

# НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 3 ✧ 2007

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.  
Мокеров В. Г.  
Никитов С. А.  
Сигов А. С.  
Чаплыгин Ю. А.  
Шевченко В. Я.

## Редакционная коллегия:

Абрамов И. И.  
Андриевский Р. А.  
Антонов Б. И.  
Арсентьева И. С.  
Астахов М. В.  
Быков В. А.  
Волчихин В. 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.  
Колобов Ю. Р.  
Кузин А. Ю.  
Мокров Е. А.  
Нарайкин О. С.  
Норенков И. П.  
Панич А. Е.  
Панфилов Ю. В.  
Петросянц К. О.  
Петрунин В. Ф.  
Путилов А. В.  
Пятышев Е. Н.  
Сауров А. Н.  
Серебряников С. В.  
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

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ НМСТ

Амеличев В. В., Данилова Н. Л., Панков В. В., Тарасов В. А. Конструктивно-технологический базис многовариантного производства интегральных полупроводниковых тензопреобразователей. . . . . 2

Золотов Ю. Н., Тимошенко С. П., Шелепин Н. А. Применение комплексных методов проектирования в процессе разработки интегральных преобразователей механических величин. . . . . 4

Амеличев В. В., Галушков А. И., Резнев А. А., Сауров А. Н., Суханов В. С. Визуализация привнесенных неоднородностей магнитного поля Земли. . . . . 11

### МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НМСТ

Амеличев В. В., Павлов А. Ю., Погалов А. И., Чаплыгин Ю. А. Конструктивно-технологическая оптимизация интегральных преобразователей физических величин. . . . . 14

Дягилев В. В., Михайлов Ю. А., Игнатьева Е. В., Шешукова С. Ю. Некоторые результаты освоения и совершенствования производства кристаллов кремниевых интегральных тензопреобразователей. . . . . 17

Амеличев В. В., Галушков А. И., Дягилев В. В., Касаткин С. И., Муравьев А. М., Лопатин В. В., Резнев А. А., Сауров А. Н., Суханов В. С. Микроэлектронная магниторезистивная технология. . . . . 22

### ЭЛЕМЕНТЫ НМСТ

Амеличев В. В., Вернер В. Д., Ильков А. В. МЭМС-микрофон. Выбор материала, конструкций и технологии. II. Влияние полости под диафрагмой на характеристики микрофона. . . . . 27

Коноплев Б. Г., Приступчик Н. К., Рындин Е. А. Автоэмиссионный акселератор с тремя осями чувствительности. . . . . 36

### НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Рощупкин Д. В., Иржак Д. В. Электронно-микроскопические и рентгеновские методы исследования акустических волновых полей в пьезоэлектрических кристаллах. . . . . 40

Глухова О. Е. Функциональные наноустройства на основе наночастицы  $C_{60}@C_{450}$ . . . . . 52

Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры. . . . . 57

Крутов В. В., Михалевич В. Г., Шука А. А. Создание нанодоменных периодических структур в сегнетоэлектриках на интерферирующих оптических волнах. . . . . 71

НОВОСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ. . . . . 74

ИНФОРМАЦИЯ. . . . . 78

Contents. . . . . 80

Журнал включен в перечень научных и научно-технических изданий ВАК России
Аннотации статей журнала и требования к оформлению статей доступны на сайте журнала: <a href="http://www.microsystems.ru">http://www.microsystems.ru</a> . E-mail: <a href="mailto:nmst@zknet.ru">nmst@zknet.ru</a>
<b>ПОДПИСКА:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• по каталогу Роспечати (индекс 79493);</li><li>• по каталогу "Пресса России" (индекс 27849)</li><li>• в редакции журнала (тел./факс: 269-55-10)</li></ul>

# МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ НМСТ

УДК 681.586

**В. В. Амеличев**, канд. техн. наук, **Н. Л. Данилова**,  
**В. В. Панков**, **В. А. Тарасов**,  
НПК "Технологический центр" МИЭТ

## КОНСТРУКТИВНО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ БАЗИС МНОГОВАРИАНТНОГО ПРОИЗВОДСТВА ИНТЕГРАЛЬНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТЕНЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ

*Описан конструктивно-технологический базис для многовариантного производства интегральных полупроводниковых тензопреобразователей физических величин (давления, ускорения, силы), разработанный и практически применяемый в течение многих лет с использованием производственного технологического оборудования, предназначенного для производства КМОП-схем.*

Продвижение кремниевой технологии для производства интегральных преобразователей физических величин невозможно без востребованности последних на рынке микроэлектронных изделий. К тому же потребительские запросы на различные продукты в основном стремятся к оптимальному соотношению цена/качество. В условиях бурно развивающегося рынка продукты микросистемной техники постоянно не только совершенствуются, но и расширяются в своем многообразии, заполняя все возможные ниши потребительского спроса. Для снижения издержек на разработку и производство новых вариантов изделия каждый производитель опирается на возможности собственного производства (персонал, конструкции, технологии, оборудование и т. д.). Наличие высококвалифицированного персонала на фирме является доминирующим источником успеха в бизнесе, поскольку производство МЭМС-изделий возможно и без собственного производственного оборудования. Примером тому может служить компания *Akustica*, образованная в рамках исследовательского проекта Университета Карнеги—Меллона (Питсбург, штат Пенсильвания). *Akustica* стала одной из виртуальных компаний, не нуждающихся в собственном производстве. Дело в том, что процесс изготовления акустических микроэлектромеханических систем полностью совместим со стандартным промышленным производством комплементарных

металло-оксидных полупроводниковых схем (КМОП-схем). Мембрана (механический элемент микросхемы) изготавливается одновременно с электронными схемами обработки сигнала. Виртуальный статус позволяет компании *Akustica* располагать небольшим штатом, занимающимся разработкой конструкций, и использовать производственные мощности предприятий в любой части света [1].

На примере процесса изготовления акустических МЭМС компании *Akustica* можно сделать вывод о том, что в качестве конструктивно-технологического базиса была выбрана КМОП-технология изготовления интегральных схем (ИС), а конструктивно-технологическим модулем является совокупность процессов производства КМОП-схем в составе пластин, формирования мембран, контроля функционирования, разделения и упаковки кристаллов. Но в целом конструктивно-технологический базис не всегда совпадает со стандартным техпроцессом изготовления КМОП или биполярных схем. В ряде случаев он разрабатывается заново на основе техпроцессов, применяемых в производстве тех или иных микросхем. Так, для производства ряда интегральных пьезорезистивных преобразователей, производимых НПК "Технологический центр" МИЭТ, был разработан специальный конструктивно-технологический базис для многовариантного производства интегральных полупроводниковых преобразователей физических величин (давления, ускорения, силы).

Особенностью разработанного конструктивно-технологического базиса является максимальное использование производственного технологического оборудования, предназначенного для производства КМОП-схем, в целях формирования тензорезисторов с оптимальными характеристиками для интегральных преобразователей физических величин в широком температурном диапазоне. Известно, что в равномерно-легированных тензорезисторах температурный коэффициент сопротивления (ТКС) определяется объемной концентрацией примеси, а в диффузионных — поверхностной концентрацией. Зависимость ТКС диффузионных резисторов *p*-типа от поверхностной концентрации бора имеет минимум при  $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  [2]. Это означает, что для снижения ТКС тензорезистора и влияния на него технологического разброса поверхностную концентрацию необходимо выбирать вблизи указанного значения. Первым конструктивно-технологическим приемом термостабилизации характеристик интегральных тензопреобразователей является правильный выбор степени легирования чувствительных элементов. Как правило,

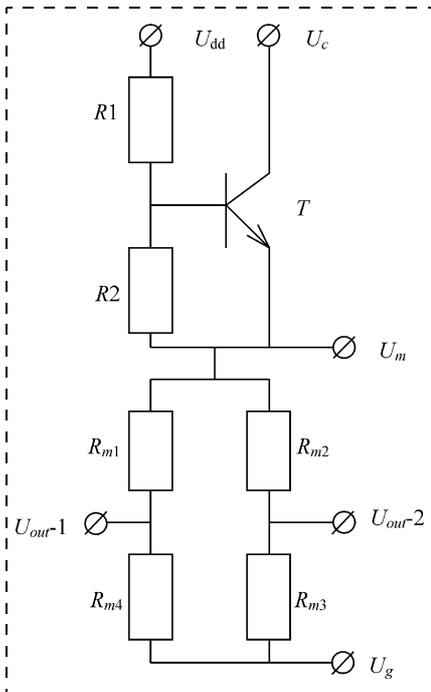


Рис. 1. Электрическая схема интегрального тензопреобразователя

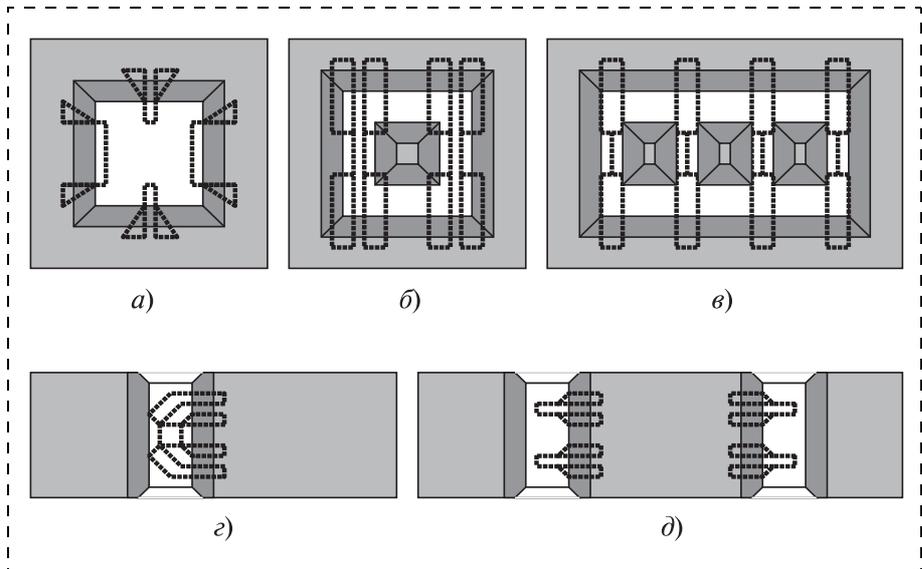


Рис. 2. Эскизы конструкций чувствительных элементов интегральных тензопреобразователей (вид с обратной стороны, пунктиром обозначено положение тензорезисторов):

*a* — плоская мембрана; *б* — мембрана с жестким центром; *в* — мембрана с тремя жесткими центрами; *г* — балка с одним концентратором механических напряжений; *д* — балка с двумя концентраторами механических напряжений

такой выбор определяется в результате компромисса между желаемыми чувствительностью и термостабильностью [3].

Конструктивная часть в разработанном базисе представлена мостовой схемой включения четырех тензорезисторов и схемой термокомпенсации изменения чувствительности, реализованной на основе биполярного транзистора (*T*) и двух диффузионных резисторов (*R1*, *R2*). На рис. 1 показана электрическая схема, применяемая во всех конструкциях интегральных тензопреобразователей физических величин, выпускаемых "Технологическим центром". В качестве ряда номиналов сопротивления тензорезистивного моста (*R<sub>m</sub>*) были выбраны значения 2,0—2,5 кОм, 4,0—4,5 кОм и 9,5—10,5 кОм. Для каждого номинала *R<sub>m</sub>* было рассчитано и экспериментально оптимизировано соотношение сопротивлений резисторов *R1/R2*.

Конструкции изготавливаемых вариантов интегральных тензопреобразователей различаются как размерами кристаллов, так и геометрической формой чувствительных элементов (мембраны, концентратора механических напряжений). На рис. 2 показаны эскизы чувствительных элементов, применяемых в производстве интегральных тензопреобразователей.

Структуру технологической части разработанного базиса можно представить в виде блок-схемы, показанной на рис. 3, где отражены основные этапы изготовления интегральных тензопреобразователей.

Создана уникальная технология, позволяющая путем воздействия на материал однотипными операциями создать различные конструкции интегральных преобразователей физических величин. Многолетним опытом производства интегральных

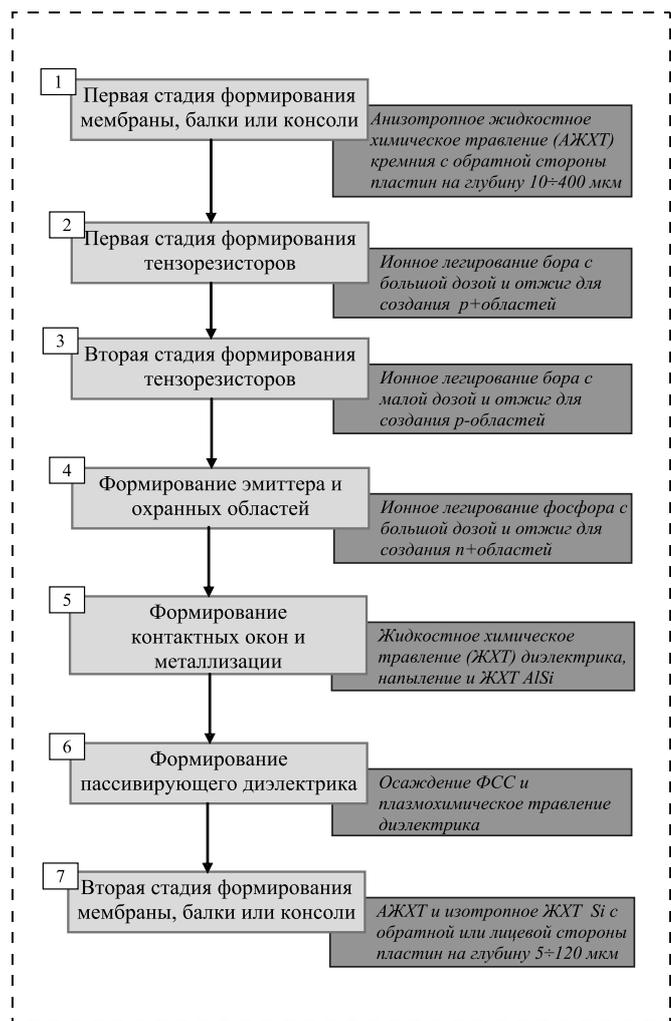


Рис. 3. Блок-схема технологической реализации разработанного базиса интегральных тензопреобразователей физических величин

тензопреобразователей доказана возможность существования данной технологии параллельно другим, в том числе и КМОП-технологии.

На основе разработанного конструктивно-технологического базиса производится несколько вариантов интегрального преобразователя давления (ИПД-1, ИПД-2, ИПД-4, ИПД-5, ИПД-9, ИПД-10), тензопреобразователи кремниевые балочного типа (ТКБ-5, ТКБ-6), а также их модификаций (ИПД-2.2, ИПД-4М, ИПД-5.3, ТКБ-5.2, ТКБ-6М). Серийные поставки кристаллов данных тензопреобразователей осуществляются на такие предприятия, как "Автоэлектроника" (г. Калуга), Арзамасский приборостроительный завод (г. Арзамас), Раменский приборостроительный завод (г. Раменское), "Шанс" (г. Москва), "Орлэкс" (г. Орел) и др.

Развитие модульности в микросистемной технике становится все актуальнее, поскольку многообразие различных процессов микрообработки при производстве микросистем вызвано трансфертом технологий из различных областей, таких как точная механика, интегральные схемы, оптика, химия и т. д. В большинстве случаев они не могут быть просто адаптированы к микросистемной технике по экономическим или техническим причинам и должны быть специализированы под производство микросистем [4]. Но усилия по их адаптации к микросистемам дают возможность создания новых продуктов и более качественных, выведенных на более высокий уровень по техническим характеристикам [5]. При создании тензомодуля на базе ИПД или ТКБ необходимо решение задач по упаковке в корпус и сопряжению с электронными схемами. Возможности тензомодуля станут гораздо шире интегральных тензопреобразователей, а их поведение будет более стабильно в условиях вредных воздействующих факторов (изменение температуры, влажности и т. п.). Построение тензомодуля может быть выполнено в кооперации с другими предприятиями, обладающими соответствующими собственными конструктивно-технологическими базисами и заинтересованными в создании нового продукта. Создание "конструктивно-технологического модуля" как метода создания продукта микросистемной техники является одной из актуальных задач настоящего времени.

#### Список литературы

1. <http://www.sciam.ru/2004/5/innovation.shtml>.
2. Tufte O. N., Stelzer E. L. Piezoresistive properties of silicon diffused layers // J. of Appl. Phys. 1963. V. 34. N 9. P. 313–318.
3. Ваганов В. И. Интегральные преобразователи. М.: Энергоатомиздат, 1983. 81 с.
4. Вернер В. Д., Пурихванидзе И. А. Технологическая модульность в микросистемной технике // Нано- и микросистемная техника. От исследований к разработкам. Сб. статей / Под ред. П. П. Мальцева. М.: Техносфера, 2005. 501 с.
5. Амеличев В. В., Вернер В. Д., Ильков А. В., Сауров А. Н. Совместимость технологии микросистемной техники с технологией микроэлектроники // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 11. С. 10–14.

УДК 681.586

**Ю. Н. Золотов**, д-р техн. наук, проф.,  
Секция прикладных проблем  
при Президиуме РАН,  
**С. П. Тимошенко**, д-р техн. наук,  
МИЭТ,  
**Н. А. Шелепин**, д-р техн. наук,  
ОАО "НИИМЭ и Микрон"

## ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ МЕТОДОВ ПРОЕКТИРОВАНИЯ В ПРОЦЕССЕ РАЗРАБОТКИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ МЕХАНИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

*Рассмотрен практический опыт применения различных методов моделирования при проектировании различных преобразователей механических величин, изготавливаемых на основе технологий микросистемной техники. Показано, что наряду с применением традиционных теоретических методов, основанных на физических законах и соответствующем программном обеспечении, хорошие результаты при модификации преобразователей обеспечивает так называемый "эмпирический" метод, заключающийся в эффективном использовании имеющихся экспериментальных характеристик и их интерполяции для расчета модифицированных конструкций. Представлены результаты проектирования и разработки серии интегральных преобразователей давления, угловой скорости и акселерометров. Показано, что для эффективного процесса проектирования двух последних типов преобразователей необходимо использование смешанных систем моделирования, обеспечивающих одновременный динамический анализ функционирования микромеханических элементов и электронной схемы МЭМС. Коротко рассмотрены возможности программного пакета "Coventor Ware" и разработанного метода создания SPICE-моделей микромеханических элементов для решения данных задач.*

При создании любых микроэлектромеханических систем (МЭМС) разработчики вынуждены решать проблемы моделирования их характеристик, которые условно можно разделить на четыре основные группы:

- моделирование механических элементов (статических и динамических);
- моделирование физических явлений, обеспечивающее расчет электрических характеристик на основе полученных результатов моделирования "механики";
- моделирование электрических цепей системы на основе полученных значений электрических сигналов из результатов моделирования физических явлений;
- комплексное (смешанное) моделирование механических, физических и электрических элементов МЭМС, обеспечивающее получение

сквозных характеристик "воздействующая механическая величина—электрический сигнал" для преобразователей физических величин или "воздействующий электрический сигнал—механическая величина" для актюаторов (микроприводов).

