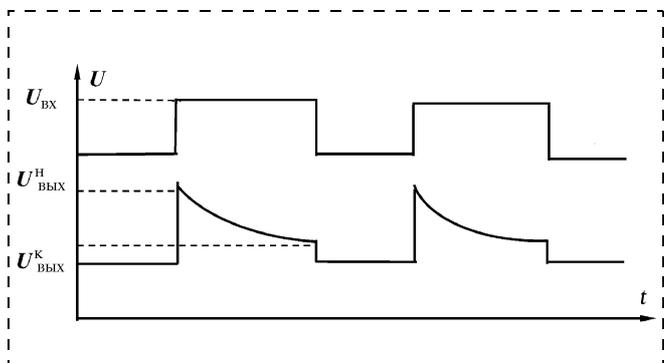


Рис. 2. Форма напряжений на входе и выходе электронного блока:

$U_{\text{ВХ}}$ — входное напряжение; $U_{\text{ВЫХ}}^H$ — выходной сигнал в начальный момент импульса тока; $U_{\text{ВЫХ}}^K$ — выходной сигнал в конечный момент импульса тока

ся тепловое равновесие и уравнение теплового баланса принимает вид

$$P = G\Delta T. \quad (4)$$

Мощность, выделяемая при протекании через микроболометр импульса тока постоянной величины I_6 , определяется выражением

$$P(t) = I_6^2 R_6(t). \quad (5)$$

Сопротивление чувствительного элемента уменьшается при протекании тока в соответствии с выражением (2). Так как ток при этом остается постоянным, то выделяемая мощность в конечный момент импульса тока не превышает мощности, выделяемой в начальный момент.

Сопротивление микроболометра при температуре окружающей среды (R_6) и в конечный момент действия импульса тока ($R_6(t)$) определяли, пользуясь выражением (1). Подставляя найденные значения R_6 и $R_6(t)$ в соотношение (2), получали величину ΔT . Коэффициент теплопроводности микроболометра G определяли, подставляя в уравнение (4) полученное значение ΔT и рассчитанную по формуле (5) мощность, выделяемую на микроболометре в состоянии теплового равновесия.

Время релаксации оценивали, моделируя на персональном компьютере с помощью программы Microsoft Excel процесс нагревания микроболометра с использованием измеренных значений α , R_6 и G и известных значений R_0 и $U_{\text{ВХ}}$. Моделирование заключалось в следующем. Процесс нагревания микроболометра разбивали на ряд временных периодов (чем меньше временной период, тем точнее результат моделирования), подразумевая, что в течение одного временного периода параметры микроболометров $R_6(t)$ и, соответственно, мощность P остаются постоянными. Изменение температуры ΔT для каждого временного периода рассчитывали с помощью выражения (6), полученного интегрированием уравнения (3) при условии, что в начальный момент времени $\Delta T = 0$:

$$\Delta T_i = (P_i/G)(1 - \exp(-t/\tau)), \quad (6)$$

где P_i — мощность, выделяемая на микроболометре в i -й период времени; t — длительность временного периода; τ — время релаксации.

Изменение температуры микроболометра в процессе нагревания описывается выражением, которое представляет собой сумму изменений температур в каждом временном периоде:

$$\Delta T = \sum((P_{i-1} - G\Delta T_{i-1})/G)(1 - \exp(-t/\tau)). \quad (7)$$

В момент подачи импульса тока $\Delta T = 0$ и, соответственно, $R_6(t) = R_6$. Мощность, выделяемую на микроболометре, вычисляли, пользуясь выраже-

нием (5). Далее, подставляя в выражение (1) рассчитанное значение $R_0(t)$, определяли выходное напряжение. Затем вычисляли ΔT микроболометра для данного временного периода. В результате получали расчетную зависимость величины выходного сигнала от продолжительности входного. Значение τ определяли, подбирая его значение таким образом, чтобы достигалось совпадение указанной расчетной зависимости с экспериментальной.

Теплоемкость микроболометра рассчитывали, пользуясь соотношением

$$C = G\tau. \quad (8)$$

Предложенный метод использовали при определении теплофизических характеристик тестовых полупроводниковых микроболометров, изготовленных по микромашиной технологии [4]. Микроболометры представляли собой чувствительные элементы неохлаждаемой микроболометрической матрицы, выполненные в виде трехслойной мостиковой структуры размером 48×48 мкм на основе оксида ванадия и нитрида кремния с балочными нихромовыми выводами (рис. 3). Толщина мостиковой структуры составляла 0,45 мкм, ширина балок 1,6–2 мкм, расстояние до кремниевой подложки 2–2,5 мкм, сопротивление чувствительного элемента 100–150 кОм, температурный коэффициент сопротивления 1,8 %/°C. Кристалл с пятью тестовыми микроболометрами монтировали на основании металлокерамического корпуса, который помещали в вакуумную камеру. После этого камеру откачивали до давления ниже $2,5 \cdot 10^{-3}$ Па.

Результаты измерений теплофизических характеристик для четырех тестовых микроболометров представлены в таблице. Полученные величины сопоставимы с опубликованными данными [1–3].

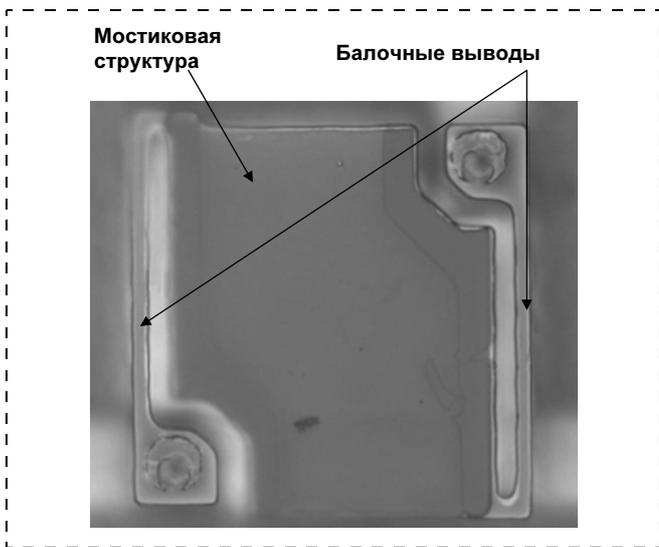


Рис. 3. Внешний вид микроболометра

Теплофизические характеристики тестовых полупроводниковых микроболометров

№ образца	G , Вт/К	τ , мс	C , Дж/К
1	$2,93 \cdot 10^{-7}$	5,7	$1,67 \cdot 10^{-9}$
2	$1,54 \cdot 10^{-7}$	12,4	$1,91 \cdot 10^{-9}$
3	$2,45 \cdot 10^{-7}$	6,3	$1,54 \cdot 10^{-9}$
4	$1,92 \cdot 10^{-7}$	8,9	$1,71 \cdot 10^{-9}$

Наблюдаемые различия могут быть объяснены особенностями геометрии, материалов и технологии изготовления микроболометров [6–9].

Полученные значения времени релаксации сравнивали с результатами прямых измерений, выполненных модуляционным методом. Известно, что микроболометр, у которого тепловая релаксация осуществляется по экспоненциальному закону (6), имеет частотную характеристику вида [1]

$$U_c(f) = 1/(1 + (2\pi\tau f)^2)^{1/2}, \quad (9)$$

где τ — время релаксации; f — частота модуляции излучения; $U_c(f)$ — напряжение сигнала на частоте модуляции f . Сравнивая измеренную частотную зависимость сигнала с расчетной, можно определить значение τ .

Для измерения частотной характеристики тестовый образец помещали в вакуумированный корпус с оптическим окном и освещали через ИК объектив модулированным излучением абсолютно черного тела. Частота модуляции изменялась в пределах от 6 до 220 Гц. Полученная в результате измерений частотная характеристика для образца № 1 изображена на рис. 4. Измеренная частотная зависимость хорошо аппроксимируется расчетной с $\tau = 6,7$ мс. Относительное отклонение экспериментальных значений от рассчитанных во всем диапазоне частот не превышает 6 % при среднем значении 3,3 %. Данное время релаксации хорошо согласуется со значением 5,7 мс, полученным по предложенному методу.

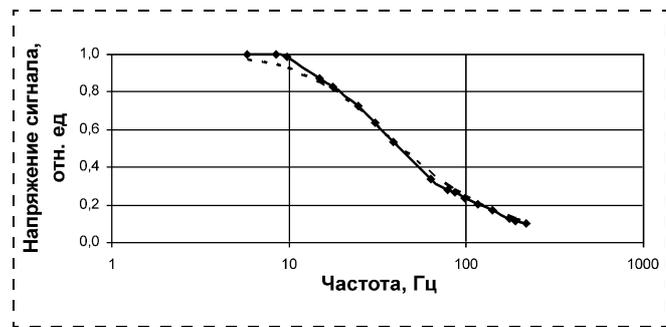


Рис. 4. Измеренная (—) и рассчитанная (---) частотные характеристики тестового образца № 1

Таким образом, разработан метод оценки теплофизических характеристик неохлаждаемых полупроводниковых микроболометров, основанный на учете изменения выделяемой мощности и позволяющий исключить возможность выхода из строя микроболометра в процессе измерений за счет использования импульсного режима со стабилизацией тока. Разработан электронный блок для экспериментальной оценки теплофизических характеристик микроболометров. Исследованы микроболометры со следующими характеристиками: размер пикселя — 48×48 мкм, толщина 0,45 мкм, ширина балок 1,6–2,0 мкм, расстояние до кремниевой подложки 2,0–2,5 мкм, сопротивление чувствительного элемента на основе оксида ванадия 100–150 кОм. Показано, что при остаточном давлении ниже $2,5 \cdot 10^{-3}$ Па коэффициент теплопроводности микроболометров составляет $(1,54-2,93) \cdot 10^{-7}$ Вт/К, теплоемкость $(1,55-1,92) \cdot 10^{-9}$ Дж/К, тепловая постоянная времени (время релаксации) 5,7–12,4 мс.

Результаты, полученные при исследовании ряда микроболометров сопоставимы с опубликованными данными.

Разработанный метод и средства измерений позволяют обоснованно подходить к оптимизации конструкции и технологии изготовления неохлаж-

даемых полупроводниковых микроболометрических матриц.

Авторы выражают признательность С. Н. Клемину за помощь при проведении эксперимента.

Список литературы

1. Хребтов И. А., Маляров В. Г. Неохлаждаемые матричные приемники ИК излучения // Оптический журнал. 1997. Т. 64. № 6. С 3–14.
2. Kruse P. W. The design of uncooled infrared imaging arrays // Proc. SPIE. 1996. V. 2746. P. 34–37.
3. Hovard P. V., Han C. J., Clarke J. E., Stevens J. C., Ely P., Fitzgibbons E. T. Advances in microbolometer focal plane technology at Boeing // Proc. SPIE. 1998. V. 3379. P. 47–57.
4. Жуков А. А., Здобников А. Е., Тарасов В. В., Четверов Ю. С. Микромашинная технология формирования мостиковых структур микроболометрической матрицы формата 64×64 // Прикладная физика. 2003. № 3. С. 48–51.
5. Gu X., Kurunasiri G., Chen G. Determination of thermal parameters of microbolometers using a single electrical measurements // Applied Physics Letters. 1998. V. 72. N. 15. P. 1881–1883.
6. Kurunasiri G., Gu X., Chen G., Sridhar U. Extraction of thermal parameters of microbolometer infrared detectors using electrical measurement // Proc. SPIE. 1998. V. 3436. P. 668–674.
7. Neuzil P., Mei T. Evaluation of thermal parameters of bolometer devices // Applied Physics Letters. 2002. V. 80. N. 1. P. 1838–1840.
8. Чистохин И. Б., Демьяненко М. А. Определение тепловых параметров микроболометров из электрических измерений // Тез. докл. XVIII Межд. конф. по фотоэлектронике и приборам ночного видения. М.: ГНЦ РФ ФГУП НПО "Орион". 2004. С. 131–132.
9. Физические величины: Справ. / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

УДК 621.382.049.77+531:546.621-31

Н. И. Мухуров, д-р техн. наук,
Г. И. Ефремов, канд. техн. наук,
Государственное научное учреждение
"Институт электроники Национальной академии наук Беларуси"

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАЗРАБОТКА ПЕРСПЕКТИВНЫХ МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Анализируются особенности построения перспективных микроэлектромеханических структур на основе анодного оксида алюминия по результатам моделирования и теоретического расчета.

Введение

Специфической особенностью микромеханических структур (ММС) — сенсоров, датчиков, ак-

тюаторов и т. п. — является наличие подвижных кинематических элементов, предназначенных для выполнения различных самостоятельных функций. Они обычно имеют достаточно сложную плоскую или пространственную конфигурацию, должны быть выполнены с прецизионной точностью и длительное время сохранять физико-механические свойства в широком интервале температур и внешних воздействий.

Схематически ММС представляет собой пластину, в которой размещены каркасные, упругие соединительные, жесткие подвижные элементы и которая закрепляется на относительно жесткой базовой подложке-основании, или соединяется с другими аналогичными пластинами. Оптимальным построением конструкции можно считать такое, в котором все элементы формируются в одной пластине едиными интегральными процессами, а затем на их поверхностях создаются функциональные слои, обеспечивающие требуемые параметры ММС.

В настоящее время в качестве исходных материалов широко используются кремний и его модификации, имеющие достаточно высокие физико-механические свойства. Технология создания ММС на его основе в ряде случаев не позволяет получить требуемую форму (например, квадратное сечение) элемента, сопряжена с высокотемпературными операциями (например, пайкой при 500...1200 °С), что ухудшает физико-механические свойства и приводит к появлению значительных внутренних механических напряжений. В связи с этим проводятся интенсивные исследования возможности использования в качестве базового материала полиамида, пермаллоя, композиционных керамико-полимерных материалов и др. [1—4].

Основные свойства анодного оксида алюминия

В ряду этих материалов одно из перспективных мест в последнее время занимает анодный оксид алюминия (АОА), обладающий высокими физико-механическими свойствами [5]. Особенно существенное значение для ММС имеют практически постоянные значения механических характеристик в широком интервале температур –50...+600 °С (их изменение не превышает 5...7 %), а также совпадение пределов упругости и прочности. Отсутствие текучести повышает надежность функционирования ММС и исключает гистерезис перемещения упругих элементов (УЭ) после многократного действия внешних сил. В результате появляется возможность увеличения допустимых перемещений упругих элементов, что расширяет диапазон их функционирования и номенклатуру устройств.

Существенное значение имеют также высокие адгезионные свойства АОА, гарантирующие прочность соединения электропроводящих пленок из различных металлов с поверхностью подложек. В качестве материала проводящих пленок обычно используются металлы с близкими к АОА значениями коэффициентов термического расширения: молибден ($5,5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$), хром ($8,1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$), ванадий ($10,9 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$). Для снижения электрического сопротивления и повышения надежности соединения с цепями управляющей и управляемой аппаратуры на эти пленки могут быть локально нанесены другие металлы, имеющие больший коэффициент термического расширения. Специфической особенностью АОА является самоорганизующаяся нанопористая структура, которая позволяет получать детали с планарными и объемными элементами сложной конфигурации и с прецизионной точностью (клин травления \leq единиц микрометров при толщинах в сотни микрометров [5]. К достоинствам технологического процесса производства ММС на базе АОА относятся также воз-

можность использования методов и оборудования интегрального микроэлектронного производства.

Таким образом, АОА является материалом, в достаточной степени удовлетворяющим основным технологическим и конструктивным требованиям, предъявляемым как к статическим, так и к кинематическим элементам ММС. Однако расчету последних пока не уделено должного внимания и рассматриваются лишь отдельные частные вопросы.

В данной статье приводятся результаты моделирования взаимодействия активных и реактивных сил в рабочем цикле ММС по единой методике, основанной на использовании безразмерных параметров межэлектродных промежутков и с учетом конструктивно-технологических особенностей АОА. Цель работы — предложить на основе полученных результатов перспективные варианты, расширяющие функциональные возможности ММС.

Анализ упругих элементов ММС

Конструктивные формы и технические показатели упругих элементов, соединяющих подвижные элементы (ПЭ) с каркасными, предопределяются назначением и требуемым диапазоном эксплуатационных характеристик разрабатываемого устройства. При этом физическая сущность воздействующих сил или смещений (механическая, электрическая, тепловая и т. п.), определяющих деформирование УЭ не имеет значения и материалы статьи не ограничиваются МЭМС-устройствами. Для обеспечения работоспособности ММС важна лишь функциональная зависимость деформирования УЭ от внешнего воздействующего силового, размерного или иного фактора. В свою очередь, максимальное значение последних существенным образом зависит от показателей деформируемости УЭ.

Специфика УЭ состоит в том, что именно они должны обеспечить основные, нередко противоречивые, требования к ММС: стабильность исходного расположения элементов, существенное значение деформации на микроединицу воздействующего фактора (разрешающую способность), быстрый и надежный возврат элементов, долговечность и др. Поэтому, прежде чем рассматривать конструкции МЭМС в целом, остановимся на некоторых типовых формах упругих микроэлементов, конфигурация которых может быть практически реализована благодаря достоинствам АОА и алюмооксидной технологии.

На данном этапе разработок ММС упругие элементы в подавляющем большинстве выполняются в виде разнообразных очертаний в плане плоских пружин-держателей, работающих на изгиб (держатели, испытывающие растяжение, рассматривать нецелесообразно в связи с их недолговечностью), или торсионов, работающих на кручение.

Конструктивно первые можно разделить на: консольные K с жестко закрепленным одним и свободным другим концом; балочные $БЖ$, соединенные внутренними концами с ПЭ-якорем и жестко закрепленные наружными в каркасе; балочные $БШ$, соединенные внутренними концами с якорем и свободно, шарнирно оперты на каркасе, наружными [6, 7].

Характеристика соединения держателя с якорем зависит от соотношения длин держателя и якоря $\alpha = L_d/L_j$ и их моментов инерции $\beta = I_d/I_j$. По проведенным нами расчетам жесткими якорями, обеспечивающими минимальную стрелу прогиба, т. е. равномерность рабочего промежутка, являются якоря в $БЖ$ при $\beta < 0,04$, $\alpha > 0,4$, в $БШ$ при $\beta < 0,04$, $\alpha > 0,25$. Анализ существующих конструкций свидетельствует о реальности таких сочетаний. Известны конструкции МЭМС с промежуточной опорой держателей, позволяющей увеличить реактивную силу возврата ПЭ из конечного положения [5].

Торсионы могут быть подразделены на: одноступенчатые, имеющие постоянное сечение; двух- (или более) ступенчатые, состоящие из участков, отличающихся по площади сечения. Последовательное отключение участков при повороте якоря позволяет варьировать реактивным моментом.

