

# НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 9 ✧ 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.  
Сигов А. С.  
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.  
Пятьшев Е. Н.  
Сауров А. Н.  
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

### НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Дедков Г. В. Физические аспекты взаимодействий зонд—поверхность в сканирующей зондовой микроскопии. Часть II . . . . . 2

### МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Гринькин Е. А., Жуков А. А., Шаповал С. Ю., Бабаевский П. Г. Адгезионное взаимодействие твердых поверхностей и создание полимерных "сухих" адгезивов. Практические аспекты . . . . . 13  
Шалдин Ю. В., Рабаданов М. Х. Мезоструктура пироэлектриков . . . . . 20

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Мамедов А. К. Оценка переходной характеристики электронных схем с операционными усилителями в режиме большого сигнала . . . . . 23  
Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. Часть II. Модели полуклассического подхода . . . . . 26  
Шауцуков А. Г., Кузнецов Г. Д. Моделирование процесса одновременного легирования атомами отдачи и бомбардирующими ионами при бомбардировке структур пленка—подложка. . . . . 36

### ПРИМЕНЕНИЕ МНСТ

Градецкий В. Г., Князьков М. М., Семенов Е. А. Динамические процессы в миниатюрных многозвенных роботах. . . . . 39  
Штырлин А. Ф. Коллоидные электроракетные двигатели для космических микроаппаратов . . . . . 43

### СПРАВОЧНЫЕ СТРАНИЦЫ

Яшин К. Д., Лацапнёв Е. В. Англо-русский терминологический справочник по микро- и наносистемной технике . . . . . 48

СТРАНИЧКА РФФИ . . . . . 50

НОВОСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ . . . . . 52

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>. E-mail: [nmst@zknet.ru](mailto:nmst@zknet.ru)

### ПОДПИСКА:

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

# НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

УДК 620.187:539.25

**Г. В. Дедков**, д-р физ.-мат. наук, проф.  
(Кабардино-Балкарский государственный  
университет, г. Нальчик  
e-mail: gv\_dedkov@mail.ru)

## ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ЗОНД—ПОВЕРХНОСТЬ В СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ.

### Часть II

*На элементарном уровне обсуждаются физические явления и эффекты, происходящие в контактных и бесконтактных режимах сканирования зондовых микроскопов. Дается теоретическое описание и проводятся численные оценки энергетических, силовых и других физических характеристик наноконтактов. Обсуждаются перспективы развития и применения нанозондовых методов в физике и нанотехнологии.*

### Силовые и энергетические характеристики наноконтактов зонд—поверхность

Пользуясь формулами, полученными в части I статьи (ссылки на них отмечаются дополнительной цифрой (I)), сделаем численные оценки. Так, для консервативных компонент сил, соответствующих взаимодействиям с поверхностью зарядов и дипольных молекул (формулы (I.1), (I.2)), получим, полагая  $Ze = 4,8 \cdot 10^{-10}$  (ед. СГСЭ),  $d = 1D = 10^{-18}$  (ед. СГСЭ) и  $z = 1$  нм; получаем значения 0,23 нН и 0,1 пН. Для флуктуационных (I.5), Ван-дер-Ваальсовых (I.6), электростатических (I.8) и магнитостатических (I.10) сил, полагая  $T = 300$  К,  $H = 10^{-19}$  Дж,  $R = 20$  нм,  $z = 1$  нм,  $U = 1$  В,  $m^2 = 10^5$  эрг/см<sup>3</sup>, получаем 83 пН, 0,7 нН, 90 пН и 40 пН. Таким образом, все виды сил весьма близки по значению. В реальной ситуации, однако, оценки, сделанные по формулам (I.1) и (I.8), могут оказаться больше на несколько порядков, поскольку зависят от квадратов заряда и напряжения смещения.

Значение диссипативных сил определяется коэффициентами трения  $\beta$  или  $\mu$ . В динамических режимах сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) при частоте осцилляций зонда 1 МГц и амплитуде 20 нм максимальная скорость зонда близ-

ка к 0,1 м/с, поэтому при  $z \geq 1$  нм для частот электромагнитного спектра в диапазоне  $\omega_0 \gg 100$  МГц

всегда будем иметь  $\beta = \frac{V}{\omega_0 z} \ll 1$ .

В итоге диссипативные силы (I.1)—(I.3) оказываются на несколько порядков меньше консервативных.

Для контактных взаимодействий в соответствии с формулами (I.11)—(I.13) найдем, что для кремниевого зонда ( $E = 140$  ГПа) с приведенным радиусом кривизны  $R = 20$  нм при деформации  $h = 0,2$  нм упругая энергия контакта  $U = 38$  эВ, нормальная сила на контакте  $F = 75$  нН, а контактная жесткость  $k_c = F/h = 375$  Н/м, соответственно. Простейшим механическим аналогом системы кантилевер—зонд—поверхность являются две последовательно соединенные пружины (см. рис. 6 ч. I), поэтому при равновесии значение упругой силы, деформирующей кантилевер, также равно 75 нН. Для типичных жесткостей кантилеверов, используемых в СЗМ (0,1...20 Н/м), основная деформация приходится на балку кантилевера. Так, при жесткости кантилевера  $k_l = 10$  Н/м, его деформация  $h_l = hk_c/k_l = 6,5$  нм, а энергия упругой деформации, соответственно,  $U_l = F^2/2k_l = 281$  эВ.

В динамических режимах силовой микроскопии, когда зонд совершает вблизи поверхности нормальные или латеральные колебания с заданной амплитудой, энергия, запасаемая в контактах в моменты максимального приближения зонда к поверхности, на несколько порядков меньше (~0,1...10 эВ), но упругая энергия деформации кантилевера по-прежнему велика (до нескольких килоэлектрон-вольт), поскольку типичные амплитуды колебаний зондов в динамическом режиме составляют десятки нанометров.

Разрыв адгезионных контактных перемычек при удалении иглы микроскопа от поверхности носит катастрофический характер и всегда сопровождается диссипацией энергии. Ее количественный расчет является сложной задачей. Для приближенной оценки можно воспользоваться формулой  $\Delta E = F_{cr} r_0$ , где  $F_{cr}$  — критическая сила отрыва, а  $r_0$  — атомный радиус. Поскольку критическая сила отрыва в модели с адгезионным гистерезисом  $F_{cr} = 2\pi R\gamma$  ( $\gamma$  — работа адгезии), то  $\Delta E = 2\pi Rr_0\gamma$ , и при  $r_0 = 0,3$  нм,  $R = 20$  нм,  $\gamma = 0,1$  Дж/м<sup>2</sup> получим  $F_{cr} \approx 13$  нН,  $\Delta E = 24$  эВ. При катастрофических проскальзываниях зонда по поверхности, наблюдающихся в эффектах "прилипания—скольжения" (ПС), аналогично, характерная энергия, уходящая на разрыв контактного "пятна" в точке начала

\* Часть I опубликована в № 8, 2006 г.

скольжения зонда и образование нового контактного "пятна" в конечной точке, приблизительно равна  $\Delta E = 2\gamma A$  ( $A$  — площадь контакта), а ее численное значение имеет тот же порядок, поскольку  $A \approx 2\pi Rr_0$ .

Эффекты ПС при латеральном движении, а также разрыва контакта при подъеме зонда являются наноскопическими аналогами процессов перехода от статического к динамическому трению. Соответствующую физическую картину можно представить следующим образом [27, 28]. Первоначальное состояние системы зонд—поверхность характеризуется локальным минимумом потенциальной энергии. Затем, при увеличении латеральной силы на зонде, происходит накопление деформации в контакте, и энергия возрастает до некоторого критического значения, при котором система теряет устойчивость. В результате следующего за этим катастрофического проскальзывания зонд скачкообразно перемещается в новое положение на поверхности, причем на ее атомарно-гладких участках, как показывают эксперименты, это движение повторяет атомную периодичность образца. Проскальзывание сопровождается генерацией колебаний решетки. Если суммарная диссипация энергии за один цикл повторения эффекта ПС равна  $\Delta E = 2\gamma A$ , то средняя сила трения, действующая на зонд, равна  $F_d \approx \gamma A/d$ , где  $d$  — период решетки поверхностной структуры. Вдвое меньший коэффициент взят потому, что образование контактного пятна не влияет на механическую работу, производимую силой трения над зондом. Сопоставляя полученное соотношение с (1.4) и учитывая, что  $F_c = 2\pi R\gamma$ ,  $A = 2\pi Rr_0 = \pi R d$ , для коэффициента адгезионного трения (как отношения диссипативной силы к консервативной) получаем  $\mu = 0,5$ .

Аналогично, при увеличении нормальной силы, стремящейся вывести зонд из контакта и изгибающей кантилевер в обратную сторону от поверхности, возрастание энергии деформации контакта до критической величины вызывает адгезионные катастрофы, связанные с перегруппировкой атомов и отрывом части контактной перемычки, соединяющей зонд с образцом (см. рис. 5, а в ч. I статьи). Такие катастрофы можно визуализировать, наблюдая вариации электрического тока в резистивных или туннельных контактах.

При более жестком вдавливании в режиме отталкивания зонда от поверхности, но без ее "пропахивания", площадь  $A$  контактного пятна существенно зависит от нагрузочной силы, приложенной к зонду со стороны кантилевера, а средняя сила трения при латеральном скольжении связана с площадью  $A$  соотношением  $F_d = \tau A$ , где  $\tau$  — напряжение сдвига [12, 14, 27, 28]. В рамках контактной теории Герца, в частности,  $A = \pi(3FR/4E)^{2/3}$  [42], поэтому коэффициент трения зависит от нагрузки

$F$  как  $\mu = F_d/F \propto F^{-1/3}$ . Эта форма закона "сухого" трения неплохо выполняется в одиночных микроконтактах, если адгезионные силы не слишком велики. В контактах макроскопических твердых тел, когда реальная область соприкосновения включает множество микровыступов, фактическая площадь контакта оказывается пропорциональной силе нагрузки, поэтому коэффициент трения перестает зависеть от  $F$  и выполняется классический закон трения Амонтона—Кулона (см. далее).

В вакуумном динамическом режиме СЗМ диссипация механической энергии, в основном, связана с потерями на внутреннее трение в кантилевере. Так, в вакууме собственная добротность кантилеверов имеет значение порядка  $Q = 10^4 \dots 10^5$ , поэтому за один период колебаний потери на внутреннее трение составляют  $\Delta E = 2\pi U_l/Q = 0,6 \dots 6$  эВ (при  $U_l \approx 10$  кэВ), а потери на разрывы динамических контактов с поверхностью еще меньше. При колебаниях в воздушной и жидкой средах добротность снижается до  $10^2$ — $10^3$ , и подавляющая часть потерь механической энергии приходится на вязкое трение (60...600 эВ за период). Отсюда ясно, что для диссипативной силовой спектроскопии контактов зонда с поверхностью динамический режим в газовой и жидкой средах малоприменим, поскольку "полезная" часть энергетических потерь, связанная с контактом, мала по сравнению с общими потерями.

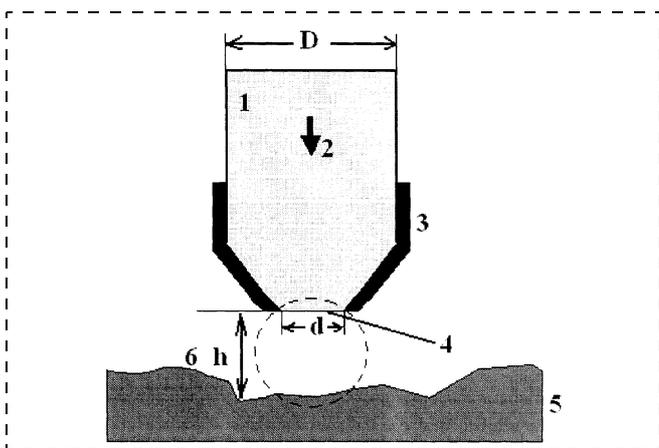
### Эффекты ближнего электромагнитного поля

Структура электромагнитного поля вблизи наночастиц или выступов на поверхности твердых тел существенно отличается от таковой внутри макроскопических тел или в свободном пространстве. Для СЗМ особое значение имеет так называемое "ближнее" электромагнитное поле контактирующих тел, которое, в частности, порождается квантовыми и тепловыми электромагнитными флуктуациями поляризации и намагниченности. Его зависимость от расстояния до поверхности является экспоненциальной:  $E \sim \exp(-kz)$ , где  $k$  — характерное волновое число. Этим объясняется невозможность отрыва ближнего поля от тел и распространения в свободном пространстве. По порядку величины  $k \sim 1/R$ , где  $R$  определяется типичным размером шероховатостей или, для плоских участков поверхности, длиной волны поверхностных возбуждений. В общем случае моды ближнего поля характеризуются волновыми векторами  $k \gg \omega/c$  ( $\omega$  — частота,  $c$  — скорость света в вакууме). В отличие от этого моды "дальнего" электромагнитного поля (обычно называемые "радиационными") характеризуются обратным соотношением  $k \leq \omega/c$ , а электромагнитному излучению в вакууме соответствует простейшее дисперсионное соотношение  $k = \omega/c$ .

Вблизи металлических поверхностей зона ближнего поля формируется, в основном, полем поверхностных плазмонов и простирается на несколько десятков нанометров от поверхности, а вблизи диэлектрических поверхностей, поддерживающих инфракрасные поверхностные моды, — на расстояния до нескольких микрометров. С одним из проявлений флуктуационного ближнего поля мы уже встречались при обсуждении механизма возникновения консервативных и диссипативных Ван-дер-Ваальсовых сил. Другой эффект той же природы касается радиационного теплообмена между телами. О нем будет рассказано в следующем разделе.

Помимо этого, ближнее поле влияет на структуру электронных уровней атомных частиц, локализованных вблизи поверхностей. Это проявляется в изменении частоты и ширины линейчатого излучения, испускаемого и поглощаемого атомами, и позволяет управлять ими и движением атомов целенаправленным образом, изменяя распределение электромагнитного поля в пространстве с помощью лазерного излучения.

Искусственное ближнее поле, создаваемое вблизи нанозондов, используется в сканирующем ближнепольном оптическом микроскопе, в котором оптическое излучение лазера входит в широкую часть зонда, а выходит через его узкую (апертурную) часть, обращенную к исследуемой поверхности, причем диаметр апертуры значительно меньше длины волны падающего излучения. Типичный зонд СБОМ (рис. 1) представляет собой заостренное оптическое волокно, наружная поверхность которого, за исключением вершины конуса, покрыта непрозрачным слоем металла. Часть светового потока, распространяющегося по волокну, проходит через



**Рис. 1. Схема волоконнооптического зонда СБОМ [17]:**  
 1 — заостренное оптическое волокно (размер апертуры  $d$  преувеличен); 2 — пучок лазерного излучения с длиной волны  $\lambda$ ; 3 — металлическое покрытие; 4 — выходная апертура ( $d \ll \lambda$ ); 5 — образец; 6 — расстояние  $h$  между исследуемой поверхностью и апертурой зонда ( $h \ll \lambda$ ). Пунктиром показана область ближнепольного контакта

диафрагму в металлическом экране и достигает поверхности образца, располагающегося в области ближнего поля зонда. Если расстояние  $h$  до поверхности образца и радиус  $d$  диафрагмы удовлетворяют условию  $z, d \ll \lambda$ , где  $\lambda$  — длина волны излучения, то диаметр светового пятна на образце близок к диаметру диафрагмы, значение которого фактически определяет разрешение прибора. Фактор экспоненциального убывания ближнего поля за диафрагмой ( $E \sim \exp(-kz)$ ) в данном случае близок к  $k^{-1} = 2a$ .

С физической точки зрения функционирование СБОМ основано на взаимодействии мод ближнего электромагнитного поля, связанных с зондом, и поверхности образца. При этом часть энергии ближнего поля трансформируется в излучательные (радиационные) моды, регистрируемые фотоприемником в дальней зоне [20]. Контраст изображений, получаемых в СБОМ, определяется процессами отражения, преломления, поглощения и рассеяния света, зависящими от локальных оптических свойств образца, т. е. все эти свойства могут визуализироваться при сканировании зондом поверхности.

В основных режимах СБОМ используются схемы регистрации отраженного или проходящего через образец излучения внешними фотоприемниками, или излучение собирается самим зондом. Существенно, что информация о коэффициентах, характеризующих указанные процессы, принципиально не может быть получена обычными оптическими методами, в которых используются радиационные моды электромагнитного поля.

#### Радиационный теплообмен и диссипация механической энергии зонда

В случае вакуумного контакта при наличии разности температур  $\Delta T$  между телами возникает радиационный теплообмен. Если бы зонд был абсолютно черным телом и имел размеры, превышающие характерную длину волны теплового излучения  $\lambda_T$ , соответствующую максимуму распределения энергии в спектре излучения абсолютно черного тела, то при помещении его в вакуумный фон, заполненный равновесным излучением с другой температурой, скорость радиационного охлаждения (нагрева) определялась бы законом Стефана (для определенности температуру зонда принимаем равной  $T + \Delta T$ , а температуру равновесного вакуумного излучения —  $T$ , причем  $\Delta T \ll T$ ):

$$dQ/dt = 4\sigma T^3 S \Delta T, \quad (1)$$

где  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-5}$  эрг/см<sup>2</sup>·с·К<sup>4</sup> — постоянная Стефана, а  $S$  — площадь поверхности зонда. В данном случае перенос тепловой энергии осуществляется радиационными (дальними) модами электромагнитного поля. Однако при комнатных и более

низких температурах длина волны равновесного теплового излучения  $\lambda_T$  превышает 10 мкм, поэтому для зондов с радиусами кривизны в десятки нанометров, применяемых в СЗМ, формула (1) не выполняется, а радиационный теплообмен с фоновым излучением осуществляется ближними модами электромагнитного поля. В отличие от (1) для сферической наночастицы с радиусом  $R$ , помещенной в вакууме в равновесное электромагнитное излучение, скорость теплообмена приближенно равна<sup>1</sup>

$$dQ/dt \approx k_B \Delta T \frac{c}{\lambda_T} (R/\lambda_T)^3. \quad (2)$$

При записи формулы (2) предполагается, что выполняется условие  $k_B T/\hbar\omega_0 < 1$ , где  $\omega_0$  — характерная частота спектра поглощения электромагнитного излучения частицей, причем  $\lambda_T = c/\omega_0$ . Интересно отметить, что зависимость от длины волны  $\lambda_T$  в (2) совпадает с аналогичной зависимостью для интенсивности рэлеевского рассеяния электромагнитного излучения сферической частицей, но, в отличие от (2), мощность рэлеевского рассеяния пропорциональна шестой степени радиуса. Напомним, что при рэлеевском рассеянии речь идет о взаимодействии радиационных мод электромагнитного поля с частицей.

Если зонд оказывается в зоне ближнего поля поверхности твердого тела с другой температурой, то скорость теплообмена между ними резко возрастает. Ввиду внешней аналогии с эффектом туннелирования электронов (см. далее) механизм теплообмена данного типа называют "туннелированием фотонов". Термин "туннелирование" используется потому, что в вакууме электромагнитные волны с такой длиной и волновым вектором не распространяются.

Выражение для скорости теплообмена  $dQ/dt$  сферической наночастицы с радиусом  $R$  и плоской поверхности можно найти из анализа размерностей аналогично тому, как была получена формула (I.3) для диссипативной флуктуационно-электромагнитной силы. При условии  $\alpha = k_B T/\hbar\omega_0 \geq 1$  с точностью до численного множителя порядка единицы результирующая формула имеет вид (подробнее см. [33])

$$dQ/dt \approx k_B \Delta T \frac{R^3}{z^3} \omega_0, \quad (3)$$

а при  $\alpha < 1$  содержит добавочный малый фактор  $\alpha^3$ . Нетрудно видеть, что (2) тождественно совпадает с (3) при  $z = \lambda_T$ . Это еще раз подчеркивает тот факт,

<sup>1</sup> Более общая формула была получена в работе Dedkov G. V., Kyasov A. A. // Phys. Lett A339(2005)212.

что зона "ближнего" поля вокруг частицы, в которой осуществляется интенсивный радиационный теплообмен с внешними телами, ограничена областью расстояний  $r < \lambda_T$ .

Если частица движется со скоростью  $v$ , то общее выражение для  $dQ/dt$  включает также динамические поправки, пропорциональные четным степеням скорости, а для параболического зонда формула (3) модифицируется заменой  $R^3/z^3 \rightarrow R/z$ , где  $R$  и  $z$ , как и в (I.6), (I.8), (I.10), — радиус кривизны параболоида и расстояние его апекса от поверхности.

Хотя при малых размерах частиц формула (1) утрачивает силу, интересно сравнить между собой скорости охлаждения  $dQ/dt$ , предсказываемые фор-

мулами (1) и (3). Полагая  $T = 300$  К,  $\omega_0 = \frac{k_B T}{\hbar} = 3,9 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ,  $R = z = 10$  нм, для их отношения получаем  $\sim 10^{-5}$ . Таким образом, радиационный теплообмен модами "ближнего" поля осуществляется значительно интенсивнее, чем модами "дальнего" поля, характерными для закона Стефана, если частица способна хорошо поглощать тепловые моды.

Поскольку причиной возникновения радиационного теплового потока (2), (3) являются электромагнитные флуктуации, то диссипация механической энергии зонда и его теплообмен с поверхностью образца связаны между собой и с внутренней энергией электромагнитного поля. Соотношение между ними имеет форму закона сохранения энергии и в отсутствие излучения электромагнитных волн во внешнее пространство в лабораторной системе координат записывается в виде (здесь и далее подразумевается нерелятивистский случай) [33]

$$-dW/dt = dQ/dt + F_x v, \quad (4)$$

где  $W$  — энергия флуктуационного электромагнитного поля;  $Q$  — тепловая энергия зонда;  $F_x$  — латеральная сила, приложенная к зонду (в случае торможения зонда ее знак отрицателен). В собственной системе отсчета зонда аналогичное выражение имеет вид

$$-dW'/dt' = dQ'/dt' = dQ/dt. \quad (5)$$

При записи (5) учитывается, что при нерелятивистском движении зонда  $t = t'$ ,  $Q = Q'$ , т. е. в обеих системах отсчета время и количество теплоты инвариантны. Формула (4) имеет очевидный физический смысл: работа электромагнитного поля над зондом в лабораторной системе отсчета расходуется на изменение его внутренней энергии (нагрев) и на изменение кинетической энергии центра масс. В системе покоя зонда, очевидно, работа поля расходуется только на его нагрев (ф-ла (5)). В замкнутой системе зонд—поверхность общее уравнение

теплового баланса ( $Q^{(s)}$ ) — тепловая энергия образца) принимает вид:

$$dQ^{(s)}/dt = -dQ/dt - F_x v. \quad (6)$$

В соответствии с (6) нагрев поверхности может осуществляться как прямым потоком теплоты от зонда, так и теплотой, выделяющейся при его торможении (поскольку  $F_x < 0$ ). Формула (6) имеет общий смысл, поскольку не зависит от конкретного вида взаимодействия между зондом и поверхностью. В частности, для жестких мультиполей (электрических и магнитных) радиационный нагрев отсутствует ( $dQ/dt = 0$ ), поэтому из (6) следует, что их торможение сопровождается нагревом поверхности (за исключением той части энергии, которая может расходоваться на вращение мультиполей).

### Термические эффекты

Тепловое равновесие в контактах зондов СЗМ с поверхностью является скорее исключением, чем правилом. Это обусловлено возможностью локальных вариаций температуры на поверхности образца, которые зонд "чувствует" при сканировании, а также тепловыделением в результате неупругих и релаксационных процессов в зоне контакта. Нагрев может создаваться также искусственным путем. Так, в СБОМ нагрев зондов лазерным излучением может привести даже к их плавлению [20].

Простейшим, но весьма существенным следствием нагрева является тепловое расширение. Например, для коммерческого кремниевого зонда [26] длиной 10 мкм, учитывая, что линейный коэффициент теплового расширения кремния при  $T = 290$  К равен  $2,5 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ , увеличение температуры на 10 К приведет к сокращению расстояния между зондом и образцом на 0,25 нм, что значительно повлияет на силовое взаимодействие и (или) значение туннельного тока (см. далее формулу (15)).

Внешние поверхности зондов часто покрываются пленками других материалов, поэтому при соответствующих тепловых характеристиках "активная" часть зонда вблизи апекса может стать локализованным источником (стоком) тепла. Так, сферическая частица (простейшая модель "активной" части зонда СЗМ) с радиусом  $R$  при повышении температуры на  $\Delta T$  обладает избыточной тепловой энергией  $\Delta Q = \frac{4}{3} \pi R^3 \rho C_p \Delta T$ , где  $\rho$  и  $C_p$  — плотность и удельная теплоемкость материала. В частности, кремниевая частица с радиусом 20 нм при нагреве на  $\Delta T = 1$  К ( $\rho = 2330 \text{ кг/м}^3$ ,  $C_p = 700 \text{ Дж/кг} \cdot \text{К}$ ) имеет избыточную энергию 341 эВ. Такой же порядок величины, как следует из ранее сделанной оценки, имеет механическая энергия, запасаемая при деформации кантилевера.

В силу малых размеров частиц формальное время релаксации их температуры тоже мало, но конкретное значение его зависит от преобладающего механизма теплообмена. Для СЗМ наибольшее значение имеет радиационный теплообмен через моды ближнего поля и контактный. Последний может осуществляться через газ (если зонд находится в атмосфере), через жидкие пленки, возникающие на поверхностях, и в жестких атомных контактах зонда с поверхностью. Надо также учитывать, что теплообмен в контактах с жидкостью имеет место не только при специальном погружении образца в жидкую среду, но и при работе на воздухе, поскольку даже при небольшой влажности на поверхности образца образуются жидкие пленки [23].

Если радиационный теплообмен зонда с поверхностью осуществляется модами ближнего поля

(формула (3) с коррекцией  $\frac{R^3}{z^3} \rightarrow \frac{R}{z}$  для параболического зонда), то при принятых выше параметрах кремниевой частицы  $z = 1$  нм и  $\omega_0 = 10^{14} \text{ с}^{-1}$  время радиационного охлаждения составит  $2 \cdot 10^{-9} \text{ с}$ . В жестком контакте скорость теплообмена существенно зависит от площади контактного пятна  $A$ , которая, в свою очередь, зависит от приложенной к зонду нагрузочной силы  $F$ . Связь между  $A$  и  $F$  обсуждалась ранее. Учитывая, что скорость теплообмена определяется законом Фурье  $\Delta Q/dt = A \lambda \Delta T / \Delta z$ , где  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности (для кремния  $\lambda = 150 \text{ Вт/м} \cdot \text{К}$  при  $T = 300 \text{ К}$ ), при площади контакта  $A = 3 \text{ нм}^2$  и  $\Delta T / \Delta z = 0,1 \text{ К/нм}$  время охлаждения сферической частицы кремния ( $R = 20 \text{ нм}$ ) в контакте с поверхностью кремния (т. е. при силе нагрузки 8,7 нН) составит  $1,2 \cdot 10^{-9} \text{ с}$ . Примерно таким же будет время охлаждения через жидкие пленки и вследствие газового теплообмена. В последнем случае, хотя теплопроводность воздуха на три—четыре порядка меньше теплопроводности конденсированных сред, общая скорость теплопередачи увеличивается за счет большей площади контакта зонда и кантилевера с окружающим воздухом.

Для протяженного зонда длиной  $l$  с неоднородным распределением температуры время выравнивания температуры  $\tau = l^2/a$ , где  $a$  — коэффициент температуропроводности (коэффициент "диффузии теплоты"). В этом случае для кремниевого зонда с  $l = 10 \text{ мкм}$ ,  $a = 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$  получим  $\tau = 10^{-6} \text{ с}$ . Так как в практике СЗМ часто используются динамические режимы с периодом осцилляции зондов того же порядка, то при определенных условиях возможны параметрические резонансные эффекты в движении и взаимодействии зондов с поверхно-

стью, инициированные наличием температурных волн и других эффектов нагрева.

При оценках температурных условий в контактах удобно использовать электротепловую аналогию, основанную на сходстве законов Фурье и Ома для процессов передачи теплоты и протекания тока:

$$\frac{dq^{(e)}}{dt} = I^{(e)} = \frac{\Delta U}{\Delta x} \frac{S}{\rho} = \frac{\Delta U}{R_e}; \quad (7)$$

$$\frac{dq^{(h)}}{dt} = I^{(h)} = \frac{\Delta T}{\Delta x} S \lambda = \frac{\Delta T}{R_h}, \quad (8)$$

где величины с индексом "e" относятся к электрическому заряду ( $q^{(e)}$ ) и току ( $I^{(e)}$ ), а с индексом "h" — к количеству и потоку теплоты;  $\Delta U$  и  $\Delta T$  — падение напряжения и разность температур на концах проводника (зонда), характеризующегося сечением  $S$  и длиной  $\Delta x$ ;  $\rho$  и  $R_e$  — удельное и полное электрическое сопротивление проводника соответственно;  $\lambda$  и  $R_h$  — коэффициент теплопроводности и тепловое сопротивление. Размерности  $R_h$  и  $I^{(h)}$ , соответственно, [К/Вт] и [Вт]. Наряду с понятием термического сопротивления используется понятие термического кондактанса  $G = 1/R_h$ . Кроме того, поскольку электрический заряд накапливается электрической емкостью  $C_e$ , а тепловая энергия — теплоемкостью  $C_h$ , то в дополнение к (7) и (8) записываются уравнения для определения значения электрического заряда и количества тепловой энергии:

$$q^{(e)} = C_e \Delta U; \quad (9)$$

$$q^{(h)} = C_h \Delta T. \quad (10)$$

Рассмотрим в качестве примера простейшую одномерную модель стационарного теплового контакта, соответствующую системе кантилевер—зонд—поверхность. Обозначим через  $T_c$ ,  $T_t$ ,  $T_s$  температуры кантилевера, зонда и поверхности, а через  $R_c$ ,  $R_s$  — тепловые сопротивления участков кантилевер—зонд и зонд—поверхность (рис. 2). В стационарном режиме передачи теплоты от зонда к поверхности (и наоборот) тепловые токи через сопротивления  $R_c$ ,  $R_t$  очевидно равны между собой, поэтому в соответствии с (8) получим

$$\frac{T_c - T_t}{R_c} = \frac{T_t - T_s}{R_s}. \quad (11)$$

Из выражения (11) следует, что температура зонда

$$T_t = \frac{T_s}{(1 + \theta)} + \frac{\theta}{(1 + \theta)} T_c, \quad \theta = \frac{R_s}{R_c}. \quad (12)$$

При  $\theta \rightarrow 0$  температура зонда совпадает с температурой поверхности, а при  $\theta \gg 1$  — с темпера-

турой кантилевера. Поскольку

$$\theta = \frac{R_s}{R_c} = \frac{\lambda_c}{\lambda_s},$$

где  $\lambda_s$ ,  $\lambda_c$  — коэффициенты теплопроводности соответствующих материалов, то при  $\theta \gg 1$  теплообмен контакта зонд—поверхность гораздо меньше теплообмена кантилевера с держателем. В этом случае точное измерение температуры поверхности зондом затруднено. В оптимальном режиме должно выполняться условие  $\theta \ll 1$ , а точность локального измерения температуры будет зависеть от значения  $T_t - T_s$ , с одной стороны, и от значения  $\theta$  — с другой.

Временной ход температуры зонда можно рассчитать, рассматривая его как температурный сенсор, характеризующийся внешним тепловым сопротивлением  $R_{ex}$ , учитывающим теплообмен с внешними телами, и теплоемкостью  $C$ . Время релаксации температуры вследствие теплового контакта  $\tau_{ex} = CR_{ex}$ . Если внешнее тепловое сопротивление зонда значительно больше внутреннего, то распределение температуры зонда однородно, а ее зависимость от времени определяется очевидным уравнением

$$\frac{dT}{dt} + \frac{T}{\tau_{ex}} = \dot{\theta}, \quad (13)$$

где  $\dot{\theta}$  — скорость внешнего нагрева (электрическим током, световым излучением, и т. д.). Если, напротив, внутреннее тепловое сопротивление зонда больше, чем внешнее, то распределение температуры по зонду неоднородно и его можно найти при решении уравнения теплопроводности (с необходимыми граничными условиями)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T + \dot{\theta}. \quad (14)$$

Для диагностики материалов методами сканирующей термической микроскопии (СТеМ) и в сочетании с другими нанозондовыми методами используются различные эффекты, вызванные нагревом контакта или отдельных элементов системы зонд—образец. Существующая техника включает ряд методов, основанных на термоэлектрических измерениях, изменении резистивных характеристик, эффектах теплового расширения [23].

В приборах, основанных на методах первого типа, сенсорным элементом является термопара, устанавливаемая на конце зонда, реагирующая на изменение температуры, вызванное сканированием. Выходным сигналом является генерируемая термоЭДС. В другой реализации этого метода измеряется контактная разность потенциалов между проводящи-

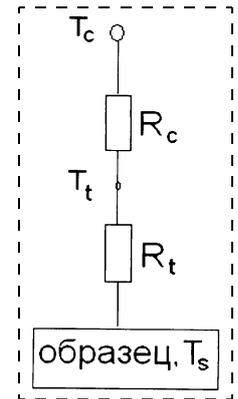


Рис. 2. Одномерная резистивная модель стационарного теплового контакта зонд—образец

ми зондом и образцом. В последнем случае измерения могут выполняться и в воздушной среде, причем достигается очень высокая чувствительность к малым изменениям температуры на поверхности образца (~1 мВ/К). ТермоЭДС может вырабатываться также в туннельных контактах зонда с поверхностью.

Термические эффекты используются не только для измерения локальной температуры поверхности, но и для измерения других физических характеристик. Так, исследуя отклик контакта на внешний нагрев, можно изучать коэффициенты теплопроводности, удельные теплоемкости, коэффициенты линейного расширения образцов, и т. д.

### Туннелирование электронов и СТМ

Прообразом нынешнего обширного семейства сканирующих зондовых микроскопов был сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) Биннига и Ропера [1, 2], в основе действия которого лежит эффект туннелирования электронов между проводящими зондом и образцом, возникающий при расстояниях между ними на уровне десятых долей нанометра при приложении внешнего напряжения смещения  $V_b$ . Энергетическая диаграмма процесса туннелирования в упрощенном одномерном случае контакта двух металлов показана на рис. 3.

Взаимодействие зонда с образцом в СТМ описывается в терминах перекрытия вакантных и

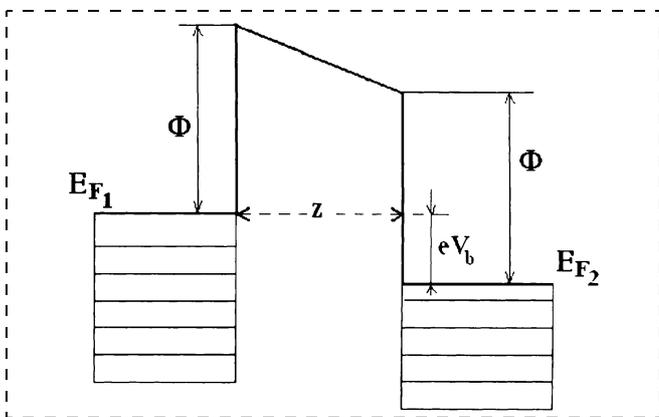


Рис. 3. Энергетическая диаграмма идеализированного туннельного контакта между двумя металлами:

$E_{F1}$  и  $E_{F2}$  — энергии Ферми;  $\Phi$  — средняя работа выхода,  $V_b$  — напряжение смещения. Заштрихованы области заполненных энергетических состояний электронов. В соответствии с квантовой механикой волновая функция электрона, туннелирующего через потенциальный барьер, находится из уравнения Шредингера  $d^2\psi/dz^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(z))\psi = 0$  ( $E$  — энергия электрона,  $V(z)$  — потенциальная энергия). Основной вклад в туннельный ток дают электроны с энергиями, близкими к энергии Ферми. Для них  $E - V(z) \approx \Phi$ , поэтому внутри барьера волновая функция экспоненциально затухает:  $\psi = \psi_0 \exp(-z/z_0)$ ,

где  $z_0 = (\hbar^2/2m\Phi)^{1/2}$ . Значение туннельного тока пропорционально коэффициенту прозрачности потенциального барьера, и в итоге получаем  $I \sim \psi^2 \sim \exp(-2z/z_0)$

заполненных электронных состояний, соответствующих зонду и образцу (и наоборот). В оптимальном для эксперимента режиме (и самом простом для теоретической интерпретации) исключаются сильные химические взаимодействия зонда с поверхностью, а характерный размер поверхностных структур должен быть больше масштаба убывания электронных волновых функций (состояний) зонда. Для выполнения первого из этих условий расстояние между зондом и поверхностью (для металлов) должно превышать 0,5...0,6 нм, а наиболее высокие контрасты изображений поверхности достигаются при локализации туннельного тока на площадку с радиусом сечения около 0,2 нм, близким к размеру одного атома. Соответствующая зависимость туннельного тока от расстояния имеет экспоненциальный вид [5, 6, 29, 31, 35]:

$$I(z) \approx I_0 \exp(-2z/z_0), \quad z_0 = (\hbar^2/2m\bar{\Phi})^{1/2}, \quad (15)$$

где  $\bar{\Phi} = (\Phi_1 + \Phi_2)/2$  — средняя работа выхода электронов материалов зонда и образца. Учитывая значения постоянной Планка  $\hbar$ , массы электрона  $m$  и работы выхода  $\bar{\Phi}$  (4...6 эВ в случае контакта металлов), получаем  $z_0 \approx 0,1$  нм. Формула (15) и происхождение параметра  $z_0$  поясняются в подписи к рис. 3.