В идеале разработчикам хочется иметь универсальную систему проектирования и анализа, обеспечивающую возможность реализации всех четырех указанных компонентов. Однако, во-первых, на практике универсальные системы не всегда доступны по причине их высокой стоимости, а во-вторых, любая универсальность всегда имеет свои недостатки и сложность в освоении и использовании. При этом не следует забывать, что перечисленные выше разделы моделирования МЭМС подразумевают выполнение проектных работ для совершенно новых конструкций. В значительной части случаев приходится иметь дело с модификацией уже разработанных изделий для получения новых потребительских характеристик. В этом случае объемы моделирования могут быть значительно сокращены и сведены к грамотному использованию экспериментальных характеристик изделия, полученных на предыдущих этапах разработки. Назовем условно данный способ моделирования эмпирическим, а предыдущие — теоретическими. В настоящей работе авторами представлены практические результаты применения всех способов моделирования, использованных при разработке различных интегральных преобразователей механических величин: давления, микроперемещения, ускорения и угловой скорости.

### Разработка интегральных преобразователей давления

Этапы разработки и освоения производства интегральных преобразователей давления (ИПД) в ГУ НПК "Технологический центр" МИЭТ достаточно подробно описаны в отечественной научно-технической литературе [1—4]. Рассмотрим особенности и результаты применения различных методов моделирования для получения требуемых характеристик. Первыми из семейства разработанных преобразователей являются кристаллы ИПД-1 и ИПД-2 с одинаковыми параметрами плоских мембран и тензорезистивной схемы. Кристаллы различаются размерами одной стороны и расположением контактных площадок. Для каждого спроектированы два варианта тензорезистивной мостовой схемы для размеров мембран  $2 \times 2$  мм и  $1 \times 1$  мм.

Основными параметрами для ИПД являются чувствительность и нелинейность передаточной характеристики. Значения и воспроизводимость этих параметров определяются геометрическими размерами упругого элемента, топологией тензорезисторов и точностью их расположения над мембраной.

Сквозное моделирование передаточной характеристики такого преобразователя представляет собой сложнейшую задачу, включающую трехмер-

ное моделирование механических напряжений в плоской мембране (обязательно трехмерное, так как размеры тензорезисторов не являются малыми по сравнению с размерами мембран) и двумерное моделирование тензорезистивного эффекта по топологии резисторов, которое даже на сегодняшний день проблематично для имеющегося программного обеспечения (ПО). Однако к началу проектных работ разработчики уже имели некоторые экспериментальные данные, на основании которых были спланированы экспериментальные работы и получены передаточные характеристики преобразователей различного конструктивного исполнения. На основании этих данных была выбрана лучшая по характеристикам топология тензорезисторов и установлено, что при выбранной конструкции ИПД и выходном сигнале около 40 мВ/В (при номинальном давлении) нелинейность передаточной характеристики составляет 0,3 %, что является весьма приемлемым значением для прецизионных датчиков класса 1,0—0,5 %. На основе этих же экспериментальных данных были определены диапазоны толщин мембран, обеспечивающие значение выходного сигнала 30—45 мВ/В при нелинейности не более 0,3 %. Полученные результаты, представленные на рис. 1, вошли в состав технологической и конструкторской документации на изготовление преобразователей давления.

Представленный пример является типичным представителем эмпирического типа проектирования, который основан исключительно на экспериментальных данных и обеспечил получение требуемого результата при минимальных затратах на приобретение ПО и компьютерное моделирование.

Следующими характеристиками, которые были улучшены путем изменения конструктивно-технологических параметров на основании экспериментальных данных, были температурный дрейф и температурный гистерезис нулевого сигнала (т. е. значения выходного сигнала без воздействия давления). Температурный дрейф нулевого сигнала мостовой схемы для кристаллов, не соединенных с основанием, определяется двумя факторами: не-

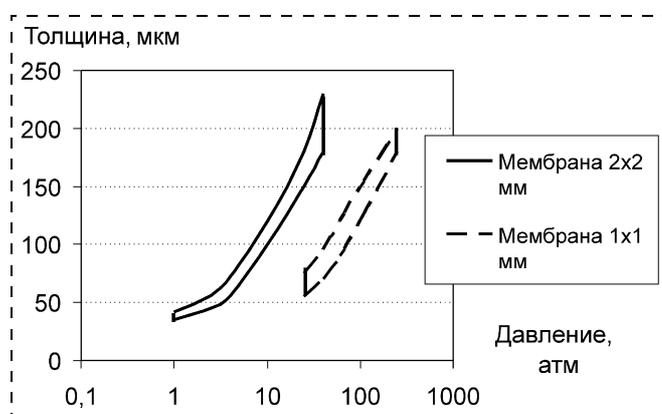


Рис. 1. Соответствие значений номинальных давлений ( $P_{ном}$ ) и диапазонов толщин мембран, обеспечивающих номинальный выходной сигнал 30—45 мВ/В

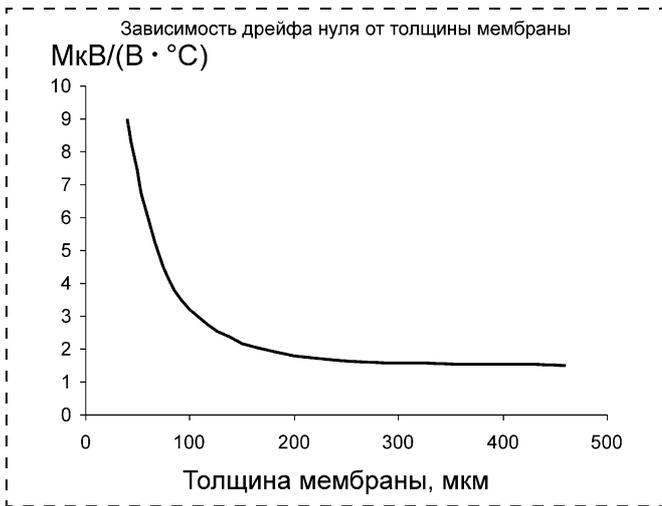


Рис. 2. Зависимость ТКН от толщины мембраны

идентичностью температурных свойств резисторов и несимметричными механическими напряжениями в мембране под воздействием слоев оксида кремния и алюминия на ее поверхности. Последнее подтверждается уменьшением значений температурного коэффициента нуля (ТКН) с увеличением толщины мембраны (рис. 2). В целях минимизации данных погрешностей были проведены экспериментальные исследования влияния на них алюминиевой металлизации, расположенной на мембране. Для этого были дополнительно спроектированы и изготовлены образцы кристаллов ИПД-2 с толщиной мембраны 40 мкм и проведены исследования параметров трех технологических вариантов кристаллов с одинаковыми размерами мембран [5]:

- 1-й вариант — тензорезисторы соединены в схему алюминиевой металлизацией толщиной 1,0 мкм;
- 2-й вариант — то же, но толщина алюминия на мембране 0,3 мкм;
- 3-й вариант — в кристаллах сформированы дополнительные  $p^+$ -области, перекрывающие контактные области тензорезисторов и выходящие за пределы мембраны, где сформированы контактные окна для алюминиевой разводки мостовой схемы. Результаты исследований представлены в таблице.

Влияние конструкции ИПД на величину дрейфа и гистерезис нулевого сигнала

Конструкция преобразователя	Дрейф, мкВ/(В · °С)	Температурный гистерезис, мВ
Преобразователь без мембраны	1—2	0,01—0,02
Преобразователь с алюминиевой разводкой тензорезисторов над мембраной толщиной 1,0 мкм	8—10	0,6—1,0
Преобразователь с алюминиевой разводкой тензорезисторов над мембраной толщиной 0,3 мкм	5—6	0,4—0,6
Преобразователь с дополнительными $p^+$ -областями	2—3	0,02—0,05

На основании этих данных был установлен и приведен к минимуму источник дополнительной температурной погрешности нулевого сигнала кристаллов ИПД как с точки зрения значения ТКН, так и с точки зрения его гистерезиса, который, кстати, является неустранимой погрешностью преобразователей.

Таким образом, были разработаны кристаллы, обеспечивающие получение преобразователей с хорошими метрологическими характеристиками для диапазонов давления от 0,1 до 30 МПа. Однако попытка расширить данный диапазон в сторону меньших давлений на преобразователях с плоскими мембранами путем уменьшения их толщины привела к довольно резкому ухудшению метрологических характеристик в основном за счет температурного дрейфа нуля. Для решения данной проблемы разработаны новые кристаллы, мембраны которых имеют один или более жестких центров. Кристалл ИПД-4 [6] (рис. 3) имеет размер  $6 \times 6$  мм

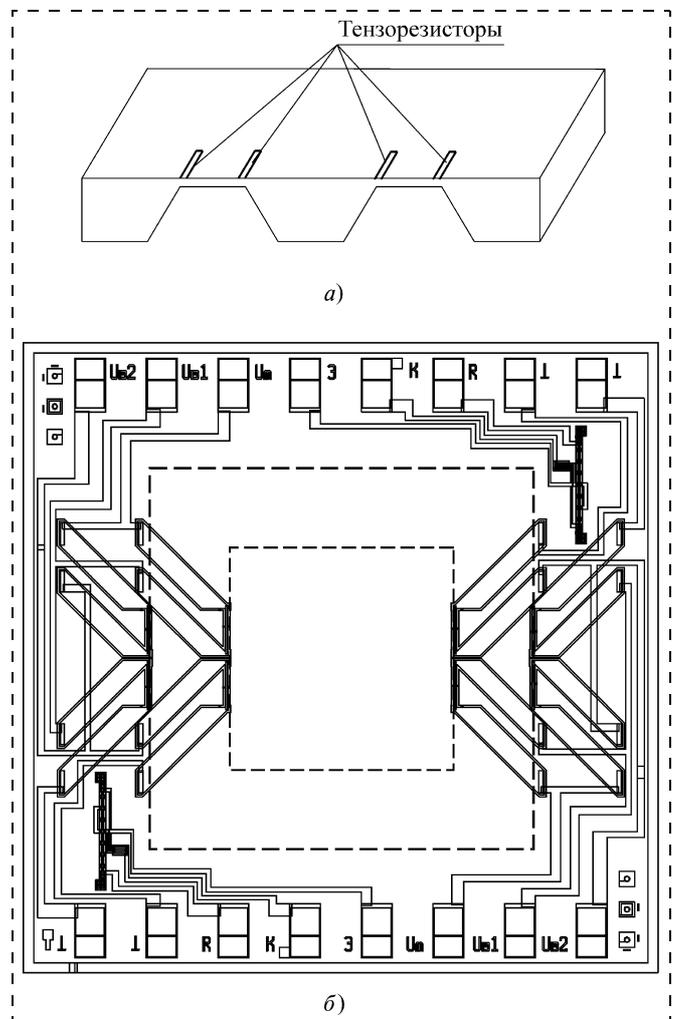


Рис. 3. Кристалл ИПД-4:

а — принципиальная конструкция кристалла (схема расположения тензорезисторов над мембраной с "жестким центром"); б — топология кристалла. На кристалле (слева и справа) расположены две схемы температурной компенсации чувствительности и две тензочувствительные мостовые схемы. Штриховой линией показаны границы мембраны с "жестким центром"

и мембрану  $4 \times 4$  мм с "жестким центром". Специфика данной конструкции заключается в том, что деформация мембраны в области расположения тензорезисторов является не трехмерной, а двумерной, что существенно упрощает расчет деформаций и механических напряжений при воздействии давления. Выполнение данного моделирования с помощью общедоступной программы "Mechanical Desktop Power Pack" позволило практически без экспериментальных итераций определить оптимальное место расположения тензорезисторов на кристалле. Данная конструкция обеспечила примерно трехкратное повышение чувствительности в области малых давлений по сравнению с плоской мембраной при равных толщинах мембран. Кроме того, конструкция с "жестким центром" позволяет добиться значительно лучшей симметрии топологии тензорезисторов (см. рис. 3) по сравнению с плоской мембраной. Эти факторы обеспечили снижение погрешности ТКН при сохранении высокой чувствительности и линейности передаточной характеристики и, соответственно, изготовление преобразователей класса  $0,5-1\%$  на диапазоны давлений  $10-60$  кПа. Совершенствование технологии в процессе производства позволило осуществить разработку кристалла ИПД-9, который является аналогом ИПД-4, но имеет размеры  $4 \times 4$  мм, что обеспечивает значительно более высокий процент выхода годных при изготовлении пластин. Соответствие между номинальным давлением и толщиной мембран установлено на основании интерполяции экспериментальных характеристик. С использованием этих кристаллов впервые осуществлена разработка интегральных микросхем — преобразователей давления серий 1191 и 1192 [7]. Таким образом, при разработке этих преобразователей с высокими точностными характеристиками использовалась комбинация теоретического и эмпирического моделирования.

### Разработка микромеханических акселерометров и гироскопов

Одними из наиболее сложных и широко используемых микромеханических устройств, интенсивно развиваемых и разрабатываемых в настоящее время, являются микромеханические датчики ускорения — микроакселерометры и микромеханические датчики угловой скорости [8]. Проектирование подобных сложных микромеханических систем включает, как правило, различные методы моделирования и аналитического расчета и опирается на возможности используемой технологии.

На рис. 4 представлены графические модели чувствительного элемента микромеханического преобразователя угловой скорости карданного типа для проведения расчетов на основе конечно-элементного анализа. Подобные модели создаются и затем анализируются с использованием пакетов прикладных программ Auto Cad, SolidWorks, Ansys. В результате проведенного анализа были получены

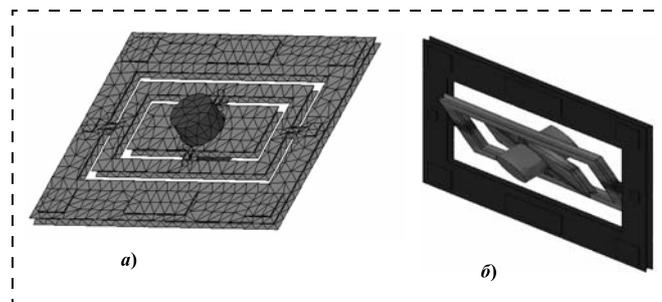


Рис. 4. Графическая модель чувствительного элемента датчика угловой скорости для проведения анализа:

*a* — разбивка конструкции на конечные элементы; *б* — анализ отклонения

собственные частоты различных модификаций данной конструкции чувствительных микромеханических элементов и соответствующие им формы (моды) колебаний. Анализ амплитудно-частотных (АЧХ) и фазочастотных (ФЧХ) характеристик позволил оптимизировать колебательные режимы микромеханической системы и провести необходимую корректировку конструкции. Определение значений механических напряжений, возникающих в конструкции, выявило наиболее напряженные узлы и позволило рассчитать предельные нагрузочные характеристики по различным направлениям воздействия. Следует заметить, что при моделировании были учтены экспериментальные данные зависимости модуля Юнга от кристаллографического направления, полученные из измерений характеристик изготовленных тестовых конструкций. Конструкция чувствительного элемента микромеханического вибрационного преобразователя угловой скорости карданного типа, разработанная на основе проведенного анализа и технологических возможностей, приведена на рис. 5. Следует заметить, что основой для конструирования преобразователя в данном случае являются именно технологические ограничения, обусловленные использованием жидкостного анизотропного травления кремния и двухсторонней фотолитографии при выполнении прецизионной микрообработки пластин.

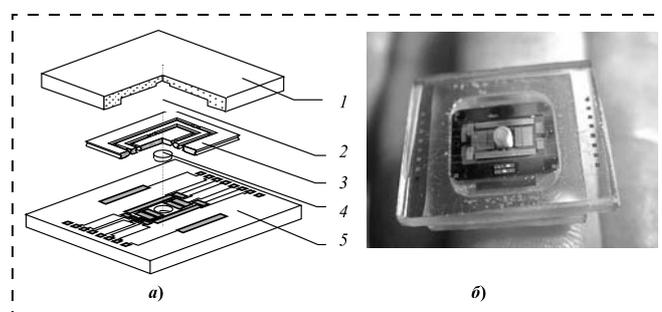


Рис. 5. Чувствительный микромеханический элемент вибрационного преобразователя угловой скорости карданного типа:

*a* — схема прибора; *б* — фотография ЧЭ корпусного исполнения; 1 — крышка; 2, 4 — инерционные массы; 3 — микромеханическая плата; 5 — электронная плата

В целях оптимизации конструкции проведен анализ динамических характеристик поведения чувствительного элемента. Равенства частот колебаний внутренней и внешней рамок добивались выравниванием отношений жесткости торсионов к соответствующим моментам инерции рам или равенством жесткостей торсионов и моментов инерции колебательных систем в соответствии с уравнением

$$\sqrt{\frac{G_\alpha}{(B_H + B_B)}} = \sqrt{\frac{G_\beta}{C_B}},$$

где  $G_\alpha$  и  $G_\beta$  — жесткости торсионов по осям  $\alpha$  и  $\beta$ , а  $(B_H + B_B)$  и  $C_B$  — моменты инерции колебательной системы. На рис. 6 приведены графики, характеризующие зависимости собственных частот  $p_1$  и  $p_2$  от угловой скорости основания  $\Omega_x$  для параметров чувствительных элементов (ЧЭ) датчика угловой скорости карданного типа с совпадающими значениями собственных частот колебания рамок и датчика с несовпадающими исходными частотами собственных колебаний.

Анализ полученных результатов показал, что в общем случае значение собственных частот нелинейно зависит от угловой скорости основания  $\Omega_x$ . Однако в определенном диапазоне угловых скоростей ( $\Omega_x = 0 \div 1000$  рад/с) при исходном равенстве частот зависимость разницы частот практически линейно зависит от угловой скорости основания. Это свойство можно использовать для получения информации об угловой скорости основания.