Как известно, воздействующая сила F , стимулирующая реактивные усилия, пропорциональна деформации—прогибу y или углу поворота α . Анализ показывает, что при прочих равных условиях значение деформации держателей существенно зависит от конструктивной реализации закрепления концов держателей, характеризующегося коэффициентом заделки k . Обычно принимается $k = 3$. Однако по проведенным нами расчетам у $БЖ$ коэффициент k увеличивается до 12, а в вариантах с промежуточными опорами возрастает до 36, что, естественно, оказывает существенное влияние на силовые факторы.

Влияние конструкции на силовые факторы далее будет учитываться при расчете рабочих параметров предлагаемых вариантов.

Перспективные варианты микроэлектромеханических систем

В настоящее время большое внимание уделяется разработкам микроприборов, основанных на использовании электростатических сил [8]. Их достоинство заключается в минимальном потреблении электроэнергии, малых массогабаритных показателей, универсальности функциональных назначений. Сочетание этого принципа действия с упругими элементами в микроэлектромеханических системах (МЭМС) на базе АОА и соответствующее теоретическое моделирование позволяют, по нашему

мнению, предложить новые варианты МЭМС типа реле, превосходящие известные по основным параметрам.

Остановимся на некоторых предложенных нами МЭМС типа реле. Предварительно отметим специфику срабатывания электростатических приводов. Подаваемые на электроды привода разноименные заряды создают электростатическую силу

$$F = \frac{\epsilon_0 S U^2}{2t^2}, \quad (1)$$

где ϵ_0 — электрическая постоянная, равная $8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м; U — электрическое напряжение; S — площадь электродов; t — межэлектродное расстояние.

При выполнении одного электрода подпружиненный последний начинает смещаться и деформировать упругий элемент, в котором возникает реактивная сила P . В общем виде силы изменяются согласно соотношениям

$$F = \frac{\epsilon_0 a U^2}{2} \int_0^L \frac{dx}{[L-y(x)]^2}; \quad (2)$$

$$P = k K q y_1(x_1), \quad (3)$$

где a — ширина электрода (якоря); b — длина электрода; K — жесткость упругого элемента; k — коэффициент заделки; q — число держателей; y — прогиб элемента; y_1, x_1 — координаты F .

Перемещение подвижного электрода будет происходить в том случае, когда сила F сравняется с силой P , т. е. при условии

$$F = P, \quad (4)$$

что станет возможным при соответствующем значении напряжения, которое из (2)—(4) определяется соотношением

$$U = \sqrt{\frac{2kKq}{\epsilon_0 a} \frac{y_1(x_1)}{\int_0^L \frac{dx}{[L-y(x)]^2}}}. \quad (5)$$

Представим (5) в следующем виде:

$$U = C U^*(m), \quad (6)$$

где C — конструктивная константа, в которую включим все исходные физико-механические параметры, $U^*(m)$ — базовая функция, в которой представим переменные в течение цикла параметры межэлектродного промежутка, выраженные в относительном виде $m = y/t$. Эта функция для каждого конкретного конструктивного варианта имеет свой специфический вид, но ее количественное значение в каждом варианте остается по-

стоянным и независимым от параметров, входящих в C . Очевидно, что m находится в пределах $0...1$. Ее ординаты определяют условное значение напряжения U^* в зависимости от относительного смещения подвижного электрода. Следовательно, определение и корректировка зависимости $U(m)$ при моделировании новой конструкции достигается выбором значений параметров и умножением C на известные и постоянные ординаты соответствующей базовой кривой.

Анализ базовой функции показывает, что она во многих конструкциях графически представляет собой кривую типа параболы с U_{\max}^* в средней части и $U^* \approx 0$ при $m = 0$ и $m \approx 1$. Такой вид кривой является следствием увеличения F обратно пропорционально квадрату уменьшающегося межэлектродного расстояния, в то время как P возрастает лишь пропорционально увеличивающемуся прогибу. Это соотношение вначале требует повышения напряжения U^* , но с некоторого положения $m = m_0$ подвижного электрода силы F начинают превосходить реактивные, и чтобы продолжить управляемый процесс, напряжение должно начать снижаться. Дифференцирование базовой функции показывает, что U_{\max}^* имеет место после прохождения одной и той же части t , равной $m_0 = y_0/t_0$ независимо от параметров компонентов данной конструкции. В других конструкциях m_0 будет иметь иные, но тоже постоянные значения. Из проведенного анализа следует, что для МЭМС диапазон изменения m_0 составляет $0,3...0,5$.

Практически наличие у кривой точки перегиба приводит к тому, что соответствующее напряжение U_{\max} в реле является рабочим U_p , так как с этого момента, ввиду отсутствия источников питания, которые обеспечили бы нужное снижение напря-

жения, процесс становится неуправляемым, и подвижный электрод при постоянном напряжении и возрастающей силе F коллапсирует на контакты или иные упоры, предохраняющие электроды от короткого замыкания.

Оценка такой кинематики неоднозначна. Для одних конструкций она положительна, например для реле, поскольку обеспечивает мгновенное замыкание контактов. Но для оптических актюаторов — отрицательна, так как ограничивает угол сканирования. Однако анализ теоретической зависимости (5) позволяет найти перспективное направление оптимизации обоих вариантов, расширяющее функциональные возможности конструкций МЭМС. Базовая функция также позволила нам для каждого типа МЭМС количественно определить соотношения основных параметров — U, F, P в характерных точках рабочих циклов [9].

Рассмотрим конкретные примеры из предложенной серии перспективных МЭМС, базирующихся на элементах из АОА. Расчеты проведем в относительных величинах межэлектродного промежутка.

Электростатическое микрореле плоскопараллельной конструкции (ЭСР ПК). Достоинство плоскопараллельной конструкции (ПК) заключается в сравнительно большой площади электродов, что предопределяет повышенное значение F , а также в независимости размеров якоря и держателей, позволяющей выбирать оптимальное соотношение F и P [9].

Параметры ПК при отсутствии в межэлектродном промежутке твердого диэлектрика, выполнении "елочных" (направление в одну сторону) держателей по типу K и жестком якоре, сформулированные согласно (6), представлены в таблице (п. 1), где расположение держателей представлено условно.

№	Схема	Формулы	Параметры
1		$C = \frac{\sqrt{2kEIq}t^3}{\sqrt{\epsilon_0}l^3S}$	$m_0 = 0,33$ $U_{\max}^* = 0,38$
1а		$U^* = \sqrt{(1-m)^2m}$	
1б		$U_p = 0,54 \frac{\sqrt{kEIq}t^3}{\sqrt{\epsilon_0}l^3S}$	
1в		l — длина держателей	

№	Схема	Формулы	Параметры
2			
2a		$C = 1,4 \sqrt{\frac{kEI}{\varepsilon_0 a L^4}} t^3, U^* = \sqrt{(1-m)(2-m)^2 m},$ $U_p = 1,1 \sqrt{kEI t^3 / \varepsilon_0 a L^4},$ $U_p = 1,1 \sqrt{\frac{kEI t^3}{\varepsilon_0 a L^4} \left(1 + \frac{1}{i}\right)},$	$m_0 = 0,36$ $U_{\max}^* = 0,79$
26		$C = 1,4 \sqrt{\frac{kEI}{\varepsilon_0 a L^3}}, U^* = \sqrt{\frac{(1-m)^2 [m_0(2-m)^2 + mj]}{1-m+\gamma}}$	$m_0 = 0,28...0,26$ $U_{\max}^* = 0,4...0,25$
3		$C = \sqrt{[\pi^2 P_{кр} H_{\max}^5 (1/\nu + 1/L + \pi^2 H_{\max}^2 / 8L^2 \nu)] / 4\varepsilon_0 a L^3}$ $U^* = \frac{m(1-m^2)}{\sqrt{\int_0^1 [n(1-n)dn] / \sin \pi(c/H_{\max} + m \sin \pi n)^2}}$ <p>H_{\max}, H — исходный и текущий прогибы средней точки якоря, c — смещение по оси у концов якоря</p>	$n = x/L,$ $m = H/H_{\max}$ $m_0 = 0,7$ $U_{\max}^* = 0,43...0,69$
4		$C = \sqrt{4GI_T t^3 / \varepsilon_0 a l_T L^3}, U_p = 0,58 \sqrt{4GI_T t^3 / \varepsilon_0 a l_T L^3},$ $U^* = \sqrt{m^3 \left[2m^2 \frac{1-m_0^2}{(1-m^2)(1-n_0^2 m^2)} + \ln \frac{1-m^2}{1-n_0^2 m^2} \right]^{-1}},$	$m_0 = 0,52$ $U_{\max}^* = 0,58$
4a		<p>G — модуль упругости при кручении, l_T — длина торсиона</p>	$m_0 = 0,07...0,08$ $U_{\max}^* = 1...1,5$
46		$U_p = (1...1,5) \sqrt{\frac{4GI_T t^3}{\varepsilon_0 a l_T L^3}}$	
4в		$U_p = 1,1 \sqrt{\frac{4GI_T t^3}{\varepsilon_0 a l_T L^3}}$	$m_0 = 1,4$ $U_{\max}^* = 1,1$

Перепад сил и напряжений в рабочем цикле, например, при $m = 0,9$, $k = 3$, выражается следующими числами: $F/P = 16,5$; $U_p/U_B = 4$, где U_B — напряжение выключения. Эти соотношения удовлетворительны для ПК, работающих по схеме реле, в пороговом режиме, но неприемлемы для использования, в частности, в регулирующих схемах. Анализ зависимости $U(m)$ позволяет наметить некоторые направления, обеспечивающие расширенные функции ПК, в частности:

- возможность применения ЭСР ПК в системах, стабилизирующих значение контролируемого параметра за счет ограничения перемещения якоря значением $m = 0,35...0,4$, что даст снижение отношения $(U_p - U_B)/U_B$ до минимума; конструктивно это достигается увеличением высоты контактов управляемой электрической цепи (см. табл., п. 1а);
- возможность применения ЭСР в высокочастотных схемах путем уменьшения отношения F/P при $m = 0,9$ за счет ступенчатого повышения жесткости держателей, обеспечиваемой промежуточными опорами (см. табл., п. 1б). Опоры располагаются на расстоянии $y = (0,25...0,3)t$ под серединами держателей. Они при том же значении U_p увеличивают реактивную силу держателей в ~ 3 раза, что повышает "высокочастотность" реле, так как сокращает время возврата якоря до 2 раз, кроме того, повышается надежность размыкания контактов;
- возможность применения ЭСР в системах управления нестационарными процессами за счет программируемого изменения значений U_p при постоянном минимальном значении отношения $(U_p - U_B)/U_B$. В такой конструкции дно подложки с самой подложкой соединяется упругими держателями дна. На них выполнены контакты, размещенные на выступах высотой $0,6...0,65t$ (т. е. при $t_k = 0,4...0,35t$, $m > m_0 = 0,33$), расположенных на расстоянии $0,35...0,4t$ от места закрепления держателей в подложке. Кроме того, дно подложки связано с реверсивным микромеханическим двигателем, который по заданной программе перемещает электрод подложки, изменяя t и обеспечивая нужные значения U_p и U_B (см. табл., п. 1в).

Электростатические микрореле консольной конструкции (ЭСР КК). Характерной особенностью ЭСР КК являются переменные значения t и F по длине якоря L , так как в них якорь совмещен с прогибающимся упругим держателем [10].

Расчетные теоретические параметры при допущении прямолинейности формы консольного якоря приведены в табл., п. 2. Параметры рабочего цикла при $m = 0,95$: $F/P = 12,9$; $U_p/U_B = 3,3$.

Традиционная конструкция компактна, но ее изготовление по кремниевой технологии связано с большими затруднениями и не обеспечивает высокой точности, так как к погрешностям многооперационного формирования добавляется коробление якоря, возникающее в условиях значительно различающихся технологических и рабочих температур.

Использование алюмооксидной технологии позволяет оптимизировать как изготовление, так и эксплуатационные параметры КК. Это достигается в варианте микрореле планарного исполнения КПК, т. е. когда элементы подвижных частей в единой плоской пластине образуются путем электрохимического травления прецизионных сквозных пазов по контуру элементов. При этом особенно важно непосредственное формирование t и t_k , которые в объемных конструкциях являются замыкающими звеньями, суммирующими все погрешности размерной цепи. Очевидна доступность оперативного приборного контроля всех размеров.

В КПК внутренние концы консолей жестко закреплены в подвижной планке, а в пластине сформированы выступы с неподвижными электродами. В п. 2а таблицы представлен вариант, содержащий два консольных якоря и контактную ветвь. Его базовая функция имеет прежний вид, поэтому m_0 и U^* остаются теми же. Увеличение числа якорей i позволяет снизить U_p . Чисто КПК срабатывают при напряжениях, превосходящих U_p ПК, в связи с тем, что, как показывают расчеты, электростатические силы F действуют лишь на последней трети длины электрода. Поэтому в случае необходимости получения срабатывания КК при более низких напряжениях, может быть применен якорь комбинированной конструкции ККК (см. табл., п. 2б), содержащий наряду с консольными некоторое число j плоскопараллельных электродов. Последние расположены на выступах планки, соединяющей концы упругих консолей. В этой конструкции тянущие электроды размещены на всех консолях. При перемещении якоря консоли прогибаются, а выступы с электродами остаются параллельными, как в ЭСР ПК.

Моделирование комбинированной конструкции показывает, что оптимальными являются значения $\gamma = j/i = 2...6$, при которых U_{max}^* в 2...3,2 раза меньше U_{max}^* при $\gamma = 0$.

Электромеханические микрореле с упругодеформированной стержневой системой (ЭСР УК). Возрастающий уровень требований к чувствительности МЭМС делает актуальным поиск путей снижения рабочего напряжения ЭСР. Нам представляется, что решение этой задачи состоит в интенсификации воздействия сил F на упругие элементы воз-

врата якоря. Это может быть достигнуто конструктивной схемой ЭСР, в которую включен механический усилитель электростатических сил.

Принципиальная схема такого микрореле содержит упруго деформированный плоский якорь с электродом и контактами, зажаты между упругими консольными держателями с силой P , превышающей критическую нагрузку $P_{кр}$ (см. табл., п. 3) [11]. Вследствие малой кривизны H_{max} изогнутого якоря воздействующая на него при включении ЭСР УК минимальная поперечная электростатическая сила F с большим передаточным отношением, достигающим 30...60, преобразуется в продольную силу P , раздвигающую держатели, реактивная сила которых практически не возрастает, так как дополнительный прогиб не превышает 0,1 мкм. Поперечная сила F выпрямляет якорь и замыкает контакты. Конструктивно ЭСР УК может быть реализована, как в планарном, так и в объемном вариантах.

Электростатические микрооптоэлектромеханические актюаторы торсионной конструкции (МОЭМС ТК). МОЭМС ТК используются в оптических системах для сканирования или переключения управляемых лучей. Их традиционная схема состоит из основания с выступами, в пазах которых размещены упругие торсионы якоря (см. табл., п. 4). На внутренней плоскости основания симметрично оси торсионов сформированы два неподвижных изолированных друг от друга электрода. На плоскости якоря, обращенной к основанию, размещен единый подвижный электрод [12]. Использование АОА позволяет получить торсионы якоря с квадратным сечением.

Актюатор работает в режиме "Push-Pull". Поскольку угол поворота якоря мал (менее 2°), то для получения формул с относительными значениями перемещений примем

$$\alpha/\alpha_{max} = \text{tg}\alpha/\text{tg}\alpha_{max} = y/t = m, \quad (7)$$

откуда следует, что коэффициент m одновременно характеризует и угол поворота, и линейное смещение конца якоря.

Условие равновесного состояния в торсионных системах выражается соотношением

$$M_F = M_T, \quad (8)$$

где $M_T = 2GI_Ttm/l_TL$ — реактивный момент торсионов (см. табл., п. 4).

Управляемый угол поворота m_0 при $n_0 = 0,2$ составляет чуть больше половины угла, допускаемого геометрией межэлектродного промежутка.

Увеличения m_0 теоретически можно достичь, например, повышением реактивного момента торсионов в процессе поворота якоря. Конструктивно

это решается применением торсионов двухступенчатой жесткости и отключением первой ступени при повороте якоря на угол немного менее m_0 (см. табл., п. 4а). Для этого на торсионах первой ступени предлагается расположить жесткие лепестки, а под их концами на подложке разместить опоры, высота которых определяется углом m_0 . Жесткость у торсионов второй ступени выполняется большей, чем у первой. В конструкции может быть предусмотрена одновременная или последовательная остановка диагональных лепестков.

Аналогичный эффект увеличения m_0 может быть получен за счет преобразования конфигурации электродов с прямоугольной на пятиугольную, составленную из прямоугольного на длине якоря от $n_0 = 0,2$ до $n_1 = 0,42...0,5$ и треугольного на длине от n_1 до $n_2 = 0,74...0,78$ (см. табл., п. 4б). Такая форма обеспечивает уменьшение вклада концевых сил в суммарную электростатическую силу.

Анализ взаимодействия сил F и P в торсионных актюаторах показывает, что на поворот якоря толкающие силы F (*Push*), если и оказывают какое-то небольшое влияние, то оно действует только в начальной стадии поворота. Представляется целесообразным воздействие сил F_T увеличить, а притягивающих F_{II} уменьшить. Конструктивно это предлагается реализовать за счет ступенчатого расположения электродов на основании, выполнив $t_T < t < t_{II}$ (см. табл., п. 4в).

Увеличение толкающих сил при одновременном уменьшении притягивающих принципиально изменяет характер зависимости $U(m)$, восходящая ветвь которой становится практически линейной в диапазоне $0...m_0$.

Заключение

Моделирование и анализ рабочего цикла ММС, создаваемых на основе АОА и традиционных технологических процессов, позволили разработать принципы построения новых перспективных структур, обеспечивающих существенное расширение и повышение эксплуатационных параметров широкого спектра систем разнообразного назначения.

Список литературы

1. Лучинин В. В., Таиров Ю. М., Васильев А. А. Особенности материаловедческого и технологического базиса микросистем // Микросистемная техника. 1999. № 1. С. 7—11.
2. Погалов А. И., Тимошенко В. П., Тимошенко С. П. и др. Разработка микрогироскопов на основе многослойных структур кремния и стекла // Микросистемная техника. 1999. № 1. С. 36—41.
3. Gessner T., Dotzel W., Hiller., et al. Micromechanische Sensoren und Aktoren — Funktionsprinzipien, Technologien

und Applikationen // VDI Berichte. 2000. N. 1530. P. 211—220.