Экспериментальной мерой расстояния зонда от поверхности является сопротивление туннельного контакта  $R = V_b/I$ . Поскольку оптимальные значения туннельного тока  $I$  имеют порядок 1 нА, то при комнатных температурах и низких напряжениях смещения (< 80 мВ) сопротивление туннельного контакта равно 10...100 МОм, а энергия теплового возбуждения электронов равна  $kT \approx 26$  мэВ, т. е. имеет один порядок величины с энергией, приобретаемой электронами вследствие электрического смещения ( $\Delta E = eV_b$ ). Увеличение напряжения вызывает рост числа электронных состояний (каналов), участвующих в образовании туннельного тока, а это в свою очередь приводит к ухудшению разрешения микроскопа вследствие расширения геометрической области взаимодействия и нарушения локальности контакта. Уменьшение смещения не дает выигрыша в разрешении вследствие неустраняемого влияния температуры, также приводящей к уширению спектра электронных состояний.

Степень локальности зондирования электронных состояний поверхности образца характеризуется приближенной зависимостью плотности электронов от значения туннельного тока  $n(I) [\text{нм}^{-3}] \approx \approx 0,02 I^{1/2} [\text{нА}]$  [35]. Таким образом, туннельному току 1 нА отвечает контур электронной плотности со значением  $0,02 \text{ нм}^{-3}$ .

Для контакта металл—полупроводник или двух полупроводников структура энергетического спектра электронов, участвующих в образовании туннельного тока, является более сложной, поскольку

отражает наличие энергетических щелей между валентной зоной и зоной проводимости полупроводников, наличие и расположение примесных и поверхностных уровней, и т. д. Эти особенности проявляются в существенно нелинейном характере вольт-амперных характеристик туннельных контактов, получаемых при различных напряжениях смещения, которые (для полупроводников) варьируются от нескольких десятков милливольт до нескольких вольт. По характеру пиков, возникающих в дифференциальном спектре проводимости туннельных контактов  $dI/dV = f(V)$ , можно идентифицировать примесные состояния и положения краев зоны проводимости и валентной зоны относительно уровня Ферми. Еще более интересные особенности возникают в туннельных контактах сверхпроводников, но проведение подобных экспериментов требует наличия хороших вакуумных условий [5, 6, 29, 30, 38].

Изучение вкладов различных электронных состояний и каналов в туннельный ток с помощью СТМ-спектроскопии позволяет ассоциировать характерные свойства (процессы) на поверхности с особенностями контраста изображений. Так, зависимости туннельного тока от расстояния дают информацию о рельефе поверхности, высоте потенциальных барьеров и пространственной локализации электронных состояний, фотоны, излучаемые в неупругих туннельных переходах, несут информацию о плазмонных возбуждениях поверхности, локальной плотности электронных состояний, об энергетических уровнях адсорбированных молекул, процессах генерации и распада электрон-дырочных пар, спиновой поляризации электронов и т. д. В 1998 г. [2] в СТМ-экспериментах на поверхности меди, покрытой полиароматическими молекулами, было обнаружено мощное световое излучение с выходом  $10^8$  фот/с и эффективностью конверсии около 30 %, генерируемое в области контактного пятна с объемом в несколько кубических нанометров. В более типичных для СТМ ситуациях неупругие эффекты меньше упругих на 4–6 порядков величины (сравните с ранее приведенными численными оценками упругой энергии и диссипативных потерь в силовых режимах СЗМ).

#### Эмиссия электронов и атомных частиц из зоны контакта

Участок поверхности под зондом СЗМ подвергается значительным давлениям. Так, в условиях герцевского контакта кремниевого зонда с плоской поверхностью ( $R = 20$  нм,  $E = 140$  ГПа) даже при относительно малой для СЗМ нагрузочной силе  $F = 10$  нН давление под зондом  $p =$

$$= \frac{F^{1/3}}{\pi} \left( \frac{4E}{3R} \right)^{2/3} \approx 3 \text{ ГПа, что в несколько раз пре-}$$

вышает предел текучести большинства металлов. Поэтому быстрые процессы приложения и снятия нагрузочных сил способны вызвать значительные механические повреждения материалов: образование зон пластической деформации и дефектов, трещинообразование, экструзию, диспергирование и т. д. Такие же явления характерны и для фрикционных режимов СЗМ, а в целом их можно отнести к эффектам механо- и трибоактивации.

Заметим также, что чисто механическое воздействие зонда на поверхность может дополняться термическим разогревом контактных пятен вследствие неупругости контактов, поглощения внешнего электромагнитного излучения, протекания тока (в жестких металлических контактах) или химических реакций, поэтому совместное действие механических и тепловых факторов может привести к значительно более серьезным последствиям. Высокая химическая активность механоактивированных областей материалов обусловлена появлением многочисленных дефектов и оборванных химических связей, а наличие воздуха или жидких пленок на поверхностях стимулирует процессы окисления. В свою очередь, механо- и трибоактивация, а также активация вещества излучением или тепловым нагревом вызывает обширный спектр микроскопических явлений, таких как вылет из зоны контакта электронов, атомных частиц и кластеров, генерацию электромагнитного излучения и т. д. [27, 28].

Менее значительные с точки зрения механического разрушения, но зато постоянно действующие в СЗМ факторы, возникающие при движении нанозондов вблизи поверхности, связаны с релаксацией непрерывно возникающих и обрывающихся химических и адгезионных связей, приводящей к "фрактоэмиссии" электронов и атомов (в английской литературе — *debonding fractoemission*). Как вытекает из численных оценок, разрывы и образование адгезионных связей характеризуются энергиями порядка нескольких электронвольт. Этого оказывается достаточно для активации различных каналов фрактоэмиссии. Кроме того, процессы фрактоэмиссии ответственны за возникновение релаксационных (переходных) электрических токов, возникающих в зонде и образце (без подачи внешних электрических смещений). К сожалению, в практике СЗМ исследование роли и возможностей применения этих эффектов еще находится в начальной стадии развития.

#### Трибологические, адгезионные и химические эффекты

Силы трения между "сухими" поверхностями, описываемые формулой Амонтона  $F = \mu P$  ( $P$  — сила нагрузки), относятся к числу наиболее простых. Фактически лишь недавно, с изобретением зондовых

микроскопов, стало возможным проводить их систематическое изучение в микро- и наномасштабах.

При трении макроскопических тел фактическая площадь соприкосновения образована множеством микроконтактов, причем сила трения пропорциональна этой площади, а коэффициент трения не зависит от нагрузки. Простое объяснение этим фактам при трении металлических поверхностей дали английские физики Боуден и Тэйбор в середине прошлого столетия [34]. Когда давление на поверхности металла в области контактных пятен превышает некоторое критическое значение, начинается их пластическая деформация, в результате которой суммарная площадь пятен возрастает, а давление, соответственно, уменьшается. Поэтому площадь реального контакта  $A$  "подстраивается" под значение силы внешней нагрузки  $P$  ( $A \sim P$ ). "Равновесное" давление  $p$ , создаваемое нагрузочной силой, относительно равномерно распределяется по различным контактным пятнам, поэтому  $P = pA$ . Далее, если фактическая площадь контакта в среднем постоянна (при постоянной силе нагрузки), а контактные площадки характеризуются касательным напряжением  $\tau$ , необходимым для преодоления трения, то сила трения  $F = \tau A$ , а коэффициент трения, соответственно,  $\mu = \frac{F}{P} = \frac{\tau A}{pA} = \frac{\tau}{p}$ .

Таким образом, имеет место закон Амонтона, в котором коэффициент трения определяется только характеристиками контакта  $\tau$  и  $p$ . И все же эта теория не всегда способна объяснить происхождение силы "сухого" трения, поскольку закон Амонтона выполняется и для неметаллов, а кроме того, даже в случае металлов пластическая деформация микроконтактов имеется не повсюду.

В СЗМ даже в простейшей ситуации — для одиночного наноконтакта между зондом и поверхностью образца в вакууме, возможны особенности сил трения, связанные с анизотропией скольжения зонда в различных направлениях относительно кристаллографической ориентации образца, со сложными зависимостями от формы и радиуса зонда, скорости скольжения, температуры, параметров контактирующих материалов и т. д. [14, 20, 21, 27, 28]. Если же эксперименты проводятся в воздушной или в жидкой среде, то ситуация выглядит еще сложнее, поскольку трение вызывает вторичные эффекты в зоне контакта, а те, в свою очередь, влияют на взаимодействие поверхностей. Более того, и свойства самих жидкостей (и жидких пленок) в присутствии твердых границ сильно видоизменяются: они могут структурироваться в зависимости от создаваемого зондом давления; встраиваться в поверхность; инициировать или подавлять химические реакции [11, 14, 27, 28, 34]. Экспериментальное определение зависимости  $A(P)$  для различных материалов до сих пор остается сложным де-

лом. Так, в случае контакта сферических частиц обнаруживается зависимость  $A \sim P_n$  с показателем  $n$ , близким к  $2/3$  для резины, дерева, пластика и тканей, и близким к 1 для более хрупких материалов (стекло, каменная соль, алмаз) [34].

Двойственная природа сил трения (механическая и молекулярная) была впервые осознана Кулоном еще в конце XVIII в. Именно молекулярный характер взаимодействий в одиночных микроконтактах объясняет тесную связь адгезионных, трибологических и химических явлений. Там, где есть сильное "прилипание" тел (адгезия), велико и статическое трение, хотя адгезионная составляющая и не является единственной — всем хорошо известен механизм "пропахивания", когда более твердый предмет, углубившись в мягкую поверхность, "срезает" ее при латеральном движении. К числу фундаментальных образующих трения относятся также эффекты неупругости [8]. В атомно-плотных контактах они приводят к генерации дислокаций, точечных дефектов и пластическому течению материалов, а при бесконтактном трении — к образованию фононов и других квазичастиц.

Для нанотрибологии принципиально важно понять природу универсальности статического трения, а также физические причины различия между статическим, вязким (пропорциональным скорости трением) и трением скольжения Амонтона—Кулона. Статическое трение обычно не ассоциируется ни с диссипацией энергии, ни с выделением теплоты. При отсутствии видимой механической работы сила статического трения качественно похожа на силу упругости, противодействующую внешней силе, растягивающей пружину. Если это так, и сила трения покоя связана с невидимой деформацией, происходящей в зоне контакта, то можно предположить, что снятие внешней нагрузочной силы должно оставлять "следы" диссипации запасенной энергии, хотя количество выделяемой теплоты, очевидно, весьма мало. Зондовая микроскопия должна помочь "увидеть" и исследовать этот эффект.

Другой важнейший вопрос касается скорости диссипации энергии в наноконтактах и каналов ее превращения в другие формы. Ответ на него даст ключ к проектированию и созданию материалов с супернизким и супервысоким трением, что представляет задачи огромной практической важности.

При наличии между зондом и поверхностью образца смазочных покрытий, например, цепных молекул углеводородов, прикрепляющихся одним концом к поверхности металлического образца, силы трения сложным образом зависят от радиуса кривизны зонда и нормальной нагрузки [14]. При низких давлениях, производимых на смазочный слой (10—100 МПа), зонд скользит по "верхушкам" молекул, не изменяя их структуры и ориентации,

поэтому результирующее трение оказывается низким. При увеличении давления до значения порядка 1 ГПа "острый" зонд "протыкает" смазочный слой и, смещая и деформируя молекулы, входит в жесткий контакт с поверхностью. В этом случае трение резко увеличивается. Если же зонд имеет большой радиус, то молекулярные слои "встраиваются" в зазор между ним и поверхностью, и трение опять может быть низким, а смазочный слой принимает на себя нормальное давление, заметно превосходящее предел текучести материала поверхности. Структура пленок смазочных материалов в большой степени зависит от межмолекулярных сил внутри пленки и от взаимодействий с подложкой, причем влияние прилегающих твердых границ, давления, скоростей скольжения и температуры приводит к значительно большему разнообразию их межфазных характеристик, чем в случае одной поверхности [11, 14, 27, 28, 40].

Касаясь адгезионных эффектов вообще и в контактах зонд—поверхность, в частности, ошибочно целиком связывать их с наличием силовых взаимодействий химического или физического рода непосредственно между электронными и атомными подсистемами зонда и образца [8]. Типичным примером являются полимеры, сильная адгезия которых к твердым телам может быть обусловлена встраиванием в сложный рельеф поверхности и перепутыванием отдельных молекулярных звеньев между собой (достаточно напомнить, как трудно разорвать клубок спутанных волос или ниток). В этом случае определяющую роль приобретают эффекты энтропийного характера, а разрыв адгезионных контактов идет не по границам контактных пятен, а захватывает более глубоко лежащие слои материала.

Латеральный или нормальный контраст изображений, получаемых в силовых режимах СЗМ, в принципе, дает возможность идентификации химического состава и структуры твердых поверхностей и жидких поверхностных пленок. Хотя роль, оказываемая на трение типом атомов и их химическим окружением в области контактных пятен, еще до конца не выяснена, чувствительность нормальных и латеральных сил к химическому составу может быть использована для его определения [14]. Так, например, было обнаружено влияние водородного показателя pH раствора на латеральную силу взаимодействия зонда из нитрида кремния с поверхностью кварца. Воздействие и само присутствие зонда в реактивной среде, вместе с тем, можно использовать в качестве катализатора химических превращений. "Быстрая химия" обеспечивается наномасштабом зоны реакции, так как характерное время диффузии компонентов пропорционально квадрату линейного размера соответствующей области, т. е. очень мало.

Совместное действие механического давления

зонда и влажности на поверхности образца способно приводить к "трибохимическому износу". Это можно понять, учитывая факторы разрыва и образования адгезионных связей, сопровождающие процесс трения, а также другие следствия механоактивации, повышающие реакционную способность структур, граничащих с атмосферой. Исследование износа и его связи с трением и адгезией представляет самостоятельную важную задачу нанотрибологии. Обычно высокий уровень износа связывается с большим трением и наличием "пропахивания", но высокое трение может наблюдаться и при полном отсутствии износа и пластических деформаций [34].

Трибохимические эффекты существенно зависят от приложенных импульсов напряжения между зондом и образцом, способных инициировать модификацию поверхности. В этом случае уместнее говорить об электрохимических взаимодействиях. Наиболее важным и исследованным из процессов такого рода является процесс селективного оксидирования кремния, осуществляемый зондом СЗМ в различных условиях, в том числе во влажной атмосфере на воздухе. Скорость роста оксида зависит от влажности, размеров зонда и приложенного электрического поля. С практической точки зрения электрическая модификация более предпочтительна по сравнению, например, с механической, поскольку легче управляема, а кремний является технически важным материалом [12, 16, 26, 30, 39].

Нанолитография, основанная на использовании эффекта селективного оксидирования в динамическом (полуконтактном) режиме сканирования СЗМ, уже сейчас обеспечивает пространственное разрешение (толщину линий оксида) на уровне 10 нм, а по воспроизводимости результатов и скорости записи (10...100 мкм/с) заметно превосходит контактные методы зондовой нанолитографии. Методы СЗМ позволяют осуществлять прямое формирование квантовых наноструктур типа Ga(Al)As, биполярных и одноэлектронных транзисторов, и т. д. [12, 17, 25, 26, 39]. В целом физика и электрохимия "мокрых" контактов предоставляют необъятное поле для будущих исследований.

## Заключение

Как вытекает из изложенного выше, применение СЗМ открывает обширные практические возможности в нанолитографии и микроэлектронике, при модификации трибологических и химических свойств поверхностей и смазочных покрытий, с целью сенсорной диагностики материалов. Не менее важные приложения СЗМ находит в биомедицинских исследованиях. Реализация их требует изготовления проводящих и непроводящих кантилеверов с различными жесткостями и покрытиями зондов, поскольку создание многофункциональных сенсоров является труднорешаемой задачей.

Значение нанозондовых методов для нанотехнологии, фундаментальной физики и прежде всего для физики поверхности, трудно переоценить. Первоначальный интерес к ним концентрировался вокруг достижения супервысокого пространственного разрешения и понимания физики процессов изображения, манипуляции и модификации свойств поверхности материалов с помощью нанозондов [1, 2]. Сегодня в центре внимания находится точность количественных измерений и расширение спектра изучаемых физических свойств. Впечатляет даже простое перечисление реализованных методов СЗМ и характеристик материалов, которые можно локально измерить [22, 26, 37, 38]. По образному выражению Биннига и Ропера [2], наномасштаб является "точкой бифуркации", в которой материалы начинают проявлять свои специфические свойства (отличные от свойств отдельных атомов и молекул), а научные и инженерные дисциплины, разветвляясь, — специфику терминологии, теоретического аппарата и экспериментальных средств. Путь от нано- к макрообъектам использует природа при конструировании окружающего нас мира.

Подводя итоги, можно констатировать, что зондовая микроскопия и связанные с ней теоретические и прикладные исследования нанообъектов обладают чрезвычайно высоким потенциалом для будущего развития. Этот потенциал, по мнению автора, определяется несколькими факторами: 1) контакт зонд—поверхность является уникальной физической "лабораторией" для проверки теорий и моделей; 2) нанозонд — универсальное инструментальное средство для модификации и диагностики свойств материалов; 3) изучение функциональных свойств нанообъектов, основанное на физических исследованиях, дает ключ к пониманию существующих и конструированию искусственных макрокопических тел.

#### Список литературы

1. **Binnig G., Rohrer H.** Scanning tunneling microscopy: from birth to adolescence // *Rev. Mod. Phys.* 1987. V. P. 615 (имеется перевод: УФН. 1988. Т. 154. С. 261).
2. **Binnig G., Rohrer H.** In touch with atoms // *Rev. Mod. Phys.* 1999. V. 71. N 2. S324.
3. **Эдельман В. С.** Сканирующая туннельная микроскопия // Приборы и техника эксперимента. 1989. № 5. С. 24.
4. **Sarid D.** Scanning force microscopy with applications to electric, magnetic and atomic forces. N. Y.: Oxford U. Press. 1991.
5. **Wiesendanger R., Guntherodt H. J.** (eds.), Scanning tunneling microscopy. Berlin. N. Y.: Springer. 1992. 1993. V. 1—3
6. **Chen J. C.** Introduction to scanning tunneling microscopy. Oxford: Oxford Univ. Press. 1993.
7. **Stoneham A. M., Marta M., Ramos D., Sutton A. P.** How do they stick together? A feature article // *Phil. Mag.* 1993. V. A67. N 4. P. 797.
8. **Courjon D., Bainier C.** Near field microscopy and near field optics // *Rep. Prog. Phys.* 1994. V. 57. P. 989.
9. **Marti O., Muller R.** (eds.). Photons and local probes // NATO ASI Series E: Applied sciences. V. 300. Dordrecht: Kluwer, 1995.
10. **Bhushan B., Israelachvili J. N., Landman U.** Nanotribology: friction, wear and lubrication at the atomic scale // *Nature (London)* 1995. V. 374. P. 607.
11. **Singer I. L., Pollock H. M.** (eds.). Fundamentals of friction: Macroscopic and microscopic processes. Dordrecht: Kluwer Acad. Publ. 1996.
12. **Неволин В. К.** Основы туннельно-зондовой нанотехнологии: Учебное пособие, М.: МГИЭТ (ТУ), 1996. 91 с.
13. **Persson B. N. J., Tosatti.** Physics of sliding friction. Dordrecht: Kluwer Acad. Publ. 1996.
14. **Carpick R. E., Salmeron M.** Scratching the surface: fundamental investigations of tribology with atomic force microscopy // *Chem. Rev.* 1997. V. 97. P. 1163.
15. **Hurtmann U.** An introduction to AFM and related methods // *TopoMetrix.* 1997. P. 26.
16. **Бухараев А. А., Овчинников Д. В., Бухараева А. А.** Диагностика поверхности с помощью сканирующей силовой микроскопии // Заводская лаборатория. 1997. № 5. С. 10.
17. **Суслов А. А., Чижик С. А.** Сканирующая зондовая микроскопия // Материалы, технологии, инструменты. 1997. № 3. С. 78.
18. **Володин А. П.** Новое в сканирующей микроскопии // Приборы и техника эксперимента. 1998. № 6. С. 3.
19. **Жданов Г. С., Либенсон М. Н., Марциновский Г. А.** Оптика внутри дифракционного предела: принципы, результаты, проблемы // УФН. 1998. Т. 168. № 7. С. 801.
20. **Persson B. N. J.** Sliding friction: physical principles and applications. Berlin: Springer. 1998.
21. **Bhushan B.** (ed). Handbook of Micro/Nanotribology. Boca Raton, FL: CRC Press. 1999.
22. **Majumdar A.** Scanning thermal microscopy // *Annu. Rev. Mater. Sci.* 1999. V. 29. P. 505.
23. **Cappella B., Dietler G.** Force — distance curves by atomic microscopy // *Surface Sci. Rep.* 1999. V. 34. P. 1.
24. **Яминский И. В., Тишин А. Н.** Сканирующая магнитно-силовая микроскопия // Успехи химии. 1999. V. 68. № 3. P. 165.
25. **Арутюнов П. А., Толстихина А. Л.** Атомно-силовая микроскопия в задачах проектирования приборов микро- и наноэлектроники Ч. 1 // Микроэлектроника. 1999. Т. 28. № 6. С. 405; Ч. 2. 2000. Т. 29. № 1. С. 13.
26. **Быков В. А.** Микромеханика для сканирующей зондовой микроскопии // Микросистемная техника. 2000. № 1. С. 21—33.
27. **Dedkov G. V.** Experimental and theoretical aspects of the modern nanotribology // *Phys. stat. solidi.* 2000. V. (a)179. N 1. P. 3.
28. **Дедков Г. В.** Нанотрибология: экспериментальные факты и теоретические модели // УФН. 2000. Т. 170. № 6. С. 585.
29. **Bonnell D. A.** Probe microscopy and spectroscopy: theory, techniques and applications. N. Y.: Wiley, 2000.
30. **Рыков С. А.** Сканирующая зондовая микроскопия полупроводниковых материалов и наноструктур. СПб.: Наука. 2001. 53 с.
31. **Drakowa D.** Theoretical modeling of scanning tunneling microscopy, scanning tunneling spectroscopy and atomic force microscopy // *Rep. Prog. Phys.* 2002. V. 64. P. 205.
32. **Morita S. R., Wiesendanger, and Meyer** (eds.). Noncontact atomic force microscopy Berlin: Springer. 2002.
33. **Дедков Г. В., Кясов А. А.** Электромагнитное и флуктуационно-электромагнитное взаимодействие движущихся частиц и нанозондов с поверхностями. Нерелятивистское рассмотрение (Обзор) // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 10. С. 1729.
34. **Krim J.** Resource Letter: FMMLS-1: Friction at macroscopic and microscopic length scales // *Am. J. Phys.* 2002. V. 70. N 9. P. 890.
35. **Hofer W. A., Foster A. S., Schluger A. L.** Theories of scanning probe microscopes at the atomic scale // *Rev. Mod. Phys.* 2003. V. 75. P. 1287.
36. **Giessibl F. J.** Advances in atomic force microscopy // *Rev. Mod. Phys.* 2003. V. 75. P. 949.
37. **Бахтизин Р. З., Галлямов Р. Р.** Физические основы сканирующей зондовой микроскопии. Уфа: РИО Баш. ГУ. 2003. 82 с.
38. **Миранов В. Л.** Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера. 2004. 143 с.
39. **Неволин В. К.** Зондовые нанотехнологии в электронике. М.: Техносфера. 2005. 152 с.
40. **Israelachvili J. N.** Intermolecular and surface forces. London. Acad. Press. 1992.
41. **Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.** Статистическая физика. Ч. 2. М.: Физматлит, 2002. 493 с.
42. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория упругости. М.: Физматлит. 2001. 257 с.
43. **Яминский И. В., Еленский В. Г.** Сканирующая зондовая микроскопия: Библиография (1982—1997). М.: Научный мир. Сер. Сканирующая зондовая микроскопия. Вып. 2. 1997.

УДК 539.612

Е. А. Гринькин\*, А. А. Жуков\*, д-р техн. наук,  
С. Ю. Шаповал\*\*, канд. техн. наук,  
П. Г. Бабаевский\*, д-р техн. наук,  
\*«МАТИ» — Российский государственный  
технологический университет  
им. К. Э. Циолковского, г. Москва  
\*\*Институт проблем технологии  
микроэлектроники и особочистых материалов  
РАН, г. Черноголовка Московской области

## АДГЕЗИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТВЕРДЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ И СОЗДАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ "СУХИХ" АДГЕЗИВОВ. ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ

*Проанализированы методы и приведены примеры целенаправленного создания поверхностных полимерных структур, обеспечивающих эффект "сухой" адгезии, представлена оценка адгезионных свойств некоторых структур к твердым подложкам различной природы.*

Искусственные "сухие" адгезивы, имеющие характеристики, близкие к природным, должны представлять собой двух- или трехуровневые микро- и/или наноразмерные структуры, состоящие из регулярно или статистически распределенных плотно упакованных без слипания и спутывания "микроворсинок" диаметром 3...10 мкм и/или "нановорсинок" диаметром 200...500 нм с характеристическим отношением, т. е. отношением диаметра "ворсинки" к ее длине, около 1 : (10...50) на жесткой или эластичной основе [1]. Для получения таких адгезивов могут быть использованы гидрофобные или гидрофобизированные полимеры, имеющие модуль упругости не менее 1 ГПа и высокий предел прочности и выносливости при сжатии и изгибе, и различные процессы, разработанные в микро- и нанотехнологии [2, 3].

Эти процессы могут быть подразделены на два основных типа: метод репликации, т. е. получение реплики с поверхности матрицы, и методы искусственного формирования (выращивания) или самосборки "ворсинок" на поверхности основы.

Методы репликации заключаются в одновременном формировании поверхностной структуры и основы "сухого" адгезива жидко- или газофазным нанесением полимерообразующих композиций на профилированную поверхность плоских матриц

с последующим отверждением или вулканизацией композиций и отслаиванием отформованного материала (реплики) или удалением матрицы растворением или травлением поверхностного слоя. Матрицы, в свою очередь, могут быть получены формированием микро- или нанорельефа на гладкой поверхности какого-либо мягкого материала (размягченного термопласта, воска и т. п.) с помощью конического или цилиндрического индентора, например, острия кантилевера атомно-силового микроскопа (АСМ) (рис. 1, а), микро- или наностамповкой (наноимпринтингом) (рис. 1, б, в), методом литографии с последующим плазменным травлением, воздействием лазерных, ионных или электронных пучков [4]. В качестве матриц могут также использоваться пленки заданной толщины с отверстиями определенного диаметра, полученные различными методами. Матрицы могут быть также изготовлены аналогично получению двойных реп-

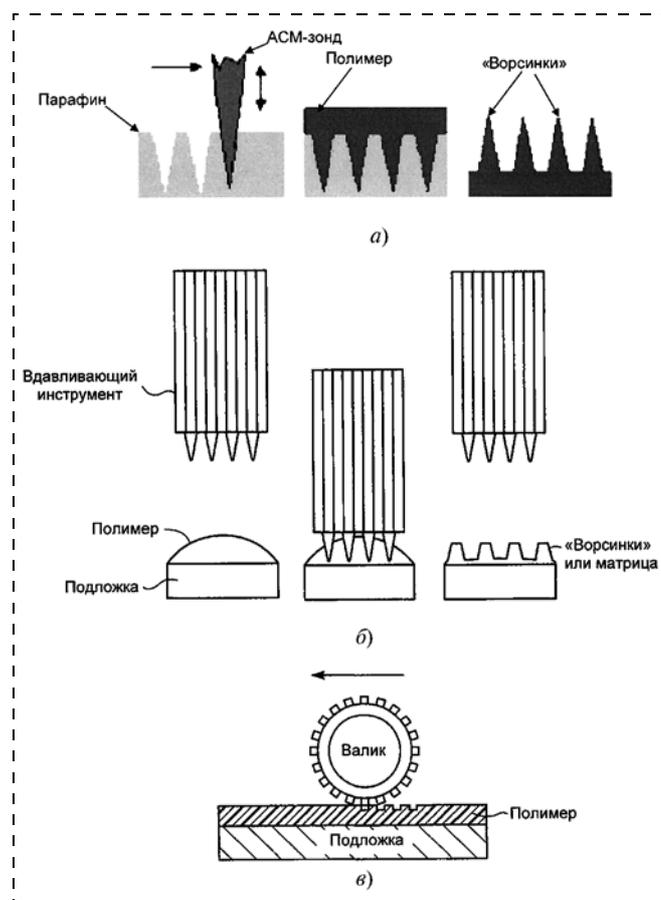


Рис. 1. Схемы изготовления матриц и полимерных "ворсинок":  
 а — с помощью АСМ [5–7]; б — с использованием вдавливающего инструмента, состоящего из множества элементов с острыми кончиками [2]; в — с помощью накаточного валика [2]

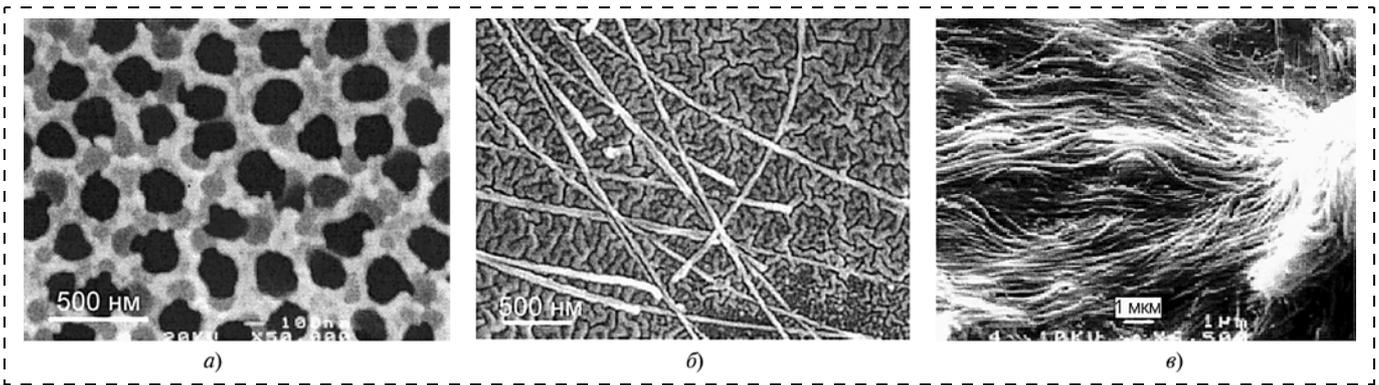


Рис. 2. Сканирующие электронные микрофотографии поверхности пленочной матрицы из  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (а), "ворсинок" из ПДМСО (б) и полиимида (в) диаметром 200 нм и длиной 60 мкм [5–7]

лик в просвечивающей электронной микроскопии: изготавливается позитивная модель из вспомогательного материала, на которой формируется матрица, используемая для получения конечной структуры.

Методы формирования "ворсинок" на поверхности основы включают в себя создание на поверхности полимера "ворсинок" литографией с плазменным травлением, газофазным осаждением полимеробразующих компонентов, структурной самоорганизацией блок- и привитых сополимеров с последующим травлением одного из компонентов и т. п. [4]. Возможно также использование прямых методов микро- и наноформования, аналогичных формованию матриц (см. рис. 1). Все эти методы могут быть использованы для получения двух- и трехуровневых "сухих" адгезивов. При этом можно осуществлять ориентацию получаемых "ворсинок" под различными углами к поверхности основы непосредственно в процессе изготовления. В большинстве случаев в качестве полимеробразующих жидкофазных композиций как для получения "сухих" адгезивов, так и матричных или вспомогательных материалов используют полиамидокислотные или полиамидоэфирные, полиуретановые, эпоксидные, полиэфирные, кремнийорганические и другие композиции, а в качестве газофазных — параксиллены [3].

Большинство из перечисленных выше методов опробованы на практике для получения "сухих" адгезивов как с регулярными, так и с нерегулярными структурой "ворсинок" и их распределением, а также для исследования взаимосвязи структуры и свойств полученных адгезивов. В работах [5–9] представлена технология изготовления "сухих" адгезивов методом репликации с использованием пленочных матриц, имеющих самоорганизованные нанопоры с высоким характеристическим отношением. Использовали два типа пленочных матриц — из оксида алюминия ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) и из поликарбоната. На матрице из  $\text{Al}_2\text{O}_3$  толщиной 60 мкм с нанопорами диаметром 200 нм и их числом, приходящимся на  $1 \text{ см}^2$ , равным  $10^9$  (рис. 2, а), был от-

формован в вакууме слой вулканизирующегося полидиметилсилоксана (ПДМСО) с модулем упругости порядка 0,1 МПа. Этот слой после выдержки в течение суток в нормальных условиях был отделен от матрицы. В результате получились "ворсинки" с характеристическим отношением 1 : 300 (рис. 2, б). С помощью матрицы из  $\text{Al}_2\text{O}_3$  были получены также полиимидные "ворсинки" (рис. 2, в). Как видно из рис. 2, б и в, "ворсинки" слипаются друг с другом вследствие высоких значений характеристического отношения, податливости и густоты.

Для получения более коротких и менее густых "ворсинок" из ПДМСО использовали пленочные матрицы из поликарбоната толщиной 8 мкм с беспорядочной ориентацией пор ( $\pm 15^\circ$ ), представляющих собой ядерные треки с большим разбросом по диаметру (от 20 нм до 20 мкм) при числе пор на  $1 \text{ см}^2$ , равном  $10^5 \dots 10^8$  (рис. 3, а). Полученные "ворсинки" диаметром и длиной, приблизительно равными 6 мкм, показаны на рис. 3, б. С помощью силового датчика измерили адгезионную прочность сцепления структуры, представленной на рис. 3, б, и плоской стеклянной подложки, предварительно прижатых друг к другу с нагрузкой  $25 \text{ мН/см}^2$ . Адгезионная сила отрыва "сухого" адгезива от подложки, приведенная к площади, со-

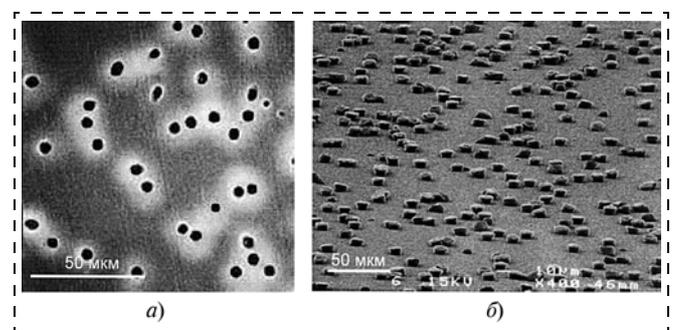


Рис. 3. Сканирующие электронные микрофотографии поверхности пленочной матрицы из поликарбоната (а) и полученных с ее помощью "ворсинок" из ПДМСО диаметром и длиной, приблизительно равными 6 мкм (б) [5–7]

ставила  $2,8 \text{ мН/см}^2$  [5–7]. Если предположить, что все "ворсинки" контактировали с подложкой, то отдельная "ворсинка" должна была отрываться от подложки с усилием, приблизительно равным  $60 \text{ нН}$ . В настоящее время проводятся работы по использованию пленочных матриц с порами меньшего диаметра (вплоть до  $100 \text{ нм}$ ). С использованием пленочных матриц предложено получать "сухие" адгезивы с трехуровневой иерархической структурой, подобной и структуре "ворсинок" на пальцах геккона (рис 4). Нанопористую и микропористую матрицы соединяют друг с другом и заливают полимерообразующей композицией. После выдержки при определенной температуре и травления матриц получают полимерные "ворсинки" [8]. В качестве матриц возможно также использование пористых неорганических и органических подложек с различными видами пор [10]. Изготовление "ворсинок" с регулярными структурой и распределением данным методом вряд ли возможно: диаметр и расстояние между "ворсинками" зависят от пористости материала матриц.