Из анализа результатов моделирования и полученных экспериментальных данных для датчика угловой скорости карданного типа можно сделать следующие выводы:

- наибольшая чувствительность (отношение амплитуды вынужденного движения наружной рамки к угловой скорости) наблюдается при возбуждении на частоте, совпадающей с собственными частотами колебаний рамок (при условии их равенства);

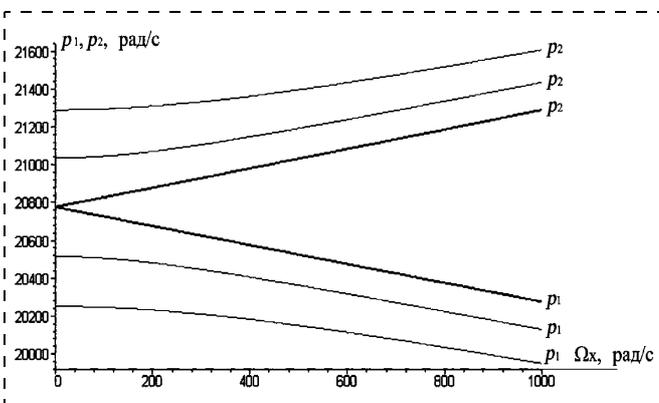


Рис. 6. Зависимости собственных частот чувствительного элемента гироскопа от угловой скорости основания:

$p_1, p_2$  — собственные частоты чувствительного элемента гироскопа;  $\Omega_x$  — угловая скорость основания

- для малых угловых скоростей амплитуда вынужденного движения наружной рамки практически линейно зависит от угловой скорости основания;
- амплитуда вынужденного движения наружной рамки пропорциональна произведению добротностей обеих рамок;
- при возбуждении внутренней рамки гироскопа на частоте, не совпадающей с резонансной, наблюдается падение амплитуды вынужденного движения наружной рамки;
- амплитуда вынужденного движения наружной рамки будет тем меньше, чем дальше частота возбуждения от собственной частоты и чем больше разность собственных частот.

**Экспериментальные исследования** датчиков угловой скорости проводили в целях определения следующих характеристик прибора, которые во многом определяются состоянием разрабатываемой и используемой технологии:

- добротности колебательной системы;
- собственных частот колебаний рамок подвеса;
- АЧХ датчика угловой скорости;
- масштабного коэффициента преобразования угловой скорости в выходное напряжение системы съема сигнала;
- случайной угловой скорости дрейфа в режиме прямого преобразования.

Добротность подвесов внутренней и внешней рамок определялась двумя методами: методом свободных затухающих колебаний после воздействия одиночного возбуждающего импульса и методом амплитудно-частотных характеристик. При этом вынужденные колебания обеспечивались с помощью электростатического двигателя. Исследовалась зависимость добротности от напряжений смещений, подаваемых на силовые электроды датчиков силы.

Экспериментально добротность колебательного контура вычисляли по формуле  $Q = \frac{\pi}{D}$ , где  $D$  — декремент затухания колебаний, определяемый как  $D = \ln \frac{A_i}{A_{i+1}}$ , где  $A_i$  и  $A_{i+1}$  — амплитуды соседних колебаний;  $i$  — целые числа.

Собственные частоты колебаний рамок также определялись методами свободных и вынужденных колебаний. Исследовалась зависимость собственных частот от напряжений смещений, подаваемых на силовые электроды датчиков силы.

Масштабный коэффициент датчика угловой скорости и его скорости дрейфа измерялись в режиме прямого преобразования. АЧХ определялась в рабочем режиме гироскопа методом подачи на электроды датчика момента выходной рамки гармонического момента с изменяемой расстройкой по частоте относительно ее собственной (рабочей) частоты. Для измерения масштабного коэффициента использовался поворотный стол ИПП-902АП с диапазоном изменения угловых скоростей от 0,01

до  $1000\text{ }^\circ/\text{с}$ . Случайная скорость дрейфа оценивалась в диапазоне частот от 0 до 100 Гц.

Разработанная конструкция датчика угловой скорости карданного типа и технологический процесс изготовления обеспечивают получение колебательного контура с частотой собственных колебаний от 1900 до 3500 Гц и поддержку необходимых частот подвесов рамок с заданной между ними расстройкой порядка 40 Гц. Погрешность выдержки частот между образцами, измеренная по нескольким сериям образцов ММВГ, составляет не более 3 %, погрешность выдерживания заданной расстройки по частоте в образце — не более 10 %. При изменении напряжения смещения на электродах ММВГ в пределах 0—50 В собственные частоты уменьшаются от номинальных значений примерно на 100 Гц. Погрешность реализованного метода измерения частот подвеса не превышала 0,3 Гц. Добротность подвеса составила не менее 5000 при давлении  $1,3 \cdot 10^{-3}$  мм рт. ст. (0,173 Па) и уменьшается до 500 при давлении  $1,3 \cdot 10^{-1}$  мм рт. ст. (17,33 Па). Погрешность измерения добротности в эксперименте не превышала 2,5 %.

Значение масштабного коэффициента для различных образцов составляло от 7 до 50 мВ/ $^\circ/\text{с}$  при коэффициенте усиления емкостной системы съема сигнала порядка 100. Максимальная угловая скорость, измеряемая гироскопом в экспериментах, составляла  $1000\text{ }^\circ/\text{с}$ . Среднее квадратичное отклонение сигнала, рассчитанное для полосы частот 0—10 Гц (масштабный коэффициент 40 мВ/ $^\circ/\text{с}$ ), равно 0,35 мВ, что соответствует случайному дрейфу ММВГ  $32,5\text{ }^\circ/\text{ч}$ .

Перспективы улучшения характеристик датчика угловой скорости могут лежать в основном в технологической области. Путем увеличения добротности подвеса примерно до  $10^4$  (достаточно легко реализуемое значение при вакуумировании полости подвеса до  $10^{-2}$  мм рт. ст. (1,33 Па)), оптимизации связи подвеса с датчиком угла и использования маломощного предварительного усилителя случайный дрейф может быть уменьшен до  $1\text{ }^\circ/\text{ч}$  и даже его долей. Введение режима компенсационного измерения позволит расширить частотный диапазон до значений порядка 100 Гц. При этом диапазон измеряемых угловых скоростей принципиально может значительно превосходить  $1000\text{ }^\circ/\text{с}$ . Использование режима контроля линейного ускорения позволит одновременно значительно уменьшить погрешность датчика от этого параметра и обеспечит возможность его измерения с точностью, удовлетворяющей ряду задач управления подвижными объектами. В процессе измерений получены следующие предварительные параметры микрогироскопов: диапазон измеряемых угловых скоростей  $\pm 50\text{ }^\circ/\text{с}$ ,  $\pm 150\text{ }^\circ/\text{с}$ ,  $\pm 500\text{ }^\circ/\text{с}$ , масштабный коэффициент 7—50 мВ/ $^\circ/\text{с}$ , скорость изменения случайного дрейфа 36—360  $^\circ/\text{ч}$ ; добротность колебательной системы до 12000, частота собственных колебаний 1900—3500 Гц.

Таким образом, в процессе проектирования данного вида преобразователей механических величин были использованы методы моделирования механических характеристик с помощью программ конечно-разностного анализа и эмпирические методы для оптимизации конструкции на основе измерений характеристик экспериментальных образцов. Моделирование физических процессов преобразования физической величины в электрический сигнал и, тем более, смешанное моделирование функционирования механических элементов и электронной схемы не проводилось, что не позволило исследовать возможности оптимизации характеристик прибора путем изменения электрической схемы возбуждения внутренней рамки и схемы считывания сигнала с емкостных элементов внешней рамки. Эти же недостатки можно отнести и к процессу разработки емкостных акселерометров, фотография чувствительного элемента (ЧЭ) которого представлена на рис. 7.

Разработанный ЧЭ акселерометра маятниковой конструкции состоит из основания и подвижной рамки, подвешенной на торсионах. Принцип действия ЧЭ основан на несимметричности подвеса подвижной рамки, благодаря чему осуществляется регистрация силы ускорения, направленной перпендикулярно плоскости ЧЭ. На основании конструкции размещены четыре опорных выступа, которые определяют зазор между подвижной рамкой и статорной пластиной. По углам подвижной рамки размещаются четыре упора, исключаящие короткое замыкание емкостных датчиков при повороте подвижной рамки в любое крайнее положение. На обратной стороне маятника какой-либо рельеф отсутствует, т. е. поверхности основания и подвижной рамки находятся в одной плоскости. Методом конечных разностей для подобной конструкции можно оценить чувствительность и соб-

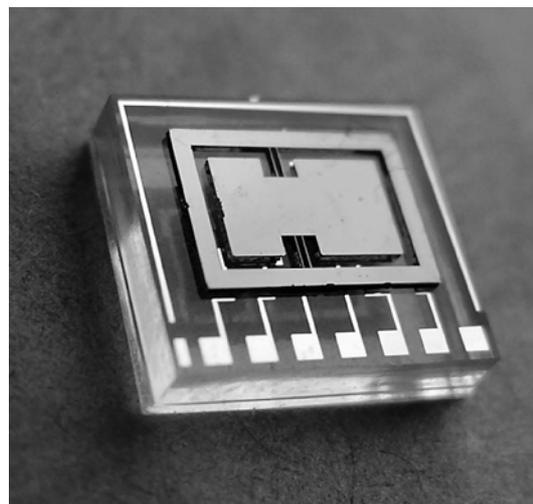


Рис. 7. Фотография чувствительного элемента микроакселерометра

ственные частоты. Однако, как и в предыдущем случае, моделирование его динамики и функционирования в условиях демпфирования и взаимодействия с электронной схемой может быть осуществлено только с помощью программных комплексов, способных осуществлять смешанное моделирование движения механических элементов и электронных схем.

Эти примеры ярко показывают, что для полноценного проектирования сложных функциональных (СФ) микромеханических систем разработчикам в первую очередь необходимо обеспечить возможность анализа динамического функционирования всей электронной схемы МЭМС совместно с анализом движения механических элементов.

### Разработка сквозных методов моделирования сложных функциональных МЭМС

Как было показано выше, моделирование ряда МЭМС практически невозможно без осуществления совместного одновременного анализа динамических характеристик и механической системы, и электронной схемы. Однако до недавнего времени ПО, обеспечивающего решение подобных задач, практически не было. Так, например, для анализа функционирования акселерометра на основе микромеханического дифференциального конденсатора разработчикам приходилось создавать его программную модель, основанную на физических законах движения подвижного электрода конденсатора и протекания тока в электрических цепях. Очевидно, что данная задача сама по себе является весьма трудоемкой и практически лишает разработчика возможности оптимизации электронной схемы. Эффективный инструмент для решения задач комплексного анализа и проектирования МЭМС создан в компании *Coventor* [9]. Программный пакет "CoventorWare" [10] обеспечивает возможность начала проектирования на системном уровне, дальнейшее использование библиотеки элементов электромеханических, оптических, микрожидкостных и других компонентов, моделирование электронной схемы совместно с механическими узлами, верификацию проекта и, наконец, автоматическую генерацию масок для производства (вероятно, для какой-то формально описанной технологии). Сведения о каком-либо эффективном использовании данного ПО в России авторам неизвестны. В основном это объясняется его высокой стоимостью. Однако в значительной степени решить задачу совместного моделирования механической и электронной частей МЭМС и, соответственно, обеспечить простоту и доступность оптимизации электронной схемы позволяют найденные методы представления моделей механических элементов на языке системы моделирования электронных схем — PSPICE [11, 12]. Напомним коротко суть данной разработки. Для лю-

бого микромеханического элемента на основании формальной математической модели, описывающей его движение под воздействием различных физических величин и электронной схемы, формируется SPICE-модель, которая воспринимается программой анализа электронных схем как любой другой электронный компонент в составе всей электронной схемы. Дальнейший анализ функционирования всей МЭМС не отличается от обычного анализа электронной схемы, с которым справляются даже студенты. В частности, разработана общая методика получения моделей для емкостных микроэлектромеханических систем, которая показана на примере двух типов акселерометров. Параметры моделей микромеханических компонентов могут быть определены как из экспериментальных данных, так и из результатов расчета характеристик механической системы с помощью известных и доступных программ. Следовательно, применяя предложенный метод и создав необходимые SPICE-модели, разработчики получают возможность осуществления комплексного анализа динамических характеристик СФ МЭМС и оперативной оптимизации их электронных схем.

### Список литературы

1. **Зимин В. Н., Шабратов Д. В., Шелепин Н. А., Чаплыгин Ю. А.** Интегральные преобразователи давления на нормальный ряд от 0,04 до 30 МПа // Измерительная техника. 1994. № 2. С. 35.
2. **Зимин В. Н., Шабратов Д. В., Шелепин Н. А.** Интегральные преобразователи давления на нормальный ряд от 0,04 до 30 МПа // Разработка и исследование микроэлектронных кремниевых датчиков и элементов памяти СБИС ДОЗУ / Под ред. Ю. А. Чаплыгина. М.: МГИЭТ, 1994. С. 20—24.
3. **Галушков А. И., Зимин В. Н., Чаплыгин Ю. А., Шелепин Н. А.** Кремниевые интегральные датчики физических величин на основе технологии микроэлектроники // Электронная промышленность. 1995. № 4—5. С. 95—101.
4. **Зимин В. Н., Салахов Н. З., Чаплыгин Ю. А., Шелепин Н. А.** Прецизионные интегральные преобразователи давления // Измерительная техника. 1995. № 1. С. 20—21.
5. **Отчет о НИР "ЛИГА-5"** // № гос. регистрации 01950007528, Москва, 1995.
6. **Зимин В. Н., Данилова Н. Л., Панков В. В., Шабратов Д. В.** Базовые конструкции интегральных тензопреобразователей на ряд давлений от 0,01 до 40 МПа // Датчики и системы. 1999. № 2. С. 52—55.
7. **Данилова Н. Л., Павлов А. Ю., Панков В. В., Шелепин Н. А.** Преобразователи давления — интегральные схемы серии 1191 и 1192 // Датчики и системы — 2005. Сб. докл. Международной научно-технической конференции, 6—10 июня 2005 г., г. Пенза, 2005. 204 с.
8. **Тимошенков С. П., Чаплыгин Ю. А.** Микро- и наноэлектромеханические системы // Нанотехнологии в электронике / Под ред. Ю. А. Чаплыгина. М.: Техносфера. 2005. С. 381—420.
9. <http://www.coventor.com>
10. **Миллер О., Потапов Ю.** Универсальная среда проектирования коммерческих МЭМС устройств // Электронные компоненты. 2003. № 2. С. 1—3.
11. **Шелепин Н. А.** Основные принципы создания SPICE-моделей микроэлектромеханических систем // Микросистемная техника. 2004. № 9. С. 30—35.
12. **Шелепин Н. А.** Функционально сложные микроэлектромеханические системы. Проблемы проектирования и основы моделирования в САПР для анализа электронных схем // XVI научно-техническая конференция "Датчики и преобразователи информации систем измерения, контроля и управления" ("Датчик-2004"), Май 2004, Материалы конференции. 2004. 45 с.

**В. В. Амеличев**, канд. техн. наук,  
**А. И. Галушков**, канд. техн. наук,  
**А. А. Резнев**, д-р техн. наук,  
**А. Н. Сауров**, д-р техн. наук, проф.,  
**В. С. Суханов**,  
 НПК "Технологический центр" МИЭТ

## ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРИВНЕСЕННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ЗЕМЛИ

*Представлен метод двумерной визуализации магнитного поля от объекта в условиях однородного магнитного поля Земли, позволяющий фиксировать магнитометрическую информацию с помощью массива датчиков магнитного поля, записывать в память ЭВМ, просматривать и после математической обработки сохраненных данных визуализировать объект в реальном времени, а также распознавать его по сравнению с элементами в базе данных.*

Расчет стационарного магнитного поля ферромагнитного объекта может быть выполнен на основе решения уравнений для эквивалентной системы токовых проводников. Это дает возможность идентификации ферромагнитного объекта, имеющего остаточное магнитное поле, а также его расположение в пространстве по этому полю.

Известно, что под действием магнитного поля все тела приобретают *магнитные свойства* — в веществе появляются собственные магнитные поля, и поле внутри вещества складывается из внешнего поля и собственного. В этом смысле принято говорить, что все тела являются *магнетиками*.

Существуют программные продукты (ANSYS, EMM, Vizimag и др.), позволяющие моделировать магнитные поля как простых, так и сложных объектов [1, 2]. На рис. 1 приведен пример расчета распределения магнитного поля двух брусков, выполненный с помощью программы Vizimag.

Совместно со специалистами Владимирского государственного университета разработано программное обеспечение под операционную систему *Windows*, позволяющее вводить магнитометрические данные с матрицы датчиков вектора магнитного индукции (ВМИ). В качестве датчиков ВМИ могут использоваться конструкции с чувствительностью по трем осям [3]. Магнитометрическая информация через последовательный и параллельный порты поступает в ЭВМ, данные сохраняются в памяти с возможностью их последующего просмотра. После математической обработки сохраненных данных можно визуализировать объект в реальном времени, а также распознавать его по сравнению с элементами в базе данных.

В данном продукте реализовано два вида визуализации показаний датчика. Первый — трехмерное изображение векторов магнитной индукции, изме-

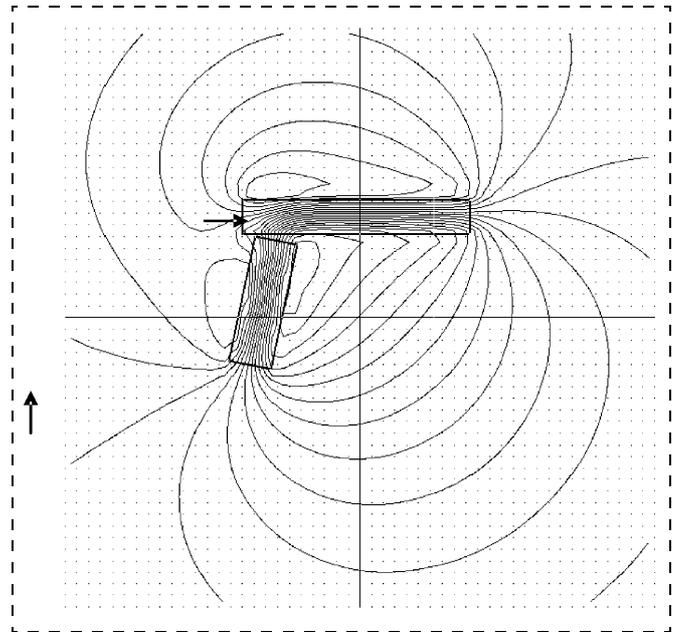


Рис. 1. Двумерное распределение магнитного поля в двух брусках

ренное  $X$ ,  $Y$  и  $Z$ -ячейками датчика магнитного поля. Пример такой визуализации представлен на рис. 2.

Описанный режим визуализации не всегда позволяет наглядно представить магнитное поле, поскольку при трехмерной визуализации одни векторы закрывают другие. Для устранения этого недостатка был разработан метод двумерной визуализации. Наглядный пример представления двумерной визуализации магнитного поля от объекта показан на рис. 3.