4. **Дятлов В. Л., Конышкин В. В., Потапов Б. С., Фадеев С. И.** Пленочная электромеханика. Новосибирск: Наука, Сиб. отд. 1991. 248 с.

5. **Мухуров Н. И.** Алюмооксидные микро-наноструктуры для микроэлектромеханических систем. Минск: УП "Бестпринт". 2004. 166 с.

6. **Пономарев С. Д.** и др. Расчеты и прочность в машиностроении. М.: Наука, Ф. М. Л., 1956. 568 с.

7. **Тимошенко С. П.** Устойчивость стержней, пластин и оболочек. М.: Наука, Ф. М. Л., 1971. 808 с.

8. **Chan E. K., Dutton R. W.** Electrostatic Micromechanical actuator with extended range of travel // J. Microelectromechanical Systems. 2000. V. 9. N. 3. P. 321—328.

9. **Ефремов Г. И., Мухуров Н. И.** Функциональные возможности электростатических микрореле по результатам моделирования // НТК "Кибернетика и технологии XXI века", РФ, Воронеж, 23—24 октября 2001. С. 499—508.

10. **Efremov G. I., Mukhurov N. I., Galdetskiy A. V.** Analysis of electromechanical parameters of electrostatic micro relay with a movable elastic cantilever electrode // Proc. SPEI. 2000. V. 4019. P. 581—586.

11. **Efremov G. I., Mukhurov N. I., Chodin A. V.** Modeling of electromechanical: forces in electrostatic micro-relay with elastically deformed anchor // Proc. SPEI. 2001. V. 4593. P. 255—262.

12. **Efremov G. I., Mukhurov N. I.** Improvement of electro-mechanical microscanners efficiency using modeling results // Proc. SPEI. 2003. V. 5116. P. 850—856.

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

УДК 537.228.1 + 539.219.1

В. Ю. Тополов, д-р физ.-мат. наук, **А. Е. Панич**, д-р техн. наук, Ростовский государственный университет,
М. А. Курбанов, д-р физ.-мат. наук, Институт Физики Национальной академии наук Азербайджана

ОСОБЕННОСТИ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ 0—3-КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ КЕРАМИКИ ТИПА ПКР

В рамках модели регулярно расположенных сфероидальных включений в протяженной матрице определены концентрационные зависимости эффективных пьезокоэффициентов d_{3j}^ и g_{3j}^* композитов "сегнетопьезокерамика — пьезоактивный полимер" со связностью 0—3. Рассмотрены примеры использования в качестве керамического компонента составов ПКР-7М и ПКР-8 (группа "пьезокерамика из Ростова-на-Дону"). Проанализировано влияние формы и объемной концентрации включений на пьезоэлектрический отклик 0—3-компози́тов. Сопоставлены некоторые расчетные и экспериментальные результаты по родственным пьезокомпозитам.*

Проблема прогнозирования и оптимизации эффективных электромеханических свойств пьезоактивных композитов — одна из важнейших проблем пьезоэлектрического материаловедения. Пьезокомпозиты являются многочисленной и важной группой современных функциональных материалов [1, 2], которые находят разнообразные применения в пьезотехнике, медицинской и микро-

системной технике, гидроакустике и других областях. При сочетании двух или нескольких компонентов (сегнетопьезокерамик (СПК), кристаллов и полимеров) и создании структур с определенной микрогеометрией (связностью по терминологии Ньюэнма [1]) удается получить материалы, имеющие преимущества по сравнению с входящими в них компонентами. Это относится, в

частности, к композитам типа "СПК—полимер" со связностями 2—2, 1—3 или 0—3 [3—6]. Интерес к 0—3-композитам, состоящим из протяженной полимерной матрицы и СПК включений конечных размеров, обусловлен технологическими факторами [5, 7—10] и существенной зависимостью эффективных электромеханических свойств и других параметров от формы и взаимного расположения включений [11—14]. При этом часто в качестве СПК компонента выбирается состав на основе $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ (СПК типа PZT, ЦТС, ПКР и др.), а в качестве полимерного компонента — пьезопассивный материал (эпоксидная смола, полиэтилен, эластомер) [7, 8, 11—13]. Вместе с тем, в литературе имеются ограниченные экспериментальные данные [5, 10] по 0—3-композитам, состоящим из двух пьезоактивных компонентов — СПК и полимера. Цель настоящего сообщения — анализ концентрационных зависимостей пьезомодулей d_{3j}^* и пьезокоэффициентов g_{3j}^* ($j = 1; 3$) 0—3-компози́тов "СПК типа ПКР — поли-

мер типа поливинилиденфторида (ПВДФ)", а также определение связей между пьезоактивностью и пьезочувствительностью данных компози́тов.

Одной из наиболее распространенных моделей, используемых для прогнозирования эффективных электромеханических свойств 0—3-компози́тов, является модель сфероидального включения в трансверсально-изотропной среде [12, 14, 15]. Идея описания 0—3-компози́та с помощью системы подобных сфероидальных СПК включений в полимерной матрице выдвинута Ямадой с сотрудниками [8], однако им не удалось корректно учесть электромеханическое взаимодействие включений.

Предполагается, что рассматриваемый 0—3-компози́т имеет ячеистую структуру (рис. 1), все включения имеют одинаковые размеры и регулярно распределены в матрице. Вектор остаточной поляризации P_r каждого включения сонаправлен с осью Ox_3 , и компози́т в целом характеризуется симметрией ∞mm . Его эффективные электромеханические константы рассчитываются методом эффективного поля [12, 14, 16] с

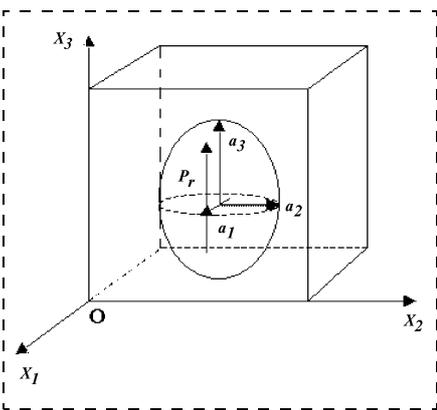


Рис. 1. Схематическое изображение структуры 0—3-компози́та со сфероидальными СПК включениями. Форма включений задается уравнением $(x_1/a_1)^2 + (x_2/a_2)^2 + (x_3/a_3)^2 = 1$ в осях прямоугольной системы координат $(X_1 X_2 X_3)$ образца; a_i — длины полуосей сфероида, $a_1 = a_2$

использованием форм-факторов Эшелби [17] для сфероидальных включений в трансверсально-изотропной пьезоактивной среде. Метод эффективного поля — один из вариантов самосогласованной схемы — надежная основа для теоретического предсказания электромеханических свойств компози́тов [15]. В данном методе взаимодействие между включениями учитывается при введении локального внешнего поля, действующего на каждое включение. При этом матрица эффективных констант данного 0—3-компози́та записывается в общем виде как

$$\|C^*\| = \|C^*(m)\| = \begin{pmatrix} \|c^{*E}\| & \|e^*\|^T \\ \|e^*\| & -\|\varepsilon^{*\xi}\| \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где индекс "т" обозначает транспонирование, а $\|c^{*E}\|$, $\|e^*\|$ и $\|\varepsilon^{*\xi}\|$ — матрицы модулей упругости, измеренных при постоянном электрическом поле E , пьезоэлектрических коэффициентов и диэлектрических проницаемостей механически зажатого образца соответственно. Согласно результатам работы [16], матрица (1) может быть записана в следующей форме:

$$\|C^*\| = \|C^{(2)}\| + m(\|C^{(1)}\| - \|C^{(2)}\|)\{\|K_{id}\| + (1 - m)\|S\| \times \|C^{(2)}\|^{-1}(\|C^{(1)}\| - \|C^{(2)}\|)\}^{-1}. \quad (2)$$

В формуле (2) m — объемная концентрация СПК включений; $\|C^{(1)}\|$ и $\|C^{(2)}\|$ — матрицы электромеханических констант СПК (индекс 1) и полимерного (индекс 2) компонентов; $\|K_{id}\|$ — единичная матрица и $\|S\|$ — матрица форм-факторов Эшелби, зависящая от элементов матрицы $\|C^{(2)}\|$ и формы включений [12, 16, 17]. Матрицы $\|C^{(1)}\|$ и $\|C^{(2)}\|$, описывающие электромеханические свойства компонентов, имеют структуру, аналогичную структуре матрицы (1). Форма СПК включений характеризуется от-

ношением длин полуосей сфероида (аспектным отношением) $\rho = a_1/a_3$.

Матрицы пьезоэлектрических коэффициентов d_{3j}^* и g_{3j}^* определяются с использованием эффективных электромеханических констант из соотношения (2) по формулам [18]

$$\|d^*\| = \|e^*\| \cdot \|s^{*E}\|; \\ \|g^*\| = \|d^*\| \cdot \|\varepsilon^{*\sigma}\|^{-1},$$

где $\|s^{*E}\| = \|c^{*E}\|^{-1}$ — матрица упругих податливостей, измеренных при $E = \text{const}$; $\|\varepsilon^{*\sigma}\|$ — матрица диэлектрических проницаемостей, измеренных при постоянном механическом напряжении σ .

Расчетные концентрационные зависимости эффективных пьезокоэффициентов определяются при варьировании параметров m и ρ в интервалах $0 < m \leq 0,5$ [14] и $0 < \rho \leq 1$.

Для расчетов зависимостей нормированных пьезокоэффициентов $\beta_{d3j} = d_{3j}^*(m, \rho)/d_{3j}^{(1)}$ и

$\beta_{g3j} = g_{3j}^*(m, \rho)/g_{3j}^{(1)}$ используются полные наборы упругих, пьезо- и диэлектрических констант СПК [19] и полимерного [4] компонентов, определенных при комнатной температуре.

В настоящей статье мы остановимся на примерах 0—3-компози́тов на основе сегнетожесткой СПК (ПКР-8 [19]) и СПК с высокой диэлектрической проницаемостью (ПКР-7М [19]). Процедура получения исследуемых компози́тов описана в работе [10]. Следует отметить, что поляризация компози́тных образцов проводилась в интервале температур $T = 100...150$ °С при напряженности внешнего электрического поля $E = (3...6)$ МВ/м. Приведенные значения E оказываются значительно ниже напряженностей E_p полей, применяемых для поляризации ПВДФ и родственных материалов. Например, согласно многочисленным экс-

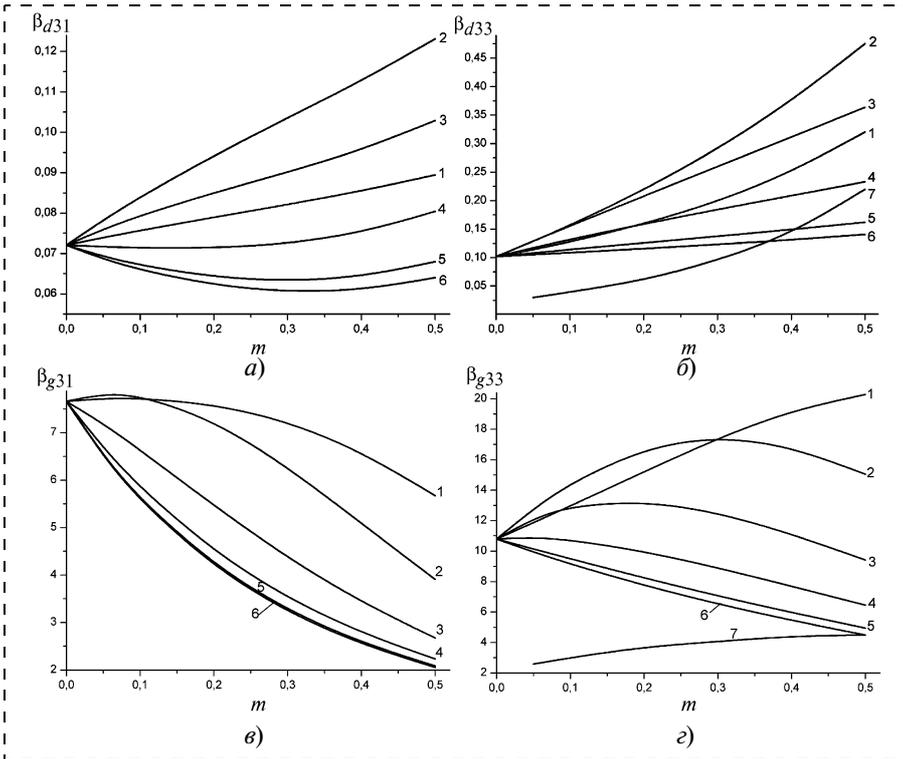


Рис. 2. Концентрационные зависимости $\beta_{d31}(m)$ (а), $\beta_{d33}(m)$ (б), $\beta_{g31}(m)$ (в), $\beta_{g33}(m)$ (г), рассчитанные для 0–3-композиата "ПКР-8 — полимер типа ПВДФ" при $\rho = 0,1$ (кривая 1), $\rho = 0,3$ (кривая 2), $\rho = 0,5$ (кривая 3), $\rho = 0,7$ (кривая 4), $\rho = 0,9$ (кривая 5) и $\rho = 1$ (кривая 6). Экспериментальные концентрационные зависимости $\beta_{d33}(m)$ и $\beta_{g33}(m)$ представлены кривыми 7 на графиках б) и г) соответственно

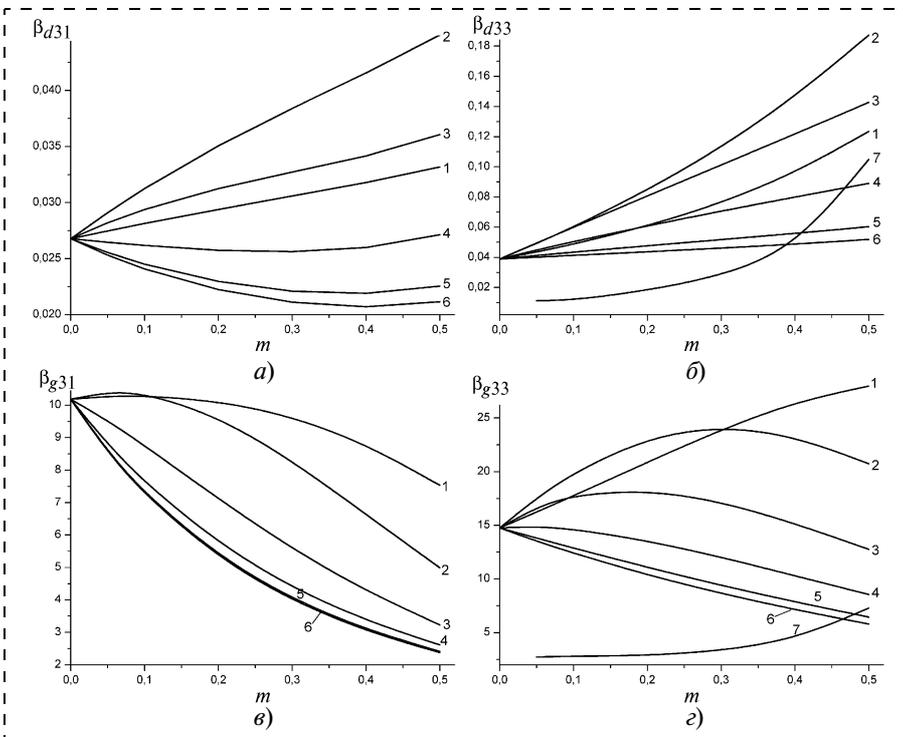


Рис. 3. Концентрационные зависимости $\beta_{d31}(m)$ (а), $\beta_{d33}(m)$ (б), $\beta_{g31}(m)$ (в), $\beta_{g33}(m)$ (г), рассчитанные для 0–3-композиата "ПКР-7М — полимер типа ПВДФ" при $\rho = 0,1$ (кривая 1), $\rho = 0,3$ (кривая 2), $\rho = 0,5$ (кривая 3), $\rho = 0,7$ (кривая 4), $\rho = 0,9$ (кривая 5) и $\rho = 1$ (кривая 6). Экспериментальные концентрационные зависимости $\beta_{d33}(m)$ и $\beta_{g33}(m)$ представлены кривыми 7 на графиках б) и г) соответственно

периментальным данным [20], термическая поляризация ПВДФ проводится при $T = 90...165$ °С и $E_p = (50...100)$ МВ/м. При таком различии напряженностей полей E и E_p можно считать вектор остаточной поляризации полимерной матрицы $P_r \uparrow \downarrow E$ и использовать для расчетов пьезокоэффициенты полимера $e_{3j}^{(2)}$ с обратными знаками, т. е. $e_{31}^{(2)} < 0$ и $e_{33}^{(2)} > 0$, как у СПК на основе $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ [19].

Результаты расчетов параметров β_{d3j} и β_{g3j} графически представлены на рис. 2 и 3. Для сравнения на рис. 2, б, г и 3, б, г приводятся также концентрационные зависимости $\beta_{d33}(m)$ и $\beta_{g33}(m)$, определенные из экспериментальных данных по 0–3-композиатам родственного состава. В ходе анализа концентрационных зависимостей $\beta_{d3j}(m)$ и $\beta_{g3j}(m)$ выявлены следующие особенности пьезоэлектрических свойств 0–3-композиатов на основе ПКР. Пьезоэффект полимерной матрицы и форма (фактор ρ) СПК включений влияют на взаимное расположение кривых $\beta_{d3j}(m)$ при $0,1 \leq \rho < 0,5$: в обеих системах $\partial\beta_{d3j}/\partial m|_{\rho=0,1} > \partial\beta_{d3j}/\partial m|_{\rho=0,5}$ и изменяется порядок следования кривых. С одной стороны, пьезоактивная матрица благоприятствует пьезоактивности композита, а с другой стороны, сплющивание включений (увеличение ρ) способствует снижению пьезоактивности композита. Более высокие значения $\beta_{d3j}(m)$ при $\rho = \text{const}$ соответствуют композиту на основе ПКР-8, что связано главным образом с меньшими различиями между $d_{3j}^{(1)}$ и $d_{3j}^{(2)}$, а

также между $\varepsilon_{jj}^{(1),\xi}$ и $\varepsilon_{jj}^{(2),\xi}$ по сравнению со случаем композита на основе ПКР-7М. Следует добавить, что упругие свойства

ПКР-8 и ПКР-7М, согласно [19], различаются слабо и примерно одинаково влияют на зависимость $\beta_{d3j}(m)$.