В работах [8, 11] предложен метод искусственного формирования "ворсинок" на поверхности основы, в котором жидкий полимеробразующий слой наносят на нижнюю пластину конденсатора — плоскую токопроводящую подложку (рис. 5). При подаче напряжения на конденсатор слой полимера теряет стабильность, и с его поверхности начинают

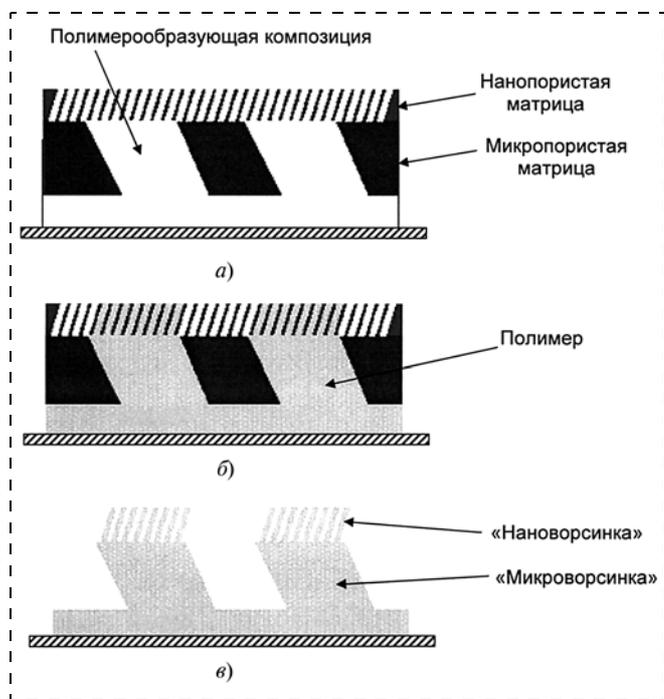


Рис. 4. Схема изготовления "сухого" адгезива с иерархической структурой:

*а* — соединение микро- и нанопористой матриц и заливка их полимерообразующей композицией; *б* — выдержка при определенной температуре; *в* — травление матриц [8]

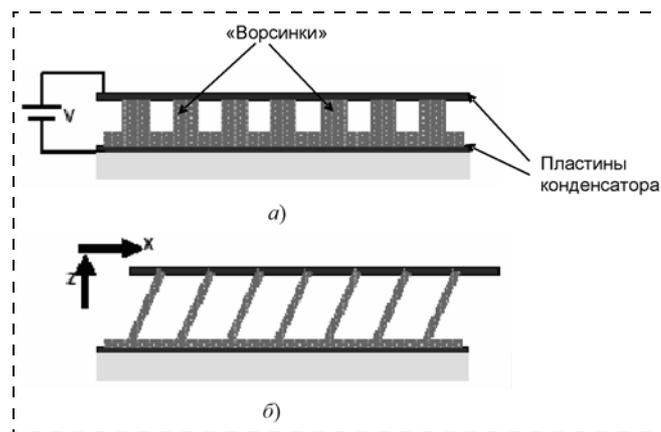
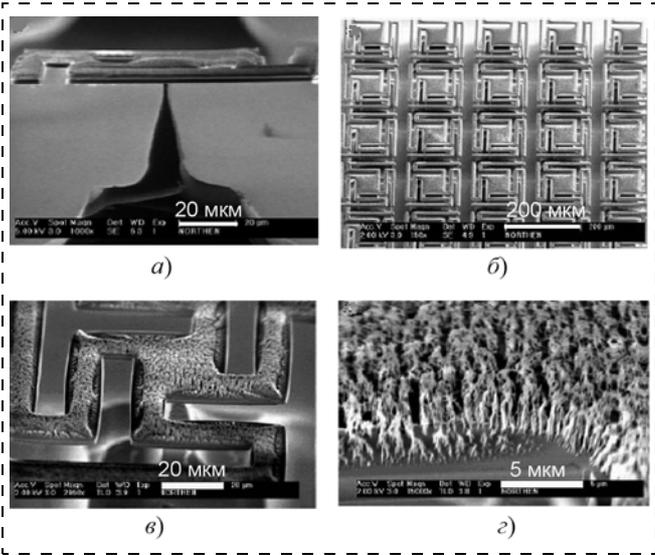


Рис. 5. Схема выращивания "ворсинок" с помощью электрического поля:

*а* — рост "ворсинок"; *б* — вытягивание и сдвиг "ворсинок" [8]

расти "ворсинки" до тех пор, пока они не коснутся верхней пластины конденсатора. Процесс точно контролируется во времени с помощью оптического микроскопа с обратной связью. После частичного отверждения полимера "ворсинки" с помощью высокоточного оборудования вытягивают в продольном направлении и сдвигают в поперечном, пока не будут достигнуты требуемые характеристическое отношение и ориентация "ворсинок". Затем полимер доотверждают и отделяют от электродов. Рассмотренный метод позволяет получать "сухие" адгезивы с нерегулярным распределением "ворсинок" одинаковой высоты, ориентированных под заданным углом относительно основы.

В работе [12] представлен процесс изготовления "сухого" адгезива, основанный на использовании технологии микроэлектроники. Вначале на поверхности пластины из монокристаллического кремния ориентации (100) путем оксидирования в атмосфере влажного кислорода при температуре  $1373 \text{ К}$  создали слой  $\text{SiO}_2$  толщиной  $2 \text{ мкм}$ . На поверхности диоксида кремния методом фотолитографии с использованием позитивного фоторезиста на основе эфира диазохинона и новолачной фенолформальдегидной смолы получили маски заданной геометрии с размерами сторон  $100\text{--}150 \text{ мкм}$ . Незащищенную поверхность  $\text{SiO}_2$  травят в плазме  $\text{CHF}_3$  до поверхности кремния, формируя балки заданной конфигурации, поверхность которых покрыта слоем фоторезиста. После этого провели регулируемое глубинное реактивное ионное вытравливание кремния в среде  $\text{SF}_6\text{--CF}_4$  из-под балок, формируя кремниевые цилиндрические опоры для них диаметром до  $1 \text{ мкм}$  и высотой около  $50 \text{ мкм}$  (рис. 6, *а*). В результате получили покрытые фоторезистом элементы из  $\text{SiO}_2$  со сторонами размером  $100\text{--}150 \text{ мкм}$  и толщиной  $2 \text{ мкм}$  с различным числом балок. Элементы с четырьмя балками представлены на рис. 6, *б*. Изготовленные та-



**Рис. 6.** Сканирующие электронные микрофотографии "сухого" адгезива, изготовленного с использованием технологии микроэлектроники:

*a* — отдельный балочный элемент из SiO<sub>2</sub> с покрытием из фоторезиста, расположенный на кремниевой опоре; *b* — балочные элементы (вид сверху); *в* — увеличенное изображение отдельного балочного элемента с "ворсинками"; *г* — электронная микрофотография "ворсинок" [12]

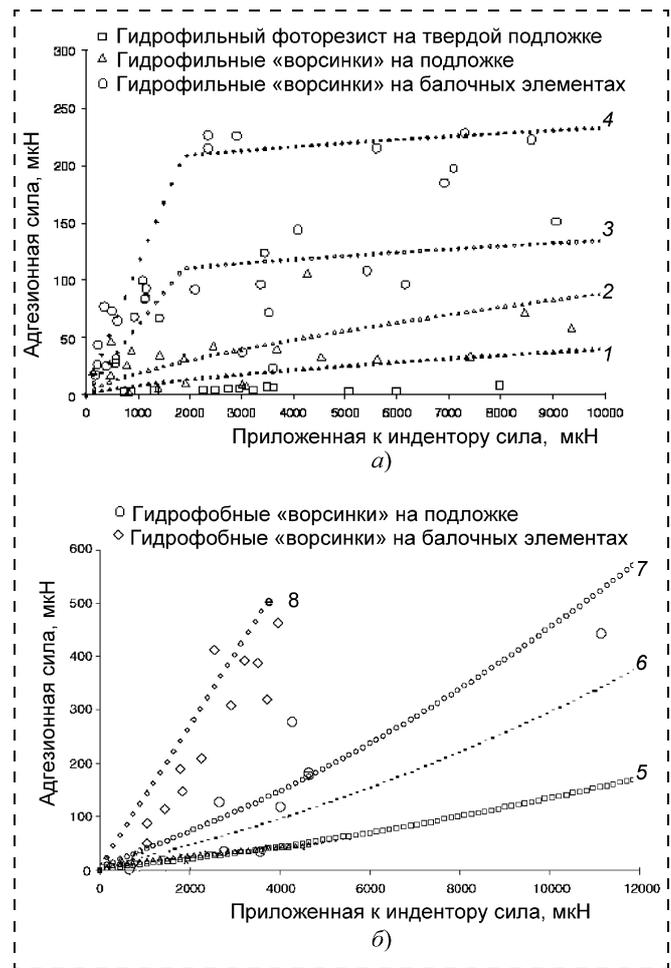
ким образом структуры подвергли обработке в кислородной плазме в течение 5 мин, предварительно обработав слой фоторезиста гексаметилдисилазаном (ГМДС). Под воздействием градиента электрического поля на поверхности фоторезиста образовались "ворсинки" высотой около 2 мкм и диаметром 50...200 нм (рис. 6 *в, г*). Данный метод имеет ряд преимуществ по сравнению с представленным в работах [8, 11], так как не предполагает наличия второго электрода, не требует высокоточного контроля и занимает примерно в 200 раз меньше времени. Однако при этом отсутствует возможность регулирования угла наклона "ворсинок". Гидрофильную поверхность полученных "ворсинок" с краевым углом смачивания водой  $42,5 \pm 2^\circ$  делали гидрофобной с краевым углом смачивания водой  $145 \pm 2^\circ$  формированием на них фторуглеродного покрытия при обработке в плазме CF<sub>4</sub> в течение 30 с. При этом диаметр "ворсинок" увеличился до 350 нм.

Адгезионные свойства полученных структур на основе гидрофильных и гидрофобных "ворсинок" изучали с помощью трибоиндентора со сферическим алюминиевым кончиком диаметром 3,175 мм. На основании теорий Гамакера [13, 14] и Джонсона—Кендалла—Робертса (ДЖКР) [15] рассчитали теоретически ожидаемые значения адгезии.

Экспериментальные данные и результаты теоретических расчетов представлены на рис. 7, *a, б*. Цифрами обозначены зависимости, построенные в результате теоретических расчетов: 1 — по теории

Гамакера; 2 — по теории ДЖКР; 3, 4 — по теории Гамакера с учетом увеличения площади контакта за счет деформации балок для двух- и четырехбалочных элементов соответственно; 5, 6 — по теориям Гамакера и ДЖКР соответственно, учитывающим увеличение радиуса "ворсинок" за счет их расплющивания индентором; 7 — по теории Гамакера, в которой среднее межзатомное расстояние при Ван-дер-Ваальсовом взаимодействии принято равным 0,09 нм; 8 — по теории, аналогичной предыдущей, для "ворсинок", расположенных на элементах с одной балкой, которая изгибается при контакте с индентором.

Из рис. 7 видно, что адгезионная сила возрастает при увеличении усилия предварительного прижима трибоиндентора к "ворсинкам", причем сила отрыва трибоиндентора от гидрофобных "ворсинок" выше, чем от гидрофильных. Адгезия трибоиндентора к "ворсинкам" на балочных элементах выше, чем к "ворсинкам" на плоской подложке, вследствие вероятного изгиба балок и увеличения



**Рис. 7.** Экспериментальные и теоретические зависимости силы адгезии гидрофильных (*a*) и гидрофобных (*б*) поверхностей и "ворсинок" к алюминиевому сферическому кончику трибоиндентора от приложенной перед отрывом к индентору силы, перпендикулярной к подложке [12]

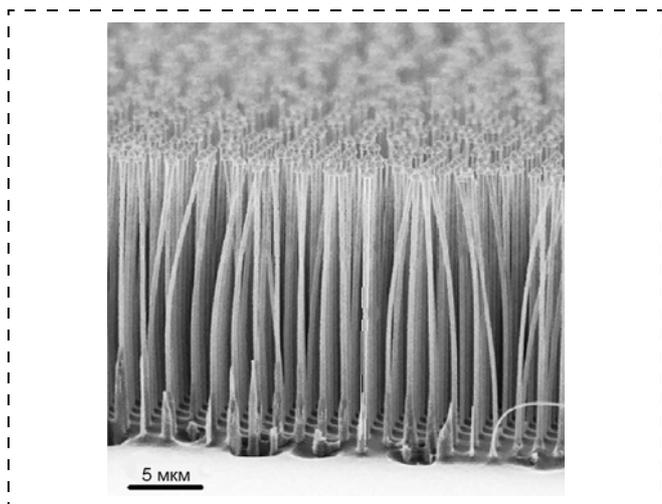


Рис. 8. Кремниевые "ворсинки", созданные с помощью стандартных методов микролитографии и глубинного реактивного ионного травления [16]

эффективной площади контакта между кончиком трибоиндентора и "ворсинками". После предварительного прижима трибоиндентора к расположенным на балочных элементах гидрофобным "ворсинкам", равного 4000 мкН, зафиксирована сила адгезии около 500 мкН.

В работе [16] приведен пример изготовления кремниевых "ворсинок" диаметром 300 нм и характеристическим отношением порядка 1 : 50 с помощью стандартных методов микролитографии и глубинного реактивного ионного травления (рис. 8). Адгезионные свойства полученных "ворсинок" не оценивали.

В работе [17] представлены результаты исследований морфологии поверхности полиимидных пленок, подвергнутых бомбардировке потоком атомарного кислорода. Бомбардировку проводили со средней скоростью около 8 км/с, энергией атомов 2...4 эВ, интенсивностью  $10^{16}$  ат/см<sup>2</sup> и интегральной плотностью потока  $0,5 \cdot 10^{20}$  ат/см<sup>2</sup> под углом между направлением потока и нормалью к плоскости пленки, равным 30°. Было показано наличие на поверхности пленки "ворсинок" грибовидной структуры, которые состояли из цилиндрических "ножек" диаметром 20...40 нм и высотой 2 мкм, "шляпок" диаметром 30...50 нм и толщиной 20...30 нм. Очевидно, что таким методом сложно добиться регулярности распределения "ворсинок", но задавая параметры бомбардировки, можно регулировать их длину и диаметр. Адгезионные свойства таких поверхностей также не исследовались.

В работах [5—7, 18] представлены методы получения и результаты исследования адгезионных свойств "ворсинок" из ПДМСО и отвержденного ненасыщенного полиэфира (ОНП). "Ворсинки" формировали методом репликации с помощью матрицы, полученной индентированием парафи-

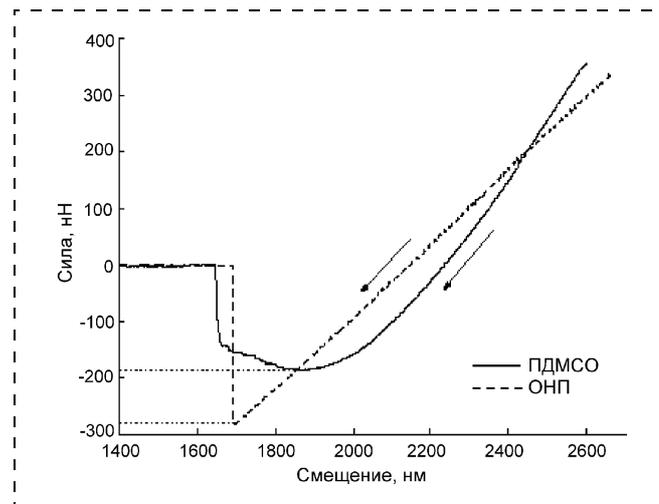


Рис. 9. Кривые "сила—смещение" для синтетических "ворсинок" из ПДМСО и ОНП, проведенные с использованием АСМ-зонда (стрелки показывают направление разгрузки) [5—7, 18]

новой поверхности АСМ-зондом (см. рис. 1, а). Усилие отрыва кремниевого зонда с окисленной поверхностью (плоский кончик, жесткость кантилевера 1,75 Н/м, скорость отвода 390 нм/с) от отдельных "ворсинок" при температуре 298 К и относительной влажности воздуха 58 % составило по модулю  $181 \pm 9$  нН для "ворсинок" из ПДМСО (радиус кончика 230...440 нм) и  $294 \pm 21$  нН для "ворсинок" из ОНП (радиус кончика около 350 нм). Экспериментальные результаты близки к расчетным данным: 185 и 279 нН для ПДМСО и ОНП, соответственно.

На рис. 9 приведены полученные кривые "сила—смещение", на которых максимальное усилие отрыва соответствует адгезии искусственной "ворсинки" к поверхности зонда. Трехмерные АСМ-изображения полученных таким методом поверхностей ПДМСО и ОНП приведены на рис. 10, а и б, соответственно. Таким образом, рассмотренный метод позволяет получать конусообразные "ворсинки" с их регулярным распределением по поверхности основы, но изготовление "ворсинок" с высоким характеристическим отношением затруднительно.

Группа ученых Манчестерского университета во главе с А. Геймом в сотрудничестве с россий-

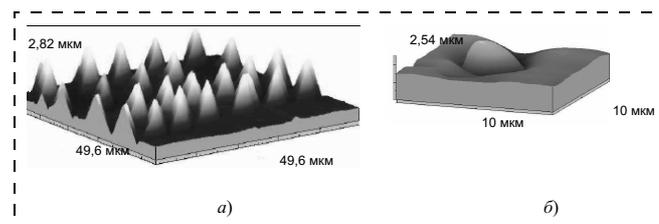


Рис. 10. Трехмерные АСМ-изображения "ворсинок" из ПДМСО (а) и из ОНП (б) [5—7, 18]

ским Институтом проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов [19, 20] получили образцы "сухого" адгезива на основе полиимида на кремниевой подложке анизотропным травлением полимера через алюминиевую или никелевую маску в кислородсодержащей плазме, генерируемой источником электронного циклотронного резонанса (ЭЦР). Маски формировали с помощью электронно-лучевой литографии. Использовали ЭЦР-плазменную установку с возможностью подачи напряжения смещения на образец для обеспечения анизотропного травления. В зависимости от потенциала смещения и, соответственно, энергии ионов изменялся угол травления, зависящий также и от используемого полимерного материала [21]. При использовании данного метода получают "ворсинки" с точно заданными высотой, диаметром и расстоянием между ними.

В работе [19] представлены результаты измерений усилия отрыва кремниевоего зонда АСМ с окисленной поверхностью, имеющего плоский кончик размером около 50 мкм, от полиимидных "ворсинок" после предварительного прижима с нагрузкой 10 мН. Для десяти измеренных точек контакта зонда с исследуемой поверхностью площадью порядка 50 мкм<sup>2</sup> сила, необходимая для отрыва зонда, прямо пропорционально уменьшалась с увеличением расстояния между "ворсинками" и слабо зависела от соотношения их длины и диаметра (рис. 11). Даже для самого густого набора "ворсинок" сила адгезии не превышала 10 мкН. Сравнение полученных результатов с расчетными и измеренными для отдельных "ворсинок" показало, что только малая часть "ворсинок" вступила в контакт с плоским кончиком зонда. Основной причиной этого могло быть недостаточное усилие предварительного прижима при оценке усилия отрыва.

На рис. 12 показаны микрофотографии поверхности исследованных полиимидных "сухих" адгезивов.

Очевидно, что слипание эластичных полиимидных "ворсинок" друг с другом и с поверхностью основы (рис. 12, б) может быть также одной из причин, снижающих адгезионные характеристики "сухого" адгезива. Электронно-микроскопические исследования его поверхности после отрыва от подложки показали, что очень тонкие "ворсинки" (радиусом менее 0,15 мкм) не только слипаются, но и ломаются после контакта с твердой поверхностью. Оптимальной в данном случае является структура с "ворсинками" длиной 2 мкм, диаметром 0,5 мкм и расстоянием между ними 1,6 мкм. Такие "ворсинки" были сформированы на площади 1 см<sup>2</sup> [19]. После формирования полиимидных "ворсинок" на жесткой кремниевой пластине образец прижимали к поверхности стекла с нагрузкой массой около 20 кг. Усилие отрыва образца после этого не превышало 0,01 Н. Это свидетельствует о том, что менее чем 1 % "ворсинок" вступили в контакт со стекляннной поверхностью. После отделения полиимидной пленки с "ворсинками" от жесткой кремниевой пластины усилие отрыва при аналогичных условиях возросло примерно в 1000 раз. Очевидно, что эластичность основы способствует адаптации адгезива к шероховатой поверхности подложки и приводит к резкому увеличению числа контактов с ней полиимидных "ворсинок".

Исследования зависимости адгезионных свойств полиимидного "сухого" адгезива от площади контакта с поверхностью стекла, проведенное с помощью стеклянных клиньев размером порядка нескольких миллиметров и лабораторных весов, также показали, что усилие отрыва определяется только площадью контакта адгезива и подложки (рис. 13) и практически не зависит от нагрузки, с которой осуществляется их предварительный прижим друг к другу, если она превышает 50 Н/см<sup>2</sup>. При этом средняя сила, приходящаяся на одну "ворсинку",

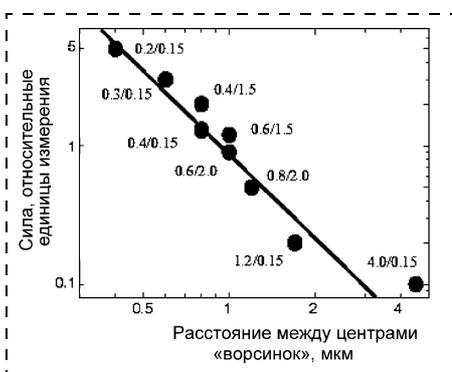


Рис. 11. Зависимость силы, требуемой для отделения от поверхности SiO<sub>2</sub> полиимидного "сухого" адгезива, от расстояния между центрами "ворсинок" (цифры возле экспериментальных точек означают отношение  $2a/L$ , где  $a$  — радиус "ворсинок",  $L$  — их длина [19])

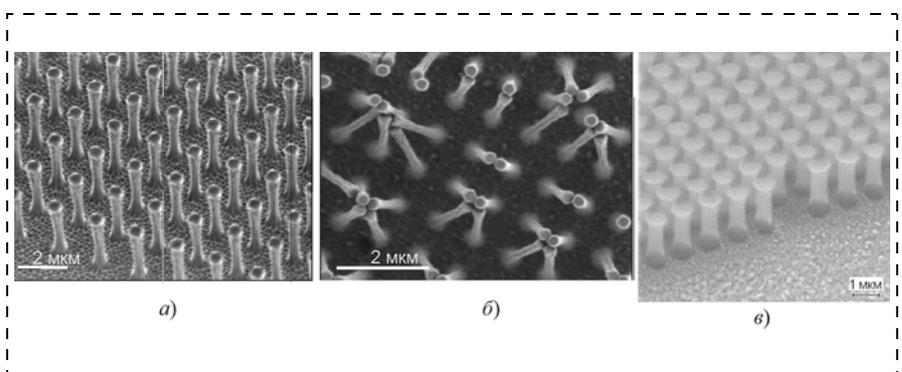
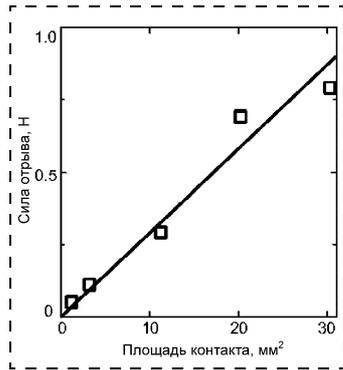


Рис. 12. Сканирующие электронные микрофотографии поверхности полиимидных "сухих" адгезивов, полученных методами литографии и травления с использованием алюминиевой (а, б) и никелевой (в) масок [19, 20]

Рис. 13. Зависимость силы, требуемой для отделения от поверхности стекла полиимидного "сухого" адгезива, от площади контакта [19]



примерно равна 70 нН, а весь участок размером 1 см<sup>2</sup> выдерживает 3 Н. Это усилие сопоставимо с рассчитанной адгезионной прочностью в 10 Н/см<sup>2</sup> для пальцев геккона. Человеческие ладони имеют общую площадь поверхности более 200 см<sup>2</sup>, и если бы они были покрыты таким материалом, то были бы способны выдержать вес среднего человека.

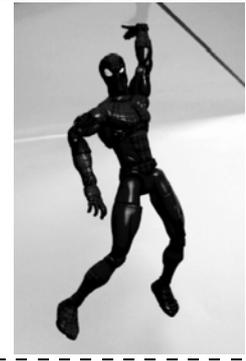
Экспериментальную оценку способности "сухого" адгезива к многократным циклам прилипания и отрыва провели на игрушке (рис. 14) с использованием различных поверхностей [19]. Ухудшение адгезии при этом связано, в первую очередь, с изломом "ворсинок" и их слипанием с поверхностью основы. Полученные результаты свидетельствуют о необходимости оптимизации как материалов, так и технологии "сухих" адгезивов с точки зрения устойчивости к многократным циклам прилипания и отрыва.

В работе [22] показана возможность получения "сухих" адгезивов из углеродных нанотрубок в качестве "ворсинок", закрепленных на полимерной основе. Кривые "сила—смещение", полученные с помощью АСМ, показывают, что локальная адгезия зонда к такому адгезиву в 200 раз выше, чем к "ворсинкам" на пальце геккона.

Таким образом, изготовление поверхностных полимерных структур, обеспечивающих эффект "сухой" адгезии, сопряжено с трудностями формирования заданных геометрических параметров (формы, характеристического отношения и плотности) и регулирования распределения полимерных "ворсинок" по поверхности основы. Относительно простые экономичные методы, например, репликация с использованием микро- и/или нанопористых мембран, позволяют получить "ворсинки" с высоким характеристическим отношением (до 1 : 300), а также трехуровневые "сухие" адгезивы. Однако геометрическую структуру и распределение "ворсинок", полученных данными методами, регулировать не представляется возможным.

Изготовление "сухих" адгезивов с регулярными структурой и распределением "ворсинок" предполагает использование высокопрецизионного обо-

Рис. 14. Игрушечный человек-паук (высота 15 см, масса 40 г), прилипший к горизонтальной стеклянной поверхности. Участок, покрытый "ворсинками", обеспечивает площадь контакта около 0,5 см<sup>2</sup> и может выдержать массу более 100 г [19]



рудования, установок электронно-лучевой литографии и фотолитографии, а также анизотропного, в том числе глубинного реактивного ионного травления, и других процессов, разработанных в микро- и нанотехнологии.

"Сухие" адгезивы должны обеспечивать сочетание высоких адгезионных свойств (прочности сцепления с твердыми поверхностями), способности к самоочищению (сверхгидрофобности) и долговечности. Поэтому при выборе материала "ворсинок" в первую очередь необходимо учитывать его физико-механические характеристики, в частности, модуль упругости, и значение поверхностной энергии: с одной стороны, поверхность "сухого" адгезива должна быть высокоэнергетической, а с другой стороны — обеспечивать сверхгидрофобность "ворсинок". Так, полиимид хорошо зарекомендовал себя как материал для изготовления "сухих" адгезивов благодаря достаточно высоким физико-механическим характеристикам. Однако данный полимер не может в полной мере обеспечить эффект самоочищения без специального гидрофобного покрытия.

Данные исследований адгезии "ворсинок" к подложкам различной природы сложно сопоставить между собой вследствие применения различных методик для оценки адгезионных характеристик. Однако в результате проведенных с помощью АСМ исследований адгезионных характеристик полиимидных "ворсинок", полученных методом микролитографии с последующим анизотропным травлением, удалось выяснить, что наибольшую адгезию обеспечивают "сухие" адгезивы с наименьшим расстоянием между "ворсинками", но таким, которое не позволяет им слипаться между собой, а их характеристическое отношение не имеет большого значения. При этом адгезионные характеристики значительно возрастают при изготовлении "ворсинок" на эластичных основах. Максимальная достигнутая на сегодняшний день сила взаимодействия полученной методом репликации отдельной искусственной "ворсинки" из ОНП с радиусом кончика 350 нм с АСМ-зондом составляет приблизительно 250 нН (для "ворсинки" геккона —

200 нН). Участок поверхности размером  $1 \text{ см}^2$ , покрытый полиимидными "ворсинками", выдерживает 3 Н (для пальцев геккона —  $10 \text{ Н/см}^2$ ). В настоящее время интерес представляют изготовление "сухих" адгезивов с углеродными нанотрубками в качестве "ворсинок" и обеспечение способности к многоцикловым режимам прилипания и отрыва "сухого" адгезива без повреждения его поверхностной структуры за счет уменьшения усилия прижима и ослабления связи в момент отрыва.

#### Список литературы

1. **Бабаевский П. Г., Жуков А. А., Шаповал С. Ю., Гринькин Б. А.** Адгезионное взаимодействие твердых поверхностей и создание полимерных "сухих" адгезивов. Теоретические аспекты // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 2. С. 2—8.
2. **Full R. J., Fearing R. S., Kenny T. W., Autumn K.** Adhesive microstructure and method of forming same // Patent US 6737160B1. 2004.
3. **Fearing R. S., Sitti M.** Adhesive microstructure and method of forming same // Patent US 68724391B2. 2005.
4. **Gardner J., Varadan V.** Microsensors, MEMS, and Smart Devices. 2001. New York. 502 p.
5. **Sitti M., Fearing R. S.** Synthetic gecko foot-hair micro/nanostructures as dry adhesives // Journal of Adhesion Science and Technology. 2003. V. 18. N 7. P. 1055—1074.
6. **Sitti M., Fearing R. S.** Nanomolding based fabrication of synthetic gecko foot-hairs // Proceedings of the IEEE Nanotechnology Conference. August 2002. P. 137—140.
7. **Sitti M., Fearing R. S.** Synthetic gecko foot-hair micro/nanostructures for future wall-climbing robots // Proceedings of the 2003 IEEE International Conference on Robotics and Automation. September 2003. Taipei. Taiwan. P. 1164—1170.
8. **Sitti M.** High aspect ratio polymer micro/nanostructures manufacturing using nanoembossing, nanomolding and directed self-assembly // IEEE/ASME Advanced Mechatronic Conference. July 2003. Kobe. Japan. ([www.me.cmu.edu/faculty1/sitti/nano/publications/aim03\\_sitti.pdf](http://www.me.cmu.edu/faculty1/sitti/nano/publications/aim03_sitti.pdf)).

9. **Menon C., Murphy M., Sitti M.** Gecko inspired surface climbing robots // IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics (ROBIO). August 2004. Shenyang. China. ([www.me.cmu.edu/faculty1/sitti/nano/publications/waalbots\\_robio04.pdf](http://www.me.cmu.edu/faculty1/sitti/nano/publications/waalbots_robio04.pdf)).
10. **Мулдер М.** Введение в мембранную технологию. Пер. с англ. М.: Мир, 1999. 513 с.
11. **Schaffer E., Albrecht T. T., Russell T. P., Steiner U.** Electrically induced structure formation and pattern transfer // Nature. 2000. V. 403. N 24. P. 874—877.
12. **Northern M., Turner K.** A bath fabricated biomimetic dry adhesive // Nanotechnology. 2005. V. 16. P. 1159—1166.
13. **Hamaker H. C.** The London-van der Waals attraction between spherical particles // Physica. 1937. V. 4. N 10. P. 1058—1072.
14. **Israelachvili J.** Intermolecular and surface forces. 1992. New York: Academic Press. 450 p.
15. **Johnson K. L., Kendall K., Roberts A. D.** Surface energy and the contact of elastic solids // Proceedings of the Royal Society. London. 1971. V. 324. P. 301—313.
16. **Chan Y., Lee Y., Wong M., Zohar Y.** High-throughput fabrication of submicron pillar arrays for free-solution DNA electrophoresis without E-beam lithography // Proceedings of the 2005 IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics. June—July 2005. Hong Kong and Macau. P. 101—104.
17. **Chalykh A. E., Matveev V. V., Nikiforov A. P.** et al. About mechanism of surface roughness development on polyimide films during anisotropic etching by fast atomic oxygen // Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Symposium on "Materials in Space Environment". Toulouse. France. June 1997. P. 243—246.
18. **Autumn K., Sitti M., Liang Y.** et al. Evidence for van der Waals adhesion in gecko setae // Proceedings of the National Academy of Science. 2002. V. 99. N 19. P. 12252—12256.
19. **Geim A. K., Dubonos S. V., Grigorieva I. V.** et al. Microfabricated adhesive mimicking gecko foot-hair // Nature Materials. 2003. V. 2. P. 461—463.
20. **Shapoval S., Geim A., Dubonos S.** et al. "Gecko-style" dry adhesives on flexible substrate // 12<sup>th</sup> International Symposium Nanostructures: Physics and Technology. June 2004. St. Petersburg. Russia. P. 201—202.
21. **Жуков А. А., Жукова С. А., Четверов Ю. С.** и др. Формирование рельефа в полиимидных покрытиях травлением в ЭЦР-плазме // Прикладная физика. 2004. № 1. С. 118—123.
22. **Yurdumakan B., Raravikar N., Ajayan P., Dhinojwala A.** Synthetic gecko foot-hairs from multiwalled carbon nanotubes // Chemical Communications. 2005. V. 30. P. 3799—3801.

УДК 537.226.33

**Ю. В. Шалдин**, канд. физ.-мат. наук,  
**М. Х. Рабаданов**, д-р физ.-мат. наук, доц.,  
Институт кристаллографии  
им. А. В. Шубникова РАН  
e-mail: rab\_mur@ns.crys.ras.ru

## МЕЗОСТРУКТУРА ПИРОЭЛЕКТРИКОВ

*На примере пироэлектрических классов кристаллов рассмотрены и выявлены ацентрические мезофрагменты структуры, которые ответственны за утрату средой инверсионной симметрии. Особое внимание уделено трансформации мезоструктур пироэлектриков в процессе фазовых переходов.*

Теоретические подходы описания физических свойств кристаллических сред основываются на представлении об идеальности структуры кристал-

лов, подчиняющейся определенным симметричным законам. Несмотря на все упрощения, которые вносит симметрия, полная теория основного объекта физики твердого тела — идеального кристалла — никогда не может быть построена, так как это теория многих сильно взаимодействующих частиц. Поэтому даже в теории идеального кристалла приходится строить некую модель для описания его конкретных свойств. Основной принцип построения сводится к тому, что необходимо выделить в идеальном кристалле некую подсистему, которая обладала бы конечным числом коллективных степеней свободы [1, 2]. И этого можно добиться в рамках кристаллофизического подхода [3], основанного на разложении тензоров, описывающих те или иные физические свойства, на тензорные подпространства веса  $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ .

Рассмотрим те кристаллические классы веществ, точечные группы симметрии (ТГС) которых не содержат операции отражения от начала координат. Фи-

Линейно независимые коэффициенты инвариантов для всех классов ацентрических кристаллов

ТГС	Система образующих	Ранг тензорных инвариантов $L$		
		1	2	3
$6mm$	$z_6, E_x$	$P_3(A), -P_3(B)$	$Q_{11}^* = Q_{22}^* = -1/2 Q_{33}^*$	$S_{131}$
$4mm$	$z_4, E_x$	$P_3(A), -P_3(B)$	$Q_{11}^* = Q_{22}^* = -1/2 Q_{33}^*$	$S_{131}$
6	$z_6$	$P_3(A), -P_3(B)$	$Q_{11}^* = Q_{22}^* = -1/2 Q_{33}^*$	$S_{131}$
4	$z_4$	$P_3(A), -P_3(B)$	$Q_{11}^* = Q_{22}^* = -1/2 Q_{33}^*$	$S_{131}$
3	$z_3$	$P_3(A), -P_3(B)$	$Q_{11}^* = Q_{22}^* = -1/2 Q_{33}^*$	$S_{131}, S_{121}, S_{212}$
$3m$	$z_3, E_x$	$P_3(A), -P_3(B)$		$S_{131}, S_{212}$
$mm2$	$z_2, E_x$	$P_3(A), -P_3(B)$	$Q_{12}^*$	$S_{131}, S_{232}$
2	$y_2$	$P_2(A), -P_2(B)$	$Q_{ii}^* \neq 0, i = 1, 2, 3, Q_{13}^*$	$S_{131}, S_{232}, S_{321}, S_{323}$
$m$	$E_x$	$P_i(A), -P_i(B), i = 1, 2$	$Q_{12}^*, Q_{23}^*$	$S_{131}, S_{232}, S_{323}, S_{121}$
1	—	$P_i(A), -P_i(B), i = 1, 2, 3$	$Q_{ij}^*$	$S_{ijk}$
$\bar{4}3m$	$S_x, S_y, (S_z)$			$S_{321}$
23	$x_2, y_2$			$S_{231}$
$\bar{6}m2$	$z_3, x_2, E$			$S_{212}$
$\bar{6}$	$z_3, E$			$S_{121}, S_{212}$
622	$z_6, x_2$		$Q_{11}^* = Q_{22}^*, Q_{33}^*$	
$\bar{4}$	$S_z$		$Q_{11}^* = Q_{22}^*, Q_{33}^*$	$S_{321}$
422	$z_4, x_2$		$Q_{11}^* = Q_{22}^*, Q_{33}^*$	
32	$z_3, x_2$		$Q_{11}^* = Q_{22}^*, Q_{33}^*$	$S_{121}$
222	$z_2, y_2, x_2$		$Q_{11}^*$	$S_{321}$

зические свойства таких сред можно охарактеризовать двумя основными категориями величин, преобразующихся как коэффициенты центро- и нецентросимметричных тензоров. Примером центросимметричных свойств является их диэлектрическая оптическая проницаемость; нецентросимметричных — их нелинейная (например, квадратичная) поляризуемость. Основываясь на этой концепции, согласно принципу Неймана можно

установить взаимно однозначное соответствие между физическими свойствами кристаллов и их структурными особенностями, характеризующимися прежде всего внутренними параметрами. Так как в работе будут рассмотрены только пирозлектрические классы кристаллов, основная задача при анализе их структур будет сводиться к выявлению тех ацентрических фрагментов, которые ответственны за утрату средней симметрии относительно инверсии.