Разработанный способ визуализации совмещает отображение модуля магнитной индукции в виде

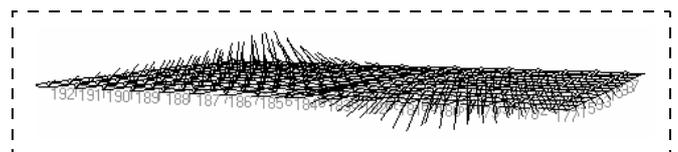


Рис. 2. 3D-отображение векторов магнитной индукции

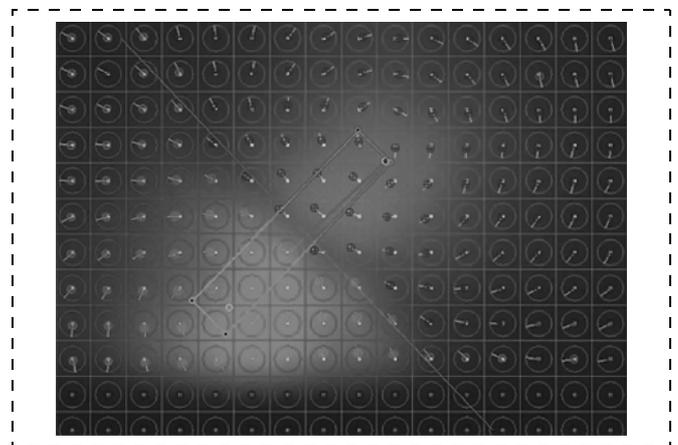


Рис. 3. Двумерная визуализация магнитного поля от объекта

черно-белого или цветного растра с отображением векторной информации. Растровая информация может отображаться с ручным и автоматическим масштабированием по яркости за счет интерполирования и выбора логарифмического масштаба.

Автоматический выбор масштаба по яркости реализован с учетом возможности возникновения сильных шумовых выбросов. Масштабирование выполняется по следующей формуле:

$$I_{rc} = \frac{(B_{rc} - \bar{B})}{2,5\sigma_B} 255 + I_{см},$$

где  $I_{rc}$  — яркость, соответствующая магнитной индукции ячейки, находящейся в строке  $r$  и столбце  $c$ ;  $B_{rc}$  — максимум модуля магнитной индукции на датчике;  $\bar{B}$  — среднее значение модулей магнитной индукции на ячейках датчика;  $\sigma_B$  — среднее квадратическое отклонение модулей магнитной индукции на ячейках датчика;  $I_{см}$  — константа. После масштабирования значения яркости ограничиваются таким образом, чтобы яркость находилась в диапазоне 0...255.

Такой способ масштабирования позволяет отображать информацию в достаточном динамическом диапазоне даже при наличии значительных импульсных шумовых выбросов по некоторым ячейкам. Цветное отображение растра позволяет с помощью цвета передать направление составляющей магнитного поля, направленной по нормали к плоскости датчика. Если вектор магнитной индукции входит в датчик, модуль вектора отображается градациями специально подобранного оттенка синего цвета, если выходит из датчика — красного цвета. Выбор оттенков цветов сделан таким образом, чтобы субъективное ощущение яркости при одинаковых значениях модуля индукции, но при разных направлениях нормальной компоненты поля было одинаковым.

Векторная информация представляется следующим образом. В проекции каждой ячейки датчика строится окружность. Ее радиус считается единичным. Строится радиус-вектор единичной длины, имеющий координаты  $(V_x, V_y)$ . Радиус-вектор показывает направление проекции вектора магнитной индукции на плоскость датчика. На радиус-векторе строится небольшая окружность, центр которой совпадает с проекцией конца нормированного вектора магнитной индукции на плоскость датчика. Положение проекции конца нормированного вектора позволяет судить об угле между вектором магнитной индукции и нормалью к плоскости датчика (рис. 4). Окружность, соответствующая концу вектора, окрашивается в красный цвет и имеет в центре точку, если нормальная компонента вектора индукции выходит из датчика. В противном случае используется синий цвет, и в центре рисуется крест.

Показания различных ячеек трехмерного датчика в однородном магнитном поле могут отличаться

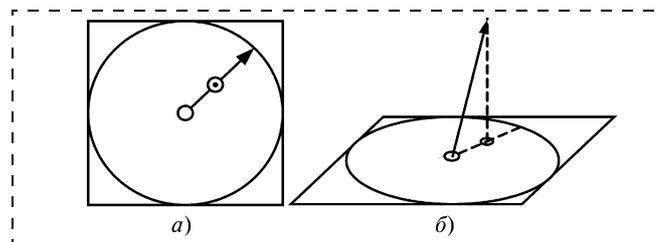


Рис. 4. Отображение векторной информации при двумерной визуализации:

$a$  — пример отображения;  $b$  — соответствующее положение нормированного вектора

друг от друга по уровню выходного сигнала. Это связано со случайными отклонениями осей чувствительности, погрешностью расположения в растре и т. д. Для решения задачи распознавания важно, чтобы датчик был откалиброван. В результате проведения ряда исследований был разработан метод калибровки магнитным полем Земли, реализованный следующим алгоритмом:

1. В однородном магнитном поле Земли записывается последовательность кадров.

2. На основе записанной последовательности кадров для каждой ячейки определяются среднее значение и дисперсия по каждой из координат.

3. Выполняется отбраковка ячеек с большой дисперсией и большим отклонением среднего значения от среднего значения по всему массиву трехмерных датчиков магнитного поля.

4. Среднее значение магнитной индукции, получаемое с ячеек, оставшихся после отбраковки, считается эталонным, по нему выполняется калибровка всех ячеек датчика.

В качестве ячеек трехмерного датчика магнитного поля могут применяться только преобразователи магнитного поля с нечетной функцией преобразования [4]. Основу анизотропных магниторезистивных преобразователей составляют тонкопленочные резисторы на основе сплавов пермаллоя и Fe, Ni, Co. Количественное содержание Co в пленке магниторезистивной структуры влияет как на чувствительность, так и на магнитострикционный эффект [5]. На рис. 5 представлен фотоснимок конструкции магниторезистивного преобразователя

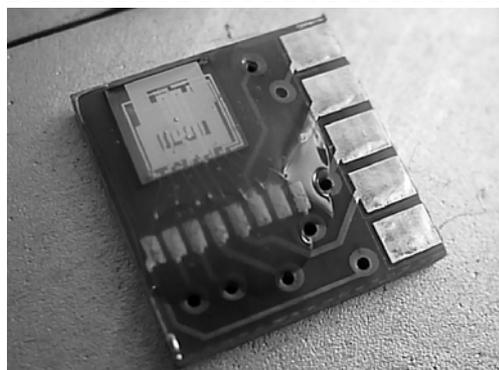


Рис. 5. Фотоснимок конструкции магниторезистивного преобразователя

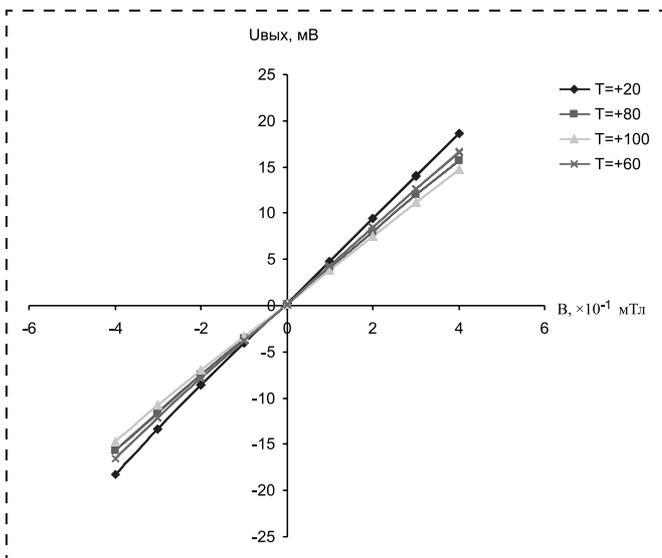


Рис. 6. Изменение передаточной характеристики датчика MRO-1 на основе пленки FeNiCo<sub>20</sub> в температурном диапазоне 20...100 °C

MRO-1, разработанной в НПК ТЦ МИЭТ на основе тонких пленок ( $\approx 10...20$  нм) из сплава FeNiCo<sub>20</sub>. Чувствительность MRO-1 составляет 20...25 В/Тл при напряжении питания 5 В и токе потребления 1,2 мА. Особенностью данной конструкции является обязательная подача кратковременных ( $< 5$  мс) импульсов тока до 1 А в планарную катушку подмагничивания "set/reset". Управлять значением начального разбаланса можно путем задания тока в другую планарную катушку "Offset". Изображенная на рис. 6 передаточная характеристика MRO-1 представлена для температурного диапазона 20...100 °C. Температурный коэффициент изменения чувствительности MRO-1 для данной тонкопленочной магниторезистивной структуры на основе FeNiCo<sub>20</sub> составляет  $-1,1 \cdot 10^{-3}$  мВ/(В · Э · °C).

Влияние однородного магнитного поля Земли на магнитометрические характеристики массива датчиков можно исключить двумя способами: 1) перейти от анализа магнитной индукции к анализу ее градиента; 2) вычитать фоновые значения магнитной индукции из анализируемых данных. Однако для анализа градиента магнитного поля необходима объемная система трехмерных датчиков. В реализации с плоскостью трехмерных датчиков магнитного поля наиболее удобен второй подход. Его недостаток заключается в том, что при изменении положения датчика относительно фонового поля необходимо заново записать фоновое значение магнитной индукции, а преимущество — в том, что фоновое поле не обязательно должно быть пространственно однородным.

В работе массива трехмерных датчиков магнитного поля подавление импульсных помех является актуальной задачей, которая может быть решена с помощью алгоритма подавления помех на основе модифицированного медианного фильтра. Фильтрация в этом случае выполняется отдельно по ка-

ждой из координат вектора магнитной индукции и только пространственно (не по времени), поскольку частота кадров мала. Отличие от стандартного алгоритма заключается в том, что заменяются значения только для тех элементов раstra, для которых результат медианной фильтрации отличается от исходного на значение, превышающее порог. Такая фильтрация действует только на элементы раstra, в которых имеется сильная импульсная помеха, и не влияет на остальные.

Пример подавления импульсной помехи по описанному алгоритму приведен на рис. 7. Анализ показал присутствие помех с амплитудой, превышающей уровень сигнала, и существенный разброс характеристик по разным каналам, что также потребовало решения возникших проблем. В результате была разработана методика калибровки каналов датчика, позволяющая добиться идентичности показаний по всем каналам.

Представление данных в наиболее информативных формах имеет принципиальное значение. Визуализация потока данных, получаемых с датчика, делает процесс наблюдаемым и выполняется в разнообразных формах и на разных уровнях.

На уровне входного потока проводится разборка на кадры и просмотр пакетов в текстовом формате.

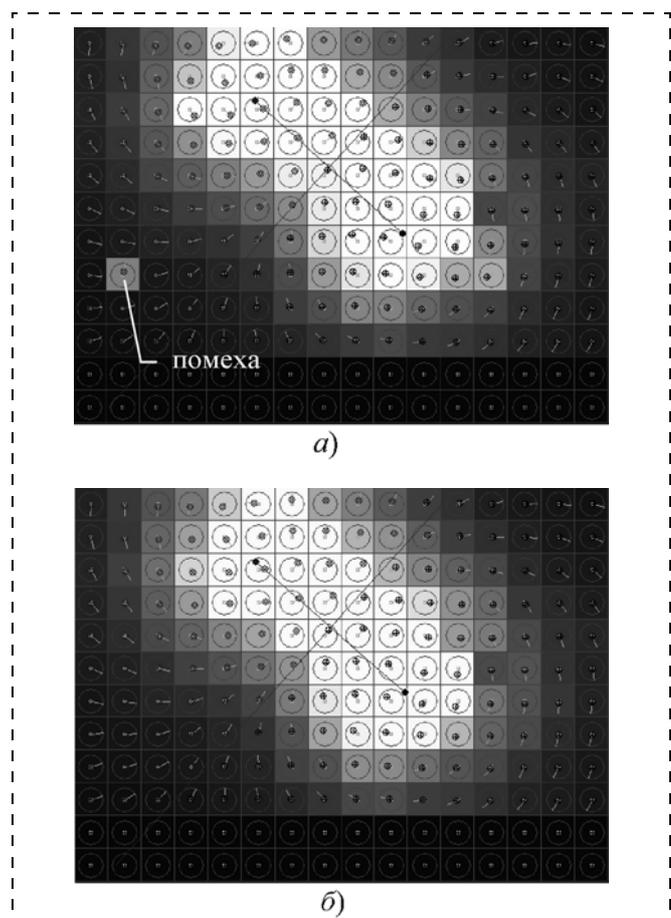


Рис. 7. Подавление импульсной помехи модифицированным медианным фильтром:

а — исходный кадр; б — кадр с удаленной импульсной помехой

Подсистема моделирования позволяет наблюдать поля, порождаемые искусственными объектами в плоскости, наблюдать за работой выбранных датчиков. Окна статистической обработки позволяют просматривать параметры датчиков как в скользящем окне, так и за все время измерения. Это позволяет проводить оценку шума в сигнале, а также выполнять настройку датчика и калибровку каналов.

Таким образом, разработанное программное обеспечение позволяет с помощью магнитометрических данных двумерной матрицы датчиков магнитного поля визуализировать объект в реальном времени на фоне магнитного поля Земли, просмат-

ривать сохраненные данные по каждому каналу, моделировать магнитное поле объектов простых геометрических форм.

#### Список литературы

1. <http://www.ansys.msk.ru>
2. <http://www.vizimag.com>
3. Бараночников М. Л. Микромагнитоэлектроника. Т. 1. М.: ДМК Пресс, 2001. С. 436—449.
4. Касаткин С. И., Васильева Н. П., Муравьев А. М. Многослойные тонкопленочные магниторезистивные элементы. Тула, 2001. 134 с.
5. Прагтон М. Тонкие ферромагнитные пленки / Пер. с англ. Е. О. Брянской и др. Л.: Судостроение, 1967. С. 114—117.

## МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НМСТ

УДК 681.586.325;621.382.001.63

**В. В. Амеличев**, канд. техн. наук,  
**А. Ю. Павлов**, **А. И. Погалов**,  
НПК "Технологический центр" МИЭТ,  
**Ю. А. Чаплыгин**, д-р техн. наук, проф., чл.-корр. РАН,  
МИЭТ

### КОНСТРУКТИВНО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

*Изложены основные аспекты оптимизации конструктивно-технологических параметров интегральных преобразователей физических величин, применяемые в условиях многовариантного серийного производства. Представлены результаты моделирования конструктивных узлов интегральных полупроводниковых тензопреобразователей с применением методов механики материалов и метода конечных элементов.*

Улучшение метрологических характеристик интегральных полупроводниковых преобразователей физических величин (ПФВ) является актуальной задачей микроэлектроники. Потенциальные возможности кремниевой технологии по-прежнему велики, и интеграция на одном чипе преобразователей физических величин с электронными схемами неоднократно демонстрировала свои несомненные преимущества. Создание совершенных интеллектуальных микросистем, содержащих в своем составе ПФВ и электронные схемы, является одним из приоритетных направлений развития современной электронной компонентной базы. Интегральные микросхемы в последнее время значительно продвинулись в своем развитии благодаря малым про-

ектным нормам, новым конструкциям элементов и схемотехническим решениям. ПФВ развиваются не менее динамично, о чем свидетельствует их все возрастающее многообразие, использование новых принципов преобразования, новых конструкций и технологий [1—3].

Интегральные тензопреобразователи используют для создания интеллектуальных микросистем, поскольку в своей основе они имеют однотипные исходные материалы и технологические процессы обработки [4]. Совершенствование конструктивно-технологических параметров интегральных преобразователей является залогом успешного создания новых перспективных микросистем. Плодотворная деятельность по созданию интегральных тензопреобразователей с улучшенными характеристиками ведется во многих производственных фирмах.

В НПК ТЦ МИЭТ на основе технологии объемной микрообработки кремния, совмещенной со стандартными технологическими процессами изготовления ИМС, была разработана конструкция интегральных преобразователей давления (серия ИПД), ускорения и силы (серия ТКБ), объединяющая на одном кристалле чувствительный элемент и схему термокомпенсации [5—7].

Первые серийные образцы интегральных преобразователей давления (ИПД-1 и ИПД-2) появились в 1994 г. Конструктивно они представляют собой кремниевую рамку с плоской мембраной, рассчитанной на применение номинального давления 100 кПа. При более низких давлениях их применение нецелесообразно ввиду более низких метрологических характеристик. Для применения ИПД, работающих в диапазонах 60...630 кПа и 0,1...100 кПа, потребовалась оптимизация их конструктивно-технологических параметров. С этой целью были разработаны конструкции ИПД с концентраторами механических напряжений (КМН) в области мембраны. Механические напряжения тонкой крем-

ниевой мембраны концентрируются по периметру ее крепления или искусственного утолщения, располагающегося, как правило, в центре мембраны (отсюда, очевидно, и произошел термин "жесткий центр"). На самом деле таких "жестких центров" в области мембраны может быть несколько [8], а тензочувствительные элементы оптимальнее всего располагать в областях с максимальными механическими напряжениями. По этому принципу были сконструированы и изготовлены в НПК ТЦ МИЭТ конструкции интегральных преобразователей давления (серии ИПД-4, ИПД-4М, ИПД-5, ИПД-9), ускорения и силы на основе балочной конструкции (ТКБ-5, ТКБ-6), имеющих улучшенные показатели по значению выходного сигнала, коэффициенту нелинейности, температурному коэффициенту нуля при меньшем его значении.

Формирование нескольких жестких центров в области кремниевой мембраны или балки обеспечивает создание системы растягивающих и сжимающих механических напряжений. На рис. 1 представлено распределение напряжений на краях одного жесткого центра, формируемого методом анизотропного химического травления кремния. Моделирование, динамический и прочностной анализ ПФВ могут проводиться с помощью методов механики материалов и метода конечного элемента [9].

При моделировании использовали следующие принципы и допущения:

- деформации в материалах — линейно-упругие, граничные условия не изменяются в процессе нагружения;
- для материалов используется модель сплошного, однородного, изотропного, деформируемого тела;
- на основе компонентов напряженно-деформированного состояния (НДС) и параметров прочности материалов проводится вычисление эквивалентных напряжений по критерию энергии формоизменения;
- коэффициент запаса прочности вычисляется как отношение допускаемого напряжения к максимальному эквивалентному напряжению материала:

$$n = [\sigma]/\sigma_3. \quad (1)$$

Для расчета напряжений в элементах тензопреобразователя мембранного типа с жестким цен-



Рис. 1. Распределение механических напряжений от одного жесткого центра

тром и балочного типа с концентратором напряжений используют компьютерные модели с применением метода конечных элементов. В аналитических методах расчета прибегают к идеализации свойств материала и схематизации геометрических форм, что позволяет значительно упростить и приблизить расчетную схему к реальному объекту. На рис. 2 показано распределение механических напряжений на поверхности кремния в зоне КМН размером  $100 \times 75$  мкм там, где располагается тензорезистор. При моделировании использовали следующие физико-механические свойства кремния:

- плотность  $2330 \text{ кг/м}^3$ ;
- модуль упругости  $130 \text{ ГПа}$ ;
- модуль сдвига  $50 \text{ ГПа}$ ;
- коэффициент Пуассона  $0,3$ ;
- температурный коэффициент линейного расширения  $2,8 \cdot 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ .

Исходя из общих принципов построения интегрального тензорезистивного преобразователя и рассчитанных механических напряжений, можно определить основные характеристики ПФВ, например, балочного преобразователя ускорения.

Работа тензорезистивного кремниевого балочного (ТКБ) преобразователя ускорения основана на двух видах преобразования. Первое преобразование ускорения происходит с помощью инерционной массы и упругого подвеса, что выражается в его деформации с концентрацией механических напряжений в локальной области. Второе преобразование происходит с помощью тензорезисторов, объединенных, как правило, в мост Уитстоуна, для формирования выходного электрического сигнала.

Принцип действия тензорезисторов основан на изменении электрического сопротивления материала при его деформации. Эффективность преобразователей определяется коэффициентом тензочувствительности  $K$ , представляющим собой отношение относительного изменения сопротивления  $\Delta R$  к относительной деформации  $K = \Delta R / (R\varepsilon)$ , где  $\varepsilon$  — относительная деформация тензорезистора. Относительное изменение сопротивления тензорезистора определяют по формуле  $\Delta R/R = (1 + 2\mu)\varepsilon + \Delta\rho/\rho$ , где  $\mu$  — коэффициент Пуассона;  $\rho$  — удельное сопротивление. Составляющая  $(1 + 2\mu)\varepsilon$  зависит от изменения геометрических размеров (длины

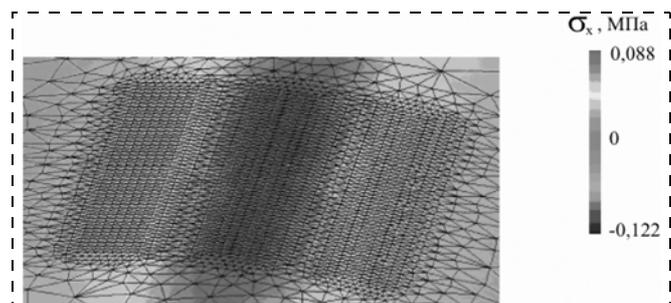


Рис. 2. Распределение механических напряжений на поверхности кремния в зоне КМН размером  $100 \times 75$  мкм

тензорезистора и площади сечения), составляющая  $\Delta\rho/\rho$  — от изменения удельного сопротивления при деформации материала тензорезистора.

Сопротивление полупроводникового кремниевых тензорезистора при его деформации изменяется, главным образом, за счет изменения удельного сопротивления. Изменением геометрических размеров кремниевых тензорезистора можно пренебречь, поскольку  $(1 + 2\mu)\varepsilon \ll \Delta\rho/\rho$ . Таким образом, для полупроводникового тензорезистора зависимость удельного сопротивления имеет вид  $\Delta\rho/\rho = \pi\sigma = \pi E/\varepsilon$ , где  $\pi$  — коэффициент пьезорезистивности;  $\sigma$  — напряжение тензорезистора;  $E$  — модуль упругости.

Коэффициент пьезорезистивности  $\pi$  зависит от следующих факторов: ориентации резистивных полосок; значения механического напряжения; от типа кремния ( $p$  или  $n$ ) и концентрации примеси. На практике принимают  $K = \pi E$ , коэффициент тензочувствительности достигает абсолютных значений от 100 до 200, а его знак определяется типом примесей (кремний  $p$ -тип — знак плюс, кремний  $n$ -тип — знак минус).

Следовательно, статическую чувствительность интегрального тензопреобразователя можно определить по формуле

$$S_0 = S_1 S_2 = \frac{\varepsilon}{a} \left( \frac{U_{\text{ВЫХ}}}{\varepsilon} \right) = \frac{\sigma}{Ea} \left( \frac{U_M(\Delta R/R)}{\varepsilon} \right) = \frac{\sigma}{Ea} (U_M K), \quad (2)$$

где  $S_1, S_2$  — чувствительность первичного и вторичного преобразователей;  $\varepsilon$  — деформация тензорезистора,  $\varepsilon = \sigma/E$ ;  $\sigma$  — напряжение тензорезистора;  $E$  — модуль упругости кремния;  $U_{\text{ВЫХ}}$  — напряжение выходного электрического сигнала;  $R, \Delta R$  — сопротивление и изменение сопротивления тензорезистора;  $U_M$  — напряжение на мосте;  $K$  — коэффициент тензочувствительности;  $a$  — измеряемое ускорение.

При напряжении на мосте  $U_M = 5000$  мВ, коэффициенте тензочувствительности  $K = 150$  и действии ускорения  $a = 1g$  формулу (1) с учетом модуля упругости кремния  $E = 1,3 \cdot 10^5$  МПа можно записать в виде

$$S_0 = \frac{\sigma}{Ea} (U_M K_n) = 5,8\sigma, \quad (3)$$

где  $\sigma$  измеряется в мегапаскалях,  $S_0$  — в милливольтгах на  $g$  (мВ/ $g$ ).

К ПФВ предъявляют повышенные требования по прочностной и метрологической надежности. Под прочностной надежностью понимают функционирование устройства без отказов, вызванных разрушением, недопустимыми деформациями, изменением размеров и формы элементов, свойств материалов и электрофизических параметров. Под метрологической надежностью понимают способность сохранять достоверность измерений в преде-

лах установленных норм при заданных условиях эксплуатации.

Прочностная и метрологическая надежность ПФВ зависит от механических, динамических, демпфирующих свойств материалов, характера напряженно-деформированного состояния, эффективного использования прочности и жесткости материалов, совершенства методов расчета и проектирования, критериев надежности. Основной мерой прочностной надежности является запас прочности элементов конструкции. Прочностную надежность можно оценивать и по вероятности безотказной работы.

Для расчета напряжений в балочном подвесе инерционной массы могут быть использованы методы механики [10]. При консольном подвесе  $\sigma = \frac{M}{W_x}$ , где  $M$  — изгибающий момент,  $M = Pl$ ;  $P$  — инерционная нагрузка,  $P = ma$ ;  $m$  — инерционная масса;  $l$  — расстояние от центра масс до тензорезисторов;  $W_x$  — момент сопротивления изгибу поперечного сечения кремниевой балки в области упругого элемента (концентратора механических напряжений), определяемый выражением

$$W_x = \frac{bH^2}{6}, \quad (4)$$

где  $b, H$  — ширина и высота сечения упругого элемента.

При мостовой схеме подвеса инерционной массы статическую неопределимость раскрывают с помощью метода сил. Изгибающий момент рассчитывают по формуле

$$M = \frac{Pl}{2n}, \quad (5)$$

где  $n$  — число упругих элементов для подвески инерционной массы, а  $l$  — длина упругого элемента.

Очевидно, для создания высокочувствительных интегральных тензопреобразователей ускорения необходимо снижение толщины упругих элементов, что, в свою очередь, ведет к снижению прочности кремниевых балок и повышенному температурному дрейфу выходного сигнала. Оптимизируя технологические методы обработки интегральных преобразователей физических величин в процессе их производства, можно достичь устойчивых высоких показателей качества, выраженных в хороших метрологических и надежных эксплуатационных характеристиках кристаллов серии ИПД и ТКБ. Так, например, применение дополнительных технологических операций по защите поверхности кристаллов ТКБ при обработке торцов балок повысило коэффициент выхода годных и надежность кристаллов, поставляемых предприятиям-потребителям. Снижение толщины оксида кремния в области мембраны позволяет избежать ее коробления, вследствие различных температурных коэффициентов расширения материалов в структуре, и произ-

водить более чувствительные интегральные преобразователи давления на основе тонких мембран.

Таким образом, улучшение технических характеристик интегральных тензопреобразователей может быть достигнуто путем оптимизации конструктивно-технологических параметров на основе методов машинного моделирования, экспериментального исследования и унификации. Создание необходимой системы концентраторов механических напряжений, расположения в них чувствительных элементов и выполнения унифицированных технологических операций является основой оптимизации серийно выпускаемых интегральных тензопреобразователей физических величин. Интеграция тензопреобразователей с улучшенными характеристиками в состав микросистем и электронных схем позволит создать современную электронную компонентную базу, востребованную на рынке продуктов гражданского и военного назначения.

#### Список литературы

1. **Фрайден Дж.** Современные датчики: Справочник. М.: Техносфера, 2005. С. 323–334.
2. **Liu C.-H., Kenny T. W.** A high-precision, wide-bandwidth micromachined tunneling accelerometer // Journal of microelectromechanical systems. 2001. Vol. 10. N 3.
3. **Cui T., Wang J.** Polymer-based wide-bandwidth and high-sensitivity micromachined electron tunneling accelerometers using hot embossing // Journal of microelectromechanical systems. 2005. Vol. 14. N 5.
4. **Ваганов В. И.** Интегральные тензопреобразователи. М.: Энергоатомиздат. 1983.
5. **Зимин В. Н., Чаплыгин Ю. А., Шабратов Д. В., Шелепин Н. А.** Интегральные преобразователи давления на нормальный ряд от 0,04 до 30 МПа // Измерительная техника. 1994. № 2. С. 35.
6. **Зимин В. Н., Салахов Н. Э., Чаплыгин Ю. А., Шелепин Н. А.** Прецизионные интегральные преобразователи давления // Измерительная техника. 1995. № 1. С. 20–21.
7. **Разработка и исследование микроэлектронных кремниевых датчиков и элементов памяти СБИС ДОЗУ:** Сб. науч. тр. / Под ред. Ю. А. Чаплыгина. М., 1994. С. 14–30.
8. <http://www.endevco.com/products/products.php>
9. **Алямовский А. А.** Solid Works/COSMOS Works. Инженерный анализ методом конечных элементов. М.: ДМК Пресс, 2004. 432 с.
10. **Феодосьев В. И.** Сопротивление материалов. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2000. 592 с.

УДК 53.087.92

**В. В. Дягилев, Ю. А. Михайлов,** канд. техн. наук,  
**Е. В. Игнатъева, С. Ю. Шешукова,**  
НПК "Технологический центр" МИЭТ

## НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ И СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ПРОИЗВОДСТВА КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЕВЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ТЕНЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ

*Представлены данные о числе и качестве серийно выпускаемых НПК ТЦ МИЭТ кристаллов тензопреобразователей в 2000–2006 гг., результатах совершенствования технологии их изготовления, задачах по освоению выпуска новых кристаллов.*

Кристаллы кремниевых интегральных тензопреобразователей, выпускаемые НПК "Технологический центр" МИЭТ (далее НПК ТЦ), используются в составе датчиков давления, силы, ускорения в качестве первичного преобразователя измеряемой механической величины в пропорциональный электрический сигнал — выходное напряжение. Кристалл состоит из толстой несущей части и тонкого упругого элемента, полученного путем локального анизотропного травления кремния с обратной стороны кристалла. На лицевой стороне кристалла в теле упругого элемента сформированы четыре ионнолегированных тензорезистора  $p$ -типа проводимости, объединенные токоведущими до-

рожками в мостовую схему, а на несущей части размещена схема термокомпенсации чувствительности, содержащая биполярный  $n-p-n$ -транзистор и резистивный делитель.

Первыми изделиями в области компонентов микросистемной техники, разработанными НПК ТЦ и освоенными в опытном производстве, были кристаллы интегральных преобразователей давления ИПД-1 и ИПД-2 с плоской мембраной. Их основные характеристики представлены в [1]. Систематический выпуск кристаллов интегральных тензопреобразователей по договорам поставок с потребителями осуществляется с 4-го квартала 1999 г. За семь лет (2000–2006 гг.) суммарный объем выпуска составил более 900 тыс. кристаллов. За этот период годовой объем выпуска увеличился с 70 до 170 тыс. кристаллов.

Большую часть (~75 %) в объеме поставок занимали кристаллы ИПД-1 в составе пластин  $\varnothing 100$  мм для ОАО "Автоэлектроника" (г. Калуга). Они использовались при изготовлении датчиков абсолютного давления для автомобилей ГАЗель и ВАЗ, а также датчиков давления наддува воздуха 0,25 МПа для автомобилей ГАЗ.

Четверть объема поставок приходится на другие типы кристаллов интегральных тензопреобразователей: ИПД-9, ИПД-4М, ИПД-2, ТКБ-6, ТКБ-5 [2]. Их выпуск в 2006 г. превысил 40 тыс. шт. В частности, в новых тензопреобразователях давления ЗАО "ОРЛЭКС" на номинальные значения 10 и 16 кПа [3] используются кристаллы с жестким центром ИПД-4М, имеющие размеры  $6,2 \times 6,2$  мм.

Для любого предприятия быть поставщиком АвтоВАЗа — непростая задача из-за постоянного

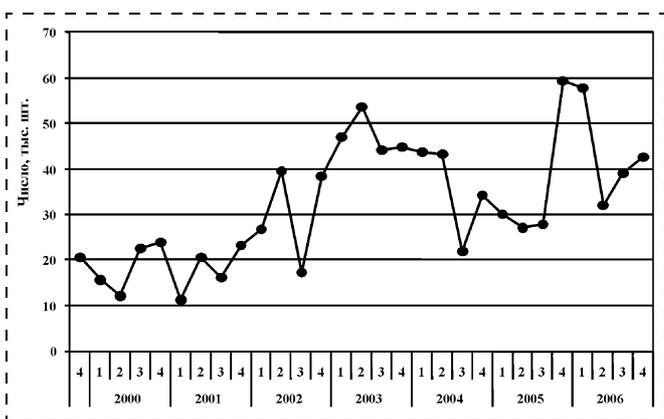


Рис. 1. Квартальные объемы выпуска кристаллов кремниевых интегральных тензопреобразователей опытным производством НПК ТЦ МИЭТ

ужесточения требований к качеству комплектующих [4] и нестабильности месячных заказов с разбивкой по неделям и дням при условии поставок "точно вовремя" [5]. Второе обстоятельство соответственно проявлялось в виде частых коррекций со стороны ОАО "Автоэлектроника" объема месячных заказов на кристаллы ИПД-1 в рамках годового заказа. Кроме того, в течение года имеют место две—три продолжительные остановки работы гермозоны опытного производства, обусловленные спецификой функционирования НПК ТЦ в качестве научного учреждения в составе вуза. Тем не менее в этих непростых условиях НПК ТЦ на протяжении семи лет сумел осуществлять систематический выпуск кристаллов ИПД-1 в задаваемом потребителем режиме по объему и срокам поставок при стабильном качестве продукции (рис. 1). Способность опытного производства динамично реагировать на изменение ситуации особенно отчетливо проявилась в оперативном отклике на бо-

лее чем двукратное увеличение объема месячных заказов весной 2002 г. и летом 2005 г. В итоге при периодической оценке качества взаимоотношений поставщик—потребитель ОАО "Автоэлектроника" неоднократно квалифицировало НПК ТЦ по категории "отличный поставщик".

Для устойчивой работы на рынке компонентов автомобильных комплектующих необходимо постоянно снижать себестоимость кристаллов тензопреобразователей. С этой целью в опытном производстве НПК ТЦ постепенно было увеличено число пластин в технологической поставочной партии с 16 до 40 шт. Тщательная отработка технологического маршрута и отдельных операций в условиях серийного изготовления продукции позволила повысить сквозной выход годных кристаллов тензопреобразователей в большинстве технологических партий до 50—65 %. В результате число годных кристаллов ИПД-1, получаемых в среднем от партии, увеличилось в 3 раза (с 1,5 до 4,5—5 тыс. шт.). Еще одной мерой снижения себестоимости кристаллов тензопреобразователей является оптимизация площади, занятой кристаллами, на пластине, имеющей повышенную хрупкость. Изучение этого вопроса позволило увеличить число кристаллов ИПД-2 на пластине диаметром 100 мм с 232 до 272 шт., а ТКБ-6 — со 136 до 176 шт. без увеличения потерь пластин при прохождении технологического маршрута.

Данный результат, полученный в ходе совершенствования выпуска кристаллов ИПД-2 с размерами 4 × 4 мм, был затем использован для кристаллов ИПД-9, имеющих такие же размеры и мембрану с жестким центром, при конструировании рабочих фотошаблонов и освоении выпуска этих кристаллов в 2003 г. На рис. 2 в логарифмических координатах представлена номограмма взаимосвязей чувствительности  $S$  (мВ/В), номинального давления  $P_n$  (кПа) и толщины мембраны  $d_M$  (мкм) для кристалла ИПД-9 (топология 380). Эти кристаллы выпускаются на номинальные давления от 25 кПа до 2,5 МПа, имеют толщину мембраны 20 мкм и более и позволяют получать высокие метрологические характеристики.