Наоборот, более высокие значения $\beta_{g3j}(m)$ при $\rho = \text{const}$ соответствуют композиту на основе ПКР-7М, и можно говорить о преимуществах данной СПК по сравнению с другими составами на основе $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ как компонента, обуславливающего высокую пьезочувствительность. Ранее на примере 1—3-компози́тов "ПКР-7М — пьезопассивный полимер" (т. е. случай $\rho = 0$) было показано [21], что ПКР-7М характеризуется наивысшим среди родственных СПК отношением $e_{33}^{(1)E}/c_{33}^{(1)E}$, благоприятствующим высокой пьезочувствительности композита.

По-видимому, это положение остается справедливым и для 0—3-компози́тов с вытянутыми СПК включениями ($0 < \rho < 1$), погруженными в пьезоактивную полимерную матрицу. Кривые $\beta_{d3j}(m)$ характеризуют монотонное концентрационное поведение эффективных пьезомодулей $d_{3j}^*(m)$ исследуемых компози́тов. Немонотонное поведение $\beta_{g3j}(m)$, свойственное обоим компози́там на основе ПКР, объясняется влиянием диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{33}^{*\sigma}(m)$ композита и фактора формы ρ на пьезочувствительность. Наибольшая пьезочувствительность (наивысшие значения $|g_{3j}^*|$) соответствует компози́там с сильно вытянутыми сфероидальными включениями. Несогласованное появление $\max\beta_{g31}(m)$ и $\max\beta_{g33}(m)$ при $\rho = \text{const}$ (см. кривые 2 на рис. 2, в, г или рис. 3, в, г) объясняется малой анизотропией пьезомодулей $d_{3j}^{(1)}$ СПК типа ПКР. В отличие от рассматриваемого здесь концентрационного поведе-

ния пьезокоэффициентов, в работе [14], посвященной 0—3-компози́там на основе СПК модифицированного PbTiO_3 , обсуждена возможность согласованного появления $\min g_{31}^*(m)$ и $\max g_{33}^*(m)$ при $0 < \rho < 0,2$ вследствие значительной анизотропии $d_{3j}^{(1)}$.

Сопоставление расчетных и экспериментальных данных (см. рис. 2, б, г и рис. 3, б, г) указывает на заниженные числовые оценки эффективных параметров, соответствующих $\rho = 1$ (т. е. изолированным сферическим включениям) в обоих компози́тах. Наряду с этим, расчетные значения β_{d33} и β_{g33} при $\rho \leq 0,5$ оказываются выше соответствующих экспериментальных значений. Это обстоятельство позволяет предположить существование в ком-

позитных образцах наряду со сферическими включениями некоторых вытянутых вдоль оси поляризации OX_3 конгломератов (протяженных цепочек), состоящих из включений сферической формы. Идея формирования подобных включений при прессовании (формовании) образцов высказывалась в работе [9], а модельные представления об иерархии СПК включений в 0—3-компози́тах были развиты в недавней работе [22].

Другим фактором, способным повлиять на концентрационные зависимости $\beta_{d3j}(m)$ и $\beta_{g3j}(m)$, является пьезоэффект полимерной матрицы. Предположим, что вектор остаточной поляризации матрицы $P_r \uparrow \downarrow E$ и в матрице существуют области, поляризованные по полю E , вследствие проводи-

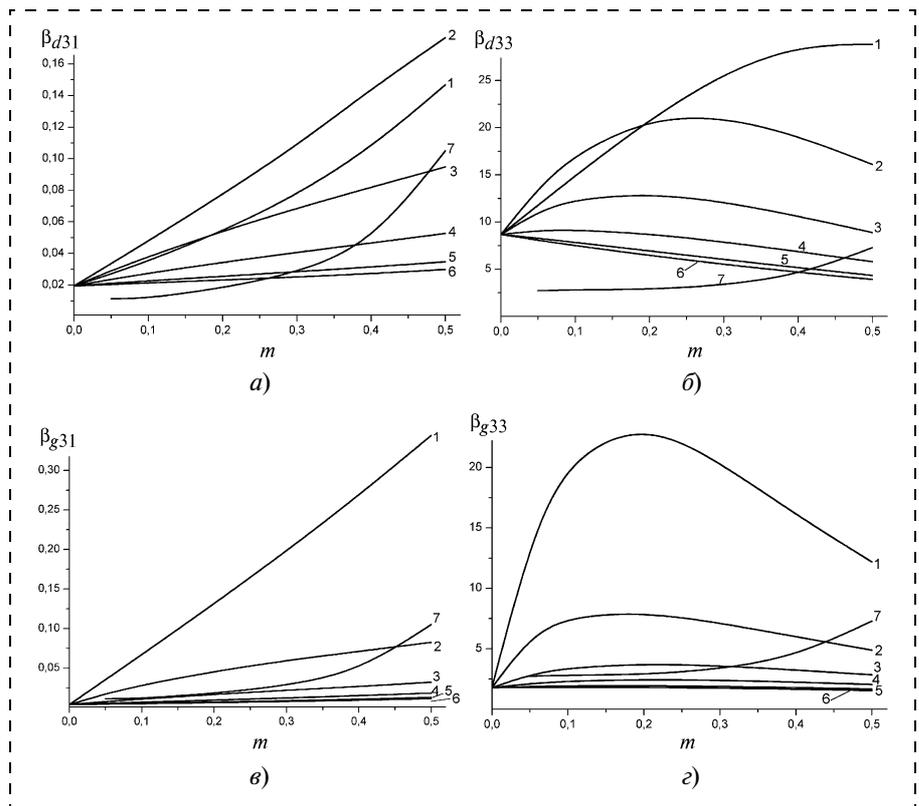


Рис. 4. Концентрационные зависимости $\beta_{d33}(m)$ (а, в), $\beta_{g33}(m)$ (б, г), рассчитанные для 0—3-компози́та "ПКР-7М — полимер типа ПВДФ" при пьезокоэффициентах полимера $e_{ij}^{(2)}$, в два (а, б) или десять раз (в, г) меньших по модулю соответствующих экспериментальных значений $e_{ij}^{(2)}$ из работы [4]. Кривые 1, 2, 3, 4, 5 и 6 построены для $\rho = 0, 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9$ и 1 соответственно. Кривая 7 соответствует экспериментальной зависимости $\beta_{d33}(m)$ (а, в) или $\beta_{g33}(m)$ (б, г)

мой термической поляризации композитов. Такая полимерная матрица характеризуется пьезокоэффициентами $|e_{ij}^{(2)}|$, меньшими используемых [4] для расчетов. При уменьшении $|e_{ij}^{(2)}|$ в 2—10 раз удается достичь заметного сближения расчетных кривых с экспериментальными (рис. 4) как для β_{d33} , так и для β_{g33} . Изменение наклона обеих экспериментальных кривых $\beta_{d33}(m)$ и $\beta_{g33}(m)$ при $m \approx 0,25$ и расположение этих кривых в области между расчетными кривыми 1 и 3 при $m > 0,3$ (см. рис. 4, в, г) свидетельствуют в пользу предположения о существовании в 0—3-композиатах протяженных СПК цепочек, близких по форме к сфероидальной с $\rho = 0,1 \dots 0,5$. Эти структурные образования в значительной мере определяют пьезоактивность и пьезочувствительность 0—3-композиатов на основе СПК типа ПКР при $m > 0,3$.

Заключение

Проведенные исследования концентрационных зависимостей $\beta_{d3j}(m)$ и $\beta_{g3j}(m)$ свидетельствуют о различиях в поведении пьезомодулей $d_{3j}^*(m)$ и пьезокоэффициентов $g_{3j}^*(m)$ 0—3-композиатов "СПК — полимер" с двумя пьезоактивными компонентами, а также о важной роли сегнетожесткости СПК, микроструктурного фактора и отношений $e_{33}^{(1)}/c_{33}^{(1)}$, E констант СПК и $e_{33}^{(2)}/e_{33}^{(1)}$ констант компонентов в формировании эффективных пьезоэлектрических свойств. Полученные результаты могут способствовать созданию новых высокоэффек-

тивных пьезокомпозитов, в которых сочетаются преимущества СПК и пьезоактивного полимерного компонентов, особенности формирующейся в процессе изготовления микроструктуры и условия оптимальной поляризации композитных образцов в заданных интервалах T и E .

Работа выполнена при частичной поддержке по теме 11.01.03ф НИР РГУ.

Список литературы

1. Newnham R. E. Molecular mechanisms in smart materials // MRS Bull. 1997. Vol. 22. N. 5. P. 20—34.
2. Uchino K. Piezoelectric actuators and ultrasonic motors. Boston: Kluwer, 2001. 364 p.
3. Hashimoto K. Y., Yamaguchi M. Elastic, piezoelectric and dielectric properties of 1—3 piezoelectric ceramic / piezoelectric polymer composites // Proc. IEEE Ultrasonic Symposium, Williamsburg, Va, November 17—19, New York, 1986. Vol. 2. P. 697—702.
4. Taunamang H., Guy I. L., Chan H. L. W. Electromechanical properties of 1—3 piezoelectric ceramic / piezoelectric polymer composites // J. Appl. Phys. 1994. Vol. 76. N. 1. P. 484—489.
5. Ng K. L., Chan H. L. W., Choy C. L. Piezoelectric and pyroelectric properties of PZT/P(VDF-TrFE) composites with constituent phases poled in parallel or antiparallel directions // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr. 2000. Vol. 47. N. 6. P. 1308—1315.
6. Nan C. W., Weng G. J. Influence of polarization orientation on the effective properties of piezoelectric composites // J. Appl. Phys. 2000. Vol. 88. N. 1. P. 416—423.
7. Furukawa T., Ishida K., Fukada E. Piezoelectric properties in the composite systems of polymers and PZT ceramics // J. Appl. Phys. 1979. Vol. 50. N. 7. P. 4904—4912.
8. Yamada T., Ueda T., Kitayama T. Piezoelectricity of a high-content lead zirconate titanate / polymer composite // J. Appl. Phys. 1982. Vol. 53. N. 6. P. 4328—4332.
9. Лушейкин Г. А. Полимерные и композиционные пьезоэлектрики // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1987. Т. 51. № 12. С. 2273—2276.

10. Панич А. Е., Вусевкер В. Ю., Курбанов М. А. Исследование путей создания эффективных пьезоэлектрических композиционных структур на основе полимерных материалов // Науч. мысль Кавказа. Приложение. 2002. Спецвып. С. 141—147.

11. Levassort F., Lethiecq M., Millar C., Pourcelot L. Modeling of highly loaded 0—3 piezoelectric composites using a matrix method // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr. 1998. Vol. 45. N. 6. P. 1497—1505.

12. Levin M., Rakovskaja M. I., Kreher W. S. The effective thermoelectroelastic properties of microinhomogeneous materials // Internat. J. Solids a. Struct. 1999. Vol. 36. N. 18. P. 2683—2705.

13. Poizat Ch., Sester M. Effective properties of composites with embedded piezoelectric fibers // Comput. Mater. Sci. 1999. Vol. 16. N. 1—4. P. 89—97.

14. Глушанин С. В., Тополов В. Ю., Криворучко А. В. Нетривиальное поведение пьезокоэффициентов 0—3-композиатов "керамика модифицированного PbTiO₃ — полимер" // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. № 20. С. 69—75.

15. Лучанинов А. Г. Пьезоэлектрический эффект в неполярных гетерогенных сегнетоэлектрических материалах. Волгоград: ВолГАСА, 2002. 277 с.

16. Тополов В. Ю., Глушанин С. В. Эффективные электромеханические свойства сегнетопьезоактивных композиатов "кристалл — керамика" на основе (Pb_{1-x}Ca_x)TiO₃ // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. № 7. С. 38—45.

17. Huang J. H., Yu J. S. Electroelastic Eshelby's tensors for an ellipsoidal piezoelectric inclusion // Compos. Engin. 1994. Vol. 4. N. 11. P. 1169—1182.

18. Желудев И. С. Физика кристаллических диэлектриков. М.: Наука, 1968. 464 с.

19. Данцигер А. Я., Разумовская О. Н., Резниченко Л. А. и др. Высокоэффективные пьезокерамические материалы: Справ. Ростов-на-Дону: Книга, 1994. 32 с.

20. Sessler G. M. Piezoelectricity in polyvinylidene fluoride // J. Acoust. Soc. Am. 1981. Vol. 70. N. 6. P. 1596—1608.

21. Тополов В. Ю., Турик А. В. Пористые пьезокомпозиты с экстремально высокими параметрами приема // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 9. С. 26—32.

22. Глушанин С. В., Тополов В. Ю. Особенности формирования электро-механических свойств 0—3-композиатов "сегнетопьезокерамика на основе Pb(Zr, Ti)O₃ — полимер" // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. № 8. С. 67—73.

УДК 681.12.8

С. В. Сажнев, канд. техн. наук,
ОАО НИИ точного машиностроения,
М. А. Фомичёв, В. Н. Тимофеев, д-р техн. наук,
Московский государственный институт
электронной техники

ПРИМЕНЕНИЕ НИТЕВИДНЫХ ПЕРВИЧНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ В ТЕРМОКОНВЕКТИВНЫХ ГАЗОВЫХ РАСХОДОМЕРАХ

Рассмотрены нитевидные первичные полупроводниковые и металлические преобразователи физических величин. Показано, что их использование перспективно в разработке термоконвективных датчиков более точного дозирования газового потока в технологическом оборудовании микрoэлектроники.

Введение

Термин "нитевидные" при описании первичных преобразователей физических величин первоначально был связан с монокристаллами нитевидной формы, обладающими уникальными свойствами. Наиболее существенное из них — прочность [1], которая близка к теоретической. Геометрические размеры и форма нитевидных кристаллов сделали их подходящими для использования в первичных преобразователях деформации, ускорения, давления, температуры, скорости потока.

В [2] описано применение полупроводниковых нитевидных преобразователей из поликремния

(*p*-Si), нитевидных кристаллов твердых растворов кремния — германия (Si — Ge), арсенида кальция (CaAs). При использовании нитевидных кристаллов необходимо проводить отбраковку, поскольку на поверхности могут обозначаться ступени роста кристаллов и при этом снижаться отражательная способность, что может привести к изменению поперечного сечения кристалла. Другие дефекты проявляются при травлении, когда скорость травления на дефектах на 1—2 порядка превышает скорость травления материала без дефектов. Наблюдается множество локальных растравливаний в виде шероховатостей поверхности, иногда соизмеримых с толщиной грани нитевидного кристалла. Кристаллы с указанными дефектами склонны к проявлению нестабильности свойств, поэтому они должны быть отбракованы.

В более широком смысле термин "нитевидные" можно применить к чувствительным элементам нитевидной формы различных сенсоров. На рис. 1 показано микроизображение *p*-Si резистора теплового датчика касательного напряжения [3].

Нагреватель и термочувствительный элемент этого сенсора в виде нити выполнен из поликремния, покрытого фосфорсодержащей защитой. Ширина резистора 2 мкм, толщина 0,45 мкм, длина 20—200 мкм. Показано, что однородный защитный слой гарантирует сопротивление квадрата пленки 50 Ом/□ при общем сопротивлении 1,25—5 кОм при комнатной температуре в диапазоне указанной длины. Резистор расположен по центру плоскости на диафрагме толщиной 1,5 мкм и площадью 200 × 200 мкм. Два металлических проводника соединяют резистор с внешней электроникой.

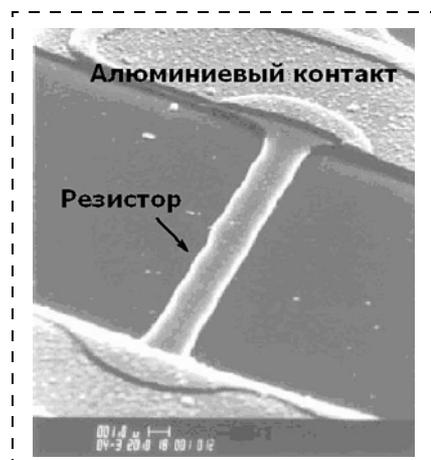


Рис. 1. Поликремниевый резистор

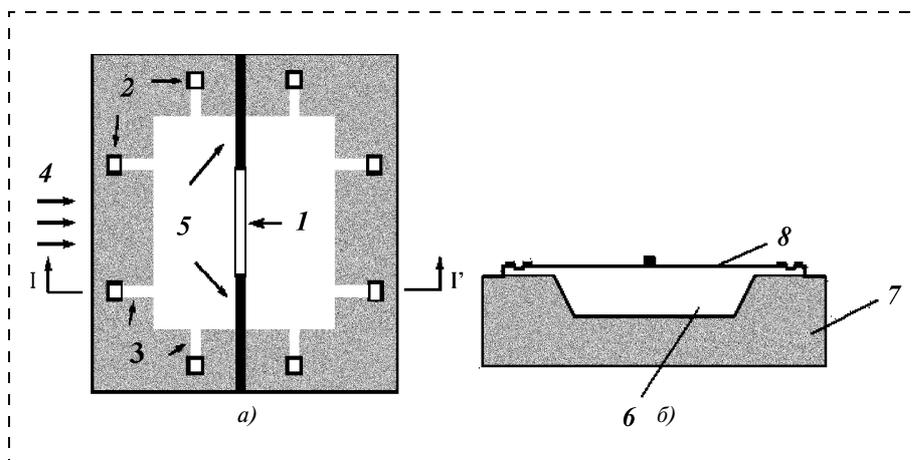


Рис. 2. Схематический вид сенсора в плане (а) и в сечении (б):

1 — поликремниевый резистор; 2 — вытравленные отверстия; 3 — вытравленные каналы; 4 — направление потока; 5 — металлический контакт; 6 — полость; 7 — кремниевая подложка; 8 — SiN_x мембрана

Отличительной особенностью данного сенсора является использование вакуумной полости под диафрагмой, что гарантирует эффективную термоизоляцию между нагревательным элементом и корпусом, которая может быть улучшена за счет увеличения размера полости. Однако такое увеличение может существенно осложнить технологический процесс создания сенсора. Оптимальная глубина полости, предлагаемая авторами разработки, составляет 0,7 мкм.

На рис. 2, а, б схематически представлен вид сенсора сверху и сбоку, а на рис. 3 (см. третью сторону обложки) — его общий вид.

В качестве технической характеристики сенсора можно привести температурный коэффициент сопротивления (ТКС) — 0,13 %/°C (для сравнения у платины — 0,39 %/°C, у вольфрама — 0,45 %/°C). На рис. 4 показана зависимость изменения сопротивления от температуры.

Временная константа сенсора составляет 25 мкс при частоте синусоидального сигнала 9 кГц.

В работе [4] исследовались термосенсоры с нагревательным элементом из платины. Общий вид таких сенсоров приведен на рис. 5 и 6.