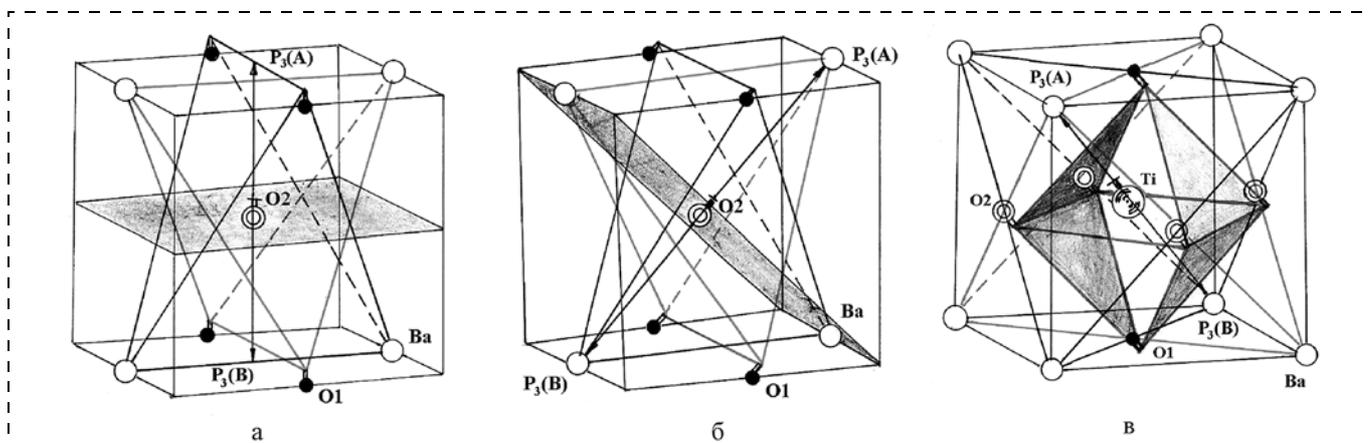


Рис. 1. Мезотетраэдры тетрагональной  $P4mm$  (а), орторомбической  $Cmm2$  (б) и тригональной  $R3m$  (в) сегнетофаз  $BaTiO_3$ ;  $P_3(A)$  и  $P_3(B)$  — спонтанные поляризации двух подрешеток, образованных мезотетраэдрами А и В. В первых двух модификациях ион титана играет второстепенную роль, связывая между собой мезотетраэдры А и В

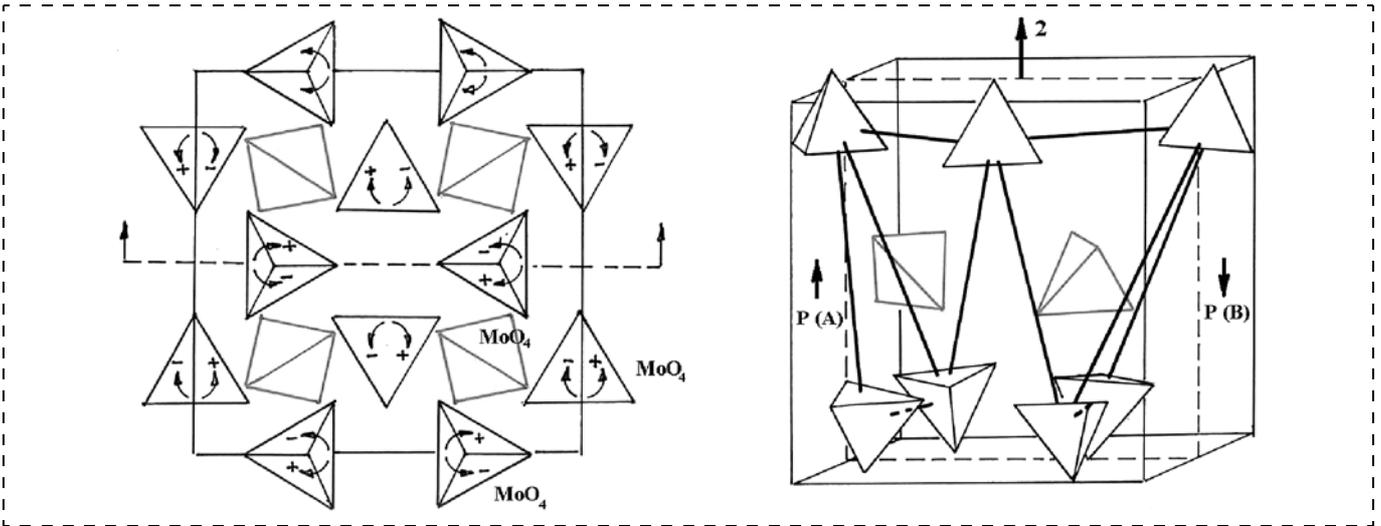


Рис. 2. Мезоструктура несобственного сегнетоэлектрика  $Tb_2(MoO_4)_3$  (пр. группа  $P6_32$ );  $P(A)$  и  $P(B)$  — спонтанные поляризации двух подрешеток, образованных мезотетраэдрами А и В. Поскольку мезотетраэдры практически одинаковы и отличаются только ориентацией, то суммарная поляризация определяется псевдоквадрольным взаимодействием:  $P_s = \alpha_{12}^* Q^*$ . Стрелками показаны направления вращения мезотетраэдров при переполяризации кристалла

Эмпирические представления кристаллохимии показывают, что в качестве наиболее распространенных элементов структуры ацентрических кристаллов выступают тетраэдры или их разнообразные комбинации. Такой взгляд на структуру согласуется с кристаллофизическим подходом, поскольку тетраэдр дает наиболее наглядное физическое представление о неэквивалентности взаимно противоположных кристаллографических направлений (от вершины тетраэдра к его центру и от цен-

тра к основанию) как условия утраты средой симметрии относительно инверсии.

Структурные особенности ацентрических кристаллов, материализующиеся в виде разнообразных комбинаций тетраэдров, можно описать, вводя в рассмотрение математические величины, инвариантные относительно элементов симметрии среды и следующие из разложения полярного тензора 3-го ранга на подпространства векторов, псевдоскаляров и септоров, с которыми связываются макроскопические дипольные  $D_i$ , псевдоквадру-

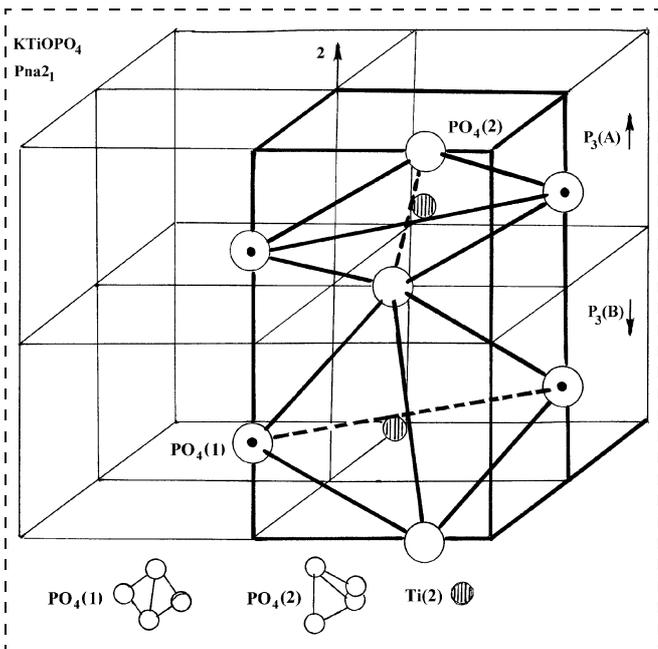


Рис. 4. Фрагмент мезоструктуры сегнетоэлектрика  $KTiOPO_4$ ;  $P_3(A)$  и  $P_3(B)$  — спонтанные поляризации двух подрешеток

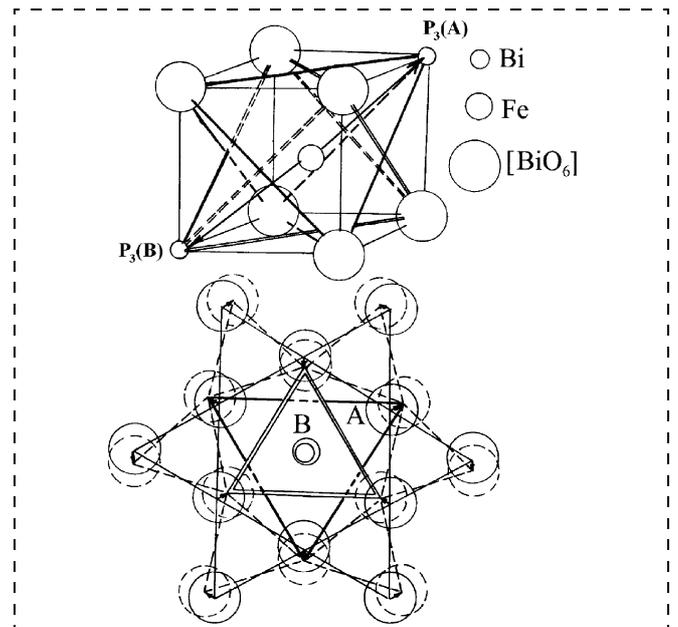


Рис. 5. Мезоструктура сегнетомангнетика  $BiFeO_3$  (пр. группа  $R3c$ ), основной вклад в спонтанную поляризацию которого вносит оккупольный момент:  $P_s = \beta_{3311} S_{311}$

польные  $Q_{ij}^*$ , и октупольные  $S_{ijk}$  моменты. В таблице для всех классов ацентрических кристаллов приведены линейно независимые коэффициенты инвариантов, используемые наряду с внешними параметрами для описания отклонения среды от центральной симметрии. Введенные таким способом параметры отвечают определенным деформациям тетраэдров или их макрофрагментов. Однако ситуация в реальных кристаллах может оказаться значительно сложнее. Конкретные структуры кристаллов приведены на рис. 1–6 (рис. 3, 6 см. на третьей стороне обложки).

### Выводы

- Выделение в кристаллической структуре мезообразований позволяет перейти от анализа смещений отдельных атомов к анализу дисторсии мезофрагментов, ответственных за возникновение полярного состояния среды.

- Результаты разложения тензора третьего ранга, определенного на классе пьезоэлектриков, дают возможность подвести математическую базу под классификацию сегнетоэлектриков по Абрагамсу и Киви [4], основанную на данных прецизионных структурных исследований

*Работа выполнена при финансовой поддержке "Фонда содействия отечественной науке".*

### Список литературы

- Вакс В. Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 326 с.
- Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир, 1981. 580 с.
- Шалдин Ю. В. Вычисление спонтанной поляризации сегнетоэлектриков по данным оптических и пьезоэлектрических измерений // ФТТ. 1977. Т. 19. № 5. С. 1580.
- Abrahams S. C., Keve E. T. Structural basis of ferroelectricity and ferroelasticity // Ferroelectrics. 1971. V. 2. P. 129–154.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 621.372.061

А. К. Мамедов, д-р техн. наук, доц.,  
Азербайджанский технический университет

### ОЦЕНКА ПЕРЕХОДНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОННЫХ СХЕМ С ОПЕРАЦИОННЫМИ УСИЛИТЕЛЯМИ В РЕЖИМЕ БОЛЬШОГО СИГНАЛА

*Предложено для приближенной оценки переходной характеристики электронных схем на основе операционных усилителей в режиме большого сигнала использовать метод энергетической линеаризации. Алгоритм построения переходной характеристики продемонстрирован на примере передающего каскада оптоэлектронного устройства с дифференциальным оптроном.*

Для оценки динамических параметров электронных схем с обратной связью на основе операционных усилителей (ОУ) в широком диапазоне входных сигналов необходимо учитывать проявляющиеся при этом нелинейные эффекты, связанные с ограниченной скоростью нарастания выходного напряжения ОУ. В [1] для анализа частотных характеристик схем на ОУ использован метод гар-

монической линеаризации. Известно, что прямая интерпретация частотных характеристик системы с точки зрения ее поведения в переходных процессах, в общем, довольно затруднительна. В настоящей статье для приближенной оценки переходной характеристики электронных схем на основе ОУ в режиме большого сигнала применен метод энергетической линеаризации, разработанный в [2] для определения переходного процесса в замкнутых автоматических системах с одним нелинейным элементом (НЭ).

Использование метода энергетической линеаризации для анализа электронных схем на ОУ основано на том, что в режиме большого сигнала ОУ описывается нелинейной моделью, содержащей один нелинейный элемент с передаточной характеристикой типа насыщения, который связан с входным дифференциальным каскадом, и последовательно с ним соединенный интегратор, отражающий частотную зависимость коэффициента усиления ОУ. В соответствии с этой моделью схему с обратной связью на ОУ в частотной области представим в виде, приведенном на рис. 1. Здесь

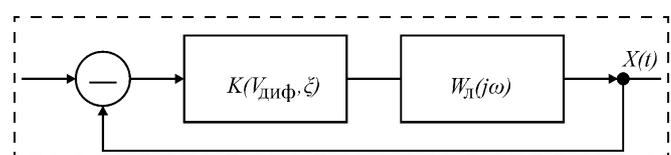


Рис. 1. Структурная схема устройства с ОУ в частотной области

$W_{\text{л}}(j\omega)$  — коэффициент передачи линейной части схемы с обратной связью;  $K(V_{\text{диф}}, \zeta)$  — коэффициент передачи НЭ, называемый коэффициентом энергетической линеаризации. Согласно определению из [2], этот коэффициент является функцией амплитуды входного сигнала  $V_{\text{диф}}$  НЭ и коэффициента демпфирования  $\zeta$ . Необходимым условием данного рассмотрения является наличие такой линейной части системы, при которой существенное влияние на ее движение независимо от порядка системы оказывают только две комплексно-сопряженные доминирующие ветви корневого годографа вблизи (левее) мнимой оси, которым соответствуют два комплексно-сопряженных корня  $s_{1,2} = -\sigma \pm j\omega$  (здесь  $\sigma$  — затухание,  $\omega$  — частота).

В режиме малого сигнала, т. е. при  $V_{\text{диф}} < V_{\text{л}}$  (где  $V_{\text{л}}$  — значение  $V_{\text{диф}}$ , соответствующее линейному участку передаточной характеристики НЭ) работа схемы с обратной связью происходит на линейном участке передаточной характеристики НЭ, и при выбранном значении коэффициента усиления по петле обратной связи  $L_0$ , которому соответствуют фиксированные значения параметров  $\sigma$  и  $\omega$ , переходная характеристика схемы при указанных выше условиях приближенно описывается выражением

$$V(t) \approx V_{\text{диф},0} e^{-\sigma t} \cos \omega t,$$

где  $V_{\text{диф},0} = V(0)$  — заданное начальное значение сигнала на входе НЭ при  $t = 0$ .

В режиме большого сигнала, т. е. при  $V_{\text{диф},0} > V_{\text{диф},\text{л}}$ , сказывается нелинейность передаточной характеристики НЭ, а коэффициент усиления по петле обратной связи, равный  $L = L_0 K(V_{\text{диф}}, \zeta)$ , становится переменным. Это обуславливает перемещение с течением времени "изображающей точки"  $L = \text{var}$  по доминирующим ветвям корневого годографа и, как следствие, изменение во времени параметров  $\sigma$  и  $\omega$  затухающего переходного процесса.

Этапы решения указанной задачи продемонстрируем на примере передающего каскада оптоэлектронного устройства с дифференциальным оптроном [3], схема которого представлена на рис. 2.

Передаточная функция эквивалентной линеаризованной системы определяется выражением

$$W_{\text{э}}(s) = K(V_{\text{диф}}, \zeta) W_{\text{л}}(s).$$

В соответствии с рис. 2 для  $W_{\text{л}}(s)$  нетрудно получить

$$\begin{aligned} W_{\text{л}}(s) &= \frac{L_0}{(1 + s\tau_{\text{ут}})(1 + s\tau_{\text{сд}})(1 + s\tau_{\text{э}})} = \\ &= \frac{L_0(-p_1 p_2 p_3)}{(s - p_1)(s - p_2)(s - p_3)}, \end{aligned}$$

здесь  $\tau_{\text{э}} = R_{\text{экв}} C_{\text{фд}}$ ;  $R_{\text{экв}} = R_{\text{см}} \| R1 \| R_{\text{фд}}$ ;

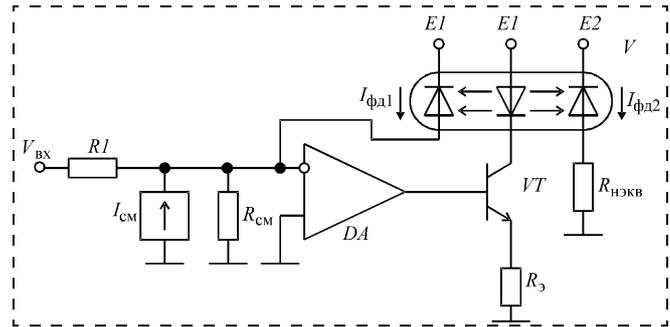


Рис. 2. Передающий каскад оптоэлектронного устройства

$$c = -p_1 p_2 p_3; p_1 = -\frac{1}{\tau_{\text{э}}}; p_2 = -\frac{1}{\tau_{\text{сд}}}; p_3 = -\frac{1}{\tau_{\text{ут}}}; L_0 = L(0) = K_{i\text{диф}}(0) K_{i\text{ут}}(0) R_{\text{экв}}/R_{\text{вх}},$$

где  $K_{i\text{диф}}$  — дифференциальный коэффициент передачи по току оптрона;  $K_{i\text{ут}}$  — коэффициент передачи по току усилителя тока;  $R_{\text{вх}}$  — входное сопротивление ОУ;  $C_{\text{фд}}$  — емкость фотодиода;  $\tau_{\text{сд}}$ ,  $\tau_{\text{ут}}$  — постоянные времени светодиода и усилителя тока;  $p_1, p_2, p_3$  — полюсы передаточной функции  $W_{\text{л}}(s)$ .

Для конкретности принимаем:

$R1 = 100$  кОм;  $R_{\text{см}} = 70$  кОм;  $R_{\text{э}} = 2$  кОм;  $R_{\text{вх}} \approx 100$  кОм;  $K_{i0} = 10^4$ ;  $f_{\text{т}} = 1$  МГц;  $\vartheta_{V_{\text{вых}}} = 0,6$  В/мкс;  $V_{\text{вх}} = \pm 5$  В;  $K_{i\text{диф}} = 1\%$ ;  $I_{\text{см}} = 100$  мкА;  $\tau_{\text{сд}} = 300$  нс;  $C_{\text{фд}} = 10$  пФ. Здесь  $f_{\text{т}}$ ,  $K_{i0}$  — частота единичного усиления и коэффициент усиления по напряжению ОУ на нулевой частоте;  $\vartheta_{V_{\text{вых}}}$  — скорость нарастания выходного напряжения ОУ;  $V_{\text{вх}}$  — амплитуда входного сигнала устройства.

Тогда

$$p_3 = -\omega_{\text{т}}/K_{i0} = -6,28 \cdot 10^2 \text{ с}^{-1}; p_1 = -7 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}; p_2 = -3,34 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}; R_{\text{экв}} = 30 \text{ кОм}; V_{\text{диф},\text{л}} = \vartheta_{V_{\text{вых}}}/\omega_{\text{т}} = 0,1 \text{ В}; L_0 = 0,75 \cdot 10^4.$$

Воспользовавшись известными свойствами корневых годографов [2], построим годограф рассматриваемой схемы с обратной связью, представленный на рис. 3. Характерные признаки годографа: точка пересечения с действительной осью  $\alpha = -1,45 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ; число ветвей годографа — 3; углы наклона асимптот —  $60^\circ, 180^\circ, 300^\circ$ ; точка пересечения асимптот с действительной осью  $\sigma_{\alpha} = -3,45 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ; точки пересечения с мнимой осью  $\omega_{\text{кр}} = \pm 4,9 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ;  $L_{0,\text{кр}} = 1,6 \cdot 10^4$  — значение  $L_0$  при  $\omega = \omega_{\text{кр}}$ .

На рис. 3 нанесены лучи, которым соответствуют значения  $\zeta = 0,1; 0,2; \dots 1$ . С учетом выражения  $L = l_1 l_2 l_3 / c$  [2], где  $l_1, l_2, l_3$  — длины векторов, проведенных из точек  $p_i$  в точку  $s_1$ , определены значения  $L$ , соответствующие значениям  $\zeta$ , и построена зависимость  $L = f_1(\zeta)$ , представленная на рис. 4.

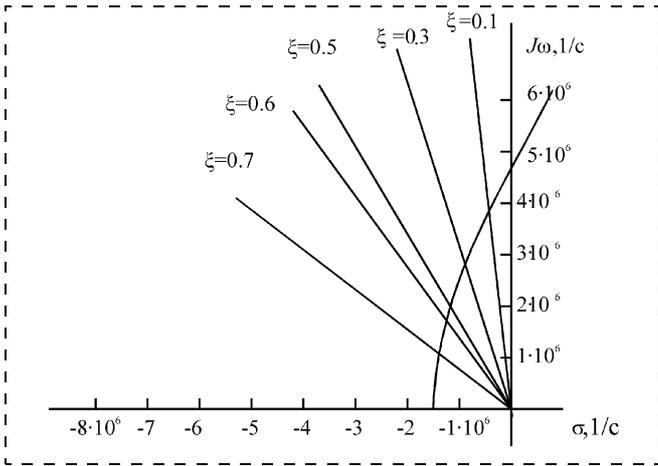


Рис. 3. Корневой годограф схемы, представленной на рис. 2

Найдем отношение  $V_{\text{диф}0}/V_{\text{диф.л}}$ . Для схемы, приведенной на рис. 2, можно записать:

$$V_{\text{диф}}(s) = V_{\text{вх}} \eta_{\text{вх}i}(s) R_{\text{вх}}/R1, \quad (1)$$

где

$$\eta_{\text{вх}i}(s) = I_{\text{диф}}/I_{\text{вх}} = (R_{\text{экв}} \parallel R_{\text{вх}})/[R_{\text{вх}}(1 + s\tau_{\text{э}})]. \quad (2)$$

На высоких частотах (порядка  $\omega_T$ ) из (1) и (2) получим

$$V_{\text{диф}0}/V_{\text{диф.л}} \approx V_{\text{вх}}(R_{\text{экв}} \parallel R_{\text{вх}})/(2R1V_{\text{диф.л}}). \quad (3)$$

Учитывая исходные данные, из (3) имеем  $V_{\text{диф}0}/V_{\text{диф.л}} \approx 6$ .

Найдем точки пересечения кривых  $K(V_{\text{диф}}, \zeta)$  с вертикальной прямой, проведенной для значения  $V_{\text{диф}0}/V_{\text{диф.л}} \approx 6$ , и в соответствии с выражением  $L = L_0 K(V_{\text{диф}}, \zeta)$  построим зависимость  $L = f_2(\zeta)$ , представленную на рис. 4.

Согласно рис. 4, точка пересечения кривых  $f_1(\zeta)$  и  $f_2(\zeta)$  для интервала  $\pi \geq \omega \geq 0$  дает  $\zeta = 0,58$ ,  $L = 2,3 \cdot 10^3$ .

Тогда

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= \arcsin \zeta = 0,62 \text{ рад}; \quad \omega_0 = 2,1 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}; \quad \sigma = \\ &= \zeta \omega_0 = 1,22 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}; \quad \omega = \omega_0 \sqrt{1 - \zeta^2} = 1,71 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}; \\ s_{1,2} &= \sigma \pm j\omega = 1; \quad T = 2\pi/\omega = 3,67 \text{ мкс}. \end{aligned}$$

Переходная характеристика подобных систем описывается выражением [2]

$$V_{\text{диф}}(t) = V_{\text{диф}0} \frac{\omega_0}{\omega} e^{-\sigma t} \cos(\omega t - \varphi_0). \quad (4)$$

Учитывая соотношение (4), определим момент  $t_1$  прохождения переходной характеристики через нуль и момент  $t_2$ , соответствующий ее первому максимальному выбросу:  $V_{\text{диф}}(t) = 0$  при  $\omega t_1 - \varphi_0 = \pi/2$ , откуда  $t_1 = 1,29$  мкс;  $V_{\text{диф}}(t) = -V_{\text{диф}1}$  при  $\omega t_2 = \pi$ , откуда  $t_2 = 1,84$  мкс. В соответствии с (4) для амплитуды имеем  $V_{\text{диф}1} = 0,063$  В.

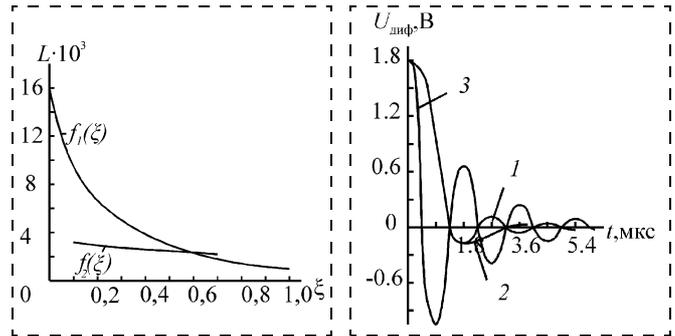


Рис. 4. Зависимости коэффициента усиления по петле обратной связи от коэффициента демпфирования

Рис. 5. Переходные характеристики оптоэлектронного устройства, представленного на рис. 2: кривая 1 — приближение в два шага; кривая 2 — приближение в один шаг; кривая 3 — линейное приближение

Положив  $V_{\text{диф}}(0) = -V_{\text{диф}1}$ , проведем аналогичный расчет для второго интервала. Так как  $V_{\text{диф}1} = 0,063 \text{ В} < V_{\text{диф.л}} = 0,1 \text{ В}$ , то в дальнейшем НЭ работает на линейном участке передаточной характеристики, а ОУ функционирует в режиме малого сигнала. При этом частота  $\omega$  и затухание  $\sigma$  принимают фиксированные значения. Для дальнейшего переходного процесса имеем:  $L_0 = 7,5 \cdot 10^3$ ;  $\zeta_{\text{лин}} = 0,16$ ;  $\varphi_0 = 0,16$  рад;  $\omega_0 = 3,55 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ;  $\sigma = 0,57 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ;  $\omega = 3,5 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ;  $T = 1,8$  мкс;  $t_1 = 0,49$  мкс;  $t_2 = 0,9$  мкс;  $V_{\text{диф}2}/V_{\text{диф}1} = 0,6$ ;  $V_{\text{диф}3}/V_{\text{диф}1} = 0,36$ .

Переходная характеристика, построенная по результатам представленного расчета, приведена на рис. 5 (кривая 1). В соответствии с кривой 1 время установления переходного процесса  $t_y$  при допустимой относительной погрешности  $\delta = 5\%$  равно 3,5 мкс. На том же рисунке построена переходная характеристика (кривая 2), соответствующая более грубому приближению в один шаг. При этом параметры переходного процесса после расчета на первом шаге далее считаются неизменными. В соответствии с кривой 2 значение  $t_y$  равно 2,7 мкс. Для сравнения на рис. 5 представлена кривая 3, построенная в предположении линейного приближения ( $\zeta = 0,16$ ). Время установления при  $\delta = 5\%$  составляет 5,4 мкс.

Сравнение с экспериментом (время установления равно 3,6 мкс) показывает, что приближение в два шага дает наиболее хорошее совпадение.

#### Список литературы

1. Allen P. E. Slew induced distortion in operational amplifiers / IEEE Journal of solid-state circuits. 1977. V. sc.-12, 1. P. 39–44.
2. Удерман Э. Т. Метод корневого годографа в теории автоматических систем. М.: Наука, 1972. 448 с.
3. Носов Ю. Р., Сидоров А. С. Оптроны и их применение. М.: Радио и связь, 1981. 280 с.

УДК 621.382

**И. И. Абрамов**, д-р физ.-мат. наук, проф.  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники, Минск,  
Республика Беларусь

## ПРОБЛЕМЫ И ПРИНЦИПЫ ФИЗИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ.

### Ч. II. Модели полуклассического подхода

*В данной части работы выделены и рассмотрены физико-математические основы моделирования физических процессов в разнообразных элементах микроэлектроники в рамках полуклассического подхода.*

#### Строгие методы

Полуклассический (квазиклассический) подход применим, когда характерные размеры элемента  $L_{\text{хар}}$  гораздо больше длины волны де Бройля  $\lambda_B$  [1]. В целом, это, как правило, выполняется для приборных структур микроэлектроники. В связи с этим данный подход традиционно используется для моделирования элементов микроэлектроники. В настоящее время в рамках полуклассического подхода построено огромное число моделей, описание которых невозможно даже в рамках большой книги. К счастью, это многообразие моделей может быть систематизировано.

Цель данной работы — выделение и рассмотрение физико-математических основ моделирования физических процессов в разнообразных элементах микроэлектроники в рамках полуклассического подхода. При этом будем следовать классификации, предложенной в [2—5], как наиболее полно соответствующей целям цикла статей.

При создании кинетической теории классических систем основополагающей является теорема Лиувилля для полной вероятностной функции распределения  $f^{(N)}$   $N$  одинаковых частиц. После интегрирования по координатам и импульсам  $N - l$  частиц из **обратимого уравнения Лиувилля** при ряде предположений может быть получена цепочка (или иерархия) уравнений Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона (ББГКИ) для приведенных функций распределения  $f^{(l)}$  [6, 7]. Серьезным недостатком этих уравнений является то, что в уравнение для  $f^{(l)}$  входит  $f^{(l+1)}$ . Таким образом, при **строгом** (в рамках полуклассического) **подходе**

к описанию электронно-дырочной плазмы (ЭДП) в элементах необходимо решать все уравнения цепочки, что практически нереально, так же как и решение исходного уравнения Лиувилля для многочастичной функции распределения  $f^{(N)}$ . Заметим, что здесь в **строгом подходе** (подчеркиваем — но не точном) мы по сути дела **постулировали в качестве "первого шага"** при переходе от реального объекта к его модели **справедливость обратимого уравнения Лиувилля**.

Вследствие практической невозможности использования такого подхода традиционным стал переход к уравнению для одночастичной функции распределения  $f^{(1)}$  (в дальнейшем  $f$ ). Этот переход от обратимых ББГКИ уравнений, например, к **необратимому кинетическому уравнению Больцмана** (КУБ) выполняется в результате введения условия полного ослабления начальных корреляций (условия Боголюбова). Для нас важно отметить, что уже здесь (на "втором шаге") при выводе используются физические допущения с огрублением по пространству, времени и в результате статистического усреднения.

Данное упрощенное КУБ выводится и для твердых тел, включая полупроводники [8]. Традиционно оно записывается в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}}, \quad (1)$$

где **полевой член**

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} = -(\mathbf{v}\nabla_r f) - \frac{1}{m}(\mathbf{F}\nabla_v f) \quad (2)$$

описывает скорость изменения функции распределения  $f$  в результате движения носителей массы  $m$  в  $\mathbf{r}$ - и  $\mathbf{v}$ -пространстве, а **член столкновений**

$$S = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = \int \{f(\mathbf{v}', \mathbf{r}', t)W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')\} d^3v' \quad (3)$$

описывает скорость изменения функции  $f$  в результате столкновений (рассеяния) носителей. Здесь введены следующие обозначения:  $t$  — время;  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор пространства;  $\mathbf{v}$  — скорость носителей;  $\nabla_r, \nabla_v$  — градиенты по соответствующим направлениям;  $\mathbf{F}$  — сила, действующая на носитель и определяемая внешними полями;  $W(\mathbf{v}', \mathbf{v})$  — характеризует вероятность перехода из состояния  $(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$  в состояние  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ .

В общем случае при рассмотрении ЭДП в приборных структурах необходимо учитывать то, что она состоит из нескольких сортов подвижных носителей заряда (традиционно — электронов и дырок). КУБ может быть обобщено на этот случай в виде системы кинетических уравнений. При этом происходит существенное усложнение входя-

\* Часть I опубликована в № 8, 2006 г.

щих в них интегралов столкновений  $\{S_i\}$ , которые включают интегралы столкновений электронов с фононами, дефектами решетки разного рода (примесями, дислокациями и т. д.), электронами, а также описывающие процессы типа рекомбинации, ударной ионизации и др. Получаемая система интегро-дифференциальных уравнений должна быть дополнена уравнениями электромагнитного поля Максвелла. Полная система уравнений с соответствующими граничными условиями является **базовой непрерывной кинетической моделью** ЭДП в приборной структуре.

Главные допущения при ее получении: 1) ЭДП — идеальная система; 2) ЭДП — классическая система. Корректность их использования для элементов современных интегральных схем обосновывалась в [9]. Заметим, что некоторые квантовые эффекты могут быть учтены в рамках подхода, близкого к выделенному кинетическому описанию.

Полная система уравнений рассматриваемой **строгой** (с указанными оговорками) **кинетической модели** приборной структуры является очень сложной системой интегро-дифференциальных уравнений. К сожалению, реализация следующих из нее дискретных (численных) моделей является чрезвычайно трудоемкой задачей для современных супер-ЭВМ и в настоящее время не выполнена. Здесь основные проблемы связаны со сложностью задания зонной структуры, вида интегралов столкновений, построения численных моделей и др.

Отметим и еще один строгий метод в рамках полуклассического подхода, основанный на применении при моделировании процессов переноса **метода Монте-Карло** [10–12]. Было доказано, что результаты, полученные с помощью этого метода, полностью согласуются с данными, базирующимися на реализации метода КУБ. Принципиальное отличие заключается в том, что в методе Монте-Карло имитируется движение каждого из носителей заряда, т. е. моделирование осуществляется непосредственно на микроуровне, а не путем расчета микрохарактеристики системы  $f$ .

Различают два метода Монте-Карло, а именно: многочастичный и одночастичный. В **многочастичном методе Монте-Карло** имитируется движение большого числа носителей заряда. Оптимальное число носителей при моделировании нестационарных процессов в полупроводниках лежит от нескольких тысяч до десятков (и даже сотен) тысяч и зависит от конкретной задачи. При моделировании стационарных задач, как правило, применяется **одночастичный метод Монте-Карло**, когда осуществляется имитация движения одного электрона в пространстве волнового вектора  $\mathbf{k}$  в течение достаточно длительного времени. Это время зависит от многих факторов, в частности, требуемой точ-

ности, зонной структуры и учитываемых механизмов рассеяния.

Сложность применения к плазме элементов заключается в необходимости использования в общем случае многочастичного метода Монте-Карло, а следовательно, точность моделирования сильно зависит от числа частиц  $N^*$ . К сожалению, высокая адекватность результатов моделирования может достигаться лишь при достаточно точном задании зонной структуры материала и большом числе носителей. Так, для одной из наиболее адекватных в настоящее время моделей (но не строгой!), основанной на **методе Монте-Карло частиц** (см. далее) и реализованной в программе DAMOCLES фирмы IBM [13], требуется десятки (от 10 до 100!) часов при расчете одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ)  $n$ -МОП-транзистора в двумерном случае на вычислительной системе с векторным процессором IBM 3090/600E (одной из лучших в то время). Комментарии, как говорится, излишни.

Таким образом, две строгие модели полуклассического подхода практически нереализуемы и являются результатом, по крайней мере, двух шагов и этапов приближений, если считать уравнение Лиувилля следствием "первого шага" для первой модели, а уравнения Гамильтона — для второй. В статистической физике показана эквивалентность указанных двух исходных формализмов при описании классических систем частиц. Эта эквивалентность, по сути дела, и является первопричиной отмеченного ранее согласования результатов по методу КУБ и методу Монте-Карло. Поэтому в литературе часто метод Монте-Карло рассматривается всего лишь как один из численных методов решения КУБ. Точнее в данном случае допустимо говорить, что он является "методом неявного решения КУБ" [14].