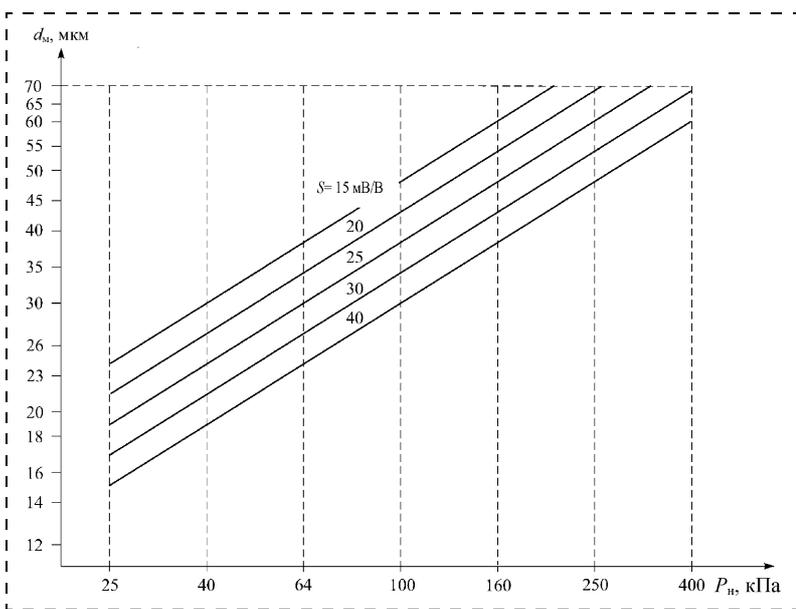


Рис. 2. Номограмма взаимосвязей параметров  $S$ ,  $P_n$ ,  $d_M$  кристаллов ИПД-9

Для изготовления кристаллов тензопреобразователей используются пластины монокристаллического кремния диаметром 100 мм, ориентацией (100), удельным сопротивлением 4,5 Ом · см, с двусторонней полировкой. Качество пластин кремния существенно влияет на показатели производства кристаллов тензопреобразователей. Целенаправленная работа с поставщиком привела к существенному улучшению их характеристик. По данным входного контроля, пластины кремния имеют разброс по толщине между пластинами ±5 мкм при средней толщине 422 мкм, разнотолщинность по площади пластины не более 4 мкм, хорошее качество полировки

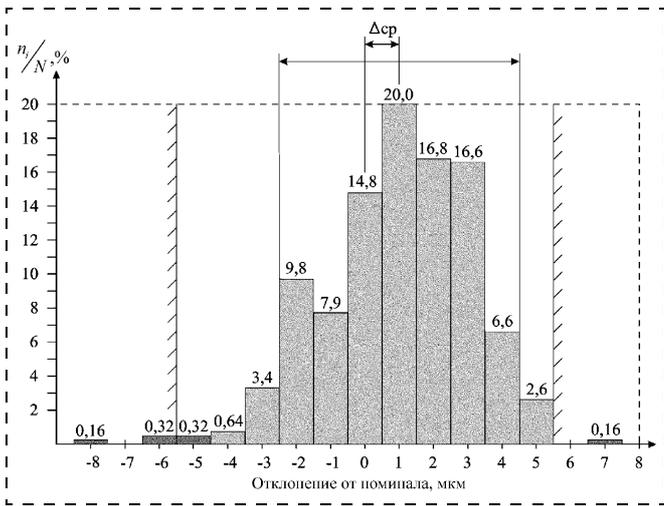


Рис. 3. Гистограмма распределения кристаллов ИПД-1 по толщине мембраны:

число измерений  $N = 3 \text{ изм.} \cdot 207 \text{ пл.}$ ; номинал  $d_M^H = 42 \text{ мкм}$ ;

$$\Delta_{cp} = d_M^{cp} - d_M^H$$

обеих сторон пластин. На рис. 3 представлена гистограмма распределения отклонения толщины мембраны от номинала на кристаллах ИПД-1 по результатам измерений приблизительно на 200 пластинах. Хорошая геометрия исходных пластин в сочетании с воспроизводимостью процесса анизотропного травления кремния и четкой работой квалифицированного персонала позволяют получать в серии партий разброс по толщине мембраны в пределах  $\pm 3 \text{ мкм}$  от среднего значения для более 90 % кристаллов. Кроме того, в этих условиях достигается стабильное положение резисторов мостовой схемы относительно края мембраны. Тем самым реализуются конструктивные условия, обеспечивающие однородность ИПД по чувствительности.

Результаты выпуска ИПД существенно зависят от качества используемых рабочих фотошаблонов.

Это можно проиллюстрировать следующим примером. Число кристаллов ИПД-1 на пластине было увеличено со 198 до 206 шт. и был изготовлен новый комплект рабочих фотошаблонов (РФШ) исходя из маршрута, включающего семь фотолитографий. В результате выявилось улучшение ситуации с параметром "начальный разбаланс моста  $U_0$ ". На рис. 4 представлена накопленная доля распределения кристаллов ИПД-1 по  $U_0$  для двух распределений: первое — для кристаллов шести партий, изготовленных по старому комплекту РФШ, второе — по новому комплекту. В каждой партии проводился сплошной контроль кристаллов по  $U_0$  на одной пластине без вакуумного присоса пластины к измерительному столику, чтобы исключить воздействие вакуума на мембрану. Объем каждого распределения 1200 кристаллов. По ординате рис. 4 отложена вероятностная

шкала. В выбранных координатах распределение укладывается на прямую линию. Это означает, что по  $U_0$  кристаллы распределяются по нормальному закону. Угол наклона прямой характеризует среднее квадратическое отклонение. Сопоставление распределений показывает, что при переходе на новый комплект фотошаблонов среднее значение начального разбаланса уменьшилось в 1,7 раза (с  $-3,0$  до  $-1,75 \text{ мВ/В}$ ), а среднее квадратическое отклонение — в 2 раза (с 1,35 до 0,65  $\text{мВ/В}$ ). На рис. 4 видно, что для второго распределения все кристаллы имеют  $U_0$  в пределах нормы  $|\pm 5,0| \text{ мВ/В}$ .

В 2002 г. в опытном производстве НПК ТЦ был начат регулярный выпуск кристаллов кремниевого тензопреобразователя балочного типа ТКБ-6 с распаянными выводами для датчиков силы. Кристалл представляет собой прямоугольную балку размером  $2 \times 10 \text{ мм}$  с двумя концентраторами механических напряжений в виде поперечных углублений. Основной потребитель — Арзамасский приборостроительный завод — использовал кристалл ТКБ-6 в качестве чувствительного элемента в новом изделии — датчике перегрузки стрелы автокранов.

В ходе освоения кристалла ТКБ-6 и датчика на его основе был выявлен ряд конструктивно-технологических недоработок как у поставщика, так и у потребителя: неполнота требований к внешнему виду, расхождение результатов измерений начального разбаланса моста кристалла в составе пластины и после его монтажа, поломки концентратора при испытаниях и эксплуатации изготовленных датчиков, недостаточная деликатность в обращении с кристаллами персонала потребителя, несовершенство тары для упаковки кристаллов. Часть недоработок удалось устранить достаточно оперативно, поиск же эффективного решения вопросов по начальному разбалансу моста и прочности концентраторов напряжений занял немало времени и потребовал серьезных интеллектуальных усилий и творческого подхода. Проведенный анализ пока-

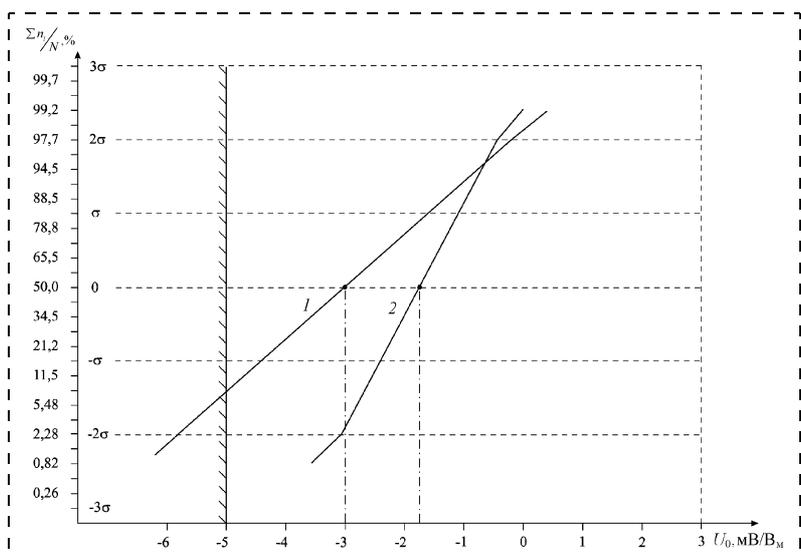


Рис. 4. Распределение кристаллов ИПД-1 по начальному разбалансу моста: 1 — прежние РФШ; 2 — новые РФШ; число кристаллов  $N = 1200$

зал, что основной причиной недостаточного качества кристаллов является несовершенство технологии его изготовления, связанное с формированием концентраторов напряжения балки. Проведенная в первом квартале 2004 г. переработка технологического маршрута изготовления кристаллов ТКБ-6 позволила практически полностью исключить претензии по начальному разбалансу моста, неоднородности толщины концентраторов, стойкости кристаллов к перегрузке. В результате объем заказов значительно увеличился и достиг в 2006 г. 1500 кристаллов в месяц.

При выпуске кристаллов интегральных тензопреобразователей особое внимание было уделено статистическому анализу и регулированию технологических процессов, выполнение которых определяет электрические параметры кристаллов. Освоение серийного производства потребовало разработки эффективных приемов управления процессами легирования бором и фосфором методом ионной имплантации при выпуске кристаллов тензопреобразователей. Управление должно обеспечивать надежное получение заданных значений сопротивления тензомоста  $R_M$ , напряжения тензомоста  $U_M$  и коэффициента усиления  $n-p-n$ -транзистора  $\beta$  схемы термокомпенсации чувствительности.

Резисторы и базу транзистора в кристаллах тензопреобразователей получают путем ионной имплантации бора с последующим термическим отжигом полученного  $p$ -слоя в азоте. Затем формируют эмиттер транзистора и охранные области с помощью ионной имплантации фосфора и отжига сформированного  $n^+$ -слоя во влажном кислороде. Поверхностное сопротивление  $R_s$  (кОм/□) ионно-имплантированного слоя обратно пропорционально дозе легирования  $D$  (мкКл/см<sup>2</sup>). Назовем произведение этих величин показателем легирования  $B = R_s D$ . По результатам изготовления нескольких десятков партий кристаллов тензопреобразователей получено, что средние значения показателей легирования для бора и фосфора практически одинаковы (для бора — 11,93; для фосфора — 12,35) при существенном различии по относительному отклонению от среднего значения  $\sigma$ , которое для бора составляет  $\pm 6,2\%$ , для фосфора  $\pm 11\%$ .

Отклонение сопротивления тензомоста кристаллов в партии от среднего значения не превы-

шает  $\pm 4,5\%$ . Допуск по сопротивлению моста равен  $\pm 20\%$  от номинала. Из приведенных данных следует, что при получении кристаллов тензопреобразователей процессы ионной имплантации бора можно проводить в серии партий при постоянной дозе легирования, соответствующей номиналу поверхностного сопротивления  $p$ -слоя. Коррекцию дозы следует осуществлять при отклонении среднего по партии сопротивления моста от номинала более  $6\%$  в одну сторону в двух последовательных технологических партиях. В этом случае отсутствует брак кристаллов тензопреобразователей по сопротивлению моста, связанный с неточностью процесса легирования.

Результаты управления процессом ионной имплантации бора оценивали по качеству настройки процесса. Под настроенностью процесса понимают относительное отклонение среднего значения параметра в технологической партии от середины поля допуска. Коэффициент настроенности рассчитывается по формуле

$$K_H = \frac{\bar{x} - x_\Delta}{\Delta} \rightarrow 0,$$

где  $\bar{x}$  — среднее арифметическое;  $\Delta$  — поле допуска на параметр;  $x_\Delta$  — середина поля допуска.

Для оценки настроенности технологического процесса ионной имплантации бора были взяты результаты измерений двух электрических параметров кристаллов тензопреобразователей ИПД и ТКБ (сопротивление моста  $R_M$  и напряжение моста  $U_M$ ) для восьми технологических партий, относящихся к четырем типам тензопреобразователей (см. таблицу). Партии И1 разделены интервалами времени в несколько месяцев. Технологический процесс оценивается по коэффициенту настроенности следующим образом:

- хорошая настройка (при  $K_H \leq 0,1$ );
- удовлетворительная настройка (при  $K_H = 0,11 \div 0,25$ );
- неудовлетворительная настройка (при  $K_H > 0,25$ ).

Результаты расчета показывают, что коэффициент настроенности технологического процесса ионной имплантации бора кристаллов тензопреобразователей ИПД и ТКБ обычно не превышает 0,1,

Результаты расчета коэффициента настроенности  $K_H$  технологического процесса ионной имплантации бора

Тип кристалла, номер партии	Число кристаллов	Среднее арифметическое $\bar{x}$		Середина поля допуска $x_\Delta$		Коэффициент вариации $V, \%$		Коэффициент настроенности $K_H$	
		$R_M, \text{кОм}$	$U_M, \text{В}$	$R_M, \text{кОм}$	$U_M, \text{В}$	$R_M, \text{кОм}$	$U_M, \text{В}$	$R_M, \text{кОм}$	$U_M, \text{В}$
И1, 52	5768	2,45	2,70	2,50	2,70	1,96	1,72	-0,05	0
И1, 66	7828	2,54	2,68	2,50	2,70	1,81	1,12	0,04	-0,05
И1, 73	6180	2,60	2,66	2,50	2,70	2,24	1,87	0,10	-0,10
И1, 86	7210	2,52	2,68	2,50	2,70	1,78	1,58	0,02	-0,05
И1, 95	7210	2,48	2,67	2,50	2,70	2,89	1,11	-0,02	-0,08
И4, 01	3776	4,19	2,58	4,00	2,65	1,50	1,35	0,11	-0,23
И9, 18	7888	4,02	2,65	4,00	2,70	4,13	2,33	0,01	-0,13
Т6, 17	2640	10,53	2,78	10,50	2,75	1,67	0,79	0,01	0,08

т. е. процессы имеют хорошие и воспроизводимые во времени оценки настроенности.

Коэффициент усиления  $n-p-n$ -транзистора в кристаллах тензопреобразователей должен иметь значение от 80 до 180. Для этого надо получать поверхностное сопротивление  $n^+$ -слоя  $R_s^{n+}$  с отклонением не более  $\pm 6\%$  от заданного значения. При постоянной дозе ионной имплантации фосфора коэффициент усиления транзистора довольно часто выходил за допустимые границы. При низком коэффициенте усиления  $\beta = 40 \div 60$  для его подгонки обычно проводился дополнительный отжиг в азоте при  $950^\circ\text{C}$ . Однако в случае отжига более 40 мин среднее напряжение моста снижалось. В результате в этих партиях имел место значительный брак кристаллов по этому параметру. В случае дополнительного отжига наблюдалось также ухудшение характеристик тензомодулей при их термоиспытаниях.

Получение заданного коэффициента усиления транзистора достигается достаточно надежно путем систематической коррекции дозы ионной имплантации фосфора. Коррекцию осуществляет технолог, ведущий партию, перед каждым процессом исходя из прогноза показателя легирования  $B^*$  на предстоящий процесс и задаваемого поверхностного сопротивления  $n^+$ -слоя  $D = B^*/R_s^{n+}$ . Поверхностное сопротивление  $n^+$ -слоя задается пропорционально поверхностному сопротивлению  $p$ -слоя после формирования базы. Для прогнозирования показателя легирования процесса ионной имплантации фосфора было использовано два метода прогноза: метод скользящего среднего и метод экспоненциального сглаживания [6].

Сглаживание временного ряда **методом скользящего среднего** проводилось по 10 предшествующим процессам. Все 10 членов ряда учитываются с одинаковым весовым коэффициентом 0,1:

$$y_{t+1}^* = \frac{y_t + y_{t-1} + \dots + y_{t-m+1}}{m} \text{ при } m = 10.$$

В **методе экспоненциального сглаживания** весовые коэффициенты предыдущих наблюдаемых значений увеличиваются по мере приближения к последним (по времени) данным. Для расчета прогноза методом экспоненциального сглаживания используют рекуррентную формулу

$$y_{t+1}^* = \alpha y_t + (1 - \alpha) y_t^*,$$

где  $\alpha \in (0, 1)$  — константа сглаживания, равная 0,4. Константа сглаживания выбрана равной 0,4, чтобы глубина учета на 0,99 составляла 10 процессов. Таким образом, при одной и той же

глубине учета различие между методами скользящего среднего и экспоненциального сглаживания заключалось в весовых коэффициентах, с которыми значения членов ряда входят в прогнозируемую величину. Точность прогноза  $\delta$  определялась при доверительной вероятности 0,95. Она составила  $\pm 10,3\%$  для метода скользящего среднего и  $\pm 9,1\%$  для метода экспоненциального сглаживания.

Основным препятствием построения хороших прогнозов являются внезапные сильные изменения показателя в виде ступени или импульса. Ни один метод прогнозирования временного ряда не в состоянии их предвидеть. Поэтому в момент такого изменения ошибка прогноза оказывается очень большой. После импульсного возмущения в течение нескольких последующих шагов прогноз является искаженным. Следовательно, для корректного сравнения различных методов прогноза и повышения их точности необходимо дополнить метод прогноза алгоритмом выявления изменений показателя в виде ступени и импульса и исключить влияние импульса на результаты последующих прогнозов, а ошибки прогноза в момент таких изменений показателя не учитывать при расчете средней квадратической ошибки прогноза. Сказанное иллюстрирует рис. 5, на котором изображен временной ряд показателя легирования для 65 процессов ионной имплантации фосфора при изготовлении кристаллов тензопреобразователей. На рис. 5 виден тренд показателя легирования и возмущения.

После введения алгоритма фильтрации точность прогноза улучшилась и составила  $\pm 7,9\%$  и  $\pm 5,2\%$  соответственно для метода скользящего среднего и метода экспоненциального сглаживания.

Изложенные приемы позволяют достаточно надежно получать заданные электрические параметры кристаллов интегральных тензопреобразователей. После доработки алгоритма выделения и отсеивания выбросов в серии процессов легирования фосфором и оптимизации прогнозной модели по минимуму средней квадратической ошибки предполагается разработать соответствующую компьютерную программу для ее использования при производстве кристаллов в качестве "советчика ведущего технолога" в режиме реального времени.

В течение 2006 г. в опытном производстве НПК

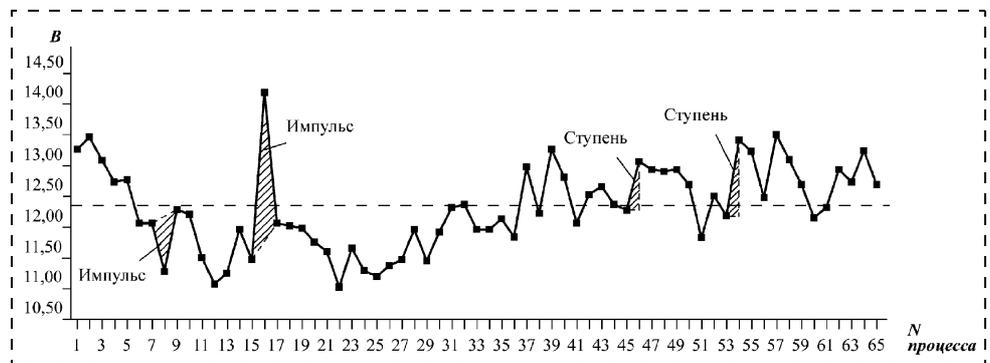


Рис. 5. Временной ряд показателя легирования  $B = R_s D$  для 65 процессов ионной имплантации фосфора при изготовлении кремниевых тензопреобразователей

ТЦ были изготовлены экспериментальные партии нескольких новых кристаллов интегральных тензопреобразователей, которые затем прошли исследования метрологических характеристик в составе тензомодулей. После доработки конструктивно-технологических решений в 2007 г. предполагается провести освоение выпуска следующих кристаллов тензопреобразователей:

- малогабаритные кристаллы ИПД-10 размером  $2,5 \times 2,5$  мм на абсолютные номинальные давления 0,1 МПа и более в двух конструктивных вариантах: с плоской мембраной и с мембраной, имеющей жесткий центр, заглубленный относительно обратной стороны кристалла, что позволяет в обоих случаях использовать метод анодной посадки для соединения кремниевой и стеклянной пластин. Число кристаллов на пластине диаметром 100 мм увеличится в 3,2 и 2,5 раза по сравнению с ИПД-1 и ИПД-2 соответственно; тем самым будут созданы условия для значительного снижения себестоимости и цены на кристаллы тензопреобразователей давления;
- кристаллы с жестким центром ИПД-9.1 размером  $4 \times 4$  мм на номинальные давления от 2,5 до 25 МПа, обеспечивающие более высокие метрологические характеристики по сравнению с кристаллом ИПД-2;
- кристаллы с жестким центром ИПД-5 размером  $6,2 \times 6,2$  мм с повышенной чувствительностью, что позволит изготавливать тензомодули на низкие номинальные давления: 6,3; 4,0; 2,5 кПа.