В [4] авторы изучали влияние размера диафрагмы, расположенной над воздушной полостью, и влияние щелей на тангенциальную теплопроводность в диафрагме, а следовательно, на частоту отклика сенсора. Полученные результаты свидетельствуют, что тепловые условия течения потока оказывают существенное влияние на указанную характеристику, приводя к образованию верхнего предела частоты отклика, даже если пренебречь теплопотерями в результате передачи теплоты корпусу. При математическом моделировании микросенсора с длиной диафрагмы 200—300 мкм сенсор с воздушной полостью показал лучшие результаты, чем с вакуумной.

Несмотря на высокое сопротивление *p*-Si, его

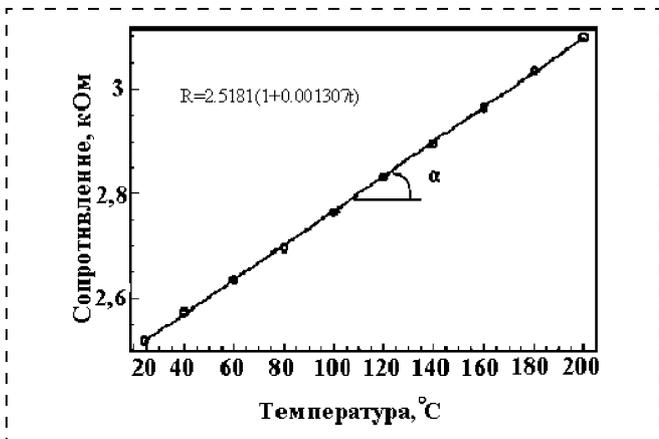


Рис. 4. Температурный коэффициент сопротивления (ТКС) сенсора

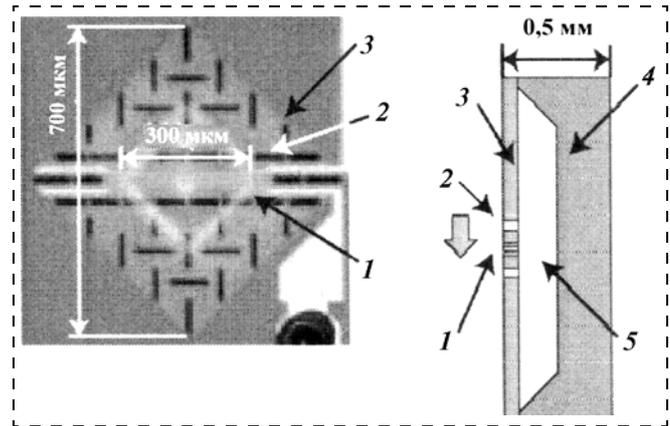


Рис. 5. Микросенсор с диафрагмой 700 мкм:
1 — платиновый резистор; 2 — щель; 3 — SiN_x диафрагма; 4 — кремниевая подложка; 5 — полость

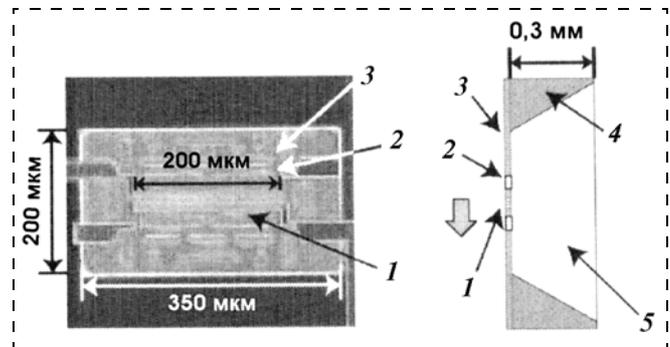


Рис. 6. Микросенсор с диафрагмой 200 мкм:
1 — платиновый резистор; 2 — щель; 3 — SiN_x диафрагма; 4 — кремниевая подложка; 5 — полость

часто заменяют на металлы. В микроконтроллерах, изготавливаемых по технологии Parylene [5, 6], используют золото для нагревательного и чувствительного элементов. На рис. 7 (см. третью сторону обложки) показана схема устройства контроллера потока по технологии Parylene.

На рис. 8 показан график зависимости "напря-

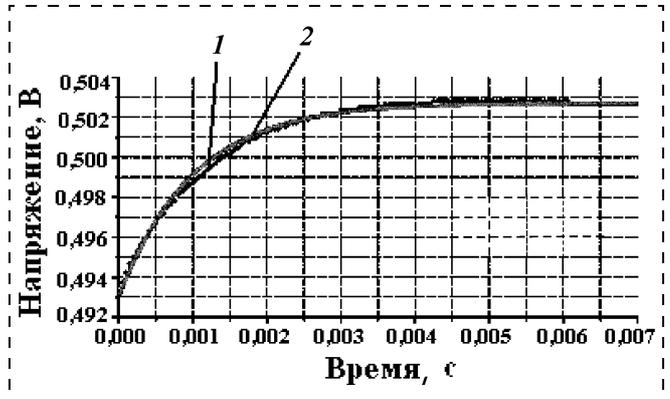


Рис. 8. Зависимость изменения напряжения от времени:
1 — фактический результат; 2 — оптимизирующая кривая

жение — время" для данного сенсора, а на рис. 9 — падение напряжения в зависимости от скорости потока воздуха.

В ряде конструкций сенсоров, выполненных по той же технологии, для увеличения сопротивления чувствительные элементы из золота профилируют в виде зигзага, что показано на рис. 10 и микрофотографии на рис. 11 [6].

В работе [7] исследовался микродатчик газового потока с нагревателем и терморезистивными элементами, уложенными серпантином. На рис. 12 дана микрофотография датчика, полученного по



Рис. 9. Падение напряжения при изменении скорости потока воздуха

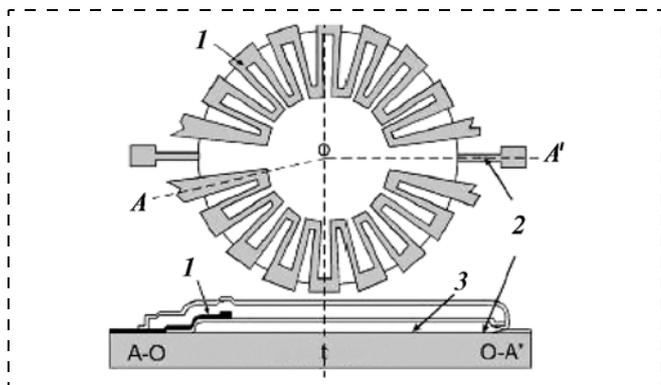


Рис. 10. Вид сверху разреза мембраны и интегрированного металлического резистора:

1 — резистор; 2 — вытравленный канал; 3 — полость

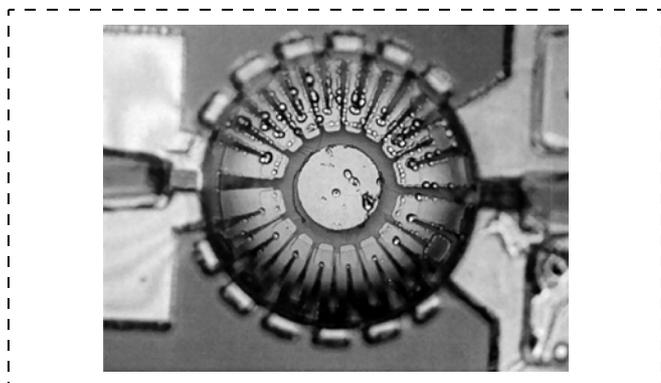


Рис. 11. Оптическая микрофотография

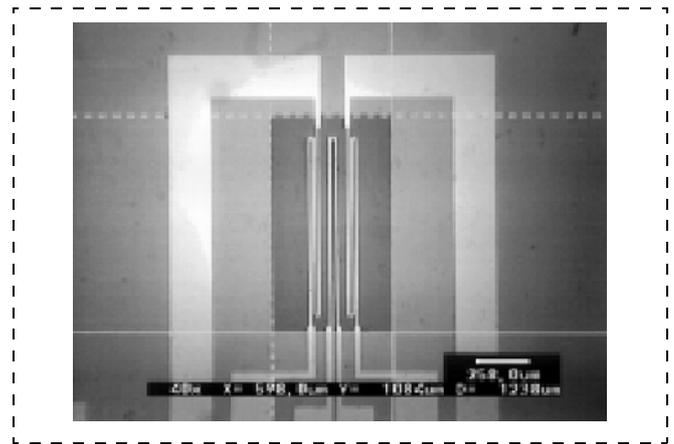


Рис. 12. Микрофотография сенсора с нитевидными чувствительными элементами (светлое изображение), уложенными серпантином на мембране (темный фон)

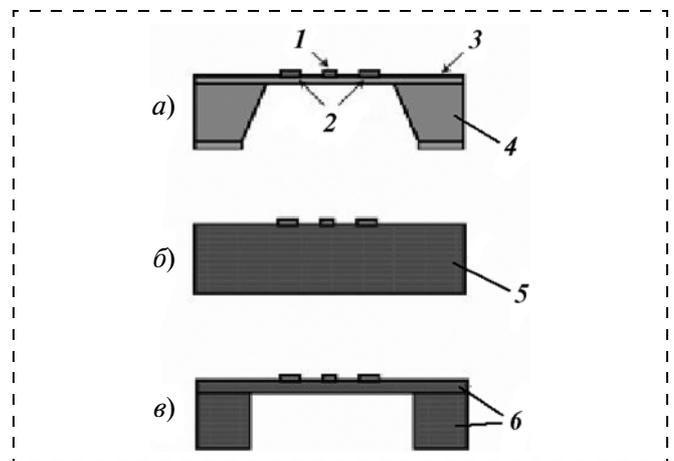


Рис. 13. Варианты конструкции датчика с нагревательным элементом и резисторами из Ni:

а — с Si подложкой и мембраной из SiN_x ; б — с пластиком толщиной 515 мкм; в — с пластиком толщиной 15 мкм и подложкой из пластика толщиной 500 мкм; 1 — нагреватель; 2 — резисторы; 3 — SiN_x мембрана; 4 — кремниевая подложка; 5 — пластик; 6 — пластик

технологии Leister Process Technologies. Нагревательный элемент и резисторы из никеля (Ni) находятся на мембране из нитрида кремния (SiN_x) толщиной 0,5 мкм на подложке из кремния толщиной 500 мкм. Сообщается, что датчик может регистрировать поток от 0,01 до 20 мл/мин.

Авторы проводили сравнение отдельных характеристик сенсора, используя математическое моделирование и реальные замеры, заменяя Si и SiN_x (как материалы подложки и мембраны) на твердый полимерный материал (пластик) в целях полного устранения теплопередачи к подложке.

Рассматривались три возможные конструкции датчика, показанные на рис. 13, а, б.

При замене материала подложки на твердый пластик (рис. 13, б) увеличивается ее толщина, возрастает и толщина мембраны (рис. 13, в).

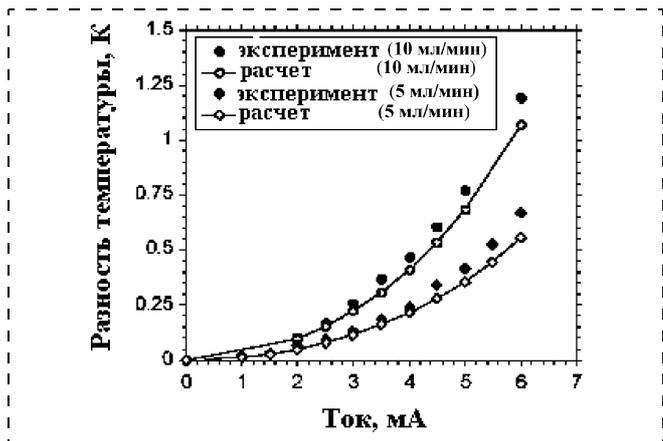


Рис. 14. Сравнение экспериментальных и расчетных значений разности температур для датчика с SiN_x мембраной для скоростей потока 5 и 10 мл/мин

Для оценки поведения трех различных устройств использовалась модель с применением метода конечных элементов. В качестве программы расчета использовался пакет моделирования ANSYS 5.4.

На рис. 14 приведены экспериментальные и расчетные результаты исследования разницы температур между восходящим и нисходящим потоками в зависимости от тока для датчика с Si подложкой и SiN_x мембраной.

Результаты исследования для трех различных устройств в зависимости от скорости потока показаны на рис. 15.

Из анализа результатов следует, что чувствительность датчика с пластиковой мембраной та же, что и у датчика с кремниевой, однако расположение нагревателя и чувствительных элементов на подложке из сплошного твердого пластика приводит к низкой чувствительности.

Описание датчика

Чувствительный элемент, изготовленный по стандартной МЭМС-технологии с использованием литографии, имеет следующие технические характеристики:

- преобразователь состоит из двойного нагревателя по центру мембраны и двух терморезисторов по краям;
- сопротивление нагревателя 200—250 Ом;
- сопротивление термочувствительных резисторов 150—170 Ом; разность сопротивления этих резисторов на одном кристалле не более 1,5 %;

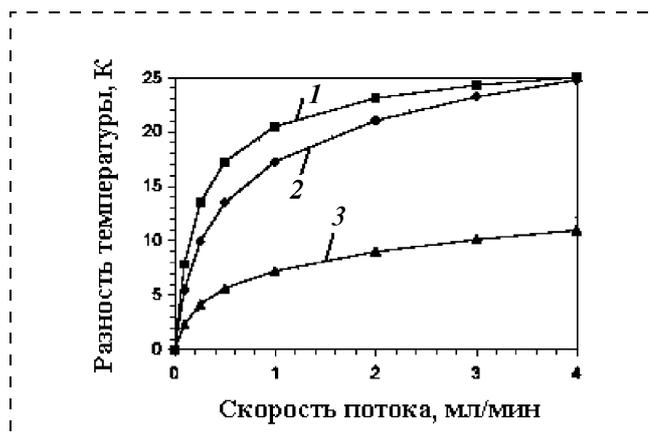


Рис. 15. Изменение разности температур в зависимости от скорости потока для датчика с мембраной (1), для датчика с мембраной из пластика (2), для датчика с подложкой из пластика (3)

- кристалл преобразователя установлен в корпус ТО-5;
- кристалл однозначно ориентирован относительно ключа корпуса преобразователя;
- выводы корпуса расположены ниже верхней поверхности кристалла на 0,2 мм;
- проводники, соединяющие кристалл с выводами, выступают за верхнюю поверхность кристалла не более, чем на 0,1 мм;
- кристалл имеет перфорацию для выравнивания давления на мембране;
- разность сопротивлений нагревателя и резисторов между кристаллами не более 10 %.

Длина активной части нити терморезистивного элемента составляла 1,6 мм, толщина 19 мкм. Топология чипа и его фотография показаны на рис. 16 и 17 (см. третью сторону обложки).

Датчик вмонтирован в металлический корпус, размеры и конструктивные особенности которого подбирались для получения оптимальных характеристик.

Важной характеристикой термоконвективных преобразователей является быстродействие. Для сравнительной количественной оценки исследовались характеристики первичного преобразователя расхода газа с нитевидными чувствительными элементами из платины и традиционные преобразователи в применяемых дозаторах.

Экспериментальные исследования показали, что быстродействие преобразователя составляет 0,45 с, что превышает тот же показатель у традиционных

Быстродействие преобразователей

Параметр	Тип преобразователя						
	PPG-9	PPG-10	PPG-10 (эксп.)	Brooks	Qualiflow	Steck	Исследуемый
Время при открытии потока, с	16,63	13,06	10,19	24,00	15,06	4,28	0,44
Время при закрытии потока, с	16,81	15,00	10,63	24,18	18,88	5,22	0,45

регуляторов. В таблице показаны результаты измерений и для сравнения даны аналогичные характеристики отечественных и зарубежных датчиков.

Из таблицы следует, что быстродействие преобразователя с нитевидным чувствительным элементом на порядок выше лучших зарубежных и отечественных традиционных преобразователей, что подчеркивает перспективность разработки регуляторов с полупроводниковым датчиком.

Однако полученная характеристика накладывает жесткие требования на конструкцию корпуса датчика, которая должна обеспечить (гарантировать) ламинарность измеряемого потока. В противном случае быстродействие датчика будет в значительной степени снижено.

Приведенные в статье данные показывают, что использование нитевидных первичных преобразователей как поликремниевых, так и металлических открывают перспективу в разработке термоконвективных датчиков более точного дозирования газового потока в технологическом оборудовании микроэлектроники.

Список литературы

1. **Ермаков А. П., Яценко С. Н.** Нитевидные кристаллы кремния как модельные объекты для создания первичных преобразователей физических величин // *Sensor&Systems*, 2000. № 5, P. 14–16.
2. **Петров П. П., Дугаев В. К., Новиков А. А.** Нитевидные кристаллы твердых растворов Si–Ge с улучшенными метрологическими характеристиками // Тез. доклада 3-й Всероссийской конференции, Воронеж, 1978. 110 с.
3. **Liu C., Huang J.-B., Zhu A., Jiang F., Tung S., Tai Y.-C. and Ho C.-M.** A Micromachined Row Shear Stress Sensor based on Thermal Transfer Principles // *J. of Microelectromechanical Systems*. 1999. Vol. 8. N. 1. P. 90–99.
4. **Yoshino T., Suzuki Y., Kasagi N., Kamiyama S.** Optimum design of micro thermal flow sensor and its evaluation in wall stress measurements; reprint-MEMS-03, Kyoto, Japan, Jan. 19–23, 2003.
5. **Xie Y., Shih J., Tai Yu-Ch.** Integated surface-micromachined mass flow controller; reprint-California Institute of Technology, Caltech. Micromachining Lab., Electrical Engineer 136-93, 2003.
6. **Fan Z., Engel J. M., Chen J., Liu Ch.** Parylene Surface-Micromachined Membranes for Sensor Applications // *J. of Microelectromechanical Systems*. 2004. Vol. 13. N. 3. P. 484–490.
7. **Cousseau P., Dubochet P., Lerch Ph., Renaud Ph.** A Comparison of the Behavioral Characteristics of Miniature Gas Flow Sensors, Swiss Federal Institute of Technology-Lausane. <http://www.nsti.org/procs/MSM2000/13/T42.09>.

СПРАВОЧНАЯ СТРАНИЦА

УДК 802.0(075.8)

К. Д. Яшин, канд. техн. наук, доц.,
Белорусский государственный радиотехнический университет (г. Минск),
Е. В. Лацапнёв, аспирант
Белорусского национального технического университета (г. Минск)

АНГЛО-РУССКИЙ ТЕРМИНОЛОГИЧЕСКИЙ СЛОВАРЬ ПО МИКРО- И НАНОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКЕ

Даны термины и наиболее широко употребляемые словосочетания и аббревиатуры по микро- и наносистемной технике и технологии их изготовления.