### Иерархия приближений и исходных уравнений полуклассического подхода

Традиционными при построении моделей элементов микроэлектроники являются следующие физические допущения:

- диэлектрическая и магнитная проницаемости постоянны и не зависят от координаты и времени в материале одного вида;
- пренебрегается влиянием магнитного поля на электрическое.

Оценка справедливости данных предположений приведена в [15]. С введением данных допущений из уравнений электромагнитного поля Максвелла остаются только два уравнения:

\* При "строгой" реализации  $N \rightarrow \infty$ , что, конечно же, нереально.

$$\nabla \mathbf{J}_{\text{полн}} = 0; \quad (4)$$

$$\nabla \mathbf{D} = \rho, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{J}_{\text{полн}} = \partial \mathbf{D} / \partial t + \mathbf{J}_{\text{пров}}; \quad (6)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}; \quad (7)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (8)$$

Здесь введены следующие обозначения:  $\mathbf{J}_{\text{полн}}$ ,  $\mathbf{J}_{\text{пров}}$  — векторы плотности полного тока и тока проводимости;  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{D}$  — векторы напряженности электрического поля и индукции;  $\rho$  — плотность полного электрического заряда;  $\varphi$  — электростатический потенциал;  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость.

Для доопределения в модели двух величин  $\rho$ ,  $\mathbf{J}_{\text{пров}}$  необходимо изначально использовать либо метод КУБ, либо метод Монте-Карло. К сожалению, даже с применением описанных предположений реализация соответствующих моделей элементов практически невозможна. Для преодоления отмеченных сложностей при построении моделей приборных структур на основе данных двух методов полуклассического подхода используются дальнейшие упрощения (огрубления по пространству и времени) и преобразования. Они, по сути дела, являются вынужденными вследствие изложенного. В результате может быть выведена иерархия приближений и соответствующих им исходных уравнений (моделей). Рассмотрим их.

Обычным при редукции систем уравнений (моделей), полученных первым методом КУБ, является **приближение времени релаксации**, а для второго метода Монте-Карло — **объединение (группировка) носителей заряда в макрочастицы** (методы Монте-Карло частиц [9–12]).

В **приближении времени релаксации** предполагается, что интеграл столкновений (3) может быть представлен в виде [8]

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (9)$$

где  $f_0$  — равновесная функция распределения;  $\tau$  — время релаксации, которое в общем случае зависит от  $\mathbf{v}$  (или  $\mathbf{k}$ ) и  $\mathbf{r}$ . Данное приближение обычно выполняется при небольших отклонениях  $f$  от  $f_0$ , т. е. равновесных значений.

Кроме того, традиционно предполагается независимость механизмов рассеяния, что позволяет записать для  $\tau$  соотношение [8]

$$\frac{1}{\tau} = \sum_l \frac{1}{\tau_l}, \quad (10)$$

где  $\tau_l$  — время релаксации для  $l$ -го механизма рассеяния. Зависимость  $\tau$  от  $\mathbf{r}$ , как правило, не учи-

тывается в явном виде, поэтому  $\tau$  часто называется временем релаксации импульса. Считается, что данное приближение может быть достаточно строго обосновано лишь при выполнении двух условий: если столкновения частиц упругие и если время рассеяния зависит только от угла рассеяния. Заметим, что для сложных законов дисперсии (например, для Ge и Si дырочного типа проводимости) строгое введение понятия времени релаксации вызывает затруднения. **Прямые методы** на основе непосредственного решения КУБ не получили широкого распространения, за исключением простейших задач по расчету объемных свойств полупроводников, а именно: дрейфовой скорости, подвижности и др.

Для метода Монте-Карло ситуация иная. На начальном этапе развития данный метод, как правило, также использовался для расчета объемных свойств материалов. Качественный прорыв произошел после начала разработки **методов Монте-Карло частиц** для моделирования полупроводниковых приборов. Обзор ранних работ приведен в [10, 12]. В процессе использования данных методов описание движения электронов в реальном пространстве осуществляется с помощью их группировки в некоторые макрочастицы (в дальнейшем просто частицы) [10].

Методам Монте-Карло частиц свойствен ряд следующих наиболее серьезных недостатков:

- часто они не имеют строгого обоснования;
- достаточно адекватные результаты моделирования приборных структур, как правило, достигаются при относительно точном задании зонной структуры твердого тела и детальном знании скоростей большого числа механизмов рассеяния. К сожалению, модели для некоторых из них еще весьма далеки от совершенства;
- в общем случае не известно, какое число частиц  $N$  будет достаточно для получения результатов требуемой точности.

В связи с этим для того, чтобы промоделировать электрические характеристики приборных структур с высокой степенью адекватности, как правило, требуются огромные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ (см. ранее). Тем не менее, с использованием методов Монте-Карло частиц получены важные научные результаты по анализу ряда относительно простых приборных структур, в частности диодов, транзисторов и некоторых других [9–14, 16, 17]. В настоящее время данные методы интенсивно совершенствуются [14, 17].

По изложенным причинам вместо **кинетического моделирования** с помощью отмеченных прямых методов и методов Монте-Карло частиц более широкое распространение при исследовании и расчете приборных структур микроэлектроники получили описываемые ниже базовые приближения и соответствующие им модели.

Дальнейшее использование приближения времени релаксации позволяет существенным образом упростить столкновительные члены  $\{S_i\}$  и получить более простые моментные уравнения, составляющие основу известных макроскопических моделей. Заметим, что цепочка уравнений для макроскопических величин, являющаяся математически точным следствием кинетических уравнений, может быть получена после их домножения на соответствующие величины и интегрирования по зоне Бриллюэна. Сложность использования получаемых моментных уравнений, однако, аналогична сложности применения исходных уравнений. Более того, для новых уравнений характерен отмеченный недостаток ББГКИ уравнений. Поэтому при практическом использовании моментных уравнений осуществляется обрыв цепочки и вводится ряд упрощающих предположений, что и составляет суть того или иного макроскопического приближения.

К счастью, в большом числе случаев описание ЭДП в элементах с помощью функций распределения является излишне детальным, поэтому часто достаточно применять уравнения переноса, в которых присутствуют такие важные макроскопические величины, как концентрация частиц, плотность тока, тепловой поток, средняя энергия носителей и др.

Так, уравнения цепочки для нулевого (концентрации  $n_i$ ), первого (плотности момента  $\mathbf{p}_i$ ), второго (плотности энергии  $w_i$ ) моментов функции распределения для  $i$ -го сорта носителей заряда имеют вид [18]

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i n_i) = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}; \quad (11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i \mathbf{p}_i) = e n_i \mathbf{E} - \nabla(n_i k_B T_i) + \left(\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}; \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i w_i) = e n_i \mathbf{v}_i \mathbf{E} - \nabla(\mathbf{v}_i n_i k_B T_i) - \\ - \nabla \mathbf{q}_i + \left(\frac{\partial w_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $T_i$  — эффективная температура  $i$ -го сорта носителей;  $e$  — элементарный (положительный) заряд;  $\mathbf{v}_i$  — средняя скорость;

$\mathbf{q}_i$  — вектор потока тепла;  $\left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$ ,  $\left(\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$ ,

$\left(\frac{\partial w_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$  — интегралы от столкновительных членов

исходного КУБ по импульсному пространству, умноженных перед интегрированием на 1,  $\mathbf{p}_i$  и  $\varepsilon_i$  ( $\varepsilon_i$  — закон дисперсии) с соответствующим нормировочным коэффициентом. Задание этих интегралов

в приближении времени релаксации, как правило, не вызывает затруднений. Уравнение (11) — закон сохранения числа частиц (заряда, если (11) умножить на  $e$ ), уравнение (12) — закон сохранения момента, уравнение (13) — закон сохранения энергии (все для  $i$ -го сорта).

Легко заметить, что три уравнения (11)–(13) содержат семь переменных (шесть моментов), а именно:  $n_i$ ,  $\mathbf{v}_i$ ,  $\mathbf{p}_i$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $T_i$ ,  $w_i$ ,  $\mathbf{q}_i$ . Следовательно, система уравнений является незамкнутой. Напряженность электрического поля  $\mathbf{E}$  определяется согласно уравнению Пуассона (5) (с учетом (7)). Используя какие-либо дополнительные соображения, необходимо связать моменты более высокого порядка, входящие в (11)–(13), с моментами более низкого порядка. Это позволяет замкнуть систему (11)–(13). Используемые при этом физические предположения и являются сутью того или иного приближения. Именно в этом случае решение получаемой системы уравнений оказывается намного проще уравнений исходной базовой непрерывной кинетической модели.

При макроскопическом описании плазмы полупроводниковых приборов выделяют *три базовых приближения*, а именно [3, 19]: *гидродинамическое, квазигидродинамическое и диффузионно-дрейфовое*. В гидродинамической исходной модели без изменений используются все три основных уравнения (11)–(13); в квазигидродинамической — (11) и (13); в диффузионно-дрейфовой — (11). Рассмотрим эти приближения.

Для замыкания уравнений (11)–(13) в *гидродинамическом приближении* применяются следующие основные физические предположения [20]:

1) частота парных соударений  $\nu$  является наибольшей из всех частот, т. е.  $\nu \gg \max\{\nu_p, \nu_\varepsilon\}$ ,  $\nu_p$ ,  $\nu_\varepsilon$  — импульсная и энергетическая частоты соударений, причем обычно  $\nu_p \gg \nu_\varepsilon$ ; вследствие этого функции распределения являются сдвинутыми максвелловскими (или фермиевскими);

2) квадратичный изотропный закон дисперсии  $\varepsilon_i = p^2/m_i$ , где  $m_i$  — эффективная масса носителей  $i$ -го сорта.

Ситуация, описываемая п. 1), называется случаем *полного* (или импульсного) контроля, когда парные взаимодействия носителей контролируют не только перераспределение энергии, но и перераспределение импульса. Данный случай удобно также описать с помощью характеристических длин (масштабов), а именно:  $\lambda_{\text{ст}} \ll \min\{\lambda_p, \lambda_\varepsilon, L_{\text{хар}}\}$ , где  $\lambda_{\text{ст}}$  — характерная длина парных столкновений;  $\lambda_p$  — длина релаксации импульса;  $\lambda_\varepsilon$  — длина энергетической релаксации.

В гидродинамическом приближении уравнения, замыкающие систему (11)–(13), например, имеют следующий вид [18]:

$$\mathbf{p}_i = m_i n_i \mathbf{v}_i; \quad (14)$$

$$w_i = \frac{3}{2} n_i k_B T_i + \frac{m_i}{2} n_i v_i^2; \quad (15)$$

$$\mathbf{q}_i = -K_i \nabla T_i, \quad (16)$$

где  $K_i$  — теплопроводность газа носителей в  $i$ -й подзоне. В (16)  $T_i$  предполагается не тензорной, а скалярной величиной. Заметим также, что строго говоря, в соответствии с указанным физическим предположением 1)  $\mathbf{q}_i = 0$ .

Плотность тока  $\mathbf{j}_i$  может быть определена согласно соотношению

$$\mathbf{j}_i = en_i \mathbf{v}_i. \quad (17)$$

Задание столкновительных членов осуществляется с использованием понятий времен релаксации импульса  $\tau_p$  и энергии  $\tau_\varepsilon$  (см. [18] для случая двух долин).

В результате исключений из (11)—(13) с помощью (14)—(17) для каждого сорта носителей остаются три уравнения гидродинамического приближения относительно неизвестных:  $(n_i, \mathbf{p}_i, w_i)$ ,  $(n_i, \mathbf{v}_i, T_i)$ ,  $(n_i, \mathbf{j}_i, w_i)$ ,  $(n_i, \mathbf{v}_i, w_i)$  и других возможных основных переменных. Вид этих уравнений часто приводится в литературе [9, 18, 20, 21] и зависит от замыкающих уравнений типа (14)—(17).

В *квазигидродинамическом приближении* используется следующее основное физическое допущение [20]: для частот справедливо соотношение  $v_\varepsilon \ll v \ll v_p$  (для характеристических масштабов:  $\lambda_p < \lambda_{ст} \ll \min\{\lambda_\varepsilon, L_{хар}\}$ ); вследствие этого симметричные части функций распределений являются максвелловскими (или фермиевскими), а антисимметричные части функций распределения — малы.

В данном случае *неполного* (или энергетического) *контроля* парные столкновения будут влиять на распределение энергии между носителями, но никак не повлияют на рассеяние носителя с изменением направления импульса. В этом приближении остаются уравнения (11) и (13). Их удобный вид в случае квадратичного изотропного закона дисперсии и при отсутствии вырождения приведен в [9, 20, 21].

Сравнительный анализ гидродинамического и квазигидродинамического приближений показывает [19, 20], что основные условия применимости первого являются более жесткими по сравнению со вторым. На этом основании делается вывод, что полный контроль в примесных полупроводниках практически не реализуется [20], а ситуация, описываемая в рамках квазигидродинамического приближения, более типична для ЭДП полупроводниковых приборов [9]. Здесь, однако, необходимо сделать несколько важных замечаний:

- полученный в указанных предположениях *полный набор* уравнений и соотношений фактически не используется при дальнейшем построе-

нии модели элемента, а применяются, как правило, лишь основные из них;

- целый ряд результатов не зависит от степени контроля [20];
- основные уравнения гидродинамического приближения включают уравнения квазигидродинамического, а следовательно, более общие в математическом смысле (см. далее);
- многое зависит от конкретных условий замыкания и согласуемых с экспериментом параметров (в гидродинамическом приближении их, как правило, больше). По указанным причинам гидродинамическое приближение достаточно часто применяется при описании ЭДП полупроводниковых приборов и структур.

В *диффузионно-дрейфовом приближении* предполагается, что для характерных масштабов справедливо соотношение [3, 9]:  $L_{хар} > \{\lambda_p, \lambda_\varepsilon\}$ . В данном случае остаются только закон сохранения числа частиц относительно концентрации (11) и замыкающее уравнение для плотности тока. В случае квадратичного изотропного закона дисперсии и при отсутствии вырождения они принимают следующий вид [22]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{e} \nabla \mathbf{j}_i = -R_i; \quad (18)$$

$$\mathbf{j}_i = en_i \mu_i \mathbf{E} - e \varphi_T \mu_i \nabla n_i, \quad (19)$$

где  $R_i$  — превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации для  $i$ -го сорта носителей;  $\varphi_T$  — температурный потенциал, равный  $k_B T/e$ ;  $T$  — температура кристаллической решетки;  $\mu_i$  — подвижность  $i$ -го сорта носителей.

Описанные базовые приближения и соответствующие им исходные уравнения и порождают основные известные классы моделей приборных структур микроэлектроники полуклассического подхода [2—5]. Важно заметить, что здесь в целом имеет место соответствие рассмотренных уравнений иерархии уравнений статистической теории макроскопических открытых систем [23]. При этом мы описывали иерархию уравнений сверху вниз, т. е., как правило, с более высокой к менее высокой степени адекватности описания физических процессов в элементах.

### Классы моделей

Как следует из предыдущего рассмотрения, применение первого метода синтеза [1] приводит, в сущности, к построению классов *исходных моделей*. Это связано с тем, что в каждом конкретном случае возможны различия в моделях, вызванные следующими факторами:

- число сортов носителей заряда зависит от характера исследуемой плазмы;

- возможно использование разных уравнений замыкания;
- может быть важен учет магнитного поля;
- граничные условия зависят от анализируемой приборной структуры и др.

В целом, процесс синтеза моделей в рамках первого кардинального метода может быть схематично представлен, как показано в табл. 1 [2–5]. В ней отражено возможное подобие моделей, получаемых в рамках полуклассического и квантовомеханического подходов [2, 3].

В данной статье рассмотрим основные классы моделей полуклассического подхода. Методы Монте-Карло частиц часто не совсем точно интерпретируются как численные методы решения кинетического уравнения Больцмана, поэтому ряд авторов их относит к кинетическим моделям [9]. По-видимому, это не верно вследствие изложенного ранее. Кроме того, методы Монте-Карло частиц часто характеризуются достаточно сильно различающимися допущениями, используемыми при объединении носителей заряда в макрочастицы и другими [10, 12, 14], а как результат — адекватностью моделирования. По этим причинам в рамках кинетического моделирования будем выделять два класса моделей: *кинетические модели*, основанные на прямых методах решения КУБ, и *методы Монте-Карло частиц*. Эти два класса моделей формируют верхние иерархические уровни моделей полуклассического подхода. Кинетические модели, к сожалению, не получили широкого распространения при моделировании элементов. В то же время методы Монте-Карло частиц интенсивно исследуются и развиваются, однако отмеченные недостатки приводят к большей целесообразности для широкого применения для анализа и проектирования приборных структур микроэлектроники описываемых далее классов моделей.

Таблица 1

Процесс синтеза моделей элементов в рамках первого метода

Уровень	Составляющие
Общий подход	Полуклассический Квантовомеханический
Метод	Кинетических уравнений Монте-Карло (имитация движения частиц)
Базовое приближение	Времени релаксации Группировка носителей в макрочастицы Гидродинамическое Квазигидродинамическое
Основной класс	Диффузионно-дрейфовое Кинетические модели Методы Монте-Карло частиц Гидродинамические модели Квазигидродинамические модели Диффузионно-дрейфовые модели Комбинированные модели

Уже отмечалось, что число сортов носителей в плазме элемента, т. е. в каждом конкретном случае, может быть различным, например, электроны и дырки, электроны разных долин, "легкие" и "тяжелые" дырки и др. Увеличение их числа обычно приводит к существенному усложнению задачи. Последнее хотя бы связано со следующими физическими факторами. Так, необходимо различать времена между столкновениями носителей одного и того же и разных сортов. В результате число предельных случаев может заметно возрасти, например, в зависимости от соотношения эффективных масс носителей рассматриваемых в задаче типов. В случае существенного различия эффективных масс (например, электронов и дырок) времена между столкновениями носителей одного сорта обычно относительно малы. Поэтому однозначным является представление о температурах сортов носителей заряда  $\{T_i\}$ , которые, как правило, не равны между собой и не совпадают с температурой кристаллической решетки  $T$  [19]. Следовательно, даже в случае обычных двух сортов носителей заряда, т. е. электронов и дырок, необходимо, строго говоря, рассматривать три подсистемы: электроны, дырки и фононы. Таким образом, в гидродинамическом приближении задача становится сверхсложной — необходимо решать девять основных уравнений типа (11)–(13).

По изложенной причине, как правило, вводятся дополнительные физические допущения, по крайней мере, относительно фоновой системы. Так, традиционно полагается равновесность фоновой системы с температурой решетки  $T$ , постоянной по всему элементу (температурой термостата  $T = \text{const}$ ). В данном предположении достаточно общий вид уравнений *гидродинамической модели* ЭДП приборных структур приведен в работе [24]. Заметим, что исходные уравнения гидродинамической модели (11)–(13) были модернизированы на такие важные случаи, как гетероструктуры, непараболические законы дисперсии и др.

Достаточно общие системы исходных уравнений гидродинамического приближения предложены в работах [3, 25, 26] для случая, когда температура решетки меняется по приборной структуре. В данных исходных уравнениях, однако, третья подсистема (решетка) описывается приближенно с помощью уравнения теплопроводности для температуры решетки. Наиболее существенное отличие в уравнениях статьи [25] и работ [3, 26] заключается в используемом соотношении для плотности мощности  $P$  в уравнении теплопроводности. В частности, в [25] плотность мощности выражается через новые плотности энергии и интеграл столкновений, что приводит к необходимости привлекать дополнительные допущения. Относительно простой вид уравнений получается лишь для одно-

го типа носителей [25]. Более удобный и простой вид выражения для плотности мощности приведен в работах [3, 26].

В результате основной *обобщенной гидродинамической модели* ЭДП приборных структур микроэлектроники может быть следующая система уравнений [3, 26]:

$$-\nabla \varepsilon \nabla \varphi = q(p - n + N_d^+ - N_a^-); \quad (20)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \mathbf{J}_n = -R; \quad (21)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \nabla \mathbf{J}_p = -R; \quad (22)$$

$$\mathbf{J}_n + n \tau_{pn} \frac{d}{dt} \left( \frac{\mathbf{J}_n}{n} \right) = -q \mu_n n \nabla \left( \varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g - \frac{k_B T_n}{q} \right) + q D_n \nabla n; \quad (23)$$

$$\mathbf{J}_p + p \tau_{pp} \frac{d}{dt} \left( \frac{\mathbf{J}_p}{p} \right) = -q \mu_p p \nabla \left( \varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g + \frac{k_B T_p}{q} \right) - q D_p \nabla p; \quad (24)$$

$$\frac{\partial (n W_n)}{\partial t} + \nabla \mathbf{S}_n = \mathbf{E} \mathbf{J}_n - R W_n - n \left( \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{wn}} \right); \quad (25)$$

$$\frac{\partial (p W_p)}{\partial t} + \nabla \mathbf{S}_p = \mathbf{E} \mathbf{J}_p - R W_p - p \left( \frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{wp}} \right); \quad (26)$$

$$\rho_T c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (K \nabla T) + (\mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p) \cdot (-\nabla \varphi) + \mathbf{J}_n \cdot (-\nabla (A \Delta V_g)) + \mathbf{J}_p \cdot \nabla ((1 - A) \Delta V_g) + R (E_{g0} - q \Delta V_g); \quad (27)$$

с замыкающими уравнениями [3, 24]

$$\mathbf{S}_n = -K_n \nabla T_n - (W_n + k_B T_n) \frac{\mathbf{J}_n}{q}; \quad (28)$$

$$\mathbf{S}_p = -K_p \nabla T_p + (W_p + k_B T_p) \frac{\mathbf{J}_p}{q}; \quad (29)$$

$$W_n = \frac{3}{2} k_B T_n + \frac{1}{2} m_n v_n^2; \quad (30)$$

$$W_p = \frac{3}{2} k_B T_p + \frac{1}{2} m_p v_p^2. \quad (31)$$

В (20)–(31) использованы следующие обозначения:  $n, p$  — концентрации электронов и дырок;  $\mathbf{J}_n, \mathbf{J}_p$  — векторы плотности электронного и дырочного токов;  $R$  — превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации;  $N_d^+, N_a^-$  — концен-

трации ионизированных доноров и акцепторов;  $q$  — заряд электрона;  $\mu_n, \mu_p$  — подвижности электронов и дырок;  $D_n, D_p$  — коэффициенты диффузии электронов и дырок;  $T_n, T_p, T$  — температуры электронов, дырок и решетки;  $\tilde{A}, \Delta \tilde{V}_g$  — параметры, описывающие совместное влияние эффектов сильного легирования;  $\rho_T$  — плотность тела;  $c$  — удельная теплоемкость тела;  $K$  — коэффициент теплопроводности;  $A$  — коэффициент асимметрии в сужении ширины запрещенной зоны (ШЗЗ);  $\Delta V_g$  — величина ШЗЗ;  $E_{g0}$  — ШЗЗ собственного полупроводника;  $W_n, W_p$  — средние энергии электронов и дырок;  $W_{n0}, W_{p0}$  — тепловые энергии носителей в равновесии;  $\mathbf{S}_n, \mathbf{S}_p$  — электронные и дырочные потоки энергии;  $v_n, v_p$  — средние скорости электронов и дырок;  $\tau_{pn}, \tau_{pp}$  — времена релаксации момента для электронов и дырок;  $\tau_{wn}, \tau_{wp}$  — времена релаксации энергии для электронов и дырок;  $m_n, m_p$  — эффективные массы электронов и дырок;  $K_n, K_p$  — коэффициенты теплопроводности электронов и дырок, задаваемые с помощью закона Видемана—Франца [8].

Система уравнений (20)–(27) при  $\Delta \tilde{V}_g \rightarrow 0, \Delta V_g \rightarrow 0$  и  $T = \text{const}$  ( $P = \lfloor (\mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p) \cdot (-\nabla \varphi) + R E_{g0} \rfloor \rightarrow 0$ , где  $P$  — плотность мощности в случае неучета эффектов сильного легирования) переходит в систему гидродинамических уравнений работы [24]. Эти системы уравнений и являются основой ряда возможных исходных моделей класса *гидродинамических моделей*.

Предложенная система уравнений [3, 26] удобна, так как с ее помощью после введения дополнительных допущений получается иерархия исходных моделей [3, 27], включающая и известные достаточно общие модели других более низких уровней, в частности, квазигидродинамические и диффузионно-дрейфовые модели.

Достаточно общая система уравнений [28, 29] исходной модели класса *квазигидродинамических моделей* получается при следующих дополнительных к уже отмеченным для гидродинамической модели [24] допущениях [3, 27]: времена релаксации момента  $\tau_{pn} \rightarrow 0, \tau_{pp} \rightarrow 0$ , что полностью согласуется с основным физическим допущением квазигидродинамического приближения. Модели данного класса в настоящее время применяются для учета часто важных в приборных структурах с субмикрометровыми размерами на ряде полупроводников (например, с относительно малыми эффективными массами типа GaAs) эффектов, а именно: разогрев ЭДП, превышение скорости носителей заряда над скоростью насыщения (всплеск скорости) и др.

Общая система уравнений **диффузионно-дрейфовой (тепловой) модели** [3, 30, 31] получается при следующих дополнительных к квазигидродинамической модели допущениях: равенство всех температур  $T_n = T_p = T$ , а  $T \neq \text{const}$ ; постоянство потоков

$$\text{энергии } |S_n| = \text{const}, |S_p| = \text{const} \left( \left[ EJ_n - RW_n - n \left( \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{wn}} \right) \right] \rightarrow 0, \left[ EJ_p - RW_p - p \left( \frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{wp}} \right) \right] \rightarrow 0 \right).$$

В результате в нее входят уравнения (20)–(22), (27), а также следующие выражения для плотностей токов:

$$J_n = -q\mu_n n \nabla(\varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g - k_B \xi T/q) + qD_n \nabla n; \quad (32)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla(\varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g + k_B \xi T/q) - qD_p \nabla p, \quad (33)$$

причем для коэффициентов диффузии справедливо соотношение Эйнштейна, а  $\xi = 0,5$  [3, 30, 31]. Допустимо использовать и другие значения, в частности  $\xi = 1$ . Справедливости ради отметим, что значение данного коэффициента не столь существенно для приборных структур микроэлектроники, так как вклад члена, содержащего  $\nabla T$ , как правило, пренебрежимо мал.

Если в описанной исходной системе уравнений предположить, что  $T = \text{const}$  ( $P \rightarrow 0$ ), получаются хорошо известные уравнения [3–5], в частности, (20)–(22) с выражениями для плотностей токов:

$$J_n = -q\mu_n n \nabla(\varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g) + q\varphi_T \mu_n \nabla n; \quad (34)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla(\varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g) - q\varphi_T \mu_p \nabla p, \quad (35)$$

где  $\varphi_T = k_B T/q$ . Данная система уравнений обычно применяется в **диффузионно-дрейфовых моделях**, в которых проводится учет эффектов сильного легирования с помощью эмпирических моделей [3]. В случае неучета эффектов сильного легирования ( $\Delta \tilde{V}_g = 0$ ) фундаментальная система уравнений (ФСУ) физики полупроводниковых приборов (20)–(22), (34), (35) принимает традиционный вид [3–5]. В целом, диффузионно-дрейфовые модели в настоящее время наиболее широко используются при исследовании самых разнообразных приборных структур микроэлектроники.

**Исходной моделью** того или иного класса будем называть рассмотренные соответствующие основные уравнения с дополнительными соотношениями, включая условия замыкания и граничные условия.

Несколько специфическое место занимает класс **комбинированных моделей**. Это связано с тем, что его нельзя поставить в самый низ рассматри-

ваемой иерархии моделей. Сущность комбинированных моделей состоит в использовании набора исходных уравнений различных классов моделей, как правило, для различающихся групп носителей. Разбиение на группы можно вести по разным признакам [9]: по типу (сорт) носителей; по пространственному расположению; по энергиям и др. В связи с этим, понятно, что степень адекватности моделей данного класса не может рассматриваться как наименьшая. В зависимости от грамотности разбиения на группы носителей она может варьироваться от наименьшей, характерной для применяемых уравнений модели самого низкого уровня адекватности моделирования, до наибольшей, соответствующей уравнениям модели верхнего иерархического уровня. Заметим, что при комбинировании моделей могут привлекаться и другие подходы, т. е. не обязательно на основе разбиения по группам носителей.

Кроме описанных основных классов моделей можно ввести и другие (дополнительные) классы моделей, например, псевдогидродинамические [9], дрейфовые [32] и др. Однако мы не будем их выделять, так как уже отмечалось, что в рамках одного основного класса моделей уравнения могут различаться вследствие использования дополнительных (не столь кардинальных с физической точки зрения) допущений. Часто такие действия могут интерпретироваться как результат применения третьего метода синтеза моделей (см. далее). Иногда такие модели могут быть отнесены к комбинированным моделям.

К сожалению, полные системы уравнений, составляющие исходные модели, не могут быть решены традиционными методами математической физики. По этим причинам используются и два других метода синтеза моделей [1]. Их привлечение приводит к существенному расширению указанных классов моделей.

Рассмотрим **второй метод синтеза моделей** приборных структур на основе использования различных модельных зависимостей для параметров исходных моделей. В его рамках применяется как полуклассический, так и квантовомеханический подходы к описанию полупроводников. При этом возможны **два пути синтеза моделей** [2–5]: **строгий**, состоящий в создании гибридных моделей; **феноменологический**. В первом случае модель более высокого уровня используется для определения некоторых параметров в областях, где нарушается справедливость менее адекватной базовой модели [2–5]. В основе второго пути синтеза моделей лежит привлечение смыслового физического содержания параметра [2–5]. Данный путь с успехом использовался при создании классических теорий полупроводниковых приборов в рамках диффузи-

онно-дрейфового приближения и синтезе численных моделей различных классов.

С привлечением *третьего метода синтеза* на основе аппроксимаций о характере поведения искомых функций удастся построить практически реализуемые модели элементов микроэлектроники из рассмотренных моделей, синтезированных в результате применения первого и второго методов. По этой причине данные три метода синтеза могут часто интерпретироваться и в качестве трех стадий процесса построения моделей [2—5].

Анализ известных моделей приборных структур позволяет представить процесс их синтеза в рамках третьего метода, как схематично показано в табл. 2 [2—5].

Выделяются два принципиально различных типа представления среды: дискретная (дискретные модели) и непрерывная (непрерывные модели). При этом возможны два способа построения моделей: физический и формальный. Физический, представляющий для нас больший интерес вследствие изложенного ранее, является эффективным инструментом построения моделей. В соответствии с типом среды обычно выделяются и два вида моделей: распределенные и с сосредоточенными параметрами. Первые, как правило, применяются в рамках дискретного представления о среде, вторые — в рамках непрерывного. Исключением, по видимому, являются модели, использующие комбинацию того и другого представления. В рамках указанных видов моделей можно выделить их три возможных разновидности, а именно: электрические, физико-топологические и макромоделли.

Приведем определения электрической и физико-топологической моделей, представляющих для нас наибольший интерес, согласно работам [4, 5].

*Физико-топологической моделью* будем называть модель элемента, параметрами которой являются технологические и электрофизические параметры.

В литературе используется вместо "технологические параметры" эквивалентный в данном случае термин — "конструктивно-технологические параметры".

Таблица 2

Процесс синтеза моделей элементов в рамках третьего метода

Уровень	Составляющие
Среда	Дискретная Непрерывная
Способ построения	Физический Формальный
Вид модели	Распределенная С сосредоточенными параметрами
Разновидности модели	Электрическая Физико-топологическая Макромодель

*Электрической моделью* на уровне эквивалентных схем будем называть модель элемента, аналоговыми компонентами которой являются диоды, источники тока и напряжения, резисторы, конденсаторы, емкости и катушки индуктивности или их сочетания.

В принципе могут входить и простые элементы, например транзисторы, однако при моделировании они представляются отмеченными компонентами.

Таким образом, проведенное рассмотрение позволяет показать, что два общих подхода к описанию явлений переноса и выделенные три основных метода синтеза моделей и допускают осуществить систематизацию моделей приборных структур микроэлектроники — объектов физики открытых систем.

### Пределы применимости подходов

В литературе много внимания уделяется оценке справедливости применяемых приближений. Тем не менее, проведенный анализ еще весьма далек от завершения. Пойдем по "пути наименьшего сопротивления". Рассмотрим сначала уравнения, вызывающие наименьшее число возражений (ограничений).

В системе уравнений обобщенной гидродинамической модели — это уравнение Пуассона (20), уравнения непрерывности электронов (21) и дырок (22). Детальный анализ выполнимости условия квазистационарности электромагнитного поля (исходя из уравнений Даламбера для скалярного и векторного потенциалов) позволяют сделать вывод, что данное приближение, приводящее к уравнению Пуассона, справедливо для полупроводниковых активных областей вплоть до частот около 100 ГГц [33]. Уравнения непрерывности (21), (22) также носят достаточно общий характер и, по существу, являются следствием первого уравнения Максвелла (4), т. е. закона сохранения заряда, если представить его покомпонентно для электронов и дырок. При этом должно быть применимо понятие "концентрации носителей", так как речь идет о макроскопическом описании процессов. Таким образом, основные ограничения, как правило, возникают далее при конкретизации соотношений для плотностей токов, плотности полного электрического заряда и рекомбинации-генерации. Для этого необходимо детальное знание процессов, происходящих при транспорте носителей заряда, в частности, механизмов рассеяния, включая процессы рекомбинации-генерации, и др.

Достижимо ли это в рамках полуклассического подхода? Для ответа на этот вопрос необходимо, прежде всего, проанализировать ключевое уравнение рассматриваемого подхода — кинетическое уравнение Больцмана (1). Данное уравнение может быть получено из более строгого уравнения Лиу-

вилля — фон Неймана при ряде физических предположений. К основным из них относятся [33, 34]:

- взаимодействие между носителями предполагается слабым;
- справедлива зонная теория и понятие эффективной массы;
- допустимо классическое описание пролета носителей заряда после столкновений;
- рассматриваются только точечные соударения;
- пренебрегается взаимодействием носитель-носитель в интеграле столкновений;
- вероятность рассеяния не зависит от внешнего поля;
- газ носителей заряда невырожден.

Ясно, что заранее оценить справедливость всего комплекса отмеченных физических допущений для той или иной конкретной приборной структуры и соответствующих управляющих воздействий не представляется возможным для базовой непрерывной кинетической модели. Возможны лишь приближенные весьма грубые оценки.

Поэтому далее рассмотрим только предельные оценки допустимого использования основных подходов. Так, оценка применимости того или иного базового приближения может быть получена на основе указанных соотношений для характерных масштабов. С этой целью необходимо использовать хорошо известные выражения для фундаментальных длин:

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{mv_T}; \quad (36)$$

$$\lambda_p = v_T \tau_p; \quad (37)$$

$$\lambda_E = v_T \sqrt{\tau_p \tau_E}, \quad (38)$$

где  $v_T$  — тепловая скорость;  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ .

Используя формулу для длины волны де Бройля (36), можно оценить диапазоны применимости полуклассического и квантовомеханического подходов. Для кремния Si и арсенида галлия GaAs при комнатной температуре  $\lambda_B(\text{Si}) \approx 2$  нм, а  $\lambda_B(\text{GaAs}) \approx 25$  нм. Следовательно, предел применимости полуклассического подхода при комнатной температуре можно оценить следующим образом:  $L_{\text{хар}} \geq 0,01$  мкм (для Si) и  $L_{\text{хар}} \geq 0,03$  мкм (для GaAs).

На основе формул (37) и (38) допустимо оценить диапазон справедливости базовых приближений полуклассического подхода. Однако мы не будем этого делать, так как многое зависит от конкретных механизмов рассеяния носителей заряда и некоторых других факторов.

Здесь приведем лишь часто встречающиеся оценки пределов применимости диффузионно-дрейфового приближения [15, 32, 35]: 1) до частот  $10^{12}$  Гц; 2) для  $L_{\text{хар}}$ , больших нескольких сотых микрометра; 3) до градиентов концентраций приме-

сей в  $10^{24}$  см<sup>-4</sup>; 4) до плотностей токов  $10^6$  А/см<sup>2</sup>. Данные оценки должны рассматриваться как очень оптимистические. Скорее, они могут быть отнесены к наиболее строгим макроскопическим приближениям в рамках полуклассического подхода в свете изложенного ранее (в особенности для  $L_{\text{хар}}$ ). Более реальными, по-видимому, являются приведенные в [2, 3] для кремния при комнатной температуре целесообразные диапазоны применимости основных подходов: 1) квантовомеханический —  $L_{\text{хар}} \leq 0,01$  мкм; 2) полуклассический\* —  $0,01 \leq L_{\text{хар}} \leq 0,1$  мкм; 3) макроскопический (диффузионно-дрейфовое приближение) —  $L_{\text{хар}} \geq 0,1$  мкм. Для арсенида галлия и полупроводников с более легкими эффективными массами по сравнению с кремнием числовые значения необходимо увеличить ориентировочно в 2—5 раз.