\* \* \*

В заключение следует отметить, что регулярный выпуск кристаллов интегральных преобразователей позволяет поддерживать в опытном производстве технологические процессы и оборудование в отлаженном рабочем режиме. Тем самым обеспечиваются благоприятные условия для изготовления специализированных заказных КМОП-микросхем и различных экспериментальных партий в рамках ведущихся разработок.

#### Список литературы

1. **Зимин В. Н., Чаплыгин Ю. А., Шабратов Д. В., Шелепин Н. А.** Интегральные преобразователи давления на нормальный ряд от 0,04 до 30 МПа // Измерительная техника. 1994. № 2. С. 35.
2. **Шелепин Н. А.** Кремниевые преобразователи физических величин и компоненты датчиков. Датчики и микросистемы на их основе // Микросистемная техника. 2002. № 2. С. 2—10.
3. **Новые** виды продукции ЗАО "ОРЛЭКС" // Датчики и системы. 2006. № 6.
4. **Пшеников В. В.** Похороны российского автопрома отложены // Методы менеджмента качества. 2005. № 5. С. 55—59.
5. **Балахонова И. В., Волчков С. А.** Точно вовремя для России через консигнацию // Методы менеджмента качества. 2005. № 2. С. 24—29.
6. **Колемаев В. А.** и др. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высшая школа, 1991. 400 с.

УДК 621.382

**В. В. Амеличев**, канд. техн. наук,  
**А. И. Галушков**, канд. техн. наук,  
**В. В. Дягилев**, \***С. И. Касаткин**, д-р техн. наук,  
\***А. М. Муравьев**, канд. техн. наук, **В. В. Лопатин**,  
**А. А. Резнев**, д-р техн. наук,  
**А. Н. Сауров**, д-р техн. наук, проф.,  
**В. С. Суханов**,  
НПК "Технологический центр" МИЭТ,  
\*Институт проблем управления РАН

## МИКРОЭЛЕКТРОННАЯ МАГНИТОРЕЗИСТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

*Рассмотрено состояние дел в мире с разработкой и возможностями микроэлектронной магниторезистивной технологии изготовления нанозадающих элементов и устройств на их основе. Прогресс в этой области определяется успехами в субмикронной технологии и результатами фундаментальных исследований в области магнитных явлений и физики твердого тела. Представлены результаты разработки магниторезистивной технологии в НПК "Технологический центр" МИЭТ с участием Института проблем управления РАН, включая создание комплекса контрольно-измерительной аппаратуры, проектирование, изготовление и исследование магниторезистивных нанозадающих элементов на основе многослойных металлических наноструктур. Обсуждены перспективы микроэлектронной магниторезистивной технологии.*

### Введение

Разработка многослойных магниторезистивных (МР) нанозадающих элементов на основе тонкослойных металлических наноструктур и приборов на их основе — одно из наиболее бурно развиваемых в мире наукоемких направлений магнитной микро- и микроэлектроники. Рынок магнитных нанозадающих элементов является одним из наиболее интенсивно растущих. Данное направление включает: запоминающие устройства с произвольной выборкой (ЗУПВ) на основе запоминающих элементов (ЗЭ) и логических нанозадающих элементов (ЛЭ), датчики магнитного поля и тока, головки считывания, гальванические развязки, спиновые транзисторы. МР нанозадающие элементы обладают всеми достоинствами магнитных элементов: энергонезависимостью, неограниченным числом циклов перезаписи для ЗЭ, широким температурным диапазоном, радиационной стойкостью и работоспособностью при субмикронных размерах [1].

МР эффект заключается в изменении электрического сопротивления материала под влиянием внешнего магнитного поля. Одна из разновидностей МР эффекта — анизотропный МР (АМР) эффект — проявляется в зависимости значения сопротивления ферромагнитной пленки от угла ме-

жду вектором ее намагниченности и направлением тока через нее. Направление же вектора намагниченности пленки определяется, в том числе, и направлением внешнего магнитного поля. Значения коэффициента АМР эффекта для пленок пермаллоя  $Ni_{81}Fe_{19}$  при комнатной температуре составляют 1,5...2,0 %, для пленок FeNiCo — до 2,5 %.

В последние годы открыто несколько типов гигантского МР (ГМР) эффекта, многократно превышающих АМР эффект, что открывает для применения МР нанозаполнителей на их основе принципиально новые возможности. Наибольший практический интерес представляют две разновидности ГМР эффекта: спин-вентильный МР (СВМР) и спин-туннельный МР (СТМР) эффекты, так как необходимые для их проявления значения магнитных полей достаточно малы. Коэффициент СВМР эффекта достигает десятков процентов, а для СТМР эффекта уже получены значения до нескольких сотен процентов.

Основная часть СВМР наноструктуры состоит из следующих слоев:  $M_1/НМ/M_2/ФС$ . В такой наноструктуре основными составляющими являются два ферромагнитных слоя  $M_1$  и  $M_2$ , изготовленные из сплавов Co, Ni и Fe и разделенные прослойкой немагнитного металла (НМ) — Cu, Ag, Au или других. В качестве фиксирующего слоя (ФС), создающего обменное взаимодействие с ближайшим ферромагнитным слоем для его фиксации, обычно используются пленки FeMn, FeIr или NiO. В наноструктуре, приведенной выше, используются два пермаллоевых слоя с различными (благодаря действию ФС) полями перемагничивания.

Основная часть СТМР наноструктуры имеет следующий вид:  $M_1/D/M_2/ФС$ , где D — разделительный диэлектрический слой. Обычно в качестве магнитных слоев используют пермаллой, например, CoFe, FeNiCo и др., а в качестве диэлектрика —  $Al_2O_3$  и MgO.

СТМР эффект заключается в том, что, как и при СВМР эффекте, сопротивление наноструктуры зависит от угла между векторами намагниченности соседних магнитных пленок и характеризуется подобной зависимостью изменения сопротивления от углов поворота векторов намагниченности.

Использование многослойных наноструктур приводит к многократному уменьшению гистерезиса и увеличению устойчивости магнитного состояния, что, в свою очередь, позволяет перейти к субмикронным размерам элементов, а применение групповых методов обработки микроэлектронной планарной технологии к совместимости с полупроводниковой технологией изготовления интегральных схем.

Улучшение характеристик и расширение функциональных возможностей МР нанозаполнителей, связанные с развитием субмикронной технологии и применением новых физических эффектов, в первую очередь, в области магнитных явлений и физики твердого тела, приводят к усилению внима-

ния в мире к разработке этого направления нанозаполнителей микроэлектроники. С учетом всего сказанного и того факта, что МР нанозаполнители относятся к устройствам двойного назначения, актуальность развития этого направления в России не подлежит никакому сомнению.

### Состояние дел в мире: МР нанозаполнители

**МР датчики.** АМР датчики. В настоящее время в АМР датчиках применяются FeNi (пермаллоевые) и FeNiCo МР полоски. В АМР датчиках используются как однослойные, так и многослойные наноструктуры. Принципы их действия, организация и конструкции различаются. Каждый вариант имеет свои достоинства и недостатки. Среди изготовителей однослойных МР датчиков наиболее известны такие фирмы, как *Honeywell*, *Phillips*, *Zetex*, *HL-Planartechnik* [2].

**СВМР датчики.** Разработка и исследование СВМР головок считывания и датчиков магнитного поля — одно из наиболее активно развивающихся направлений в магнитной микроэлектронике. Объясняется это тем, что их применение позволяет резко увеличить плотность считываемой с магнитных носителей информации благодаря большому значению коэффициента СВМР эффекта и малым размерам нанозаполнителей.

К настоящему времени основные задачи получения нанозаполнителей на СВМР наноструктурах решены, и внимание направлено на улучшение их стабильности, уменьшение шумов и т. п. Нам известны две фирмы, выпускающие СВМР датчики, — *Non-volatile Electronics (NVE)* в США с коэффициентом МР эффекта около 7,5 % и *Siemens (ФРГ)* — 4,0 % [1].

**СТМР датчики.** К настоящему времени нам известна одна фирма в мире, выпускающая СТМР датчики, — *Micro Magnetics* [3], хотя ввиду их несомненной перспективности исследования ведутся очень интенсивно в ряде других фирм. Фирмой *Micro Magnetics* выпускается несколько видов СТМР датчиков с коэффициентом МР эффекта 25 %.

**Гальванические развязки.** Новый подход к созданию развязок нашла фирма *NVE*, которая разработала и выпускает целый спектр устройств. СВМР развязка может быть интегрирована в одном чипе с кремниевыми схемами в одноканальном или многоканальном исполнении.

**ЗУПВ.** Энергонезависимое ЗУПВ емкостью 4 Мбит на основе СТМР ЗЭ было разработано и производится фирмой *Motorola* (США) с 2003 г. В настоящее время подобные ЗУПВ выпускают еще несколько фирм. Фирмой *Freescale Semiconductor* предлагается 4 Мбит ЗУПВ MR2A16A со следующими параметрами: напряжение питания 3,3 В, температурный диапазон (0...70) °С, время цикла 35 нс, срок хранения данных не менее 10 лет. Фирмами *IBM* (США), *NEC* (Корея), *Toshiba* (Япония) продемонстрировано спин-туннельное МР ЗУПВ 16 Мбит со скоростью передачи данных 200 Мбайт/с.

## Исследование микроэлектронной магниторезистивной технологии

В НПК "Технологический центр" МИЭТ с участием Института проблем управления РАН в течение ряда лет ведутся работы по освоению МР технологии и разработке преобразователей и датчиков магнитного поля на основе МР нанозаэментов.

### Теоретические исследования

*Метод анализа работоспособности МР нанозаэментов.* Для ускорения разработки многослойных МР нанозаэментов по причине их новизны и большого объема работ целесообразно использовать теоретические методы исследования работоспособности этих нанозаэментов. Их наличие дает возможность оценить не только потенциальную работоспособность нанозаэментов, но и влияние технологических факторов, в первую очередь, разброса магнитных, топологических и электрических параметров, провести предварительную оптимизацию МР наноструктур и конструкций, выявить новые функциональные возможности.

Экспериментальное исследование МР нанозаэментов основано на наборе методов измерения магнитных параметров тонких пленок, базирующихся на ряде физических эффектов, и общепринятых методов измерений характеристик нанозаэментов с учетом особенностей МР эффекта.

Анализ характеристик МР нанозаэментов проводится в два этапа. Сначала на основе микромагнитной теории определяются зависимости направлений векторов намагниченности магнитных пленок от внешних и внутренних магнитных полей. Затем на основе результатов первого этапа и конкретных способов управления МР нанозаэлемента определяются характеристики нанозаэментов, проводятся их анализ и оптимизация.

В качестве модели распределения векторов намагниченности ферромагнитных пленок для упрощения вычислений и быстроты оценки результатов принимается их однородное распределение по всему объему пленки. В качестве исходных данных задаются значения величин управляющих полей и параметры пленок из реально достижимого диапазона значений. Затем, исходя из условия минимума энергии МР полоски с конкретными размерами из двух ферромагнитных пленок, находится решение системы из двух уравнений. Решением являются значения углов векторов намагниченности.

*Проектирование МР датчиков.* В ходе выполнения ряда исследовательских работ были предложены патентно чистые конструкции однослойных и многослойных АМР датчиков магнитного поля и тока с четной и нечетной вольт-эрстедными характеристиками (ВЭХ) и с новыми принципами действия. Датчики представляют собой мостовую схему, каждое плечо которой составлено из МР полосок, соединенных последовательно низкорези-

стивными немагнитными перемычками. Сверху, над изолирующими слоями, сформированы один или два планарных проводника. Вид ВЭХ определяется конструкцией МР полосок в мостовой схеме и проводников управления [1].

### Разработка специального контрольно-измерительного оборудования

Для разработки и освоения технологического процесса изготовления МР нанозаэментов имеющийся в НПК "Технологический центр" МИЭТ комплекс контрольно-измерительного оборудования был дополнен разработанным в ИПУ РАН стендом, обеспечивающим оперативный неразрушающий контроль на двух ключевых стадиях технологического процесса изготовления МР нанозаэментов: а) магнитных параметров ферромагнитных пленок и многослойных тонкопленочных наноструктур (толщины  $d_M$ , коэрцитивной силы  $H_c$ , поля анизотропии  $H_k$ ) после напыления; б) ВЭХ, представляющей собой зависимость  $U_{\text{вых}}(H)$  изготовленных МР датчиков магнитного поля, с последующим определением по ней рабочего диапазона по магнитному полю, крутизны характеристики преобразования магнитного поля ( $H$ ) в напряжение ( $U_{\text{вых}}$ ).

Для исследований сверхтонких магнитных пленок, имеющих характерные толщины до 5 нм, в том числе применяемых для создания нанозаэментов, использующих СВМР и СТМР эффекты, появилась необходимость в измерительных приборах с существенно повышенными чувствительностью и помехоустойчивостью. Последнее особенно важно для применения в условиях технологического участка со сложной электромагнитной обстановкой. В России подобные измерительные приборы не выпускаются, а зарубежные, например SHB109 фирмы *SHB Instruments* [4], в силу различных причин, в первую очередь, экономических, для отечественных исследователей малодоступны.

Измерение толщины магнитной пленки на разработанном стенде основано на свойстве пропорциональной (при определенных условиях) связи между толщиной магнитной пленки и значением магнитного потока [5, 6]. Условия пропорциональности выполняются при соблюдении неизменности состава магнитной пленки, площади охватываемой процессом измерения поверхности магнитной пленки и технологии ее нанесения, а также в ограничении пределов изменения толщины ферромагнитной пленки ввиду появления перпендикулярной составляющей вектора намагниченности пленки. Преодолеть указанные ограничения позволяет использование сменных эталонных образцов пленок. В этом случае измерение толщины магнитной пленки сводится к измерению изменения магнитного потока при ее перемагничивании.

Другими важнейшими параметрами магнитных пленок, подлежащими контролю при их изготовлении, являются коэрцитивная сила и поле магнитной анизотропии. Коэрцитивная сила  $H_c$  определяется как значение напряженности  $H_{упр}$  приложенного в направлении оси легкого намагничивания (ОЛН) управляющего поля, соответствующее раскрытию петли гистерезиса на 50 %. Для измерения  $H_k$  образец помещается в область действия двух взаимно перпендикулярных магнитных полей — переменного ( $H_{\sim}$ ) и постоянного ( $H_{\pm}$ ), причем ОЛН пленки располагается под углом  $45^\circ$  к направлениям полей. Фиксируется значение поля  $H_{\pm}$ , при котором отсутствует изменение намагниченности пленки под действием переменного поля. Значение  $H_k$  определяется по формуле  $H_k = 2H_{\pm}$ .

Определение параметров МР датчика выполняется по его характеристике  $U_{вых} = f(H)$ , для получения изображения которой на экране осциллографа МР датчик помещается в переменное магнитное поле. Стенд в этом случае выполняет функцию характериографа.

Диапазон изменения перемещающего магнитного поля с частотой 50 Гц при использовании разработанного усилителя мощности составляет до 2400 А/м.

#### **Отработка микроэлектронной МР технологии создания серии АМР интегральных преобразователей магнитного поля**

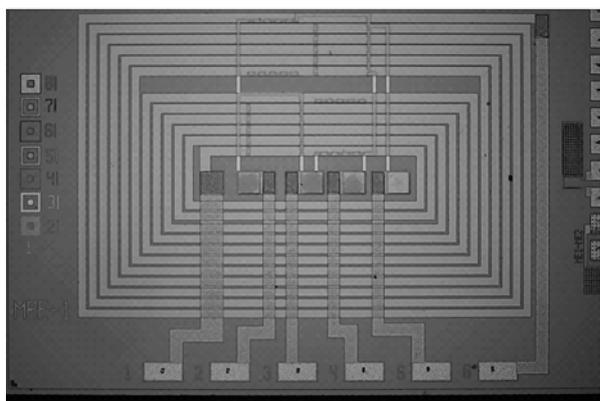
В результате проведенных работ был отработан технологический процесс изготовления разработанных однослойных и многослойных АМР преобразователей магнитного поля и тока с четной и нечетной ВЭХ. В первую очередь это относится к изготовлению многослойных Ti—FeNiCo(FeNi)—

Ti—FeNiCo(FeNi)—Ti наноструктур с требуемыми магнитными и электрическими параметрами и формированию МР полосок. Исследование АМР преобразователей показало их работоспособность и соответствие характеристик этих преобразователей характеристикам выпускаемых в мире однослойных АМР датчиков с полюсами Барбера.

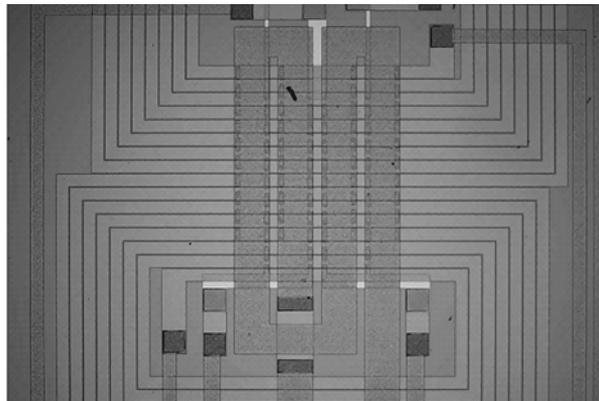
Потребность в приборах, использующих преобразователи магнитного поля на основе магниторезистивного эффекта, способствовала разработке нового конструктивно-технологического базиса для микроэлектронного производства серии интегральных преобразователей магнитного поля (ИПМП) [7]. В совершенно новой микроэлектронной технологии изготовления тонкопленочных ИПМП ключевым процессом является напыление на кремниевую подложку тонкослойных магниторезистивных структур. Для этого в НПК "Технологический центр" МИЭТ были проведены необходимые мероприятия по модернизации соответствующего оборудования, разработаны технологические процессы формирования многослойных АМР структур на основе методов электронно-лучевого испарения магнитных и немагнитных материалов и процессы формирования низкотемпературных диэлектрических слоев, а также методы контроля их параметров и характеристик.