А

Ablation — абляция. Процесс удаления поверхностного слоя материала путем его срезания, шлифовки или испарения. Применяется для получения

требуемых размеров микроэлементов или требуемой толщины слоев (тонкая подгонка размеров). Используется также для обработки поверхности подложки перед формированием на ней верхнего рабочего слоя материала в целях повышения адгезии последнего. Различают плазменную, термическую, механическую, газовую, лазерную абляцию.

Absorption — абсорбция. Процесс поглощения вещества из смеси газов жидкостью. В отличие от адсорбции, абсорбция происходит во всем объеме поглотителя (абсорбента). Поглощаемое вещество — абсорбат. Примеры: абсорбент вода поглощает газы NH₃, HCl, H₂S, Cl₂ (абсорбаты).

Accelerometer — акселерометр. Сенсорное устройство, которое измеряет ускорение или силу гравитации, способную сообщить (вызывать) ускорение. Акселерометр также используется как микродатчик для определения и измерения колебаний.

Accelerated life testing — ускоренное испытание на отказ. Методология в теории надежности МЭМС и НЭМС. Микроизделие подвергается высокому уровню рабочих нагрузок и сильному воздействию окружающей среды, таких как высокая температура и напряжение. Применяется для уско-

рения появления отказа, который обычно проявляется на более поздних стадиях "жизни" микроизделия.

Accuracy — точность (погрешность) измерений. Точность — характеристика измерения, отражающая степень близости его результатов к истинному значению измеряемой величины. Оценкой точности измерений может служить величина, обратная относительной погрешности измерений. Погрешность измерений (ошибка измерений) — отклонение результатов измерений от истинных значений измеряемой величины. Различают систематические и случайные погрешности измерений, а также промахи. Систематические обусловлены главным образом погрешностями средств измерений и несовершенством методов измерений. Случайные обусловлены неконтролируемыми изменениями окружающих условий. Промахи обусловлены неисправностью средств измерений.

Acid — кислота, кислотная среда. Примеры: HF, HNO_3 , H_2SO_4 , H_3PO_4 , CH_3COOH и др.

Actuator — актюатор, микроисполнительное устройство, микродвигатель, микродвижитель. Некоторый возбуждающий механизм, который приводит в действие какое-либо устройство посредством преобразования одного вида энергии в другую (в механическую энергию). Различают актюаторы магнитные, пьезоэлектрические, электростатические, биметаллические и др.

Acoustic electromotive force element — элемент акустоэлектрического силового двигателя. Преобразователь, который преобразует кинетическую энергию акустической волны в электрическую энергию. Иногда в литературе встречаются другие названия этого микроизделия: акустоэлектронный (акустоэлектрический) преобразователь (актюатор).

Action potential — биопотенциал, потенциал действия. Потенциал передачи сигнала (биологического), потенциал сокращения (мускул), потенциал движения (мембраны). Это временное изменение электрического напряжения между стенками клеточной мембраны нерва или клетками мускула. Биопотенциал действия возникает, когда клетка стимулируется нервным импульсом. Биопотенциалы формируют механизм, по которому сенсорные и моторные функции (сигналы) передаются по нервной системе. Понятие используется в нанобиотехнологии.

Active area — активная рабочая зона (слой). Область тонкого слоя кремния на пластине кремния, в которой находятся (сформированы) транзисторы и иные схемы.

Active catheter — активный катетер. Катетер, который может передвигаться и достигать места назначения в ответ на полученные внешние сигналы

управления. Катетер свободно изгибается и меняет направление движения за счет встроенного в него микроактюатора. Катетер — это специальная трубка. Катетеризация — введение катетера в полость тела с диагностической или лечебной целями.

Active layer — активный рабочий слой. Слой микроэлектронного устройства, в котором как электроны, так и дырки являются активными. Например, в тонкопленочных транзисторах тонкая кремниевая пленка — это рабочий слой.

Adenosine TriPhosphate (ATP) — аденозинтрифосфат, аденилпирофосфат. Соль $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_5\text{O}_{13}\text{P}_3$. Природное органическое соединение, состоящее из пуринового основания аденина, моносахарида, рибозы и трех остатков фосфорной кислоты. Универсальный аккумулятор и переносчик энергии в живых клетках. Энергия освобождается при отщеплении одной или двух фосфатных групп и используется при биосинтезе различных веществ, при движении (в том числе мышечном сокращении) и в других процессах жизнедеятельности. Применяют в качестве лекарственного препарата при спазмах сосудов, мышечной дистрофии (доставка лекарств с помощью МЭМС- и НЭМС-роботов). Ведутся работы по применению в качестве источника энергии в нанобиосистемах.

Adhesion — адгезия. Свойство (явление) слипания разнородных твердых материалов, соприкасающихся своими плоскостями. Высокая адгезия к Si у пленки термической двуокиси кремния SiO_2 . Пример относительно низкой адгезии к Si — у пленки молибдена, полученного пиролизом пентакарбонила молибдена. Из-за низкой адгезии наблюдается отслоение пленок от поверхности подложки.

Adhesive bonding — технология соединения материалов посредством адгезионного "слипания", технология адгезионного соединения подложек. Эта технология использует промежуточный слой для скрепления подложек.

Adjustment — настройка, корректировка. Действие, направленное на приведение измерительного микроустройства в состояние рабочего режима. Характеризуется отсутствием систематической ошибки при использовании измерительного устройства.

Adsorption — адсорбция. Процесс поглощения вещества из растворов или газов на поверхности твердого тела или жидкости (адсорбента). То, что поглощается, называется адсорбатами. Пример: поглощение активированным углем или растворами некоторых солей (адсорбенты) определенных газов (адсорбаты).

Aliasing — эффект наложения (одной частоты на другую). Процесс, при котором две или более частоты, кратные друг другу, не могут быть разделены

(выделены друг относительно друга) при проведении процесса дискретизации в аналогово-цифровом преобразователе.

Aligner — система (установка) совмещения и экспонирования. Оптическая система в установке совмещения и экспонирования. Используется для перемещения шаблона (маски) или пластины с промежуточным изображением.

Alignment — совмещение. Подгонка положения, ориентирование в плоскости. Размещение маски (шаблона) и пластины в строго определенном положении относительно друг друга. Проводится путем совмещения специальных меток верхнего слоя (на шаблоне) и нижнего слоя (на пластине). После подгонки положения (совмещения меток, а значит, совмещения рабочих рисунков слоев схемы), светочувствительный фоторезист на пластине подвергается воздействию света, который проходит через прозрачные участки маски (шаблона).

Alloy expansion actuator — актюатор расширения сплава. Микроисполнительное устройство (микро-двигатель, микроактюатор), в котором в качестве движущей силы используется изменение объема сплава посредством сохранения газа/газовыделения. Когда пленка сплава гидрирована (гидрирование — соединение с водородом), сплав расширяется. Это происходит потому, что пространство между атомами металла увеличивается на порядок, что соответствует определенной концентрации окклюдированного (присоединенного) газа. Это явление может быть использовано для применения в актюаторах. Актюатор расширения сплава имеет следующие преимущества: простая конструкция, подходящая для миниатюризации, и свойство самосохранения состояния при выключении питания. Недостатки: слабый ответный сигнал и относительно маленькое смещение. Для компенсации этих недостатков используют дополнительный биморфный актюатор, который деформирует пленки сплава для увеличения смещения. Популярные материалы сплавов для гидрирования — LaNi_5 и TiFe . Кроме того, используются тонкие пленки, полученные вакуумным осаждением или технологией напыления, а также аморфные тонкие пленки, сформированные посредством охлаждения расплава.

Aluminum — алюминий, алюминиевая металлизация. Проводящий металл, используемый в микросхемах для соединения разных частей реализуемого микроустройства.

Ambient — среда. Совокупность окружающих микроустройство условий. Например, состояние температуры, давления, влажности, наличие агрессивных газов и паров.

Amorphous silicon (a-Si) — аморфный кремний. Кроме аморфного различают монокристаллический

и поликристаллический кремний. Отличия во внутренней структуре материала. Слои аморфного образуются при имплантации легирующих примесей в монокристаллический кремний. Имплантированные аморфные слои кремния перекристаллизуются до монокристаллического при последующих термических отжигах по механизму твердофазной эпитаксии.

Amplification — амплификация. В биотехнологии — это обработка, приводящая к увеличению числа копий ДНК. В электронике — это процесс увеличения амплитуды электрического напряжения.

Anchor — якорь. Место, где некоторая составная часть МЭМС-устройства прикрепляется к подложке для предотвращения ее перемещения.

Annealing — отжиг. Вид термической обработки, заключающийся в нагреве металла, сплава или стекла, выдержке при температуре нагрева и последующем медленном охлаждении для удаления внутренних напряжений, для получения менее хрупкого материала или изменения структуры исходного материала. Широко применяется в микротехнологии.

Anisotropic etching — анизотропное травление. Обработка полупроводникового материала (кремния) травлением. При этом травление по различным кристаллографическим направлениям происходит с различной скоростью. Различают также анизотропное травление диэлектрической пленки под литографической маской. Это процесс травления с нулевым смещением. Обеспечивает формирование вертикального профиля края элемента, совпадающего с краем маски. В этом случае травление пленки в горизонтальном направлении под маску не происходит, рисунок переносится с идеальной точностью; это соответствует экстремальной ситуации идеально анизотропного травления.

Anisotropy — анизотропия. Зависимость свойств среды (материала) от направления. Характерна для упругих, тепловых, оптических и других свойств материалов. Пример: анизотропия скорости роста эпитаксиальных слоев кремния по разным кристаллографическим плоскостям приводит к смещению топологического рельефа скрытых слоев.

Anodic bonding — анодное соединение. Термоэлектрохимическое сплавление, метод герметичного бесклевого соединения стекла с кремнием. Кремниевая и стеклянная пластины в контакте нагреваются до 300—500 °С, подается высокое напряжение, происходит миграция ионов стекла в поверхностный слой кремния и пластины соединяются очень прочной, фактически химической связью.

Application-Specific Integrated Circuit (ASIC) —

специализированная интегральная схема. Это схема, разработанная строго для конкретного применения. Например, чип, спроектированный исключительно для управления мобильным телефоном. Этот чип является специализированной интегральной схемой, в то время как микропроцессор не является специализированной интегральной схемой, поскольку его можно применять для разных целей. Хотя понятие "специализированная интегральная схема" относится как к аналоговым, так и цифровым устройствам, но обычно применяется для цифровых схем. Максимальная сложность и, следовательно, функциональность современных специализированных интегральных схем варьируется от 5000 до 100 млн вентилях. Часто специализированные интегральные схемы имеют встроенный 32-битный процессор и иные большие стандартные блоки. Такую специализированную интегральную схему в технической литературе часто называют "системой на чипе". Проектировщики специализированных интегральных схем используют программные языки описания аппаратуры (HDL), такие как Verilog или VHDL, для описания функциональных возможностей схем.

Aqueous — водный раствор какого-либо вещества.

ARDE (Aspect Ratio Dependent Etching) — травление, зависящее от характеристического отношения. Так называют дефект, возникающий при сухом (плазменном) травлении. Дефект формируется из-за разницы в скорости плазменного травления вещества подложки вследствие разного микро-рельефа поверхности этой подложки.

Area array — поверхностная решетка. Компактная технология микросборки и герметизации чипа. Разработана в 90-х годах XX века. По этой технологии выводы для припоя размещаются "по сетке" на поверхности чипа.

Argon — аргон. Инертный газ. Обычно используется в системах охлаждения, системах разбавления реакционных газов или при создании нейтральной (безвоздушной, безкислородной) среды в химических реакторах. Пример: получение низкотемпературных пленок SiO_2 в атмосфере Ar пиролизом с использованием ($\text{SiH}_4 + \text{O}_2$).

Artificial organ — искусственный орган. Это микроустройство (оборудование), которое заменяет неправильно работающий человеческий орган и принимает на себя его функции временно или навсегда.

Ashing — озоление. Метод удаления фоторезиста с помощью плазмы (плазмохимическое удаление фоторезиста).

Aspect ratio — характеристическое отношение. Соотношение геометрических размеров микро-

структуры. Соотношение между структурной высотой и шириной. Например, высота микроструктуры 10 мкм, а ширина 2 мкм, характеристическое отношение 5:1 или 5. Высокое характеристическое отношение соответствует отношению выше 10.

—(**lateral**) — поперечное. Отношение длины микроструктуры в плоскости пластины к ширине структуры в этой плоскости.

—(**vertical**) — вертикальное. Отношение высоты микроструктуры по перпендикуляру к поверхности пластины к толщине структуры в плоскости пластины.

Assembly — сборка, монтаж. Заключительная, очень важная, сложная и крайне ответственная за выходное качество микроустройств стадия полупроводникового производства микросхем или МЭМС-изделий. В ходе сборки (монтажа) устройство (чип) заключается в пластмассовый, керамический, металлический или иной корпус. Существует также и бескорпусная сборка (монтаж).

Astigmatic focus error detection — астигматическое определение отсутствия фокуса. Метод бесконтактного измерения смещения фокуса вдоль оптической оси в фотолитографии. Измерения осуществляются посредством определения степени искажения изображения точки, проецируемой астигматической оптической системой. Астигматизм — искажение изображения оптической системой, связанное с тем, что преломление (или отражение) лучей в различных сечениях проходящего светового пучка неодинаково. Вследствие астигматизма изображение точки становится нерезким. Проецируемая точка изображается размытым эллипсом. Разработаны и эксплуатируются автоматические астигматические системы.

Atomic Force Microscope (AFM) — атомно-силовой микроскоп. Тип сканирующего зондового микроскопа с микроскопическим сенсором силы в качестве зонда. Силовой сенсор — это гибкая микроконсоль с наконечником. Силовой сенсор проводит сканирование микроповерхности образца. Выполняя сканирование, атомно-силовой микроскоп записывает деформацию консоли. По степени деформации консоли можно измерять локальную высоту микрообъекта.

Autonomous distributed control — автономное распределенное управление. Метод управления распределенными объектами. Заранее программируемое многофункциональное логическое управление. Позволяет без оперативного вмешательства извне (без воздействия командного пункта) организовать быстрое и автономное выполнение работы со стороны этих распределенных индивидуальных объектов (например, микророботов).

АННОТАЦИОННЫЕ ОТЧЕТЫ ПО ТЕМАМ РФФИ

В этом номере мы продолжаем публикацию аннотационных отчетов, полученных в инициативных научных проектах в области физики, математики, информатики, механики, химии и биологии и поддержанных Российском фондом фундаментальных исследований (РФФИ) по итогам конкурса 1999 г. Эти отчеты представляют определенный интерес для специалистов в области микро- и наносистемной техники. Общий список работ опубликован в "Информационном бюллетене РФФИ", № 7, 1999 г. (<http://www.rfbr.ru>).

Синтез и исследование новых органических проводящих материалов для молекулярной электроники

Номер проекта: 99-03-32872
Год представления отчета: 2002

Исследованы реакции олигомера 1,3-дитиол-2,4,5-третиона с различными непредельными соединениями, такими как 1,3-циклооктадиен, сорбиновая кислота, дигидропиран, сульфолен, 1,4-бутендиол. Получен ряд 1,3-дитиол-2-тионов, которые в настоящее время невозможно получить другими способами. На основе некоторых из них получены новые необычные тетраиафульвалены (ТТФ).

На основе продуктов алкилирования мезоионной соли 2-(пиперидино)-1,3-дитиолий-4-тиолата различными алкилбромидами синтезированы в несколько стадий различные 1,3-дитиол-2-тионы, -селеноны и далее ТТФ, в частности ТТФ, содержащий две бета-цианоэтильные группы в виде смеси геометрических изомеров. Этот впервые полученный новый ТТФ является прекрасным исходным соединением для введения новых заместителей и получения новых ТТФ.

Впервые получены новые симметричные и асимметричные фторсодержащие ТТФ, содержащие фтор в разных положениях тиобензильного радикала. Для ряда фторсодержащих доноров выращены монокристаллы и проведен их рентгеноструктурный анализ.

Впервые получены ТТФ, включающие в свой состав оксадиазольные фрагменты.

Исследованы циклические вольтамперограммы всех вновь полученных ТТФ, оценены их донорные свойства.

Впервые электрохимически окислен бисэтилендитиотетраиафульвален (ЕТ) в присутствии пикрата тетраэтиламмония, получены электропроводящая соль ЕТ с противоионом пикриновой кислоты, измерена его электропроводность на монокристаллическом образце и проведен рентгено-

структурный анализ. Показано, что соль имеет слоистое строение, анионы пикриновой кислоты сильно разупорядочены. В структуре имеются укороченные межатомные как межцепочечные, так и внутрицепочечные контакты. Выделено две кристаллические формы с полупроводниковым и металлическим типом проводимости.

При окислении ЕТ в присутствии стифната тетраэтиламмония получена электропроводящая соль ЕТ с противоионом стифниновой кислоты, измерена ее электропроводность на монокристаллическом образце и проведен рентгеноструктурный анализ. Показано, что соль имеет слоистое строение. Анионы стифниновой кислоты сильно разупорядочены. В структуре имеются укороченные межатомные как межцепочечные, так и внутрицепочечные контакты. Проводимость носит полупроводниковый характер с низкой энергией активации.

Электрохимически окислен тетраметилтиотетраиафульвален ТМТТФ в присутствии стифната тетраэтиламмония, проведен РСА полученной соли, показано наличие трех кристаллически неэквивалентных молекул ТМТТФ, а также наличие водородных связей между противоионами стифниновой кислоты. Вычислено распределение зарядов на молекулах ТМТТФ.

Химическое окисление ЕТ стифниновой кислотой дает комплекс с необычным кристаллическим строением, с винтообразной упаковкой доноров.

Впервые начато систематическое выращивание катион-радикальных солей ЕТ с противоионами, содержащими алифатические нитрилы. Получены монокристаллы ряда этих солей и измерена их электропроводность.

Предложен электрохимический метод определения примесей в исходном ЕТ.

Естественный институт при Пермском государственном университете.

Органические и гибридные органо-полупроводниковые наноструктуры: электронные и оптоэлектронные процессы и новые пути создания эффективных источников света с электронной накачкой (LED)

Номер проекта: 99-03-32178
Год представления отчета: 2002

За отчетные три года были проведены следующие исследования.