В заключение отметим, что ситуация еще более усложняется при анализе адекватности той или иной конкретной модели в рамках описанных приближений и классов. Этот вопрос будет более подробно рассматриваться в следующей статье, посвященной проблемам и принципам численного моделирования приборных структур микроэлектроники.

#### Список литературы

1. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34—37.
2. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 5. С. 3—9.
3. Абрамов И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск: БГУ, 1999. 189 с.
4. Абрамов И. И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пос. Минск: БГУ, 1999. 92 с.
5. Абрамов И. И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
6. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л.: Гостехиздат, 1946. 120 с.
7. Гуров К. П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.
8. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.
9. Рыжий В. И., Баннов Н. А. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральных схем: состояние и проблемы // Микроэлектроника. 1987. Т. 16. № 6. С. 484—496.
10. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
11. Реклайтис А. С., Мицквичюс Р. В. Метод Монте-Карло в физике полупроводников. М.: Знание, 1988. 32 с.
12. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo method for semiconductor device simulation. Wien, New York: Springer-Verlag, 1989. 344 p.
13. Laux S. E., Fischetti M. V., Frank D. J. Monte Carlo analysis of semiconductor devices: The DAMOCLES program // IBM J. Res. Develop. 1990. V. 34. N 4. P. 466—494.
14. Kosina H., Nedjalkov M., Selberherr S. Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation // IEEE Trans. 2000. V. ED-47. N 10. P. 1898—1908.

\* Имеются в виду модели повышенной по сравнению с диффузионно-дрейфовыми моделями адекватности моделирования.

15. **Гаврилов О. Т., Тиходеев Ю. С.** Основные ограничения макроскопического рассмотрения процессов в полупроводниковых приборах // Электронная техника. Сер. 2. Полупроводниковые приборы. 1973. Вып. 1. С. 61—71.

16. **Борздов В. М., Комаров Ф. Ф.** Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск: БГУ, 1999. 235 с.

17. **Сидоров А. А., Вьюрков В. В., Орликовский А. А.** Применение метода Монте-Карло для моделирования кремниевых полевых нанотранзисторов // Микроэлектроника. 2004. Т. 33. № 4. С. 243—255.

18. **Bløtekjær K.** Transport equations for electrons in two-valley semiconductors // IEEE Trans. 1970. V. ED-17. N 1. P. 38—47.

19. **Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г.** Физика полупроводников. М.: Наука, 1990. 688 с.

20. **Басе Ф. Г., Гуревич Ю. Г.** Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975. 400 с.

21. **Кокин А. А., Толстихин В. И.** О моделировании процессов переноса в монополярных полупроводниковых структурах с субмикронными размерами // Микроэлектроника. 1984. Т. 13. Вып. 1. С. 24—40.

22. **Van Roosbroeck W.** Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors // Bell System Techn. J. 1950. V. 29. P. 560—607.

23. **Климонтович Ю. Л.** Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем. М.: Наука, 1990. 320 с.

24. **A new discretization strategy of the semiconductor equations comprising momentum and energy balance / A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, V. Rudan, G. Vaccarani // IEEE Trans. 1988. V. CAD-7, N 2. P. 231—241.**

25. **Wang C. T.** A new set of semiconductor equations for computer simulation of submicron devices // Solid-State Electron. 1985. V. 28. N 8. P. 783—788.

26. **Abramov I. I.** A new system of equations for submicron VLSI and ULSI device simulation // The Third International Seminar on Simulation of Devices and Technologies. Obninsk, 1994. P. 21—22.

27. **Abramov I. I.** Hierarchy of models for small semiconductor device simulation // In: Physics, chemistry and application of nanostructures. Minsk, 1995. P. 257—259.

28. **Cook R. K.** Numerical simulation of hot-carrier transport in silicon bipolar transistors // IEEE Trans. 1983. V. ED-30. N 9. P. 1103—1110.

29. **Бубенников А. Н.** Моделирование интегральных микро-технологий, приборов и схем. М.: Высш. шк., 1989. 320 с.

30. **Абрамов И. И., Харитонов В. В.** Многомерное численное моделирование элементов интегральных схем с совместным учетом эффектов сильного легирования, саморазогрева и температуры окружающей среды // Электронное моделирование. 1991. Т. 13. № 4. С. 60—64.

31. **Абрамов И. И., Харитонов В. В.** Многомерные физические процессы в элементах и фрагментах кремниевых СБИС // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 2. С. 32—36.

32. **Кремлев В. Я.** Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС. М.: Высш. шк., 1990. 144 с.

33. **Process and device modeling / Ed. by W. L. Engl. Amsterdam: Elsevier Science Publ., 1986. 462 p.**

34. **Selberherr S.** Analysis and simulation of semiconductor devices. Wien, New York: Springer-Verlag, 1984. 294 p.

35. **Носов Ю. П., Петросянец К. О., Шилин В. А.** Математические модели элементов интегральной электроники. М.: Советское радио. 1976. 304 с.

УДК 621.382

**А. Г. Шауцуков**, канд. техн. наук,  
Кабардино-Балкарский государственный  
университет, г. Нальчик,  
**Г. Д. Кузнецов**, д-р техн. наук,  
Московский государственный институт стали  
и сплавов

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОДНОВРЕМЕННОГО ЛЕГИРОВАНИЯ АТОМАМИ ОТДАЧИ И БОМБАДИРУЮЩИМИ ИОНАМИ ПРИ БОМБАДИРОВКЕ СТРУКТУР ПЛЕНКА—ПОДЛОЖКА

*Разработаны алгоритмы моделирования ионной имплантации через пленки и легирования атомами отдачи. Проведен численный эксперимент и показано, что бомбардировка структур пленка—подложка позволяет формировать высоколегированные атомами отдачи слои толщиной порядка нескольких сотых долей микрометра и осуществлять одновременное легирование подложки атомами отдачи и бомбардирующими ионами.*

### Введение

В случае ионной бомбардировки структур пленка — подложка, когда толщина пленки существен-

но не превышает проективного пробега ионов в пленке, в подложку внедряются и ионы, и смещенные ими атомы пленки (атомы отдачи).

В настоящей работе путем моделирования на ЭВМ исследуется зависимость числа атомов отдачи, внедряемых в подложку, и профилей их распределения от вида и энергии ионов. Также исследуется распределение бомбардирующих ионов в структуре пленка — подложка.

Методика и результаты проводимых в работе исследований могут быть рекомендованы для использования на предприятиях отрасли при разработке процессов формирования тонких ионно-легированных слоев, одновременного легирования двумя легирующими примесями, легирования малыми дозами.

### Методика эксперимента

Для ионов и атомов отдачи с энергией  $E$  профиль распределения их в подложке можно описать кривой Гаусса и охарактеризовать ее следующим выражением:

$$C(x, E_0) = \frac{D_0}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p}\right], \quad (1)$$

где  $R_p$  — средний проективный пробег ионов;  $\Delta R_p$  — средний разброс проективного пробега ионов.

После прохождения пленки ионы внедряются в подложку со спектром энергий  $f(E)$ . Его можно определить, считая распределение по текущей энергии Гауссовым:

$$f(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta E(x)} \exp\left[-\frac{(E - \overline{E(x)})^2}{2\Delta E^2(x)}\right], \quad (2)$$

где  $\overline{E(x)}$  — средняя энергия ионов;  $\Delta E^2(x)$  — средняя квадратичная флуктуация энергии.

Средняя энергия ионов на границе пленка—подложка

$$\overline{E(x)} = E_0 - \frac{dE}{dx} x_{\text{п}}, \quad (3)$$

где  $E_0$  — начальная энергия ионов;  $\frac{dE}{dx}$  — тормозная способность пленки;  $x_{\text{п}}$  — толщина пленки.

Согласно Бору [1], средняя квадратичная флуктуация энергии

$$\Delta E^2(x) = N x_{\text{п}} \int T^2 d\sigma, \quad (4)$$

где  $N$  — число атомов в единице объема вещества пленки;  $d\sigma$  — дифференциальное поперечное сечение взаимодействия;  $T$  — энергия, переданная ионом атому.

Подставляя в формулу (4) значение для дифференциального сечения, соответствующее потенциалу вида  $r^{-2}$ , получаем

$$\Delta E^2(x) = N x_{\text{п}} \frac{0,45 z_0 z_1 0,885 d_0 e^2}{(z_0^{2/3} + z_1^{2/3})^{1/2}} \frac{M_0^2 M_1}{(M_0 + M_1)^3} E_0. \quad (5)$$

Определив спектр энергии ионов на границе пленка—подложка, нетрудно построить профиль распределения ионов в подложке, представив его как сумму профилей, соответствующих выбранным энергиям из спектра энергий:

$$C(x) = \sum_{k=1}^n f(E_k) C(x, E_k) \Delta E_k, \quad (6)$$

где  $C(x, E_k) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{pk}} \exp\left[-\frac{(x - R_{pk})^2}{2\Delta R_{pk}^2}\right]$ .

В области энергий, рассматриваемых в настоящей работе, средняя энергия атомов отдачи в слое равна нескольким килоэлектронвольтам, а проективные пробеги атомов с такими энергиями составляют несколько единиц нанометров. Поэтому можно утверждать, что основной вклад в число атомов отдачи, внедренных в подложку, вносят атомы отдачи, выбиваемые из тонкого прилегающего к подложке слоя  $\Delta x$ . При этом в работе допускалось, что рассматриваемый слой бомбардиру-

ется ионами с энергией  $E'_0$ , равной средней энергии ионов после прохождения слоя ( $x - \Delta x$ ):

$$E'_0 = \overline{E} = E_0 - \frac{dE}{dx} (x_{\text{п}} - \Delta x). \quad (7)$$

При бомбардировке пленок ионами с энергиями порядка несколько десятков и сотен килоэлектронвольт, кинетическая энергия, передаваемая ионами атомам пленки, значительно превышает пороговую энергию смещения, поэтому первично смещенные атомы способны смещать "каскад" вторично смещенных атомов.

Согласно модели радиационного "каскада", предложенного М. Кумаховым [2], каскадная функция

$$v(E) = 0,303 E/E_d. \quad (8)$$

Чтобы найти число смещенных атомов, производимых первично смещенным атомом, необходимо усреднить каскадную функцию по энергетическому спектру первично смещенных атомов. Усредненная каскадная функция

$$\overline{v(E)} = 0,303 (T_m/E_d)^{1/2}, \quad (9)$$

где  $T_m$  — максимальная энергия, переданная бомбардирующими ионами атомам отдачи.

Для определения числа первично смещенных атомов запишем их энергетический спектр в виде:

$$\frac{dW}{dE} = N \frac{d\sigma}{dE} \Delta x.$$

Тогда спектр атомов отдачи на границе пленка—подложка

$$\frac{dn_{\text{п}}}{dT} = \int_{E_d}^{T_m} f(E, T) \frac{dW}{dE} dE, \quad (10)$$

где  $f(E, T)$  — распределение энергетических потерь.

Для потенциала взаимодействия вида  $r^{-2}$

$$f(E, T) = \frac{\tau}{E^{1/2}} \frac{1}{T^{3/2}}.$$

Учитывая выражение для дифференциального сечения, получаем выражение для спектра энергий атомов отдачи на границе пленка—подложка

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\text{п}}}{dT} = N \Delta x \frac{\pi^2}{2} \frac{0,45 z_0 z_1 0,885 a_0 e^2}{(z_0^{1/2} + z_1^{1/2})^{2/3}} \left(\frac{M_0}{M_1}\right)^{1/2} \times \\ \times \left(\frac{E_d}{E_0}\right)^{1/2} \frac{1}{T^{3/2}} \int_{E_d}^{T_m} \frac{dE}{E^{3/2}}. \end{aligned} \quad (11)$$

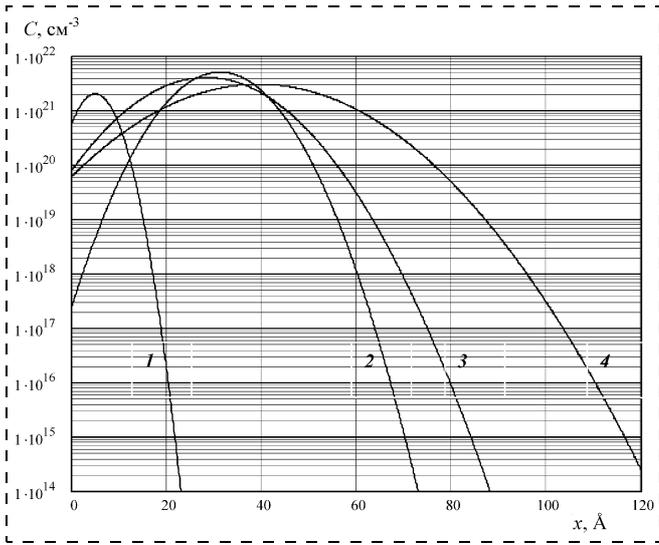


Рис. 1. Профили распределения атомов отдачи Cu в SiCO<sub>2</sub> после бомбардировки структуры Cu—SiO<sub>2</sub>:

1 — ионами В; 3 — ионами Р; 4 — ионами Ag с энергией 100 кэВ и дозой  $D_0 = 10^{16} \text{ см}^{-2}$ ; и 2 — Au в SiO<sub>2</sub> после бомбардировки структуры Au—SiO<sub>2</sub> ионами Р с энергией  $E_0 = 100 \text{ кэВ}$  и дозой  $D_0 = 10^{16} \text{ см}^{-2}$

Определив из (11) число первично смещенных атомов пленки можно найти полное число смещенных атомов, внедряемых в подложку:

$$n = \frac{1}{6} v_{\text{п}} \overline{v(E)}. \quad (12)$$

Зная (11), по методике, описанной ранее для бомбардирующих ионов, можно определить профиль распределения атомов отдачи в подложке.

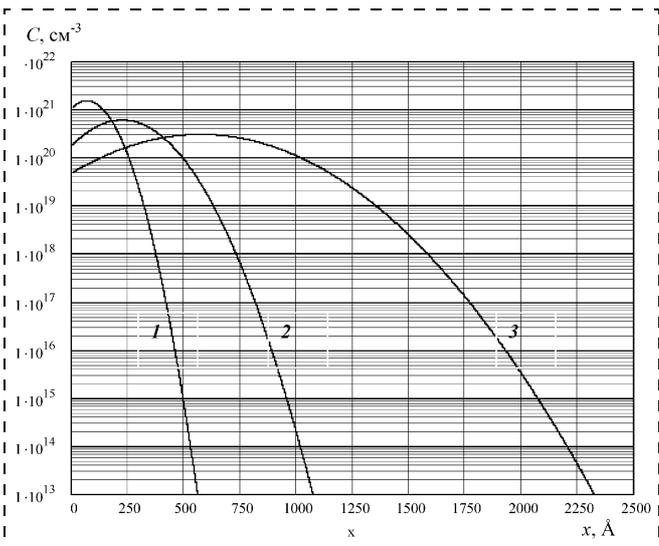


Рис. 2. Профили распределения бомбардирующих ионов Р в Si после бомбардировки структуры SiO<sub>2</sub>—Si ионами Р с энергией 100 кэВ и дозой  $D_0 = 10^{16} \text{ см}^{-2}$  при различных толщинах пленки SiO<sub>2</sub>:

1 — 2100 Å; 2 — 1400 Å; 3 — 700 Å

На основе изложенной выше физической модели процессов имплантации через пленки и легирования атомами отдачи был разработан пакет прикладных программ моделирования указанных процессов на ЭВМ. С помощью разработанных программ был проведен численный эксперимент. Исследования проводились для структур пленка (Al, Cr, SiO<sub>2</sub>) — кремниевая подложка и ионов фосфора, бора, аргона. Выбор ионов и объектов исследования обусловлен их практической и научной ценностью.

### Обсуждение результатов

Расчетные значения числа атомов отдачи, внедренных в подложку, в расчете на один бомбардирующий ион, в случае бомбардировки пленок золота, молибдена, меди ионами аргона, бора, фосфора представлены в таблице. Расчетные значения находятся в соответствии с экспериментальными, полученными в работах [3, 4].

Из расчетных данных видно, что число атомов отдачи, внедренных в подложку, увеличивается с ростом атомной массы бомбардирующих ионов. Так, в случае бомбардировки пленок молибдена ионами аргона, фосфора, бора, число атомов отдачи, внедренных в подложку в расчете на один падающий ион, равно 3,41; 2,72; 0,329 соответственно.

Видно также, что влияние материала пленки на число атомов отдачи незначительно, так, например, в случае бомбардировки ионами фосфора с энергией 160 кэВ пленок золота, молибдена, меди число атомов отдачи в расчете на один бомбардирующий ион равно 2,09; 2,72; 2,92 соответственно.

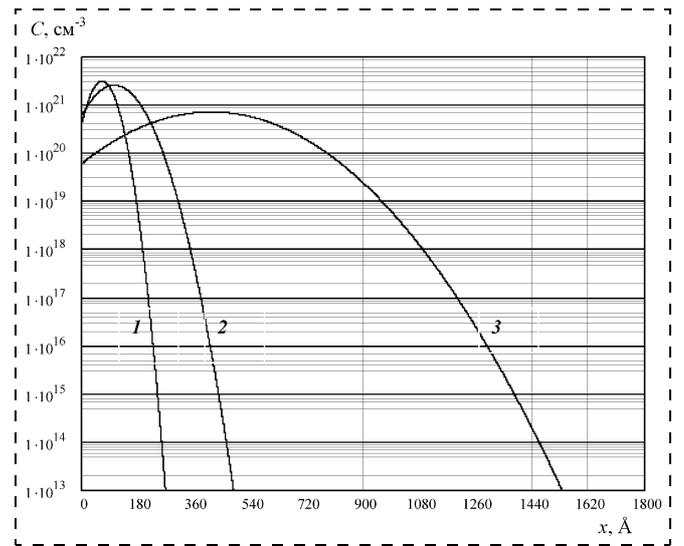


Рис. 3. Профили распределения бомбардирующих ионов В в Si после бомбардировки структуры SiO<sub>2</sub>—Si ионами В с энергией  $E_0 = 100 \text{ кэВ}$  и дозой  $D_0 = 10^{16} \text{ см}^{-2}$  при различных толщинах пленки SiO<sub>2</sub>:

1 — 5200 Å; 2 — 3500 Å; 3 — 1700 Å

Полное число атомов отдачи, внедряемых в подложку, в расчете на один бомбардирующий ион в случае бомбардировки структур пленка (Au, Mo, Cu) – подложка (Si) ионами (B, P, Ag)

Пленка	Ион	Толщина пленки $0,6 R_p, \text{Å}$	$n$
Cu	Ag	418	4,7
Cu	P	497	2,92
Cu	B	549	0,537
Mo	Ag	925	3,41
Mo	P	1095	2,72
Mo	B	1200	0,329
Au	Ag	312	3,048
Au	P	365	2,088
Au	B	395	0,268

Согласно данным, представленным на рис. 1, внедренные в подложку атомы отдачи распределяются в тонком приповерхностном слое подложки толщиной порядка нескольких десятков ангстрем (нескольких нанометров). При этом средняя концентрация атомов отдачи в слое порядка  $10^{21} \text{ см}^{-3}$ .

Приведенные на рис. 2, 3 данные показывают, что при этом в подложку одновременно импланти-

руются и бомбардирующие ионы, формируя в ней тонкие легированные ионами слои различной толщины и с различным уровнем легирования.

Таким образом, показано, что ионная бомбардировка структур пленка—подложка позволяет: формировать тонкие высоколегированные атомами отдачи слои; формировать тонкие, различной толщины и с различным уровнем легирования бомбардирующими ионами слои; осуществлять одновременное легирование двумя легирующими примесями.

#### Список литературы

1. Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество. М.: Изд-во иностр. лит. 1950.
2. Кумахов М. А. Кандидатская диссертация МГУ, НИИ ядерной физики, 1968.
3. Гречель Р., Клабес Р., Крейс У. Внедрение атомов отдачи в кремний при имплантации ионов через тонкие слои // Взаимодействие атомных частиц с твердым телом: Материалы V Всесоюзной конференции. Минск, Минский радиотехнический институт. 1978. Ч. 2. С. 80–82.
4. Nichi H., Sukurai T., Furuga T. Effect of ion bombardment on metal-silicon interphase. – Ion implantation in semiconductors science and technology. New York and London: Plenum press. 1975. P. 347–354.

## ПРИМЕНЕНИЕ МНСТ

УДК 621.3

В. Г. Градецкий, д-р техн. наук, проф.,  
М. М. Князьков, Е. А. Семенов, канд. техн. наук  
Институт проблем механики РАН, г. Москва

### ДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В МИНИАТЮРНЫХ МНОГОЗВЕННЫХ РОБОТАХ

*Рассматриваются динамические процессы, происходящие в многозвенных миниатюрных роботах, содержащих последовательные цепочки миниатюрных функциональных модулей. Анализируется динамическое взаимодействие между отдельными модулями, соединенными между собой жесткой или упругой связью. Предлагается аналитическое решение задачи движения миниатюрного многозвенного робота внутри трубок малых сечений.*

#### Введение

Основные особенности и отличительные свойства микромеханики зависят от линейных размеров изучаемых объектов, находящихся в обычно прини-

маемом диапазоне приблизительно  $10^{-2}$ – $10^{-7}$  м, хотя жестких ограничений как в сторону уменьшения, так и увеличения размеров не существует. Динамические свойства объектов микромеханики определяются соотношениями тех действующих сил и моментов, которые оказывают существенное воздействие на подвижные механические системы. Наибольшее значение придается таким действующим силам, как силы трения, адгезии, вязкости, поверхностного натяжения, электростатические, электромагнитные, а также различным силам сопротивления, возникающим при движении миниатюрных объектов в различных газовых и жидкостных средах, в вакууме и по шероховатым поверхностям твердых тел. Действующими силами могут быть как приводящие в действие микросистемы, так и внешние силы сопротивления движению.

Существенное значение придается миниатюрным роботам, которые получают в настоящее время наибольшее применение и имеют характерные линейные размеры  $10^{-1}$ ... $10^{-3}$  м. К таким объектам относятся электромагнитные роботы, которые предназначены для движения внутри трубок малых диаметров и выполнения диагностических операций.

Методы движения таких миниатюрных роботов описывались ранее [1, 3, 5], также рассматривались системы многопроцессорного управления [2, 4]. Однако аналитические решения задач движения многозвенных миниатюрных роботов не были ранее достаточно разработаны. В особенности это относится к необходимости анализа динамических процессов взаимодействия между отдельными модулями в многозвенных последовательно соединенных модулях. В данной работе представлено приближенное аналитическое описание динамики управляемых движений последовательно соединенных цепочек многозвенных роботов.

### Движение многозвенного робота внутри трубы малого диаметра при поступательном движении и выбор рациональных параметров

Вначале рассмотрим движение многозвенного робота по внутренней поверхности трубы малого диаметра при поступательном движении. Будем считать при модельном рассмотрении, что многозвенный робот представляет собой систему твердых тел или модулей, соединенных между собой жесткой или упругой сцепкой. В случае жесткой сцепки отдельные модули соединены между собой короткими несжимаемыми нитями, концы которых закреплены в виде сферических подшипников в предыдущем и последующих модулях таким образом, что возможны повороты двух смежных звеньев на определенные углы в плоскости движения.

Каждый модуль может представлять собой управляемую активную, либо пассивную систему с электромеханическим приводом и передающим движение звеном типа "винт—гайка", либо с электромагнитным приводом, выполненным в виде соленоида с возможным движением штока при закреплении с помощью управляемых упоров корпуса или возможным движением корпуса относительно штока при закреплении посредством управляемых упоров самого штока.

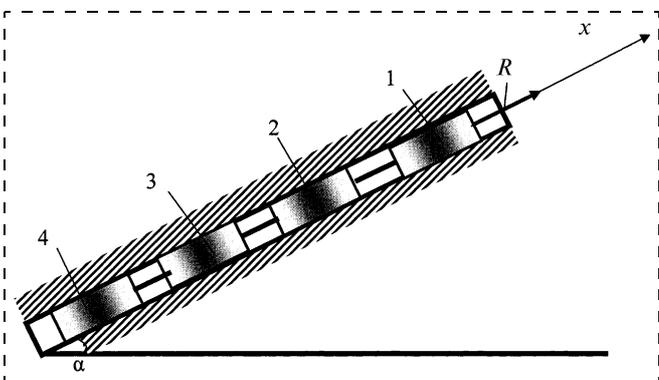


Рис. 1. Схема движения многозвенного модульного робота внутри трубы, расположенной под углом  $\alpha$  к горизонту, который может меняться от 0 до  $180^\circ$

В случае движения системы с электромеханическим приводом и звеном "винт—гайка" рассматривается движение в пределах одного полного хода винта, а в случае движения системы с электромагнитным приводом — движение при полном выдвигании штока относительно закрепленного корпуса, т. е. на одном полном шаге.

### Решение задачи определения тягового усилия и необходимых параметров

#### Постановка задачи

Рассмотрим движение многозвенной системы в следующей постановке задачи (рис. 1, 2). Движение — одномерное, прямолинейное, равномерное.

Предположим, что известны массы  $m_1, m_2, m_3$  и веса  $P_1, P_2, P_3$  сцепленных цилиндрической формы модулей, движущихся в трубе, образующей угол  $\alpha$  с горизонтом (рис. 1). Приведенные коэффициенты трения о внутреннюю поверхность соответственно равны  $f_1, f_2, f_3$ . Требуется определить:

- 1) силу  $R$ , приложенную к первому модулю, направленную параллельно наклонной трубе вдоль оси  $x$ , при действии этой силы система будет равномерно двигаться вверх по трубе;
- 2) усилия в нитях (реакции связей)  $T_{12}, T_{23}$ ;
- 3) перемещение звеньев.

Для решения поставленной задачи вначале рассмотрим равновесие всех трех модулей, поскольку при равномерном прямолинейном движении, как и в случае относительного покоя, все силы, действующие на систему, должны находиться в равновесии.

Считая зависимость внешней приложенной силы как функции времени  $R = R(t)$  между рассматриваемыми моментами времени линейной, рассмотрим действие всех приложенных сил и реакций сил.

Тогда в системе будут действовать следующие силы: активные силы  $R$  и силы веса  $P_1, P_2, P_3$ , масс  $m_1, m_2, m_3$  отдельных звеньев, нормальные си-

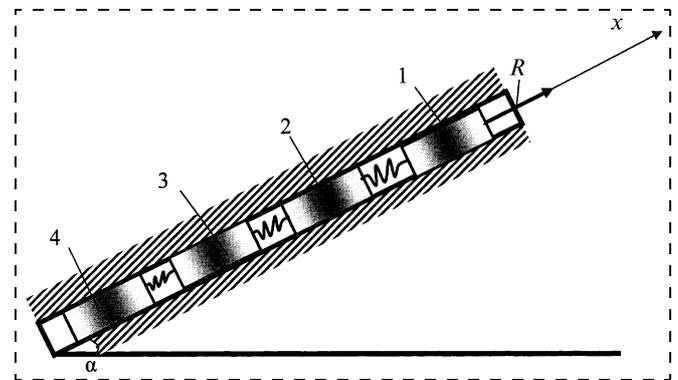


Рис. 2. Схема движения многозвенного модульного робота внутри трубы, расположенной под углом  $\alpha$  к горизонту. Модули соединены упругой сцепкой

Диаметр робота, мм	Наименование параметров										
	$B$ , Тл	$\Phi$ , Вб	$n$	$F_1$ , Н	$\Sigma F_2$ , Н	$U_{cp}$ , В	$I_{cp}$ , А	$t_{и}$ , с	$t_{п}$ , с	$T$ , с	$f$ , Гц
10	0,5	$4 \cdot 10^{-6}$	200	0,4	0,31	6,8	0,8	$3,2 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	20
5	0,5	$1 \cdot 10^{-6}$	180	$0,25 \cdot 10^{-1}$	$0,2 \cdot 10^{-1}$	4,5	0,5	$2,8 \cdot 10^{-2}$	$2,7 \cdot 10^{-2}$	$5,5 \cdot 10^{-2}$	18,1
1	0,5	$4 \cdot 10^{-8}$	120	$0,4 \cdot 10^{-2}$	$0,32 \cdot 10^{-2}$	1,5	0,15	$2,9 \cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	$5,8 \cdot 10^{-2}$	17,2
0,1	0,5	$4 \cdot 10^{-10}$	80	$0,4 \cdot 10^{-4}$	$0,33 \cdot 10^{-4}$	0,8	$0,6 \cdot 10^{-2}$	$3,2 \cdot 10^{-2}$	$2,8 \cdot 10^{-2}$	$6,0 \cdot 10^{-2}$	16,6
0,01	0,5	$4 \cdot 10^{-12}$	50	$0,4 \cdot 10^{-6}$	$0,35 \cdot 10^{-6}$	0,4	$0,8 \cdot 10^{-4}$	$3,9 \cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	$6,5 \cdot 10^{-2}$	15,0

$B$  – индукция магнитного поля;  $\Phi$  – магнитный поток;  $n$  – число витков;  $F_1$  – электромагнитная сила;  $\Sigma F_2$  – силы, препятствующие движению;  $U_{cp}$  – напряжение питания (среднее значение);  $I_{cp}$  – ток (среднее значение);  $t_{и}$  – длительность импульса питания;  $t_{п}$  – длительность паузы между импульсами;  $T$  – период следования импульсов;  $f$  – частота следования импульсов питания

лы реакций  $N_1, N_2, N_3$  и силы трения скольжения  $F_1, F_2, F_3$ .

Проекции действующих сил и моментов на оси координат по направлению оси трубы  $x$  и по направлению, перпендикулярному к оси  $x$ , имеют вид:

$$\sum_{k=1}^n F_{kx} = 0; \sum_{k=1}^n F_{ky} = 0; \sum_{k=1}^n M_{kxx} = 0; \sum_{k=1}^n M_{ky} = 0, \quad (1)$$

или, подставляя значения введенных сил, получаем

$$\begin{cases} R - F_1 - P_1 \sin \alpha - F_2 - P_2 \sin \alpha - F_3 - P_3 \sin \alpha = 0; \\ N_1 + N_2 + N_3 - P_1 \cos \alpha - P_2 \cos \alpha - P_3 \cos \alpha = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Считаем, что движение является равномерным и прямолинейным и вращение отсутствует. В этом случае для решения поставленной задачи возможно применение лишь уравнений равновесия сил.

При движении в трубе силы  $F_i = f \int_0^{2\pi} N_i r d\alpha$ ,  $F_i = f(N_i + SP_0)$ , где  $P_0$  – добавочное давление, вызванное силами молекулярного притяжения;  $S$  – общая площадь всех областей контакта между телами, в случае микроразмеров – диаметр робота порядка нескольких миллиметров (см. таблицу).

Рассмотрим равновесие каждого модуля в отдельности, разрезав мысленно нити и заменив их действие реакциями (рис. 3).

Составим уравнения движения в проекциях на те же оси координат для каждого модуля с учетом действующих сил в трехзвенной системе (рис. 4, 5):

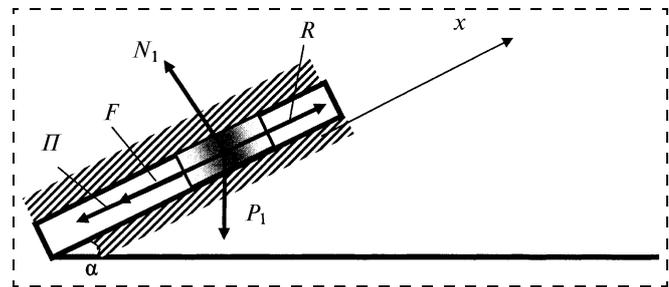


Рис. 3. Схема действия сил на один модуль:  $\Pi$  – сила, развиваемая при растяжении пружин

$$\begin{cases} R - F_1 - T_{12} - P_1 \sin \alpha = 0; \\ N_1 - P_1 \cos \alpha = 0; \\ T_{12} - F_2 - T_{23} - P_2 \sin \alpha = 0; \\ N_2 - P_2 \cos \alpha = 0; \\ T_{23} - F_3 - P_3 \sin \alpha = 0; \\ N_3 - P_3 \cos \alpha = 0. \end{cases} \quad (3)$$

К этим уравнениям добавим зависимости приведенных сил трения от нормального давления с учетом (3):

$$\begin{cases} F_1 = f_1 N_1 = f_1 P_1 \cos \alpha; \\ F_2 = f_2 N_2 = f_2 P_2 \cos \alpha; \\ F_3 = f_3 N_3 = f_3 P_3 \cos \alpha. \end{cases} \quad (4)$$

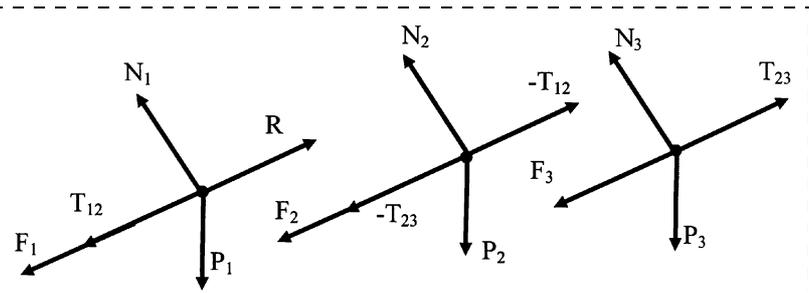


Рис. 4. Схема действия сил и реакций сил в каждом модуле трехзвенной системы

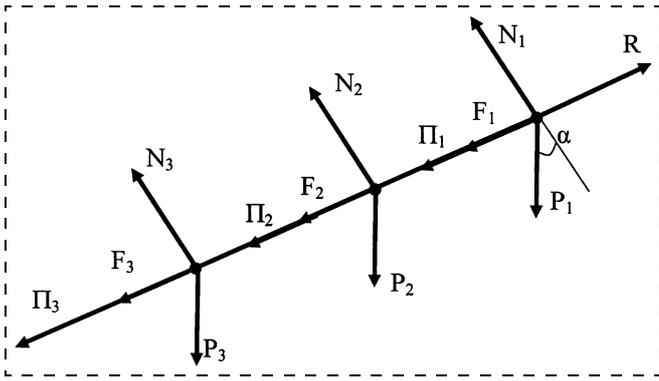


Рис. 5. Схема действия сил в трехзвенной системе

Заметим, что силы трения  $F_1, F_2, F_3$  действуют только в стадии движения, а в стадии торможения при действии управляемых упоров возникающие значительно большие значения сил трения  $F_{01}, F_{02}, F_{03}$  таковы, что  $F_{01} \gg R; F_{02} \gg R; F_{03} \gg R$  и происходит торможение элемента модуля (штока или корпуса в случае электромагнитного привода).

Подставляя полученные значения в уравнения (1), получаем, что внешняя вынуждающая движение сила  $R$  для осуществления равномерного движения внутри трубы должна быть равна следующему выражению:

$$R = (P_1 + P_2 + P_3) \sin \alpha + (f_1 P_1 + f_2 P_2 + f_3 P_3) \cos \alpha. \quad (5)$$

Выражение для расчета натяжения нити найдем из уравнений (2):

$$\begin{cases} T_{12} = (P_2 + P_3) \sin \alpha + (f_2 P_2 + f_3 P_3) \cos \alpha, \\ T_{23} = f_2 P_2 \sin \alpha + f_3 P_3 \cos \alpha. \end{cases} \quad (6)$$

Из уравнений (3) следует, что сила трения, действующая на первый модуль, равна его максимальному возможному значению.

Для отдельного модуля системы можно составить дифференциальное уравнение движения:

$$m \ddot{x} = \sum_{i=1}^k F_i.$$

Раскрывая правую часть уравнения для системы модулей, получаем следующее уравнение без учета описания физических процессов в движителях, поскольку усилие  $R$ , развиваемое движителем (двигателем), определяется его конструктивными параметрами и физическим принципом действия и будет представлено далее для электромагнитного типа:

$$m \ddot{x} = R - F_1 - P_1 \sin \alpha - F_2 - P_2 \sin \alpha - F_3 - P_3 \cos \alpha.$$

Подставляя значения действующих сил, получаем в случае равенства коэффициентов трения  $f_1 = f_2 = f_3 = f_g$

$$m \ddot{x} = R - (m_1 g + m_2 g + m_3 g) \sin \alpha - (m_1 + m_2 + m_3) f_g \cos \alpha,$$

где  $m$  — приведенная масса всей системы, откуда

$$\ddot{x} = \frac{R}{m} - \frac{m_1 + m_2 + m_3}{m} g \sin \alpha - \frac{m_1 + m_2 + m_3}{m} f_g \cos \alpha.$$

Интегрируя полученное уравнение, можно найти значение скорости  $v = \dot{x}$  системы и линейного перемещения  $h = x$ .

Для определения постоянных интегрирования  $C_1$  и  $C_2$  используется начальное условие задачи: при  $t = 0, \dot{x} = v_0$ .

При равных массах модулей и линейном законе изменения движущей силы  $R = kt$  получим для выражения скорости

$$\begin{cases} \ddot{x} = Rkt - g \sin \alpha - f_g \cos \alpha, \\ \dot{x} = Rkt^2 - g(\sin \alpha + f_g \cos \alpha) + v_0. \end{cases} \quad (7)$$

Пользуясь полученным уравнением, можно определить значение скоростей  $v_{kt}$  в моменты времени  $t(t_1, t_2, \dots, t_k)$ .

В случае движения на упругой сцепке (см. рис. 2) необходимо ввести в рассмотрение силу действия пружины. При этом сила, возникающая в результате растяжения пружины предыдущего модуля, будет внешней возбуждающей силой для последующего модуля.

В этом случае движение системы можно описать следующими уравнениями, принимая массы всех модулей равными:

$$\begin{cases} m \ddot{x} = R - F_1 - P_1 \sin \alpha - \Pi_1, \\ m \ddot{x}_1 = \Pi_1 - F_2 - P_2 \sin \alpha - \Pi_2, \\ m \ddot{x}_2 = \Pi_2 - F_3 - P_3 \sin \alpha - \Pi_3, \\ \dots \\ m \ddot{x}_{n-1} = \Pi_{n-1} - F_n - P_n \sin \alpha - \Pi_n. \end{cases} \quad (8)$$

Здесь  $\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_n$  — силы, развиваемые при растяжении пружин, соединяющих соответственно модули 1, 2, 3, ...,  $n$ . В общем виде сила, развиваемая пружиной, линейна и пропорциональна растяжению пружины,  $\Pi_i = Cx_i$ .

Система уравнений (8) итерационного типа может быть решена численно на компьютере по стандартной программе итерационных вычислений.

Дифференциальное уравнение одномерного движения в проекции на ось  $x$  за один период движения системы:

$$m\ddot{x} = F_1 - F_2 - F_3 - F_4,$$

где  $F_1 = kx$  — движущая сила;  $F_2 = fN$  — сила сухого трения;  $N = mg$  — сила нормального давления;  $F_3$  — сила внешнего сопротивления;  $F_4 = \eta x$  — сила пружины.

Подставляя принятые значения сил, получаем уравнение:

$$m\ddot{x} = kx - \eta x - fgm \text{ или}$$

$$\ddot{x} - \left(k - \frac{\eta}{m}\right)x = -fg.$$

Решение этого неоднородного линейного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами равно сумме общего решения соответствующего однородного уравнения и частного решения уравнения с правой частью.

Искомое уравнение системы, как твердого тела, за один период движения имеет окончательный вид:

$$x = \frac{1}{2} \left[ x_0 - \frac{fg}{k - \frac{\eta}{m}} \right] \left[ e^{\left(k - \frac{\eta}{m}\right)^{\frac{1}{2}} t} + e^{-\left(k - \frac{\eta}{m}\right)^{\frac{1}{2}} t} \right] + \frac{fg}{k - \frac{\eta}{m}}.$$

В таблице представлены динамические, электромагнитные и электромеханические характеристики миниатюрных многозвенных роботов при изменении внешнего диаметра робота в пределах 0,01...10 мм. Из рассмотрения таблицы следует, что при этом внешняя движущая электромагнитная сила изменяется в  $10^6$ , т. е. от  $0,4 \cdot 10^{-6}$  до 0,4 Н.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 05-01-00205.*

#### Список литературы

1. Градецкий В. Г., Князьков М. М., Кравчук Л. Н., Семенов Б. А. Методы движения миниатюрных управляемых внутритрубных роботов // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 9. С. 37–42.
2. Градецкий В. Г., Князьков М. М., Кравчук Л. Н., Соловцов В. Н. Микропроцессорное управление движением минироботов внутри труб малых диаметров // Микросистемная техника. 2002. № 8. С. 11–19.
3. Rizzotto G. G., Amato P., Gradetsky V., Kyazkov M. In-Pipe microrobot with inertia mood of motion // Int. Conf. CLAWAR—2004, Spain.
4. Rizzotto G. G., Amato P., Gradetsky V., Solovtsov V., Knyazkov M. Simulation and Modeling of Electro-Magnetic Mechatronic Microsystems // Proc. of the IARP Intern. Conf. on Microrobots, Micromachines and Microsystems. Moscow, April 24–25, 2003.
5. Градецкий В. Г., Князьков М. М., Семенов Е. А. Проблемы адаптивного движения мехатронных макро- и микросистем // Труды Международного симпозиума "Адаптивные и интеллектуальные роботы: современное состояние и перспективы". Москва, Россия, 24–26 ноября 2005 г. С. 83–93.

УДК 681.586

**А. Ф. Штырлин**, канд. техн. наук,  
Московский авиационный институт  
(государственный технический университет)

## КОЛЛОИДНЫЕ ЭЛЕКТРОРАКЕТНЫЕ ДВИГАТЕЛИ ДЛЯ КОСМИЧЕСКИХ МИКРОАППАРАТОВ

*Рассматривается возможность использования коллоидных электроракетных микродвигателей для мягкой стабилизации параметров движения длительно работающих космических микроаппаратов с массой от 1 до 100 кг, энерговооруженностью 0,4...2 Вт/кг и компенсационным микроускорением  $10^{-5}$ ... $10^{-4}$  м/с<sup>2</sup>, т. е. для нано- и микроспутников. Приведена тенденция повышения удельной стоимости единичных конструкций спутников при переходе к космическим микроаппаратам.*

За последние годы в результате интенсивного развития нанофизики твердого тела, направленной на исследование структур нанометрового масшта-

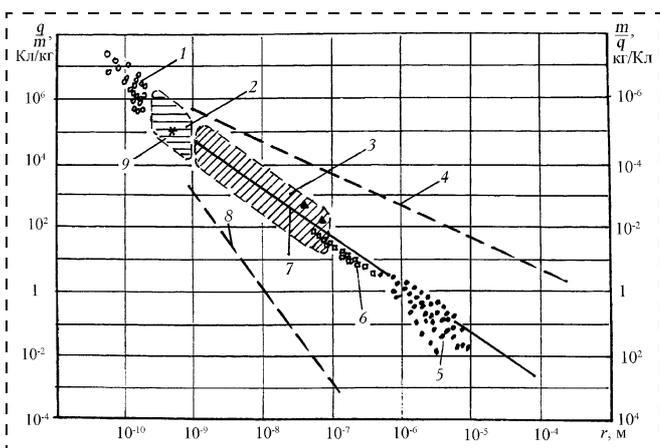
ба, возникли новые научно-технические направления — наноматериалы и нанотехнологии. Появление уникальных материалов и структур с новыми свойствами и качественными перспективными изменениями привело к революционному развитию в таких областях, как радиоэлектроника, вычислительная, информационная и космическая техника [1].

В космической технике происходит уменьшение массы и габаритных размеров летательных аппаратов вплоть до нескольких килограмм и десятков сантиметров. Так появились проекты наноспутников с массой 1...10 кг. Развиваются микроспутники с массой 10...100 кг, и продолжается практическое использование мини-спутников с массой 100...500 кг. Космические системы, состоящие из большого числа наноспутников, могут обеспечить решение глобальных задач с высокой надежностью, легкостью восполнения и наращивания [2].

Одной из перспективных задач является создание ракетных микродвигателей для расстановки, поддержания параметров орбит и ориентации кос-

мических макроаппаратов. Предлагается решить эти задачи на базе микро-ЖРД и РД твердого топлива с импульсным режимом работы и создается научно-технический задел в этих направлениях [3]. Такие системы имеют простое конструкторское решение и могут быть использованы в некоторых случаях. Однако при переходе к необходимости мягкого регулирования полетных параметров и большого времени активной работы спутников, до 10 лет и более, это достоинство резко снижается, поэтому появилась необходимость применения микротяговых двигателей, например коллоидных, которые могут более эффективно решать поставленные полетные задачи. По этим двигателям накоплен очень большой научно-технический задел по рабочим процессам и лабораторным моделям некоторых экспериментальных конструкций [4].

Коллоидные электроракетные двигатели относятся к классу электростатических двигателей, в которых протекают три физических процесса: ионизация и распыление жидкости до удельного заряда нанокпель  $10^2 \dots 10^4$  Кл/кг, ускорение частиц с напряжением  $10^2 \dots 20$  кВ до скорости истечения  $5 \dots 15$  км/с и нейтрализации электрического заряда в выходящей струе до нейтрального состояния. Разработаны разные варианты единичных эмиссионных ячеек таких двигателей и модульных конструкций, содержащих пакет ячеек, а также сборки таких модульных пакетов на разные уровни тяги от  $5 \cdot 10^{-4}$  до  $0,02$  Н. Особенностью таких двигателей является почти полная независимость коэффициента полезного действия от уровня тяги, что является существенным фактором для использования в космических микроаппаратах. Энергетическая цена тяги двигателей при скорости истечения  $10 \dots 15$  км/с не превышает  $10 \dots 12,5$  Вт/мН, а при снижении



**Рис. 1. Спектр заряженных частиц:**  
 1 — атомарные ионы; 2 — молекулярные ионы и кластеры; 3 — заряженные наночастицы; 4 — многозарядные частицы  $L_i$  при  $E = 10^{10}$  В/м; 5 — вакуумное масло; 6 — сплав Вуда; 7 — жидкие частицы глицерина; 8 — однозарядные частицы при  $\rho = 22,5 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>; 9 — фуллерен  $C_{60}$

скорости истечения до  $5 \dots 7,5$  км/с уменьшается в 2 раза [4].

В коллоидных электроракетных двигателях в рабочем цикле для ускорения рабочего тела и создания тяги используется заряженное жидкое вещество в капельном состоянии при радиусе  $10^{-9} \dots 10^{-7}$  м, т. е. в нанометровом диапазоне размеров. На рис. 1 показан непрерывный спектр заряженных частиц, из которого видна область параметров заряженных нанокпель, лежащая между атомарными и молекулярными ионами и заряженными микрокаплями. Когда необходимо получение высокой кинетической энергии при решении энергетических задач, используются легкие заряженные частицы с размерами до 1 нм, а для электростатического переноса массы вещества при решении технологических задач необходимы тяжелые заряженные частицы с размером более 1 мкм. Для коллоидных электроракетных двигателей необходима масса и скорость, поэтому используются нанокпли с радиусом  $3 \dots 70$  нм [5].

Нанозифика заряженного вещества в капельном состоянии очень слабо изучена, но параметры могут быть определены из общих физических представлений и приведены для нанокпель в следующих формулах:

- предельный электрический заряд

$$q = 8\pi(\epsilon_0\epsilon_r\sigma)^{0,5}r^{1,5},$$

где  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная, равная  $8,854 \cdot 10^{-12}$  Ф/м;  $\epsilon_r$  — относительная диэлектрическая проницаемость;  $\sigma$  — поверхностное натяжение жидкости;  $r$  — радиус частицы;

- масса

$$m = \frac{4}{3}\pi r^3\rho,$$

где  $\rho$  — массовая плотность жидкости;

- удельный заряд

$$\frac{q}{m} = 6 \frac{(\epsilon_0\epsilon_r\sigma)^{0,5}}{\rho r^{1,5}};$$

- потенциал

$$U = \frac{q}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} = 2 \left( \frac{\sigma r}{\epsilon_0\epsilon_r} \right)^{0,5};$$

- напряженность поля на поверхности

$$E = \frac{q}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r^2} = 2 \left( \frac{\sigma}{\epsilon_0\epsilon_r r} \right)^{0,5};$$

- электростатическое  $P_E$  и капиллярное  $P_\sigma$  давления

$$P_E = \frac{\epsilon_0\epsilon_r}{r} E^2 = \frac{2\sigma}{r} = P_\sigma;$$

- число элементарных зарядов

$$n = q/e.$$

где  $e$  — элементарный заряд, равный  $1,602 \cdot 10^{-19}$  Кл.

Все параметры нанокapлей в устойчивом состоянии зависят только от поверхностного натяжения  $\sigma$ , массовой плотности  $\rho$ , относительной диэлектрической постоянной окружающей среды  $\epsilon_r$  и радиуса капли  $r$ .

Результаты расчетов физических параметров наноразмерных каплей по этим зависимостям для глицерина представлены на рис. 2. Приведенные формулы соответствуют устойчивому состоянию электропроводящей заряженной капли невязкой жидкости из условия равенства электростатического и капиллярного давлений при бесконечно малых и больших эллипсоидных деформациях. В наиболее перспективном диапазоне нанокapлей в пределах 1...100 нм удельный заряд достигает высоких значений  $10^2...10^5$  Кл/кг, электрические параметры  $U$  и  $E$  изменяются в противоположных направлениях: при малых размерах напряженность поля превышает  $10^9$  В/м, а электрическое давление достигает  $10^8$  Н/м<sup>2</sup>, что близко уже к физической прочности жидкости. С увеличением числа элементарных зарядов возрастает потенциал капли, за счет чего она может активно взаимодействовать с окружающей, например газовой, средой. Для коллоидных электроракетных двигателей нужны заряженные нанокapли размером 3...70 нм.

Жидкие наночастицы с такими параметрами для коллоидных ЭРД получают при электростатическом распылении жидкостей с ионной проводимостью в единичных двухэлектродных ячейках с заостренными эмиссионными электродами, как это показано на рис. 3. В эмиссионный электрод по капиллярному каналу подается распыляемая жидкость, в рассматриваемом случае — раствор иодида

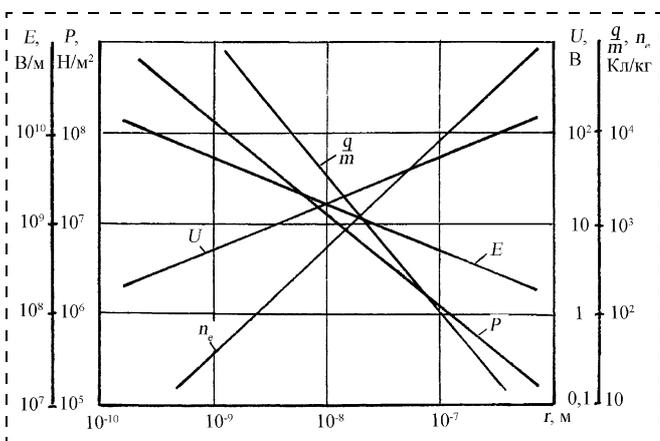


Рис. 2. Физические параметры наноразмерных каплей для глицерина:

$$\sigma = 0,064 \text{ Н/м}; \rho = 1260 \text{ кг/м}^3$$

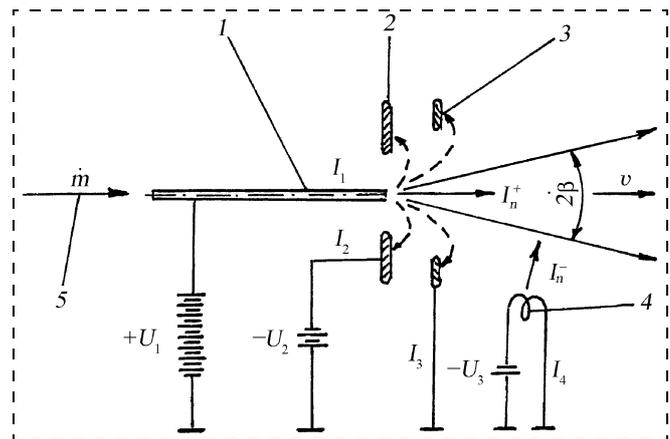


Рис. 3. Схема единичной ячейки коллоидного электроракетного двигателя:

1 — эмиссионный электрод; 2 — вытягивающий электрод; 3 — экранный электрод; 4 — электронный нейтрализатор; 5 — распыляемая жидкость;  $I_1$  — ток эмиссионного электрода;  $I_2$  — ток вытягивающего электрода;  $I_3$  — ток экранного электрода;  $I_4$  — ток нагрева электронного нейтрализатора;  $I_n^+$  — ток выходящего пучка заряженных нанокapлей;  $I_n^-$  — электронный эмиссионный ток нейтрализатора;  $v$  — выхлопная скорость потока частиц

натрия в глицерине. В электрическом поле с высокой напряженностью формируется нескомпенсированный электрический заряд катионов, затем в неоднородном поле происходит ускорение жидкости и образование заряженных микроструй, которые разрушаются на заряженные нанокapли. При дальнейшем движении в электрическом поле заряженные нанокapли продолжают ускоряться и при уносе массы вещества из ячейки создается реактивная тяга

$$P = \dot{m}v,$$

где  $\dot{m}$  — массовый расход потока частиц в единицу времени;  $v$  — скорость вытекающего из двигателя потока частиц.

Основная часть заряженных частиц вытекает из ячейки под углом  $2\beta$  и только небольшая часть попадает на вытягивающий и экранный электроды, создавая энергетические потери в процессе ускорения массы вещества. Для нейтрализации электрического заряда выходящего пучка нанокapлей используется нейтрализатор, например, генерирующий электроны при термоэмиссии из нагретой вольфрамовой нити.

В экспериментальных вакуумных условиях сняты параметры одной из единичных ячеек при разных расходах рабочей жидкости, которые даны на рис. 4. Средний удельный заряд нанокapлей изменяется в пределах 400...4000 Кл/кг. На базе этой единичной ячейки могут быть разработаны коллоидные двигатели для космических микроаппаратов с расчетными параметрами, приведенными в таб-

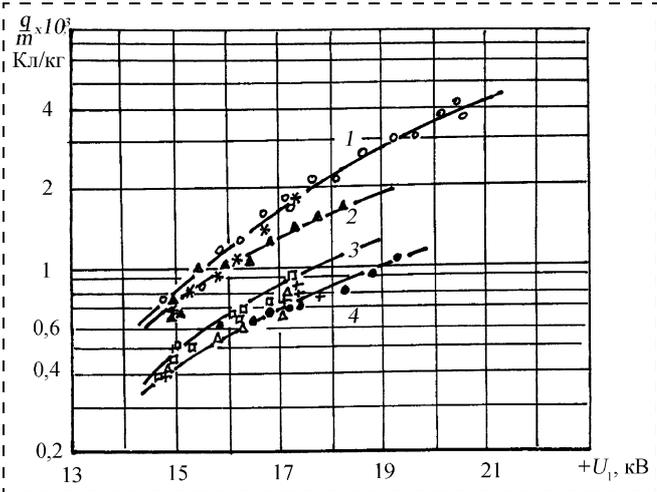


Рис. 4. Экспериментальные параметры единичной ячейки коллоидного электроракетного двигателя:

1 —  $m = 0,88 \cdot 10^{-5}$  г/с; 2 —  $m = 1,84 \cdot 10^{-5}$  г/с; 3 —  $m = 3,15 \cdot 10^{-5}$  г/с; 4 —  $m = 9,74 \cdot 10^{-5}$  г/с;  $U_2 = -2,1$  кВ

лице, где  $N$  — мощность двигателя;  $M_{p.t}$  — суммарный массовый расход рабочего тела за время работы двигателя.

Расчеты выполнены при напряжении  $U_1 = 18$  кВ и времени работы двигателя  $\tau = 1000$  ч. Двигатель с такими параметрами единичной ячейки может быть использован в наноспутниках с массой 1...10 кг и временем активной работы 5...7 лет.

Для наноспутников тяга двигателя должна повышаться за счет применения конструкций с набором ячеек числом 3, 6, 7, 12 и 18 единиц. На рис. 5 (см. третью сторону обложки) показан внешний вид конструкции коллоидного двигательного модуля с гексагональным расположением 18 ячеек. Габаритные размеры двигателя  $107 \times 52$  мм при диаметре пучка 75 мм. За счет пропорционального увеличения массового расхода рабочей жидкости, тяги и мощности двигателя от числа ячеек такой двигатель может развивать тягу до нескольких миллиньютонов, а при разработке системы хранения и подачи рабочего тела и системы электропитания может быть использован в наноспутниках с массой 10...100 кг. Имеется также научно-технический задел по коллоидным двигателям для пико- и мини-спутников.

Спутники различного назначения могут иметь самые разнообразные геометрические формы: шар,

№	$\dot{m}$ , кг/с <sup>-1</sup>	$\frac{q}{m}$ , Кл/кг <sup>-1</sup>	$V$ , м/с <sup>-1</sup>	$P$ , Н	$N$ , Вт	$M_{p.t}$ , кг
1	$8,8 \cdot 10^{-9}$	2000	6840	$6 \cdot 10^{-5}$	0,32	0,032
2	$9,74 \cdot 10^{-8}$	800	4330	$4,2 \cdot 10^{-4}$	1,4	0,35

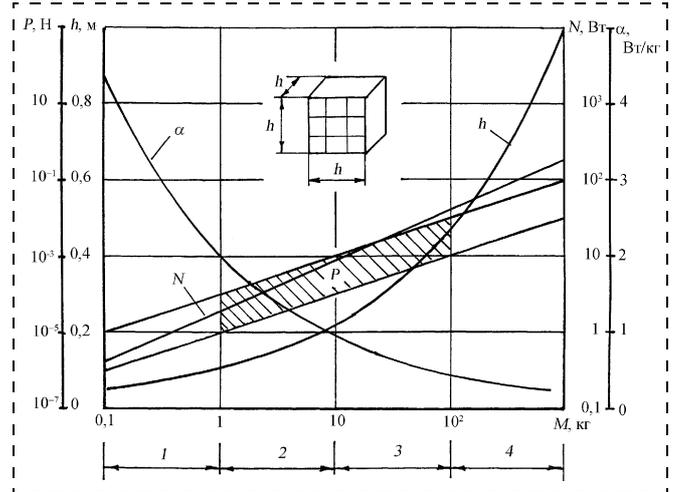


Рис. 6. Расчетные параметры спутников:

1 — пикоспутники; 2 — наноспутники; 3 — наноспутники; 4 — мини- и малые спутники;  $\alpha$  — энерговооруженность спутника

цилиндр, куб, шестигранник и комбинации этих форм. Для простоты анализа используется кубическая форма спутника с размером граней  $h$  и шестью плоскими квадратными поверхностями, на которых устанавливаются панели с солнечными батареями. Для этого случая расчет параметров спутника проводится по следующим простейшим зависимостям:

- геометрический размер граней

$$h = \left(\frac{M}{\rho}\right)^{1/3},$$

где  $M$  — масса спутника;  $\rho$  — объемная плотность конструкции;

- мощность солнечной батареи

$$N = nh^2\gamma,$$

где  $n$  — число поверхностей, занятых солнечной батареей;  $\gamma$  — удельная мощность батареи на единицу поверхности;

- энерговооруженность спутника

$$\alpha = \frac{N}{M} = n\gamma \left(\frac{\rho}{M}\right)^{1/3};$$

- потребная тяга двигателя

$$P = Ma = \rho h^3 a,$$

где  $a$  — компенсационное ускорение для мягкого управления.

Результаты расчетной оценки по приведенным формулам в зависимости от массы спутников при  $\rho = 1000$  кг/м<sup>3</sup>,  $n = 1$  и  $\gamma = 200$  Вт/м<sup>2</sup> представлены на рис. 6. Энерговооруженность нано- и наноспутников находится в пределах 0,4...2 Вт/кг, что

вполне достаточно для решения большинства полетных задач. В пикоспутниках она существенно повышается и поэтому площадь солнечной батареи иногда можно снизить, а у мини- и малых спутников она снижается до неприемлемых значений, поэтому площадь солнечной батареи приходится наращивать за счет ее выноса на другие внешние поверхности. Для мягкой компенсации возникаемых полетных возмущений целесообразно использовать ускорение летательного аппарата от работы двигателя  $a = 10^{-5} \dots 10^{-4} \text{ м/с}^2$ . В этом случае для малоразмерных спутников с массой 1...100 кг необходимы двигатели с тягой  $10^{-5} \dots 10^{-2} \text{ Н}$ , т. е. 0,01...10 мН, что согласуется с указанными ранее экспериментальными и расчетными данными для коллоидных электроракетных двигателей. Эта область по поребной тяге двигателя на графике заштрихована.

Следует отметить, что малоразмерные спутники будут создаваться на базе новейших конструкторских решений, перспективных материалов, технологий и более общей технической культуры. Это неизбежно приведет к повышению затрат на разработку, изготовление и эксплуатацию таких летательных аппаратов. Так, на рис. 7 показаны оценочные статистические данные удельной стоимости единицы массы для различных летательных аппаратов — самолетов, современных спутников и малоразмерных перспективных спутников. Видно, что каждый этап развития летательной техники приводит к удорожанию ее удельной стоимости, вследствие большого объема затрат труда на единицу массы и объема конструкции. Для нано- и микроспутников удельная стоимость может достигать  $10^5 \dots 10^6$  долл/кг. Однако обнадеживающими факторами являются: резкое снижение стоимости при массовом производстве таких спутников в количестве сотен и тысяч единиц, а также снижение стоимости вывода в космическое пространство меньшей полезной массы [6, 7]. Целесообразно проводить экономическую оптимизацию параметров двигателей малой тяги [8].

Таким образом, в связи с развитием нанотехнологии и разработкой космических микроаппаратов появилась необходимость в использовании микротяговых ракетных двигателей длительного времени действия. Коллоидные электроракетные двигатели, в которых для создания реактивной тяги используются ускоренные в электрическом поле заряженные наночастицы в жидком состоянии, в на-

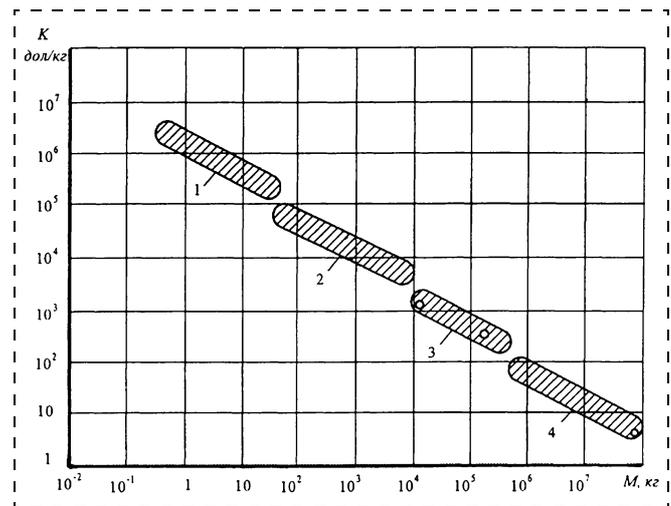


Рис. 7. Удельная стоимость единицы массы летательных аппаратов:

1 — малоразмерные перспективные космические аппараты; 2 — современные спутники Земли; 3 — воздушные летательные аппараты; 4 — водные средства передвижения

стоящее время имеют достаточно высокий накопленный научно-технический потенциал и могут рассматриваться как перспективные для использования в различных космических проектах с применением нано- и микроспутников.

#### Список литературы

- Алферов Ж. И., Агеев А. А., Гапонов С. В. и др. Наноматериалы и нанотехнологии // Микросистемная техника. 2003. № 8. С. 3—13.
- Стреж С. В., Трошин Е. В. Создание космических систем на базе микроаппаратов // Микросистемная техника. 2003. № 11. С. 35—41.
- Александров С. Е., Акулышин Ю. Д., Васильев В. К. и др. Перспективы развития микрореактивных двигателей для МСТ // Микросистемная техника. 2002. № 10. С. 3—8.
- Shtyrlin A. F. State of the art and future prospects of colloidal electric thrusters // 24<sup>th</sup> International electric propulsion conference. September 19—23. 1995. Moscow. JEP-95-103. P. 1—11.
- Штырлин А. Ф. Взаимодействие ускоренных жидких заряженных микрочастиц с поверхностью мишени // Материалы 15-й Международной конференции "ВИП—2001". 27—31 августа 2001. Звенигород. Т. 2. С. 96—100.
- Кёлле. Модели стоимости в ракетно-космической технике // Вопросы ракетной техники. 1972. № 12. С. 3—63.
- Штырлин А. Ф. Обоснование экономической эффективности применения электроракетной двигательной установки // Изв. вузов. Авиационная техника. 1976. № 4. С. 112—119.
- Штырлин А. Ф. Экономическая оптимизация параметров двигателя малой тяги // Изв. вузов. Авиационная техника. 1986. № 2. С. 76—80.

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 СПРАВОЧНИК ПО МИКРО- И НАНОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКЕ

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

### Ж

**Josephson junction** — контакт Джозефсона. Так называется микроустройство, состоящее из очень тонкого слоя диэлектрика, расположенного между двумя сверхпроводниками. Джозефсона эффект — это протекание сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника (контакт Джозефсона). Протекание тока через диэлектрический слой будет в сильной степени зависеть от внешнего магнитного поля. Эффект предсказан на основе теории сверхпроводимости английским физиком Б. Джозефсоном в 1962 г., обнаружен американскими физиками П. Андерсоном и Дж. Роуэллом в 1963 г. Электроны проводимости проходят через диэлектрик (обычно пленку оксида металла толщиной ~10 нм) благодаря туннельному эффекту. Если ток через контакт Джозефсона не превышает определенного значения, называемого критическим током контакта, то падение напряжения на контакте отсутствует (стационарный эффект Джозефсона). Если же через контакт пропускать ток больше критического, то на контакте возникает падение напряжения  $V$ , и контакт излучает электромагнитные волны (нестационарный эффект Джозефсона). Частота излучения  $\nu$  связана с напряжением на контакте  $V$  соотношением  $\nu = 2eV/h$ , где  $e$  — заряд электрона,  $h$  — постоянная Планка. Возникновение излучения электромагнитных волн связано с тем, что объединенные в пары электроны, создающие сверхпроводящий ток, при переходе через контакт приобретают избыточную (по отношению к основному состоянию сверхпроводника) энергию  $2eV$ . Единственная возможность для этой пары электронов вернуться в основное состояние — это излучить квант электромагнитной энергии  $h\nu = 2eV$ . При соединении в замкнутую цепь двух джозефсоновских контактов были получены самые чувствительные (из известных ныне) датчики магнитного поля — сквиды (от англ. SQUID — *superconducting quantum interference device*, сверхпроводящее квантовое интерференционное устройство). Они применяются для

измерения сверхмалых магнитных полей живых организмов, составления магнитных карт и детектирования объектов, скрытых под поверхностью. На основе эффектов Джозефсона были изготовлены: чувствительные детекторы очень слабых изменений напряжений; очень эффективные усилители сигналов; переключаемые и измерительные микроустройства с предельно низким уровнем шумов и др. Микроустройства на контактах Джозефсона предполагается использовать в квантовых компьютерах в качестве логических элементов.

**Joule effect** — эффект Джоуля. Эффект Джоуля можно отнести к магнитострикционному эффекту. Это есть эффект, касающийся изменения в размерах магнитного вещества, вызванный внешним магнитным полем. Кристаллическая решетка магнитного вещества деформируется в определенном направлении даже без внешнего магнитного поля. Это происходит потому, что магнитные элементы, расположенные в материале, деформируют структуру магнитного вещества посредством магнитных сил (за счет так называемого магнитоупругого эффекта). Вместе с тем, упругая сила вещества противодействует деформации, увеличивающейся вследствие возрастания магнитоупругого эффекта. Достигается равновесие сил (магнитных и упругих сил) в минимальной точке суммы этих сил. Если размеры ферромагнитного вещества конечны, то общее внутреннее магнитное поле вещества разделяется на меньшие магнитные домены. Это происходит таким образом, что сумма направлений спонтанной намагниченности доменов равна нулю. За счет этого минимизируется магнитостатическая энергия вещества. Направления намагниченности в каждом домене неодинаковы. Если внешнее магнитное поле приложено к магнитному веществу в определенном направлении, направления намагниченности внутри каждого домена изменяются. Они выстраиваются в направлении внешнего магнитного поля. В результате размеры тела из магнитного материала изменяются, переключаясь от состояния кристаллической деформации без внешнего магнитного поля к состоянию с другой точкой равновесия. На эффекте Джоуля работают некоторые микроактюаторы.

**Junction** — сочленение. Возможный физический смысл словосочетаний со словом junction: переход ( $p-n$ ); переход плавный; переход сверхрезкий; переход обратносмещенный; переход эмиттерный; барьер Шоттки; спай (термопары); спай горячий; соединение сплавное двух материалов и т. п. О  $p-n$ -переходе: условная линия раздела, на которой число носителей заряда  $p$ -типа и  $n$ -типа точно равно излишку  $p$ -типа, с одной стороны, и  $n$ -типа, с другой. Это переходная область между двумя частями кристалла полупроводника, одна из которых имеет электронную проводимость ( $n$ -типа), а другая — дырочную ( $p$ -типа).

**Junction Field Effect Transistor (JFET)** — полевой транзистор с управляющим  $p-n$ -переходом. Это полевой транзистор, затвор которого электрически отделен от канала  $p-n$ -переходом, смещенным в обратном направлении. Такой транзистор имеет два невыпрямляющих контакта к области, по которой проходит управляемый ток основных носителей заряда, и один или два управляющих электронно-дырочных перехода, смещен-

ных в обратном направлении. При изменении обратного напряжения на  $p-n$ -переходе изменяется его толщина и, следовательно, толщина области, по которой проходит управляемый ток основных носителей заряда. Область, толщина и поперечное сечение которой управляется внешним напряжением на управляющем  $p-n$ -переходе и по которой проходит управляемый ток основных носителей, называют каналом. Электрод, из которого в канал входят основные носители заряда, называют истоком. Электрод, через который из канала уходят основные носители заряда, называют стоком. Электрод, служащий для регулирования поперечного сечения канала, называют затвором. Электропроводность канала может быть как  $n$ -, так и  $p$ -типа. Поэтому по электропроводности канала различают полевые транзисторы с  $n$ -каналом и  $p$ -каналом.

Все полярности напряжений смещения, подаваемых на электроды транзисторов с  $n$ - и с  $p$ -каналом, противоположны. Управление током стока, т. е. током от внешнего относительно мощного источника питания в цепи нагрузки, происходит при изменении обратного напряжения на  $p-n$ -переходе затвора (или на двух  $p-n$ -переходах одновременно). В связи с малостью обратных токов мощность, необходимая для управления током стока и потребляемая от источника сигнала в цепи затвора, оказывается ничтожно малой. Поэтому полевой транзистор может обеспечить усиление электромагнитных колебаний как по мощности, так и по току и напряжению. Его можно использовать как переключатель с электронным управлением, как варистор. Производители: Analog Devices (США, Германия), Texas Instruments (США) и др.

## К

**Killer defect** — "смертельный" дефект. Дефект, неисправность, которые "убивают" или делают интегральную схему или другое микроустройство нерабочим. Эта такая неисправность микроустройства, которая не устраняется даже за счет резервирования функций отдельных частей этого микроустройства.

**Kilo** — кило. Префикс, означающий тысячи ( $\times 10^3$ ), символ "к".

**Kinesin** — кинезин. Молекула белка кинезина представляет собой димер, образованный двумя одинаковыми полипептидными цепями. Подобно молекуле миозина, с одной стороны каждой полипептидной цепи кинезина формируется глобулярная головка, соединенная со сравнительно длинным хвостом. Линейные размеры головки сравнительно невелики, они составляют  $4,5 \times 4,5 \times 7,5$  нм. Хвосты двух мономерных цепей сплетены вместе, а наклоненные в разные стороны головки образуют своеобразную "рогатину", которая непосредственно взаимодействует с глобулярными мономерами микротрубочки, вдоль которой перемещается кинезин. Каждая из двух головок кинезина обладает АТФ-активностью, т. е. активностью аденозинтрифосфорной кислоты (АТФ). Связывание и гидролиз молекулы АТФ в активном центре кинезина, а также последующие события, вызванные диссоциацией АДФ (аденозиндифосфата) и неорганического фосфата ( $P_i$ ) сопровождаются изменением положения головок относительно тубулиновых мономеров, в результате чего кинезин перемещается вдоль микротрубочки. Молекула белка кинезина совместно с микротрубочками цитоскелета

осуществляет транспорт веществ внутри клетки и перемещение везикул. Если провести аналогию с макромиром, то микротрубки играют роль рельсов, по которым перемещаются молекулы белков кинезина (вагоны), неся на себе полезный груз. Один конец этой молекулы прикрепляется к везикуле, которую необходимо транспортировать, а другой — к микротрубке, направляющей движение. Интересно то, что молекула кинезина "шагает" вдоль микротрубки. Один шаг димерного комплекса приводит к его смещению вдоль микротрубочки на расстояние 8 нм. Для того чтобы так шагнуть, молекула использует в качестве топлива одну молекулу АТФ. Длина шага в точности соответствует размеру двух мономерных глобул ( $\alpha$ -тубулин и  $\beta$ -тубулин), из которых построена микротрубочка. Одна молекула кинезина обычно совершает не менее 100 шагов, прежде чем она отделяется от микротрубочки. Кинезин движется с поразительно высокой скоростью. За одну секунду он делает приблизительно 100 шагов, перемещаясь за это время на расстояние 800 нм. При этом сила, развиваемая одной молекулой кинезина, составляет  $F = 6$  пН (пиконьютонов). Коэффициент полезного действия кинезинового мотора составляет  $\sim 60\%$  энергии, выделяемой при гидролизе одной молекулы АТФ. Работая в качестве индивидуального молекулярного извозчика, кинезин может совершать перемещения на очень большие расстояния (до 1 мм). Предполагается использовать подобные транспортные системы в НЭМС-конвейерах и в "лабораториях-на-чипе".