- Построена теория экситонов в квазиодномерных органических кристаллах с сильным перекрытием молекулярных орбит соседних молекул. Теория использована для расчета оптических свойств актуальных для оптоэлектроники кристаллов MePTCDI и PTCDА. Обработка экспериментальных данных позволила определить параметры взаимодействия между экситонами с переносом заряда и экситонами Френкеля. Показано, что в конечных цепочках наряду с "объемными" состояниями образуются также нового типа поверхностные смешанные состояния экситона с переносом заряда и экситона Френкеля.
- В связи с экспериментальными исследованиями переноса энергии в микрорезонаторах была развита теория различных процессов переноса энергии между квантовыми ямами. Рассмотрены случаи слабой и сильной фотон-экситонной связи. Показано, что для достаточно разнесенных квантовых ям основным процессом переноса возбуждений является перенос, обусловленный обменом виртуальными фотонами резонатора. Проведено сопоставление результатов теории с опубликованными экспериментальными данными.
- Была развита теория заряженных френкелевских экситонов в молекулярных кристаллах со структурой антрацена и тетрацена. Показано, что энергия связи заряженных френкелевских экситонов может быть порядка нескольких сотен обратных сантиметров. Таким образом, они могут быть устойчивыми при комнатных температурах в отличие от трионов в неорганических полупроводниках. Рассматриваются оптические свойства заряженных френкелевских экситонов и влияние на них статического электрического поля.
- На примере одномерной решеточной модели, которая соответствует структуре J-агрегата и является также хорошим приближением для квазиодномерных кристаллов, рассчитана зависимость энергии связанного состояния от расстояния между экситонами. Предполагается, что экситонные зоны очень узкие, так что эк-

ситоны можно считать локализованными на конкретных узлах решетки. Проведенные оценки показывают реальность наблюдения таких состояний в спектроскопических экспериментах.

Институт спектроскопии РАН.

Макрокинетические закономерности образования нанопорошков в цепных реакциях пиролиза и окисления неорганических гидридов и свойства этих материалов

Номер проекта: 99-03-32250
Год представления отчета: 2002

Осуществлены реакции распада силана и дихлорсилана в режиме самораспространения фронта реакции с использованием явления химической индукции и следов (1–2 %) кислорода в качестве индуктора.

Определены концентрационные пределы распространения фронта реакции распада. Методами рентгенофазового и электронно-микроскопического исследований выяснены свойства порошков, в том числе — характерный размер частиц (например, 0,3 мкм при 27 кПа), фазовое состояние. Методом ЭПР обнаружены парамагнитные центры, отражающие радикально-цепной характер процесса образования твердой фазы. Химической индукцией в режиме самораспространения фронта реакции получен также порошок оксинитрида кремния из реакционной смеси силана и аммиака со следами кислорода. Разработан высокочувствительный скоростной метод регистрации кинетики образования аэрозоля и расходования исходных реагентов в процессах окисления и пиролиза летучих гидридов, основанный на измерении интенсивности рассеянного света прерываемого лазерного луча при различных длинах волн, а также на абсорбционной спектроскопии. С использованием разработанной методики выявлены основные закономерности образования аэрозолей и пленок в процессах окисления и распада силана, дихлорсилана и моногермана, а также зависимость свойств твердой фазы от кинетического режима процесса его образования. Показано, что зависимость скорости образования аэрозоля от давления является S-разной функцией, усиливающейся с понижением температуры вплоть до имитации скачкообразности. Экспериментально выяснены закономерности перехода процесса между режимами образования пленки и аэрозоля при варьировании начальных условий. Дано теоретическое объяснение обнаруженным особенностям и, в том числе — резкости перехода между режимами. При этом использованы положения развиваемой нами теории неизотермических цепных процессов и теории конденса-

ции Фольмера—Зельдовича—Френкеля. При этом учитывали, что в отличие от рассмотренных ранее в теории конденсации процессов в данном случае конденсация сопровождается цепные реакции окисления и пиролиза, в которых к тому же важна роль гетерогенного развития реакционных цепей. Предложена математическая модель, адекватно описывающая наблюдаемые закономерности в рамках известных расчетных параметров. На примерах шестифтористой серы и SF_2Cl_2 показано, что ингибиторы, замедляя цепные реакции образования

твердой фазы, способствуют уменьшению размеров частиц. Выявлены основные реакции, ответственные за ингибирование. На основании экспериментальных данных предлагается в качестве ингибитора использовать гидразин ввиду его преимуществ перед SF_6 и хладоном. Определена теплота сгорания дихлорсилана. В спектре пламени дихлорсилана обнаружен возбужденный радикал HO_2 .

Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН.

НОВОСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

Новый Манхэттенский проект в области нанотехнологий

Пятнадцать членов партии демократов из Палаты представителей Конгресса США представили на одобрение Палаты документ, описывающий стратегию развития национальной безопасности США в области высоких технологий.

Этот документ в парламентских кругах уже назван "Новым Манхэттенским проектом". В числе отраслей, чей приоритет считается вопросом государственной важности, значатся различные отрасли нанотехнологий. О том, что нанотехнологии могут помочь в борьбе с терроризмом, политикам известно довольно давно. Именно благодаря их стратегическому значению государственный бюджет США на развитие нанотехнологических исследований ежегодно увеличивается.

Также в "Новом Манхэттенском проекте" идет речь об усовершенствовании современных транспортных систем. На базе нанотехнологий демократы предлагают ускорить внедрение топливных элементов в автотранспортную промышленность и использовать нанокompозиты для усиления прочности и в то же время облегчения корпусов машин.

При этом демократы хотят создать автотранспортную инфраструктуру, независимую от нефти, цены на которую неизменно растут. За счет этого, кроме усиления национальной безопасности, планируется усилить экономику страны и сделать ее независимой от колебаний цены на нефть.

Источник:

1. News-Leader: Democrats' document show promise

Германия: нанотехнологии улучшают автомобили

Германское министерство, курирующее исследовательские работы, объявило о намерении инвестировать 38 млн евро в программу *NanoMobil*. Цель программы — исследовать все возможные улучшения автомобильной промышленности с помощью нанотехнологий.

Программа предусматривает исследования по 18 междисциплинарным направлениям для того, чтобы выяснить, какие именно отрасли нанотехнологий выгодно использовать для модернизации современных автомобилей. Как предполагают ученые, машины недалекого будущего будут более экономичными, экологически дружелюбными, комфортабельными и безопасными.

Ранее концерны *BMW* и *Volkswagen* проводили собственные исследования по модернизации своих моделей с помощью нанотехнологий. В будущем новые автомобили будут оснащены рядом встроенных диагностических и мониторинговых наносенсоров, а материалы салона будут антисептическими и самоочищающимися. В 2003 г. *Volkswagen* заключил договор на совместные исследования в области наноматериалов с отделением нанонаук и наноматериаловедения при израильском институте *Weizmann Institute*. Цель исследований — создание поверхностей с низким коэффициентом трения. Эти материалы будут использоваться в подшипниках и редукторах автомобилей, причем трущиеся узлы не нужно будет смазывать. Эффект "сухой смазки" уже давно известен, усилия исследователей направлены на



Рис. 1. Нанесение на автомобиль защитного слоя наночастиц

прикладное применение наноматериалов в рабочих узлах автомобиля.

Концерн *Mercedes-Benz* в 2004 г. использовал для новой модели автомобилей специальный лак с включением керамических наночастиц. Это позволило в 3 раза повысить устойчивость корпуса автомобиля к царапинам. Технология нового лакового покрытия на основе наноматериалов уже опробована, и в 2004 г. сверхпрочный лак появился на некоторых серийных моделях компании. До 2004 г. компания опробовала новое покрытие на 150 разных машинах и нашла его эффективным (рис. 1).

Также, например, с помощью наноматериалов можно добиться усиления жесткости корпуса автомобиля при снижении его массы (рис. 2, см. четвертую сторону обложки).

Некоторые крупнейшие мировые автомобильные компании давно работают в области модернизации полимеров и пластмасс, используемых в автомобилестроении. Так, например, нанокompозиты добавляются в пластик для увеличения его жесткости и пластичности. Первыми экспериментировали с нанотрубками специалисты из компании совместно с нанотехнологической корпорацией *Zuveh*, что привело к созданию велосипеда с облегченной рамой на основе нанотрубчатого композита. Поэтому стремление германского правительства финансировать нанотехнологии в автомобилестроении не лишено перспектив. Пока еще частные инвестиции в нанотехнологии превышают государственные, но в некоторых областях, как это случилось с автомобильной промышленностью в Германии, государство не сдает свои позиции.

Источник:

1. HEISE: Better cars with nanotechnology

Молекула — шаговый актюатор

Команде исследователей из Университета Риверсайд, Калифорния, во главе с Людвигом Бартелсом впервые удалось создать молекулу, которая может прямолинейно перемещаться по ровной поверхности.

Способ передвижения молекулы схож с человеческим. "Шагающая" молекула, по мнению разработчиков, найдет применение в новых системах хранения информации. А сам факт ее существования еще раз подтверждает концепцию того, что можно создать наноразмерную копию мира, в котором мы живем.

Молекула 9,10-дифитоантрацена или ДТА имеет два отростка, действующих как ноги. Получая тепловую энергию, молекула, по очереди переступая "ногами", начинает перемещаться по прямой линии, при этом ей не требуются никакие направляющие или канавки (рис. 3).

Обычно молекулы перемещаются по поверхности хаотично, но в случае с ДТА отростки не дают ей отклоняться при движении. На испытаниях молекула сделала более 10 тыс. "шагов" и не потеряла равновесия ни на одном из них. "Наша работа доказывает, что молекулы могут быть специально созданы, чтобы выполнять определенные динамические задачи на поверхностях", — сказал Бартелс.

Молекула позволит реализовать концепцию молекулярного вычисления, предложенную IBM в 1990-х гг., согласно которой каждое число кодируется позицией молекул на линии. Эта схема схожа с обычными счетами, только уменьшенными в 10 млн раз.

То, что ДТА не нуждается в направляющих, даст возможность создать память в 1000 раз более

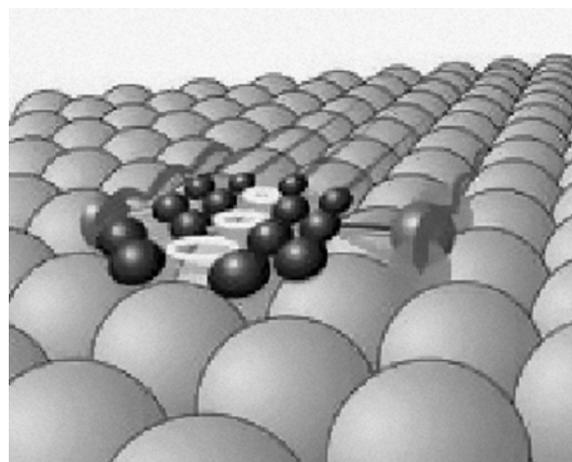


Рис. 3. Модель шагового актюатора на базе ДТА

компактную, чем в существующих устройствах. Сейчас ученые разрабатывают молекулу, которая будет преобразовывать случайные тепловые колебания в энергию для движения, подобно наручным часам, которые сами заводятся от колебаний руки их владельца.

Источник:

1. UCR News: Molecule Walks Like a Human

Золотой наноактюатор

Для обеспечения ряда нанотехнологических исследований часто возникает необходимость манипулирования наночастицами. Известные конструкции оптических нанопинцетов могут работать в воде, только с одной наночастицей и медленно.

В поисках более гибкого решения сотрудники *Johns Hopkins University* (США) изготовили наномотор из металлических нанопроволок, управляемый приложенным переменным электрическим полем. Нанопроволочки из золота, никеля, платины в поперечнике 300 нм и длиной от 2 до 30 мкм формировались электроосаждением в нанопористом трафарете из окиси алюминия. Затем эту форму растворяли в щелочи, а нанопроволочки длиной 15 мкм отмывали в воде и этаноле и помещали в деионизованную воду с проводимостью 2,4 мкСм/см. На кварцевой подложке с помощью лазера формировали четыре золотых электрода для управления образцом с зазорами 150 и 320 мкм (рис. 4). На них наносили 2–4 мкл деионизованной воды.

На электроды подавали напряжение (2,5 В; 80 кГц) со сдвигом по фазе на 90° между соседними электродами. Вращение золотых проволочек в переменном поле, как свободных, так и связанных одним концом с подложкой, наблюдали и измеряли с помощью оптического микроскопа с видеосистемой при частоте 30 кадров/с. Отмечено, что свободные нанопроволочки вращались с большей скоростью при одинаковых режимах питания.

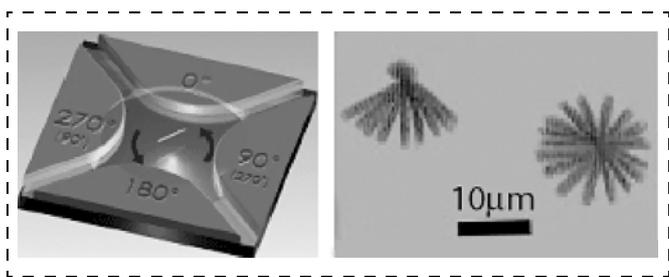


Рис. 4. Принцип действия и микрофотографии наноактюатора

Скорость вращения зависит квадратично как от амплитуды питающего тока, так и от частоты. Достигнута скорость вращения 1803 и 445 об/мин для свободных и закрепленных нанопроволочек, соответственно. Скорость вращения свободных нанопроволочек быстро увеличивается с ростом частоты сигнала до 50 Гц и затем медленно снижается в диапазоне частот 50–300 Гц. Малое тело Рейнольдса ($\sim 10^{-5}$) для нанопроволочек в воде позволяет точно задавать и очень быстро достигать постоянной скорости вращения, менять направление вращения, управлять вращением нанопроволочек с помощью переменного сигнала, задавать полный угол вращения. Скорость вращения нанопроволочек из золота, платины, никеля и углеродных нанотрубок (длиной 5 мкм, диаметром 50 нм) тоже линейно возрастала с квадратом напряжения на электродах, но с разным наклоном, согласующимся с проводимостью материала. Проведенные эксперименты подвели авторов к сборке макета наномотора, суть которого и использование видны из следующего рисунка (рис. 5).

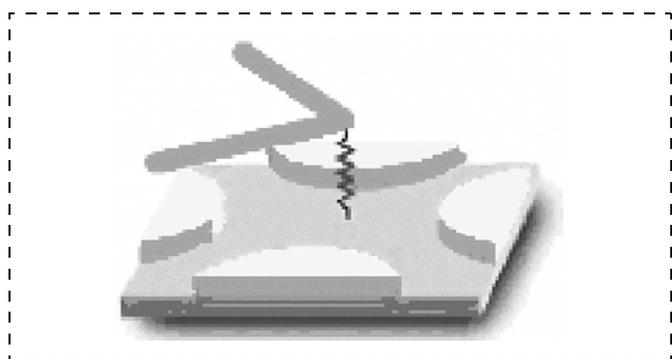


Рис. 5. Принцип действия наномотора

Изогнутая под углом 90° нанопроволочка (золото), связанная ковалентной связью с кварцевой подложкой, является ротором наномотора. Четыре электрода питания образуют "статор". При подаче вращающего напряжения 10 В с частотой 20 кГц на электроды пылинки захватываются концами "ротора" (длина их около 16 мкм), перемещаются, случайно теряются. На последнем снимке видны последовательные положения пылинки по мере ее продвижения "ротором".

Разработанная конструкция может использоваться для перемещения малых частиц, для изучения движения микроорганизмов, для различных микроэлектромеханических приборов.

Источники:

1. Phys. Rev. Lett., 2005, 94, 247208
2. ПерсТ: Управляемое быстрое вращение нанопроволок

Секвенаторы будущего, или протягивание ДНК через нанопоры

Ученые из Иллинойского университета, США, создали ДНК-чип, способный протягивать молекулы ДНК через тонкие нанопоры, используя электрическое поле. Это открытие позволит детально изучить механические свойства ДНК и создать быстродействующие секвенаторы.

Мы разрабатывали устройство, способное записывать последовательности нуклеотидов ДНК по мере того, как биомолекула проходит через тонкую пору в специальной кремниевой мембране, — говорит один из исследователей, Алексей Аксиментьев. — Чем меньше диаметр нанопоры, тем точнее мы можем управлять положением в ней молекулы, и соответственно, наши шансы на прочтение последовательности нуклеотидов увеличиваются".

Как далее объяснил ученый, компьютерное моделирование показало, что, приложив сильное электрическое поле к нанопоре, можно будет протиснуть через нее молекулу ДНК, даже, если диаметр молекулы (в растворе) больше диаметра канала нанопоры! Ученые убедились, что ДНК проходит через нанопору с диаметром даже 2,5 нм. Это выглядит так: электрическое поле сжимает молекулу и протягивает ее через узкое отверстие.

Ученые проводили свои опыты на "клеточном полигоне", состоящем из двуслойной мембраны в растворе электролита K—Cl с использованием Ag/AgCl электродов. В раствор была помещена кремний-нитридная мембрана, в которой исследователи пробили электронно-лучевым методом нанопору диаметром около 1—3 нм. Далее ученые поместили в область отрицательно заряженного электрода молекулы ДНК и приложили напряжение через мембрану, измеряя ток, протекающий по нанопоре. В то время как ДНК проходила через канал транспорт электролита временно прекращался. Ученые оценили силу, которая понадобилась для "протягивания" ДНК через нанопору. Она колебалась от 1 до 300 пН в течение прохождения молекулы через мембрану.

На основании проделанных экспериментов удалось построить математическую модель, которая описала процесс транспорта ДНК. Также был построен ряд визуализационных изображений, представленных на рис. 6 (см. четвертую сторону обложки).

"Одно из потенциальных применений ДНК-нанопоры — в диагностике генетических заболеваний. Мы можем оснастить канал различными протеинами, которые при взаимодействии с ДНК, находящейся в нем, будет изменять силу протягива-

ния биомолекулы. По значению этой силы можно говорить о каких-либо отклонениях от нормы в молекуле и, соответственно, выделять ее поврежденные участки. Возможно, что таким образом можно будет лечить различные генетические заболевания", — говорит Алексей Аксиментьев.

"Другое применение наноустройства — в экспресс ДНК-секвенировании, — продолжает Аксиментьев. Сам факт того, что молекула смогла протиснуться через пору диаметром 1 нм, говорит о сильном взаимодействии нуклеотидов с поверхностью канала, а если мы сможем зафиксировать там ДНК и каким-то образом сканировать нуклеотиды, то получим самый эффективный на сегодняшний день секвенатор".

Сейчас ученые планируют исследовать электрические свойства отдельных фрагментов ДНК, находящейся в нанопоре. Для этого они создают многослойную кремниевую мембрану, которая и будет сканировать молекулу. Как говорит Алексей Аксиментьев, это будет первым шагом по созданию секвенатора ДНК высокого быстродействия.

Ученые сообщили о своем открытии в текущем выпуске журнала *Nano Letters*.

Источник:

1. Nanotechweb: Squeezing DNA through nanopores

Создан наименьший молекулярный наномотор

В университете Колорадо ученые разработали модель наномотора, состоящего из одной сложной молекулы, который приводится в движение внешним электромагнитным полем. Как говорят сами разработчики, наномотор больше всего похож на водяное колесо: на его валу есть две лопасти, а вал "зажат" между двумя молекулами побольше. Наномотор управляем — ученые смогли изменить направление и частоту его вращения, изменяя соответствующим образом электромагнитное поле. "Лопатки" наномотора, состоящие из нескольких десятков атомов, несут противоположные заряды, вот почему ротор вращается в осциллирующем электрическом поле. Ротор проворачивается по оси химических связей, прикрепляющих его к неподвижному основанию.

Как говорят ученые, наномотор может пригодиться в различных отраслях нанoeлектроники, МЭМС-микромашин, биотехнологии, медицины и химического производства. Так, на его основе можно сделать химический наносенсор, молекулярный сортирующий ротор, насосы, перекачи-

вающие жидкости с молекулярной точностью, логический ключ и даже очки, блокирующие лазерный луч.

В марте 2004 г. группа исследователей, возглавляемых ученым Мишлем, синтезировала одну подобную молекулу-ротор на подложке из золота. Тогда же ученым удалось привести ее в движение, заставив вращаться. Но кроме простого вращения, исследователи не смогли управлять ротором. Также на вращение ротора влияли другие параметры: температура среды, давление и интенсивность светового потока. Однако, как показало моделирование, проведенное в сентябре 2005 г., при изменении частоты внешнего электромагнитного поля ротор пропорционально изменяет скорость вращения (рис. 7, см. четвертую сторону обложки).

"Мы очень рады, что компьютерное моделирование обосновало все наши эксперименты и дало ключ к управлению наномотором, — говорит Мишль. — Теперь, получив возможность извне управлять наномотором, мы сможем использовать его в микроэлектронике или медицине".

Пока что моделирование было проведено для трех значений скорости вращения ротора. В модели ученые учли Броуновское движение молекул-оснований, поддерживающих ротор, а также молекулярное точечное трение в местах химических связей, соединяющих ротор с золотым основанием.

Наноротор был смоделирован в программе "Molecular Tinkertoy Kit", разработанной самими учеными еще в 90-х годах прошлого столетия. На платформе этой программы ученые разрабатывали различные наномеханические устройства — стержни, коннекторы, редукторы и другие наноструктуры. Большая часть таких механических систем была смоделирована Эриком Дрекслером в его фундаментальном труде "Nanosystems". Там же он впервые описал наноротор, способный сортировать молекулы, нагнетая в резервуар вещества определенного типа. Таким образом, молекулярный сортирующий ротор Дрекслера (МСР) представляет собой нанонасос, нагнетающий вещества без примесей (рис. 8).

Сложные биологические моторы, встречающиеся в природе, в отличие от созданного Мишлем, характеризуются большими размерами. Так, фермент АТФ-синтеза состоит из трех белков-субъединиц, а бактериальный жгутиковый мотор — из большого числа молекул. То, что ученым удалось сделать наномотор меньше встречающихся в природе — уже большое достижение в области нанотехнологий.

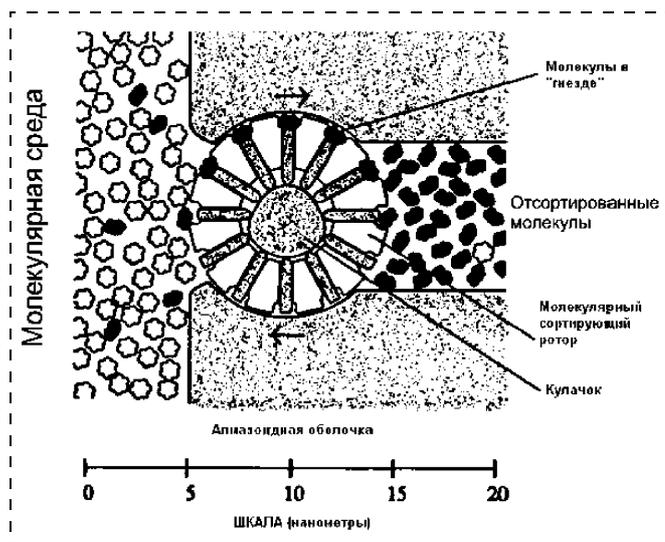


Рис. 8. Молекулярный сортирующий ротор Дрекслера (модель)

Мишль собирается сделать из наномотора насос, нагнетающий газ или жидкость, увеличив площадь "лопаток". Следующий шаг в исследовании наномотора — использование его в качестве генератора электроэнергии. Мишль планирует изготовить ротор с еще большими "лопатками", превратив нанонасос в турбину. Результаты математического моделирования показывают, что это возможно. Как говорит Мишль, моделирование позволило на ранних этапах исследования "отсеять" заведомо нерабочие проекты. Это значительно упростило работу над наномотором, прежде чем его синтезировали.

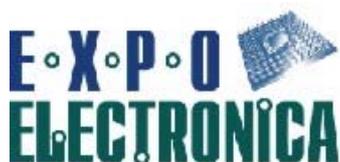
Армия США поддержала проект Мишля для того, чтобы на основе наномоторов сделать очки, защищающие от лазерного излучения. Как предполагает Мишль, излучение лазера заставит ротор повернуться в закрытое положение, блокируя луч.

О своей работе исследователи сообщили в выпуске журнала *National Academy of Sciences* от 4 октября 2005 г.

Также исследователи записали видеоролик (2,5 Мбайт), показывающий, как работает модель наномотора. Его можно посмотреть: <http://www.pnas.org/content/vol0/issue2005/images/data/0506183102/DC1/06183Movie1.mpg>

Источник:

1. PNAS: New Unidirectional Molecular Rotor May Lead To Tiny Sensors, Pumps, Switches



8-я Международная
специализированная выставка
ЭкспоЭлектроника



3-я Международная
специализированная выставка
ЭлектронТехЭкспо

5—8 апреля 2005 г. в СК "Олимпийский" в Москве с успехом прошли 8-я Международная специализированная выставка электронных компонентов и технологического оборудования ЭкспоЭлектроника и 3-я Международная специализированная выставка материалов и оборудования для производства изделий электронной и электротехнической промышленности ЭлектронТехЭкспо.

Организаторы — международные выставочные компании ПРИМЭКСПО и ITE Group Plc при содействии "Электронинторг-С". Официальная поддержка — Министерство науки и образования, Управление радиоэлектронной промышленности и систем управления Федерального агентства по промышленности, Федеральный фонд развития электронной техники, при содействии АО "Российская электроника".

В очередной раз ЭкспоЭлектроника подтвердила свой статус крупнейшей в Восточной Европе выставки данной тематики: абсолютное большинство участников — лидеры отрасли из разных стран, динамичная деловая атмосфера, большое число посетителей-специалистов, оригинальные стенды и яркие маркетинговые акции. За прошедший год выставки выросли на 15 %.

Министр образования и науки Российской Федерации А. А. Фурсенко отметил в приветственном письме участникам и гостям выставки:

"... Ежегодная выставка ЭкспоЭлектроника является значимым событием в области электронных и электротехнических технологий, ...открывает дополнительные возможности для развития отечественной науки и бизнеса, повышения профессионализма кадров. Высокий уровень организации позволяет представить последние тенденции рынка электронных компонентов и способствует продвижению российских торговых марок в одной из самых перспективных отраслей промышленности..."

В этом году на выставочной площади 16 450 м² свои экспозиции представили 458 компаний из 25 стран, а число заочных участников составило 1490 компаний. Впервые на суд взыскательных посетителей свою продукцию выставили производители из Германии, Японии, Гонконга, Голландии,

Италии, Индии, США и Финляндии. Успех выставок подтвердило также большое число посетителей из регионов России, СНГ и дальнего зарубежья. Среди посетителей были представители практически всех крупных городов нашей страны и стран ближнего зарубежья. По данным официального аудита выставку посетили 31 100 специалистов.

Тематические разделы выставки:

- полупроводниковые устройства,
- электромеханические компоненты и технологии соединений,
- встроенные системы,
- дисплеи,
- датчики и микросистемы,
- источники питания,
- печатные платы и другие платы для монтажа,
- пассивные компоненты,
- оборудование и программное обеспечение — тестирование измерений,
- узлы и подсистемы,
- материалы и инструменты для электронной промышленности,
- технологическая мебель,
- информационные и консультационные услуги,
- системы промышленной автоматизации,
- интеллектуальные карты,
- гибридные технологии и диагностические системы.

В первый день выставки прошла пресс-конференция по случаю открытия, в которой приняли участие представители ведущих отраслевых и общепромышленных изданий. На пресс-конференции выступили: Генеральный директор ЦНИИ "Электроника" Б. Н. Авдонин; Исполнительный

директор Федерального Фонда развития электронной техники И. В. Наливкин; Член совета управляющих АРДЭК Ю. В. Герасимов; Член совета управляющих АРДЭК, генеральный директор "Электронинторг-С" А. С. Курляндский; Генеральный директор АРДЭК А. Е. Прийма; Исполнительный директор ООО "Примэкспо" И. А. Любина; Директор выставок ЭкспоЭлектроника и ЭлектронТехЭкспо В. А. Козлова. Участники пресс-конференции представили обзор современного состояния рынка электронной техники, рассказали о новинках, демонстрируемых на выставках в этом году, составе участников и перспективах ЭкспоЭлектроники и ЭлектронТехЭкспо, ответили на многочисленные вопросы журналистов.

На официальной церемонии открытия выставок экспонентов и гостей приветствовали участники пресс-конференции, а также: Начальник управления радиоэлектронной промышленности и систем управления Федерального агентства по промышленности Н. А. Иванчук; Советник руководителя Федерального агентства по промышленности С. А. Муравьев; Председатель совета директоров "АНГСТРЕМ" В. Л. Дшхунян; Генеральный директор ITE Group Plc Я. Томкинс; Генеральный директор ООО "Примэкспо" Э. Струон.

По традиции выставку сопровождала насыщенная деловая программа. В течение 4 дней прошли 12 презентаций и 18 семинаров по актуальным вопросам отрасли. Участники представили новые компоненты для электронной промышленности;

современные технологии производства; новые базовые материалы для требований печатных плат в будущем; новые семейства программируемой логики, микроконтроллеры, флэш-диски и многое другое. Компания "ХИМСНАБ" провела конференцию "Современные технологии для производства печатных плат".

На вечернем приеме организаторы наградили лучшие компании-участницы памятным дипломами и подарками от Большой Телефонной Книги. Компания "ПЕТРОИНТРЕИД" получила приз "За выразительность архитектурного замысла с использованием видеоэффектов", "КОМПЭЛ" — "За оригинальность архитектурного решения", "Универсал Прибор" — "За лучший персонал". "За лучший дебют" организаторы наградили сразу две компании "Spoerle" и "Esselte".

Результаты ЭкспоЭлектроники и ЭлектронТехЭкспо 2005 доказали, что у международных специализированных выставок прекрасные перспективы. Прямо на выставке более 90 % компаний подтвердили свое участие в выставке в следующем году.

Организаторы прогнозируют тенденции дальнейшего стабильного роста, как числа экспонентов, так и выставочных площадей. По предварительным данным, число иностранных участников вырастет на 18—20 %.

В 2006 г. выставки ЭкспоЭлектроника и ЭлектронТехЭкспо пройдут 25—28 апреля.

**22—26 ноября 2005 г. в МИРЭА г. Москва
прошла
МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
"ТОНКИЕ ПЛЕНКИ И НАНОСТРУКТУРЫ"
(ПЛЕНКИ—2005)**

ОРГАНИЗАТОРЫ: Российская Академия Наук; Федеральное агентство по образованию; Федеральное агентство по промышленности; Российский фонд фундаментальных исследований; Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ); Институт радиотехники и электроники РАН; Физико-технологический институт РАН; Институт кристаллографии РАН; НОЦ "Волновые процессы в неоднородных и нелинейных средах"; ОАО "ЦНИИ Электроника".

Председатель оргкомитета – д-р физ.-мат. наук проф. Сигов А. С.

Научные направления конференции:

- | | |
|--|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Физика поверхности. 2. Структурообразование в пленках и межфазные процессы. 3. Математическое моделирование процессов в пленках и наноструктурах. 4. Радиационная физика тонких пленок и наноструктур. 5. Пленки с легирующими и ультрадисперсными добавками. | <ol style="list-style-type: none"> 6. Активные пленочные структуры и гибридные нанокомпозиты. 7. Технологии получения тонких пленок и наноструктур. 8. Защитные и физико-механические свойства пленок. 9. Нанoeлектроника и новые применения пленок и наноструктур. 10. Методы и приборы контроля пленок. |
|--|--|

В конференции приняли участие научные работники, преподаватели, ученые, инженеры, аспиранты. Рассматривались вопросы физики, технологий и применений тонких пленок и наноструктур.

CONTENTS

Ivanov A. A., Maltsev P. P., Telec V. A. *Microsystems Technology of Tendency Development* 2

Microsystems technology of direction development for application of microelectromechanical systems.

Zaporotskova I. V. *Structure and Electron-Energy Characteristics of Modified Alicyclic Nanotubes* 13

Within the framework of molecular cluster model with the closure of uncompensated valences by hydrogen pseudo-atoms and semiempirical method MNDO-PM3 with full optimization of geometrical parameters the electronic structure and spectrum of one-electronic states of hypothetical nanotubes — polyalicyclic tubulenes — are investigated. The modifications of these nanotubes formed by substitution outside atoms of hydrogen on function groups CH_3^- , NH_2^- , PH_2^- , OH^- , SH^- , F^- , NO_2^- , CN^- , $(\text{O})_2\text{Ti}(\text{Cl})_2$, $(\text{O})_2\text{Cr}(\text{O})_2$, $(\text{O})_2\text{Mn}(\text{O})_2\text{OH}$, $(\text{O})_2\text{Fe}$, $(\text{O})_2\text{Ni}$ and $(\text{O})_2\text{Mo}(\text{Cl})_2$ in limits one, central, layer along a circle of a tube, are considered. The features of the electronic and energy spectrum of these nanotubes are discussed.

Bakhtizin R. Z., Wu K.-H., Xue Q.-Z., Xue Q.-K., Sakurai T. *Atomic Scale Characterization of Adsorption and Growth of Noble Metal Films on the GaN(001) Surface* 19

The adsorption and initial stages of growth of noble metal films (Au, Ag) on the GaN(0001) surface with 1×1 -Ga fluid structure were studied by using scanning tunneling microscopy and reflection high-energy electron diffraction. Both Au and Ag atoms show very high mobility and huge diffusion length on the surface which result in the formation of large Au and Ag islands at submonolayer coverage. Au is found to be more reactive with the surface, and a $c(2 \times 12)$ alloy phase is found to coexist with the monolayer Au island. In contrast, Ag is less reactive and it does not form surface alloy with Ga, but it is more diffusive and induces the line-type Ag crystals.

Zhukov A. A., Chetverov Yu. S., Kudrjavzhev P. N., Birulin P. V., Zdobnikov A. E., Babaevsky P. G., Obizhaev D. Yu. *Method of Determination of Thermal Characteristics of Uncooled Semiconductor Microbolometers* 24

The paper presents a method of determination of thermal characteristics of uncooled semiconductor microbolometers based on the use of a pulse mode with current stabilization. The paper studies performance of microbolometers with the following characteristics: pixel size — 48×48 microns, thickness — 0,45 microns, width of legs — $1,6 \div 2,0$ microns, distance to silicon substrate — $2,0 \div 2,5$ microns, re-

sistance of vanadium-oxide-based sensitive element, $100 \div 150$ kilohms. It is concluded that when residual pressure is below $2,5 \times 10^{-3}$ Pa microbolometer thermal conductivity coefficient amounts to $(1,54-2,93) \times 10^{-7}$ W/K; heating capacity — $(1,55-1,92) \times 10^{-9}$ J/K, and thermal time constant (relaxation time) — $5,7 \div 12,4$ ms.

Mukhurov N. I., Efremov G. I. *Modelling and Development of Perspective Microelectromechanical Structures of the Basis of Anodic Alumina* 27

Features of construction of perspective microelectromechanical structures are analyzed on the basis of anodic alumina by results of modelling and theoretical calculation.

Topolov V. Yu., Panich A. E., Kurbanov M. A. *Features of Piezoelectric Properties of 0-3 Composites Based on the PCR-Type Ceramic* 34

Concentration dependences of piezoelectric coefficients d_{3j}^* and g_{3j}^* have been determined for the 0-3 composite, containing a poled ferroelectric ceramic and a piezoactive polymer, within the framework of the model of spheroidal inclusions distributed regularly in a lengthy matrix. The PCR-7M and PCR-8 compositions (named "piezoelectric ceramic from Rostov-on-Don") have been considered as ceramic components. An influence of the shape and volume concentration of the inclusions on the piezoelectric response of the 0-3 composite has been analyzed. A comparison of some results of calculations and experimental data on the related piezo-composites has been carried out.

Sajnev S. V., Fomichev M. A., Timofeev V. N. *Application of Threadlike Primary Converters in Thermal Based Mass Flow Controllers* 39

Threadlike primary semi-conductor and metal converters for physical sizes are considered. It is shown, that their use is perspective in development of more exact batching of a gas stream of thermal-conductivity detectors in the process equipment of microelectronics.

Yushin K. D., Latsanev E. V. *The Terminological English-Russian Mems&Nems Dictionary* 43

In dictionary are given the terms and most widely used phrases and abbreviations of micro- and nanosystems and their fabrication.

For foreign subscribers:

"NANO and MICROSYSTEMS TECHNIQUES" Magazine (*Nano- i mikrosistemnaa tehnika*, ISSN 1684-6419)
Joint-stock company MK-Periodica. E-mail: info@periodicals.ru Tel.: +7(095) 684-5008. Fax: +7(095) 681-3798

The journal bought since november 1999.

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

ISSN 1813-8586.

Address is: 4, Stromynsky Lane, Moscow, 107076, Russia. Tel./Fax: +7(495) 269-5510.

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

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромьинский пер., 4/1. Телефон редакции журнала (495) 269-5510. E-mail: it@novtex.ru

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.
Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.

Дизайнер Т.Н. Погорелова. Технический редактор И.С. Павлова. Корректор Е. В. Комиссарова

Сдано в набор 02.11.2005. Подписано в печать 02.12.2005. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,09. Заказ 58. Цена договорная

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