**KirchHoffian Network (KHN)** — сеть Кирхгоффа. Электрические цепи часто моделируются как сети. Такой сетевой подход можно перенести на моделирование таких областей физики, как механика и пневматика. Существуют некоторые основные требования, которым должны соответствовать системы для того, чтобы их можно было моделировать как сети: 1) сети состоят из элементов (узлов) и связей между ними; 2) существует два типа величин (переменных) в различных областях физики: потоковые величины (иные термины в технической литературе: "через" величины или 1-величины), например, электрические токи или механические силы; разностные величины (иные термины: "между" величины, 2-величины), например, электрические напряжения и давления жидкостей. Пример в виде цепочки понятий "область физики—потоковая величина—разностная величина": электричество—ток—напряжение. Другие примеры: поступательное механическое движение—сила—скорость и перемещение; механика вращения—момент—угловая скорость; пневматика—объемный расход—давление; тепловые эффекты—тепловой поток—температура; 3) связи — это идеальный элемент. Он имеет одинаковую "разностную" величину в каждой точке и не имеет потерь потоковой величины через себя. Таким образом, такой элемент может рассматриваться как одиночная точка. Математическая модель структуры такой сети — это направленный граф: ребра соответствуют элементам, а вершины соответствуют связям; 4) элементы обычно описываются как двухполюсники и многополюсники; 5) взаимосвязь между потоковыми и разностными величинами в основном задается явными или неявными уравнениями или дифференциальными уравнениями, зависящими от терминальных (конечных, предельных) величин и, возможно, внутренних состояний; 6) потоковые и разностные величины выполняют и

обеспечивают два закона сохранения: сумма всех разностных величин между вершинами вдоль каждой цепи в графе сети равна нулю; сумма всех потоковых величин внутри каждой вершины (более обобщенно — в каждом сечении графа) равна нулю. В качестве примера сетевого подхода при моделировании микросистем можно привести следующий. Бесклапанный микронасос, управляемый пьезоэлектрическим элементом, который выполняет роль мембраны в цилиндре насоса, можно от модели-

ровать как сеть с жидкостными, механическими и электрическими элементами.

**Known Good Die (KGD)** — заведомо исправный кристалл, чип. Полностью протестированные чипы, которые готовы к соединению в многочиповые модули.

**KrF** — фторид криптона. Так обозначают эксимерный лазер, где используются газы криптон и фтор. Лазер имеет длину волны излучения 248 нм. Применяется в 0,18-микрометровой технологии изготовления микроизделий. См. *Excimer laser*.

## РФФИ СТРАНИЧКА РФФИ

### 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 Российским 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>).*

#### Элементарные процессы в фотохимических реакциях с участием молекул красителей и родственных соединений и их комплексов с биомакромолекулами

Номер проекта: 99-03-32116  
Год представления отчета: 2002

Исследованы спектрально флуоресцентные свойства тиа- и оксакарбоцианиновых красителей в присутствии ДНК. Взаимодействие красителей с ДНК приводит к образованию комплексов. Обнаружено значительное увеличение квантового выхода флуоресценции красителей в присутствии ДНК. Изучено влияние природы гетероатома и заместителя в мезоположении полиметиновой цепи на рост флуоресценции. Определен стехиометрический состав сильно флуоресцирующих комплексов краситель—ДНК. Были изучены спектрально-флуоресцентные свойства 3,3'-диэтилтиадикарбоцианин иодида (ДТДКЦ) в воде в присутствии и отсутствии ДНК. Спектральные изменения указывают на образование комплексов между ДТДКЦ и ДНК. Спектральное поведение ДТДКЦ в присутствии ДНК схоже с поведением изученных полиметиновых красителей, у которых полиметиновая цепь короче на одно звено  $\text{SH}=\text{SH}$ . Однако значительного роста квантового выхода флуоресценции, как в случае с карбоцианинами, обнаружено не было. Исследованы свойства триплетных состояний ряда карбоцианиновых красителей с различной длиной полиметиновой цепи в присутствии ДНК. Показано, что взаимодействие ДНК с молекулами тиацианинов с различной длиной цепи приводит к росту квантового выхода триплетного состояния. Полученная константа скорости тушения триплетного состояния ДМТКЦ кислородом

( $2,5 \cdot 10^8$  моль<sup>-1</sup>·л·с<sup>-1</sup>) ниже ожидаемой константы скорости для диффузионно-контролируемого процесса ( $>10^9$  моль<sup>-1</sup>·л·с<sup>-1</sup>). Введение ДНК в раствор оксакарбоцианинов не приводило к заметному росту квантового выхода триплетного состояния. Исследование влияния другого типа структурно-организованных систем — мицелл (как прямых, так и обратных) на фотонику 3,3'-диэтилтиакарбоцианина показало, что в обоих типах мицелл сильно затрудняется безызлучательная дезактивация возбужденных молекул цианина, что приводит к росту квантового выхода и времени затухания флуоресценции и падению квантового выхода фотоизомеризации. Обнаружено также сильное влияние мицеллярного окружения и на процесс обратной термической изомеризации красителя. Исследования фотофизических свойств сквараинового индоцианинового красителя с длинными алкильными цепочками показали, что этот краситель ассоциируется с мицеллами и может быть использован в качестве молекулы-зонда. Изучение влияния мицеллярного окружения и ПАВ на фотохимию гидрофильных цианинов показало, что подобные красители, несмотря на общий отрицательный заряд, эффективно взаимодействуют как с катионными, так и с анионными мицеллами и что в обратных мицеллах резко меняются фотофизические, фотохимические и агрегационные свойства красителей, а заряженная мицеллярная поверхность служит хорошей матрицей для образования J-агрегатов даже при малых концентрациях красителя. Следовательно, гидрофильные цианины с сульфогруппами могут служить хорошим средством для изучения организованных систем.

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН*

## Полидиацетиленовые композиты с металлическими и полупроводниковыми нанокристаллами: синтез, структура, механизм переноса заряда и проводимости

Номер проекта: 99-03-33416  
Год представления отчета: 2002

В целях создания нанокмпозиций исследован синтез двух типов полидиацетиленовых пленок: получаемых твердофазной полимеризацией сублимированных диацетиленов и при совместном осаждении диацетиленовых и п-ксилиленовых мономеров из газовой фазы с последующей твердофазной полимеризацией. В первом случае в качестве мономера был выбран 1,6-дикарбазолилгексадин, мономерная пленка которого состоит из кристаллитов игольчатого типа с диаметром 0,1–0,5 мкм. Показано, что по сравнению с крупными кристаллами субмикронные кристаллы пленки легче деформируются под действием напряжений, вызванных полимеризацией. Перестройка сублимированных пленок влияет на кинетику их полимеризации: отсутствует автокаталитический эффект, характерный для полимеризации крупных кристаллов и связанный с фазовым переходом. Получены образцы полидиацетиленовых композитов с кристаллами PbS, средний размер которых составляет 10 нм. Исследована кинетика термической кросс-полимеризации диацетиленовых групп в полимерной матрице. Установлено, что в изотермических условиях реакция останавливается при определенной предельной конверсии диацетиленовых групп, но возобновляется при повышении температуры, достигая, соответственно, более высокого предела конверсии. Рассмотрен механизм ступенчатого процесса. Во втором случае были получены композитные пленки, содержащие в поли-п-ксилиленовом связующем области полидиацетиленовой фазы наряду с частицами неорганических полупроводников и металлов. В системах с Ag в поли-п-ксилиленовых матрицах различного типа исследовано формирование металлических частиц в зависимости от состава системы и структуры матрицы. Установлено, что в пленке, полученной при 77 К, содержатся малые кластеры, являющиеся промежуточной формой между атомом и металлом. Агрегация кластеров приводит к формированию наноразмерных кристаллов Ag, средний размер которых (~50Å) не зависит от содержания металла, а также от температуры кристаллизации кластеров. Разработана модель формирования кристаллов, которая хорошо согласуется с полученными экспериментальными данными.

*Федеральное государственное унитарное предприятие Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л. Я. Карпова*

## Ассоциированные растворы как самоорганизованные системы: кинетика, катализ, эффекты среды

Номер проекта: 99-03-32087  
Год представления отчета: 2002

Одним из следствий развиваемой в рамках проекта новой модели молекулярной реакции в ассоциированной за счет Н-связей среде является изменение наблюдаемого порядка по реагенту, ответственному за структурирование жидкости и выступающему одновременно в

качестве компонента смешанного растворителя. Новые экспериментальные обоснования модели получены при изучении влияния температуры как фактора, способствующего структурированию или деструктурированию раствора, на кинетику процессов нуклеофильного замещения с участием хлорангидридов карбоновых кислот — гидролиза и алкоголиза. Во всех случаях концентрационные зависимости наблюдаемой константы скорости подчиняются степенным законам с нецелочисленными коэффициентами, что является свидетельством фрактальной структуры Н-связанных кластеров, принимающих участие в реакции. Характер изменения наблюдаемых порядков реакций с температурой соответствует требованиям теории. С использованием метода молекулярной динамики проведено численное моделирование процесса агрегации частиц при взаимодействии жестких дисков, имеющих по три специфических центра связывания (модель образования разветвленной сетчатой структуры из Н-связанных молекул воды) с энергией порядка энергии Н-связи. Получены данные о критических концентрациях, при которых возникает микронеоднородность в системе, сведения о фрактальной размерности образующихся кластеров, радиусах корреляции и их зависимостях от концентрации частиц в системе.

*Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук*

## Биядерные гетероциклические системы с конструированной геометрией для супрамолекулярной химии. Дизайн, синтез, применение

Номер проекта: 99-03-33094  
Год представления отчета: 2002

С учетом результатов, полученных в течение первых двух лет работы по проекту, основное внимание было сосредоточено на расширении круга угловых бидентатных лигандов, способных образовывать супрамолекулярные полимерные ансамбли с ионами металлов. Главным направлением в дизайне лигандов этого типа было использование замещенных пиридиновых ядер, а также 1,2- и 1,3-дизамещенных бензольных спейсеров. Изучен ряд родственных угловых лигандов, содержащих 3-замещенный пиридиновый фрагмент. Впервые синтезированы лиганды с одним или двумя иминными спейсерами. Изучено комплексообразование ряда металлов с новыми лигандами, в том числе с *a,a'*-бис(4-пиридилметил)циклоалканами. Показана возможность получения полимерных комплексов одинакового состава с разной структурой при использовании разного соотношения реагентов.

*Государственное учебно-научное учреждение Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова*

## Металлоорганические и элементоорганические соединения в химии фуллеренов

Номер проекта: 99-03-32893  
Год представления отчета: 2002

Завершен цикл исследований по синтезу, установлению стерео- и региохимического строения, а также электрохимическому поведению гидридокарбонилфосфиновых родиевых и иридиевых моно- и биметаллокомплекс-

сов фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$ . Продолжены исследования по синтезу новых комплексов металлов, содержащих в координационной сфере металла одновременно фуллерен и другой полиэдрический лиганд — фосфинокарборан. В рамках этих исследований синтезированы и методом РСА выявлены структурные особенности, отвечающие за химическое поведение хелатных карборанилиридиевых комплексов с гапта-2- и сигма-координированными фуллереновыми фрагментами. Впервые получены комплексы  $C_{60}$  с титаном, осмием и трирутениевым кластером, а также платиновый димерный комплекс  $C_{60}$ . Осуществлен синтез первого металлоорганического оптически активного производного  $C_{70}$ . Исследована стабилизирующая способность объемных лигандов, содержащих ферроцинильную группу, на примере бензил(фенил)фосфиноферроцена (BnPhPFc) и 1,1'-бис(дифенилфосфино)ферроцена (dppf). Синтезированы и охарактеризованы соответствующие палладиевые комплексы фуллерена состава (гапта-2- $C_{60}$ )Pd(PBnPhFc)<sub>2</sub> и (гапта-2- $C_{60}$ )Pd(dppf). Начаты работы по изучению взаимодействия фуллеренов с металлокластерами различного вида, в рамках которых исследованы реакции фуллерена  $C_{60}$  с

триангулярным гетеробиметаллическим кластером  $(PPh_3)_2PtFe_2(CO)_8$  и карборанилтрирутениевым кластером  $(Me_3NCB_{10}H_{10})Ru_3(CO)_{10}$ . В рамках общей задачи получения металлофуллеренов, в которых углеродный полиэдр фуллерена связан с металлоорганическими фрагментами (ферроценил, цимантренил) посредством мостиков различной природы, изучено влияние электроноакцепторных заместителей при диазо- или азидной группе на циклоприсоединение к  $C_{60}$  и показано, что усиление электроноакцепторных свойств группировок, связанных с диазо- или азидной функциями, изменяет направление их взаимодействия с  $C_{60}$ . Изучено взаимодействие (методом ЭПР) бензильных и мезитильных радикалов (образующихся из толуола и мезитилена под действием димера Полишука) с фуллереном  $C_{60}$ . Изучено взаимодействие (методом ЭПР) радикала  $*C_{60}Ph_5$  с металлцентрированными радикалами:  $*FeCp(CO)_2$ ,  $*MoCp(CO)_3$ ,  $*WCp(CO)_3$  и с платиновым карбеноидом  $[Pt(PPh_3)_2]$ .

*Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН*

## НОВОСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

### Intel продолжает разработку 3D-транзисторов

Одна из основных проблем, которые приходится решать производителям полупроводников при разработке более совершенной продукции новых поколений — повышение быстродействия и минимизация энергопотребления. Это заставляет исследовательские коллективы компаний изыскивать все новые и новые решения, которые бы позволили, в первую очередь, усовершенствовать базовые элементы, лежащие в основе любой микросхемы, т. е. транзисторы.

Компания Intel начала говорить о перспективах применения трехзатворных транзисторов (Tri-Gate, или 3D-транзисторы (рис. 1)) еще в 2002 г., а к сегодняшнему дню разработки компании уже позволяют ей заявлять о первых тестовых результатах и возможных сроках практического внедрения этой технологии.

Применение подобной трехмерной структуры организации транзисторов позволяет улучшить их характе-

ристики по сравнению с планарными вариантами сразу в нескольких направлениях: снизить токи утечки, в том числе и в "выключенном" состоянии; увеличить рабочий ток либо уменьшить рабочее напряжение при той же силе тока; снизить время включения—выключения транзистора.

Экспериментальные экземпляры трехзатворных транзисторов, изготовленных по 65-нанометровому технологическому процессу, по заявлениям Intel, обеспечивают 45 %-ый прирост быстродействия и 50 %-ное снижение тока в "выключенном" состоянии. Компания предполагает, что появление новой технологии в массовых устройствах может начаться в 2009 г. вместе с освоением 32-нанометровых норм производства, что обеспечит 35 %-ное снижение энергопотребления чипов.

**Источник:** Intel: Intel's Tri-Gate Transistor To Enable Next Era In Energy-Efficient Performance (<http://www.intel.com/pressroom/archive/releases/20060612corp.htm>)

### Сверхпрочный гибридный наноматериал поможет создать искусственные протезы

Ученые из США смогли из двух природных материалов создать новый комбинированный наноматериал. Открытие сделали Дэвид Каплан и его коллеги из Массачусетского университета. Наноматериал, сочетающий гибкость паутины и жесткость кремнезема, найдет широкое применение в промышленности и медицине.

Гибридный нанокompозит отличается более высокой жесткостью по сравнению с другими полимерными мате-

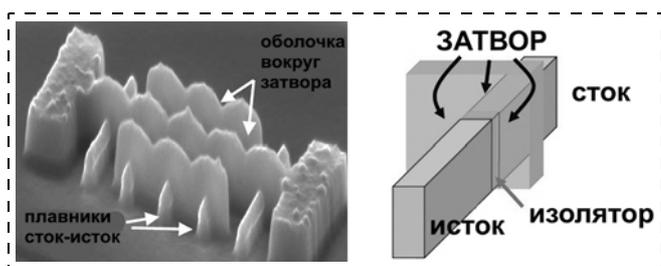


Рис. 1. Трехмерный трехзатворный транзистор

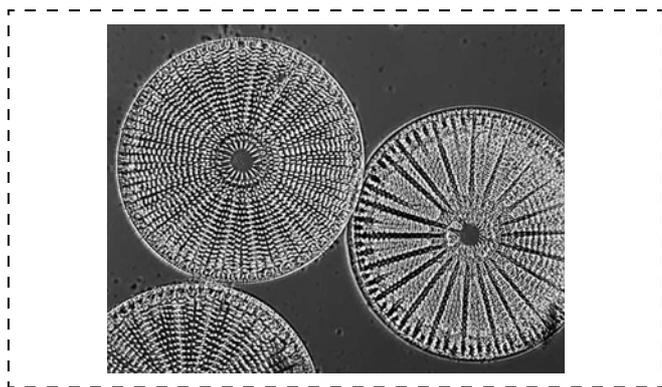


Рис. 2. Диатомей — одноклеточные создания с панцирем высокой прочности

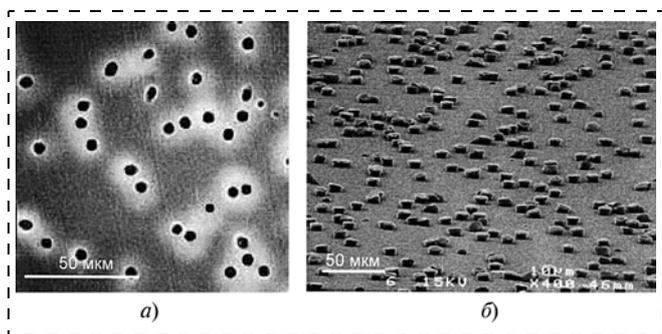


Рис. 3. СТМ изображение паучьего шелка до и после нанесения микрочастиц

риалами с использованием таких природных компонентов, как микрофибра и паутина.

Гидрат оксида кремния (или кремнезем) встречается в составе экзоскелетов одноклеточных простейших, например диатомей (рис. 2). Также он входит в состав скелета некоторых высших животных и даже растений. Шелк паука (рис. 3) — материал на протеиновой основе с высокой гибкостью и упругостью.

Одна из особенностей синтеза нового материала то, что он получается методом "самосборки". Этот метод производства широко распространен среди ученых-нанотехнологов при синтезе материалов с экзотическими свойствами.

Однако для получения гибрида ученым пришлось поработать над исходным природным материалом. Каплан и его коллеги с помощью генной инженерии синтезировали измененный шелк, формирующий не нити, а нанофибру и даже пластины. Далее, смешивая полученный "пластинчатый шелк" с биокремнеземом (водным раствором микрочастиц диатомовых водорослей), оба материала "собирались" в тонкие листы сверхпрочного и гибкого гибрида.

Как выяснилось при изучении нового наноматериала под сканирующим электронным микроскопом, прочность ему добавляют эллиптические частицы кремнезема, присоединяющиеся к протеиновым нанофибрам шелка. При этом размер частиц довольно велик по меркам наномира — от 0,5 до 2 мкм в диаметре. Но все же природные частицы больше — от 0,5 до 10 мкм.

В ходе исследований оказалось, что можно контролировать размер микрочастиц кремнезема, изменяя

прочность и гибкость гибридного композита. Используя это полезное свойство, Каплан и его коллеги надеются получить ряд наноматериалов с различными свойствами. В частности, это открытие может привести к созданию нового класса биологических протезов, например, искусственных костей, биологически совместимых с тканями человека.

Теперь Каплан и его коллеги заняты изучением морфологии нового материала для того, чтобы вычислить оптимальное соотношение пропорции микрочастицы-нанофибра, что важно для синтеза материалов с заданной жесткостью и гибкостью.

Источник: Nanotechweb.org: New look for nanocomposites (<http://www.nanotechweb.org/articles/news/5/6/6/1>)

## Самый быстрый транзистор в мире

Исследователями из Гарвардского университета создан самый лучший на сегодняшний день нанотранзистор на основе нанострун. Устройство состоит из германиево/кремниевого ядра и кремниевых нанострун (рис. 4, 5). Как говорят эксперты, это самый совершенный полевой транзистор, который когда-либо был создан.

"Мы доказали, что наш Ge/Si нанострунный FET (полевой транзистор) быстрее в 3—4 раза, чем современные кремниевые CMOS, — комментирует открытие Чарльз Либре. — Также наш нанотранзистор может поспорить в области быстродействия с обычными плоскими полевыми FET. Мы надеемся, что вскоре в микроэлектронной индустрии появится новый стандарт FET-устройств — нанострунный Ge/Si FET. Создание такого устройства стало возможным в основном благодаря проведенным ранее фундаментальным исследованиям в области нанoeлектроники".

Либре и его коллеги создали структуру "ядро—нити" в Ge/Si наноструктуре с надежными омическими контактами и высокой мобильностью носителей зарядов.

Как было установлено, время переключения нанотранзистора приближается к аналогичным показателям у транзистора, состоящего из нанотрубок. И, естественно, оно выше, чем у традиционных MOSFET-устройств.

Либре убежден в том, что нанотранзистор будет востребован производителями чипов для дальнейшего использования в скоростной логике нового поколения. Не секрет, что традиционная CMOS-технология уже не может обеспечить нужного быстродействия для ее использования в микропроцессорах будущего.

Также Либре уточнил, что нанотранзистор технологически совместим с логическими схемами на прозрачных и гибких основах — пластике, органических пленках и т. п.

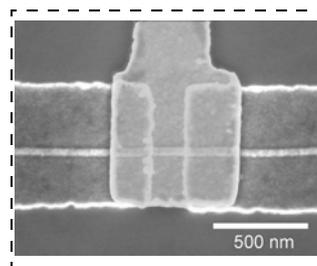


Рис. 4. Микрофотография транзистора

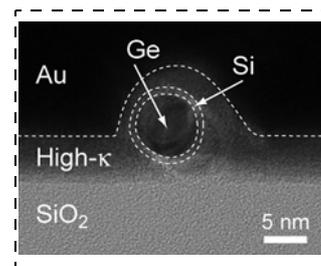


Рис. 5. Структура транзистора

Сейчас исследователи планируют уменьшить размер нанотранзистора для того, чтобы его можно было использовать в интегральных схемах. Либер и его команда разрабатывают технологию массового производства подобных устройств.

**Источник:** Nanotechweb.org: Nanowire transistors outperform MOSFETs (<http://www.nanotechweb.org/articles/news/5/5/14/1>)

## Дисплеи нового поколения на квантовых точках

Как известно, плоские и даже гибкие дисплеи — уже не новинка на мировом рынке электронной техники. Однако современные LCD- и OLED-дисплеи не могут обеспечить необходимые для комфортной работы яркости и контрастности в бюджетных моделях. А гибкими могут быть только OLED-дисплеи, стоимость которых довольно высокая для рядового потребителя.

В связи с этим различные компании ведут поиски новых продуктов, способных при относительно низкой стоимости предложить потребителю гибкий дисплей с высокой контрастностью и быстродействием. Так, недавно компания QD Vision (США) объявила о разработке и последующей продаже нового типа дисплеев — электронного устройства на квантовых точках (рис. 6, 7).

Квантовые точки — это специальные нанокристаллы, ведущие себя как один отдельный атом. Их свойства настолько уникальны, что квантовые точки используются в различных отраслях высоких технологий — от диагностики раковых заболеваний до построения нанoeлектронных логических схем.

Первый прототип-дисплей от QD Vision's имеет следующие параметры: монохромная полоска 32 × 64 пикселя. Несмотря на малые размеры прототипа Ко-Салливан, представитель компании, уверяет, что через несколько месяцев будет сконструирован прототип "квантового дисплея", не уступающий по разрешению современным HDTV. Помимо высокой яркости и контрастности (изображение на дисплее можно видеть даже при ярком солнечном свете) устройство будет потреблять меньше энергии, чем современные аналогичные LCD-телевизоры. Новый дисплей можно также изгибать практически в любом направлении.

Кроме того, дисплей на квантовых точках может покрывать гораздо больше цветов из видимой области спектра, чем любой OLED или LCD. Как говорит Салливан, число цветов, отображаемых QD-LED (от quan-

tum dot — квантовая точка) дисплеем, может быть на 30 % больше, чем в современных CRT-дисплеях.

Однако не все старое забыто — так, от OLED новый дисплей унаследовал заднюю планку, управляющую пикселями. Ко-Салливан назвал эти устройства "дисплеями нового поколения" из-за их характеристик.

Основа дисплея нового типа — квантовые точки разных размеров. Именно в зависимости от размера нанокристалла они светятся разным цветом. Так, например, квантовая точка диаметром 6 нм будет светиться красным цветом, а диаметром 2 нм — голубым. При этом цвета отличаются высокой чистотой спектра. В LCD и OLED субпиксели основных цветов обычно не характеризуются высокой чистотой цвета, поэтому их сложнее настроить.

Чистота основных субпикселей — это главное отличие дисплеев на квантовых точках. Именно это позволяет получать более насыщенные цвета при том же энергопотреблении светоизлучающей матрицы. Снижение энергопотребления достигается за счет того, что нерабочие пиксели не потребляют энергии, в то время как в LCD дисплеях задняя подсветка работает все время несмотря на то, сколько пикселей в настоящее время заблокированы. Для производства одного фотона в QD-LED тратится всего 50 электронов, что немного для светоизлучающего устройства.

Дисплеям на квантовых точках также не потребуется задней подсветки, без которой LCD-дисплей невозможно сконструировать. "Благодаря этому черный цвет у нас получается действительно черным, в то время как цветные пиксели формируют яркую и четкую картинку," — поясняет Салливан.

Исследование возможности построения дисплеев на квантовых точках началось еще в 1990-х годах. Однако технологии того времени не могли обеспечить производителей квантовыми точками с одинаковыми параметрами. Теперь же компания QD Vision разработала собственную технологию массового производства необходимого числа квантовых точек, поэтому может разработать и впоследствии вынести на мировой рынок новый тип дисплея. Пока компания ограничивается выпуском дисплеев для мобильных телефонов.

**Источник:** Technology Review: QD Vision's Seth Coe-Sullivan is using quantum dots to make vibrant, flexible screens ([http://www.technologyreview.com/read\\_article.aspx?id=16830&ch=nanotech](http://www.technologyreview.com/read_article.aspx?id=16830&ch=nanotech))

## Предложена модель нанохолодильника на броуновском движении

Физики-теоретики предложили наноустройство, которое позволит охлаждать микроскопические объекты, например молекулы. Правда, сами изобретатели признают, что для того чтобы построить спроектированное ими устройство, потребуется впечатляющее мастерство в молекулярной инженерии. Доктор Крис Ван ден Брок (Chris Van den Broeck) из университета Хассельта (Бельгия) и доктор Риоичи Каваи (Ryoichi Kawai) из университета Алабамы уверены, что их идея заставит задуматься специалистов по термодинамике.

Принцип работы предлагаемого наноустройства основан на броуновском движении. Миниатюрный холодильник использует крошечное колесо с лопастями, что-

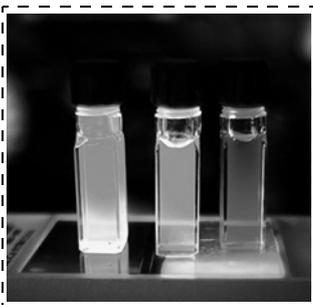


Рис. 6. Квантовые точки разного цвета

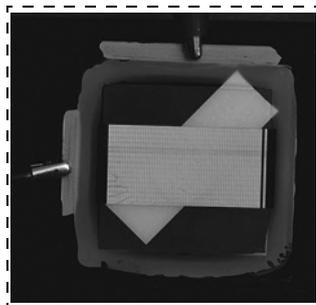


Рис. 7. Дисплей на квантовых точках "в живую"

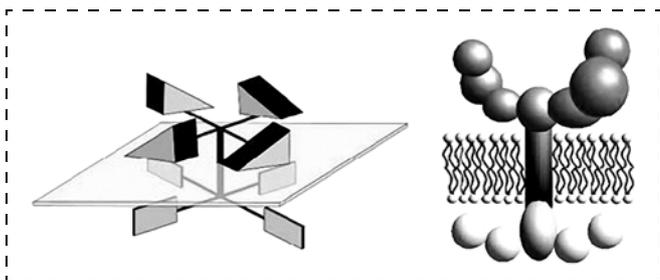


Рис. 8. Схема работы микрохолодильника на броуновском движении

бы ускорить молекулы в одном резервуаре, одновременно забирая энергию из другого. Идея очень близка к известному мысленному эксперименту физика Джеймса Клерка Максвелла: он предложил проект вечного двигателя, который состоял бы из двух сосудов, в одном из которых быстрые молекулы, а в другом — медленные. Поддерживать такое разделение молекул должен специальный "демон Максвелла", который бы пропускал в сосуд с быстрыми молекулами только быстрые молекулы и выпускал бы медленные.

Идея Ван ден Брока и Каваи существенно отличается от всех предлагавшихся ранее способов построения двигателей из двух сосудов с газами разной температуры. В основе конструкции таких устройств — вертикальная ось, соединяющая два колеса с лопастями (рис. 8): нижнее — с прямыми, верхнее — с лопастями клиновидной формы, колеса расположены в разных резервуарах, разделенных изолирующим барьером. Если нижний сосуд очень горячий, а верхний — холодный, то лопасти колеса в нижнем сосуде будут подвергаться большому числу ударов быстро движущихся молекул.

Когда колесо будет вращаться против часовой стрелки, верхнее колесо будет "врезаться" в молекулы своим тупым концом, что должно затормозить вращение. Но при вращении по часовой стрелке верхнее колесо будет "разрезать" вещество в сосуде своим острым концом, встречая меньшее сопротивление. В итоге, "чистым" направлением вращения колес станет направление по часовой стрелке.

Ученые предложили "перевернуть" эту логичную модель — в этом случае все начинается с равной температуры в обоих сосудах. Затем колеса начинают вращаться против часовой стрелки. Первый принцип термодинамики утверждает, что система будет противиться этому движению, что приведет к нагреванию нижнего сосуда и остыванию верхнего.

Хотя математически все выглядит верным, на самом деле непонятно, как себя должны вести молекулы, чтобы вещество в верхнем сосуде охладилось. "Если бы это было так легко понять, это давно бы придумали, — считает д-р Ван ден Брок. — Вы не можете это объяснить на пальцах — тут требуется статистический подход".

Коллеги авторов модели считают, что охлаждающий эффект продлится всего несколько мгновений. Тем не менее, как считают ученые, это новая идея и новый механизм, доселе не предлагавшийся. Создание работающего "холодильника" на этом принципе потребует решения многих проблем, однако эта задача не выходит за пределы возможного, полагает д-р Ван ден Брок. "Мне нравится подход теоретиков, — комментирует шведский

ученый Андерс Кастберг (Anders Kastberg) из университета Умеи (Umea University). — Им не надо беспокоиться о том, как все будет работать в реальности".

**Источник:** CNEWS: Предложена модель микрохолодильника на броуновском движении (<http://www.cnews.ru/>)

Составил Ю. Свидиненко

## electronica 2006

components systems applications

С 14 по 17 ноября 2006 г. —

Новая ярмарка, Мюнхен

Выставка **electronica** представляет интенсивно развивающиеся направления:

- Автоматизация
- Беспроводная связь
- Микро- и наномир
- Встроенные системы

### electronica Микро- и наномир

Форум пользователей **Мир MEMS**

- Новые емкие рынки для MEMS в сфере бытовой электроники
- MEMS в автомобильной промышленности
- Оправдает ли RF MEMS возлагаемые на них надежды?
- Кто может хорошо заработать на MEMS?

Рынок продукции микро- и наномира

- Микрокомпоненты и системы
- RF MEMS; оптические MEMS; биоMEMS
- Упаковка для MEMS и микросистем

Сенсорика, сенсорика на базе MEMS

Сервотехника / Приводные элементы

- Микромоторы
- Микропозиционирование
- Микроприводы

# CONTENTS

**Dedkov G. V.** *Physical Aspects of Interactions between the Tip of Scanning Probe Microscope and the Sample Surface. Part 2* . . . 2

Physical phenomena and effects being characteristic for the contact and noncontact operation regimes of the scanning probe microscopy, are discussed on an elementary level. A theoretical description and numerical estimations of energies, forces and other physical characteristics of contacts are given. Some applications and perspectives for future development of the scanning probe technique with regards to physics and nanotechnology are discussed.

**Grinkin E. A., Zhukov A. A., Shapoval S. Yu., Babayevsky P. G.** *Adhesion Interaction of Solid Surfaces and Polymer Dry Adhesives Development. Practical Aspects* . . . . . 13

Analysis of fabrication methods, examples of surface polymer structures providing dry adhesion effect and estimation of the structures adhesion to different types of substrates are presented.

**Shaldin Yu. V., Rabadanov M. Kh.** *Mezostucture of Piroelectrics* . . . . . 20

Acentric mesofragments of piroelectric crystals are responsible for the loss of an average inversion symmetry. Transformations of piroelectric structures during phase transition are discussed in details.

**Mamedov A. C.** *Estimation of Transient Response of Electron Circuits on Basis of Operational Amplifiers for High Signal Conditions* . . . . . 23

Metod of energetical linearization have been proposed for approximate estimation of transient response for electron circuits on basis of operational amplifiers for high signal condition. Algorithm of drawing of transient response have been demonstrated for the transfer cascade of the optoelectronic device with differential optocouple.

**Abramov I. I.** *Problems and Principles of Physics and Simulation of Micro- and Nanoelectronics Devices. II. The Models of Semiclassical Approach* . . . . . 26

The bases of various microelectronic devices simulation in the framework of semiclassical approach are considered.

**Shautsukov A. G., Kuznetsov G. D.** *The Modeling of Process of Simultaneous Alloying by Recoil Atoms and Bombarding Ions at Bombarding Structures Films-Substrates* . . . . . 36

On the base of the represented physical model of ionic implantation through films and alloying by recoil atoms was developed the packet of mathematical programs of modeling of indicated processes.

Carried out numerical experiment and shown that ionic bombardment of film — substrate structures allows to from thin high — alloy layers, by recoil atoms, the thickness by the was of several hundred parts of micron, to form such alloyed by bombarded ionic layers of different thickness and by the level of alloying.

To realize the simultaneous alloying of substrate by recoil atoms and by bombarded ions.

**Gradetsky V. G., Knyazkov M. M., Semenov E. A.** *Dynamic of Miniature Robots* . . . . . 39

Dynamic processes are under consideration in multilink miniature robots consisting of sequential chains of functional micro modules. The dynamical integration is analyzed between separate modules connected between by means of rigid or elastic links. The analytic solution is suggested for a problem of miniature multilink robot motion inside of the small diameter tubes.

**Shtyrlin A. F.** *Colloidal Electro-Rocket Thrusters for Space Micro-Vehicles* . . . . . 43

It is examined the possibility of colloidal electro-rocket thrusters usage for soft stabilization of parameters of motion for space micro-vehicles with mass from 1 up to 100 kg, power capacity 0.4...2 W/kg and compensating micro-acceleration  $10^{-5}$ ... $10^{-4}$  m/s<sup>2</sup>. It is represented a tendency of cost growth for single units of the satellites under jumping from usual sizes of the spacecrafts to micro-vehicles.

## For foreign subscribers:

*Journal of "NANO and MICROSYSTEMS TECHNIQUES" (Nano- i mikrosistemnaa tehnika, ISSN 1813-8586)*  
Joint-stock company MK-Periodica. E-mail: [info@periodicals.ru](mailto:info@periodicals.ru) Tel.: +7(495) 684-5008. Fax: +7(495) 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: [nmst@zknet.ru](mailto:nmst@zknet.ru); <http://www.microsystems.ru>**

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромынский пер., 4/1. Телефон редакции журнала (495) 269-5510. E-mail: [nmst@zknet.ru](mailto:nmst@zknet.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 Т. Л. Демидова

Сдано в набор 29.06.2006. Подписано в печать 04.08.2006. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.  
Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,0. Заказ 1194. Цена договорная

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