Для снижения гистерезиса и напряжения смещения нуля ИПМП разработаны конструктивно-технологические методы создания на основе многоуровневой металлизации планарных функционально-интегрированных систем подмагничивания (см. рисунок).

Габаритные размеры кристаллов серии ИПМП составляют менее  $5,5 \times 5,5$  мм, а число выводов составляет от 6 до 8 в зависимости от назначения и области применения ИПМП. ИПМП имеют ти-



а)



б)

**Вид в плане кристаллов ИПМП на основе тонкослойных АМР структур и планарных функционально-интегрированных систем подмагничивания:**

а — с четной функцией преобразования; б — с нечетной функцией преобразования

пичные значения абсолютной чувствительности — от 0,2 до 0,8 мВ/Э при питании магниторезистивного моста 1 В.

Конструктивно-технологические модификации ИПМП с нечетной ВЭХ рассчитаны на функционирование в различных линейных диапазонах магнитного поля:  $\pm 2$  Э,  $\pm 6$  Э,  $\pm 10$  Э. Характерные значения верхней границы линейного диапазона функционирования ИПМП с четной ВЭХ составляют около 20...30 Э.

На основе разработанных ИПМП возможно создание бесконтактных интегрированных преобразователей тока с типичными значениями чувствительности по току 20...30 мВ/А при питании магниторезистивного моста 1 В.

Совместно с ИПУ РАН, ФИАН и ИРЭ РАН начаты работы по исследованию возможности создания СТМР нанозаполнителей на основе наноструктур  $Ti-FeNi-Al_2O_3-Co-Ti$  и  $Ti-FeNi-Al_2O_3-FeNi-FeMn-Ti$ . В результате были получены тестовые СТМР переходы, показавшие наличие МР эффекта.

## Заключение

Фундаментальные исследования в области магнетизма и стремительное развитие технологии привели к появлению микроэлектронной МР технологии, позволяющей создавать магнитные нанозаполнители на новых принципах действия и имеющих высокие технические характеристики. В НПК "Технологический центр" МИЭТ отработаны основы микроэлектронной МР технологии, позволяющие освоить производство АМР нанозаполнителей, а также в перспективе интегрировать на одном кристалле АМР нанозаполнители со схемами усиления и преобразования сигнала, выполненными как по КМОП, так и по биполярной технологии ИС.

Разработанные ИПМП благодаря миниатюрности исполнения, улучшенным эксплуатационными и метрологическим характеристикам, расширенным функциональным возможностям могут широко применяться для создания на их основе сканеров магнитного поля для дефектоскопов, бесконтактных датчиков числа оборотов для двигателей и систем электронного зажигания автомобилей, бесконтактных датчиков тока для устройств управления электродвигателями и контуров регулирования

автоматики. Аналогичным образом они могут использоваться для регистрации механического перемещения магнита в датчиках положения и бесконтактных переключателях.

Перспективными областями использования разработанных ИПМП являются созданные на их основе компактные электронные компасы и измерительные узлы для беспроводных телефонных аппаратов и бытовой электроники, бортовых навигационных приборов транспортных средств, приборов для ориентирования антенн, измерения и анализа магнитных полей.

Перспективы микроэлектронной МР технологии в России однозначно связаны с освоением производства магнитных нанозаполнителей на основе ГМР эффекта, и в этом направлении научно-исследовательские работы в НПК "Технологический центр" МИЭТ уже ведутся. Другое направление МР технологии — это нанозаполнители и спиновые транзисторы на основе магнитополупроводниковых наноструктур. Проведенные нами исследования показали наличие взаимодействия между магнитным и полупроводниковым слоями, что позволяет разработать новые типы нанозаполнителей. Еще одно направление — разработка СВЧ магнитных пленок и преобразователей магнитного поля на их основе. В настоящее время получены экспериментальные образцы магнитных пленок, близких по своему составу и характеристикам для их использования в качестве основы при создании МР наноструктур с верхним рабочим диапазоном частот 8—10 ГГц.

## Список литературы

1. Касаткин С. И., Васильева Н. П., Муравьев А. М. Спинтронные магниторезистивные элементы и приборы на их основе. М.: Электронинформ. 2005. 168 с.
2. Касаткин С. И., Муравьев А. М. Тонкопленочные магниторезистивные датчики // Электронные компоненты. 2003. № 3. С. 1—4.
3. <http://www.micromagnetics.com>
4. Материалы фирмы SHV Instruments (США) (<http://www.shvinst.com>). 2005 г.
5. Муравьев А. М., Касаткин С. И. Установка для измерения коэрцитивной силы магнитных лент // Заводская лаборатория. 1995. № 10. С. 23—27.
6. Муравьев А. М., Касаткин С. И., Попадинец Ф. Ф. Установка для измерения параметров тонких ферромагнитных пленок // Заводская лаборатория. 2001. № 7. С. 23—26.
7. Амеличев В. В., Галушков А. И., Резнев А. А., Сауров А. Н. Состояние и перспективы разработки интегральных преобразователей магнитного поля // Сб. докл. Международной научно-технической конференции "Датчики и системы — 2005". Пенза, 2005. С. 68—71.

УДК 621.365.61

**В. В. Амеличев**, канд. техн. наук,  
**В. Д. Вернер**, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
**А. В. Ильков**,  
 НПК "Технологический центр" МИЭТ

## МЭМС-МИКРОФОН. ВЫБОР МАТЕРИАЛОВ, КОНСТРУКЦИЙ И ТЕХНОЛОГИИ\*.

### II. Влияние полости под диафрагмой на характеристики микрофона

*В дополнение к анализу методов выбора упругого элемента и технологии его изготовления, рассмотренных в части I работы, изучено влияние размеров поддиафрагменного воздушного зазора и перфорации нижней пластины микрофона на его динамические характеристики. Ограничение частоты колебаний диафрагмы со значением порядка нескольких десятков килогерц при достаточной большой доле общей площади перфорации позволяет не учитывать эффекты сжимаемости воздуха в камере микрофона. Общий расчет микрофона как электроакустического преобразователя обычно проводится методом электромеханических аналогий. Состав и форма эквивалентной цепи могут меняться в зависимости от конструкции микрофона. Даны предложения по выбору последовательности этапов проектирования и разработки МЭМС-микрофонов.*

Прослойка воздуха между планарными структурами, совершающими относительное движение, влияет на динамические характеристики системы, вызывая появление дополнительных составляющих упругости и демпфирования. Для МЭМС-электростатического микрофона это прослойка между электродами. Обычно один из электродов (диафрагма) подвижен. Нижний электрод, в большинстве случаев, неподвижен, т. е. существенно более жесткий. Возможны конструкции, когда происходит движение обоих электродов. Обычно влияние прослойки воздуха учитывают при моделировании системы с сосредоточенными параметрами методами электрических аналогов. Эти аналогии могут быть электроакустическими или электромеханическими. Электроакустические аналогии удобны при анализе чисто акустических систем. При комбинации из акустических и механических систем удобнее пользоваться электромеханическими аналогами. В этом случае предварительно акустические элементы должны быть преобразованы в механические (табл. 1—3).

\*Часть I опубликована в № 2, 2007 г.

Существуют библиотечные модели электроакустических систем, что облегчает предварительный анализ [1, 2]. Например, для модели слоя воздуха между двумя параллельными дисками площадью  $S$  механическая податливость  $C_m = \frac{1}{G_{mb}} = \frac{v}{\rho C_0^2 S^2}$ ,

Таблица 1

Электромеханические аналогии

Механическая система	Электрическая система
Сила $F$	Напряжение $U$
Скорость $v$	Ток $I$
Смещение $X$	Количество электричества $q$
$F = m \cdot \frac{dv}{dt}$	$U_L = L \cdot \frac{dI}{dt}$
Масса — $m$	Индуктивность — $L$
Сила упругости $F_y = X/C_m$	$U_C = g/C$
Податливость $C_m$	Емкость $C$
Жесткость $G_m = 1/C_m$	$U_R = IR$
Сила сопротивления $F_r = r_m v$	Активное сопротивление $R$
Коэффициент демпфирования $r_m$	Полное электрическое сопротивление $z = U/I$
Полное механическое сопротивление $z_m = F/v$	Энергия магнитного поля
Кинетическая энергия $T = mv^2/2$	$W_m = LI^2/2$
Потенциальная энергия $\Pi = C_m F^2/2$	$W_e = CU^2/2$

Таблица 2

Электроакустические аналогии

Акустическая система	Электрическая система
Давление $P$	Напряжение $U$
Скорость колебаний $v$	Плотность тока $i$
Объемная скорость $U_a$	Сила тока $I$
Акустическое сопротивление $r_a$	Сопротивление $R$
Акустическая податливость $C_a$	Электрическая емкость $C$
Акустическая масса $m_a$	Индуктивность $L$

Таблица 3

Акустомеханические аналогии

Акустическая система	Механическая система
Амплитуда объемной скорости $U_a$ $U_a = v \cdot S$	Амплитуда колебательной скорости $v$
Акустическая масса $m_a$ $m_a = m/S^2 = \rho l/S$	Механическая масса $m$
Акустическая податливость $C_a$ $C_a = C_m S^2 = \frac{v}{\rho C_0^2}$	Механическая податливость $C_m$
Акустический импеданс $z_a$ $z_a = \frac{P}{U_a} = \frac{z_m}{S^2}$	Механический импеданс $z_m$
Акустическое сопротивление $r_a$ $r_a = r_m/S^2$ $r_a = 8\eta l/\pi/S^2$	Механическое сопротивление $r_m$

где  $C_0$  — скорость звука,  $\rho$  — плотность воздуха. Сравним жесткость воздуха  $G_{mb}$  в зазоре высотой  $d$  с жесткостью квадратной пластины диафрагмы

микрофона толщиной  $h$ . Для воздуха  $G_{mb} = \frac{\rho C_0 A^2}{d}$ , где  $A$  — сторона квадратной диафрагмы. Для пластины  $G_{\Pi} = \frac{8\pi^4 D}{A^2} = \frac{2}{3}\pi^4 \frac{Eh^3}{(1-\nu^2)A^2}$ , где  $E$  — модуль Юнга;  $\nu$  — коэффициент Пуассона,

$$\frac{G_{mb}}{G_{\Pi}} = \frac{3\rho_b C_0^2 (1-\nu^2) A^4}{2\pi^4 E h^3 d}. \quad (1)$$

Для пластины из кремния  $\frac{G_{mb}}{G_{\Pi}} \cong 1,1 \cdot 10^{-8} \frac{A^4}{G_{\Pi} h^3 d}$ .

При  $A = 2$  мм,  $h = 5$  мкм и  $d = 5$  мкм  $\frac{G_{mb}}{G_{\Pi}} \cong \cong 28 \cdot 10^3$ .

Таким образом, жесткость замкнутого воздушного зазора существенно больше жесткости пластины, т. е. микрофон без отверстия в дне нижней пластины работать не будет. Мембрана и трубка с потерями в широкой трубе, соединенные в узел, могут рассматриваться как упрощенная модель микрофона с отверстием в нижней пластине. В этом случае для мембраны  $C_a = C_m S^2$  или  $C_a = \frac{S^2}{G_{\Pi}}$ ,  $\omega_0 =$

$$= \sqrt{\frac{1}{m_a C_a}} \text{ или } f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{G_{\Pi}}{m_a}}, \text{ где}$$

$$m_a = \rho_b \left[ \frac{l}{S_0} + \frac{1 - 1,47(d_0/D) + 0,47(d_0/D)^3}{d_0} \right].$$

Здесь  $l$  — длина трубки;  $S_0$  — площадь ее поперечного сечения;  $d_0$  — диаметр трубки;  $D$  — диаметр трубы.

Будем считать, что  $l$  равна толщине нижней пластины и  $l = 10h$ , где  $h$  — толщина диафрагмы и  $D^2 \approx A^2$ . При условии, что  $S_0 \approx 0,5A^2$

$$m_a = S_b \frac{10h}{A^2} \left( 2,55 + 0,26 \frac{A}{h} \right).$$

Пусть  $A = 2$  мм,  $h = 5$  мкм,  $A/h = 400$  и  $10h/A^2 = 12,5 \text{ м}^{-1}$ , тогда  $m_a = 162\rho_b = 194,25 \text{ кг/м}^4$  и  $f_0 \approx \approx 400$  кГц. Таким образом, собственная частота такой системы гораздо выше собственной частоты диафрагмы, которая при заданных размерах лежит в области нескольких килогерц. Акустический импеданс такой системы

$$\hat{Z} = r_a + j\omega m_a + \frac{1}{j\omega C_a} \quad (2)$$

полностью совпадает с импедансом резонатора Гемгольца, для которого

$$Z_0 = \sqrt{r_a^2 + \left( \omega m_a - \frac{1}{\omega C_a} \right)^2}. \quad (3)$$

При низких частотах данную модель можно рассматривать как резонатор Гемгольца, в котором в качестве жесткости действует мембрана, и, считая воздух внутри полости несжимаемым, предположить, что сила давления от мембраны воздействует на массу в трубке  $m = \rho_b S_0 l$ . Коэффициент демпфирования  $r_a$  принимаем равным [1]

$$r_a = 8\eta l / S_0, \quad (4)$$

где  $\eta$  — коэффициент вязкости для воздуха.

Модели вязкого течения среды через отверстия для учета демпфирования достаточно часто используются в моделях МЭМС. Например, в работе [3] рассмотрено демпфирование колебаний диафрагмы датчика за счет перетекания жидкости через демпфирующие отверстия. В этом случае абсо-

лютный коэффициент демпфирования  $k_d = \frac{F_{\text{тр}}}{v} = 4\pi\eta S / S_0 n$ , где  $F_{\text{тр}}$  — сила вязкого трения;  $v$  — скорость истечения;  $n$  — число отверстий площадью  $S_0$ ;  $S$  — площадь сечения камеры под диафрагмой.

Таким образом, методы классической акустики могут быть использованы в отдельных случаях для оценок порядка значений параметров моделей МЭМС-микрофонов. Но специфика конструкции МЭМС-приборов, а именно, их размеры в микрометровом диапазоне, должна учитываться при моделировании. В классической акустике обычно не рассматривают тонкий слой воздуха около колеблющейся поверхности. Толщина этого пограничного слоя  $h = \sqrt{2\eta/\omega\rho}$ , и для 1 кГц он равен 0,07 мм или 70 мкм [4]. Однако для МЭМС-конструкций это очень большое значение. Первоначально малые зазоры были рассмотрены в теории гидродинамической смазки. В этом случае контактирующие поверхности могли иметь шероховатость, но они сплошные. Учет влияния перфорации пластин стал существенным именно для анализа поведения МЭМС-конструкций. Вклад перфорации в динамические характеристики зависит от ее параметров: диаметра отверстий, толщины пластины, расположения отверстий и их шага на пластине. Косвенно это определяет и общую долю площади перфорации по отношению к площади поверхности пластины. Таким образом, для МЭМС-приборов важными являются малые зазоры между элементами и наличие перфорации поверхности отдельных элементов.

Рассмотрим, как эти принципы учитывались в конкретных исследованиях конструкций МЭМС-микрофонов. Ограничимся при этом только емкостными микрофонами. Исторически МЭМС-емкостные микрофоны появились как замена более традиционных для миниатюрных микрофонов — электретных микрофонов. Их отличие заключается

в наличии собственного источника ЭДС в электретном микрофоне.

Первоначально были разработаны двухкристалльные микрофоны. В этом случае межэлектродное расстояние определялось высотой спейсера между двумя лицевыми поверхностями соединенных кристаллов. По такой схеме был изготовлен электретный микрофон, описанный в работе [5]. В ней была рассмотрена история разработок электретных МЭМС-микрофонов. Отмечалось, что на момент начала работ в области электретных МЭМС-микрофонов стандартная чувствительность обычных электретных микрофонов была на уровне 5...20 мВ/Па. Первые электретные МЭМС-микрофоны достаточно быстро прошли путь от 0,2 до 25 мВ/Па для динамического диапазона 30...110 дБ в полосе пропускания до 10 кГц. Первоначально в качестве электрета использовали  $\text{SiO}_2$ . Существенно лучшие результаты были достигнуты при использовании тефлона [5].

Была разработана двухкристалльная кремниевая технология изготовления микрофона на базе Si(100). На первый кристалл методом LPCVD наносился слой нитрида кремния толщиной 0,5 мкм. Затем формировался контактный слой толщиной 1000 Å (100 нм) из Cr/Au. С обратной стороны кремний вытравливался до пленки нитрида кремния с образованием нижней стороны мембраны размером 8 × 8 мм. На лицевую сторону затем наносился тефлон (AF1601S). На лицевую сторону второго кристалла наносились слои нитрида кремния, затем электродный слой Cr/Au той же толщины. Нижняя часть кристалла протравливалась до образования кремниевой мембраны толщиной 20 мкм размером 8 × 8 мм. С лицевой части этой заготовки затем формировалась матрица 160 × 160 отверстий диаметром 30 мкм и шагом 50 мкм. Общая площадь перфорации составила 28 % от неподвижной пластины. На лицевую сторону кристалла наносился спейсер из фоторезиста в виде рамки высотой 4,5 мкм и размером 8,3 × 8,3 мм. Таким образом была создана конструкция из двух мембран с электродами на расстоянии 4,5 мкм друг от друга. Конструкция корпусировалась в металлический корпус с окном 5 × 5 мм для уменьшения паразитной емкости. С учетом перекрытия электродов отношение площади электродов к площади мембраны равно 0,273, что достаточно близко к оценочному значению 0,2 в работе [6].

В рассмотренной конструкции диафрагма является мембраной с натяжением 150 МПа. Резонансная частота, оцененная по формуле  $f_{11} = (\sigma_n/2a^2\rho)^{0,5} = 19,4 \text{ кГц}$  ( $\rho = 3100 \text{ кг/м}^3$ ,  $a = 8 \text{ мм}$ ), экспериментально полученные значения меньше (17 кГц), что можно объяснить наличием дополнительной массы пленки тефлона. Полученная в результате расчета хорошая чувствительность 50 мВ/Па была подтверждена в эксперименте — 45 мВ/Па.

Ценность работы [5] для анализа заключается в полноте информации: конструкции ЧЭ, технологических параметров, размеров корпуса, состава электрической цепи, условий испытаний и т. д.

Сами авторы отмечают, что их теоретическая оценка чувствительности (50 мВ/Па) завышена по отношению к экспериментальному результату вследствие отсутствия учета эффекта воздушной прослойки и сложной структуры сечения мембраны.

С появлением поверхностной микрообработки стало возможным формирование структуры микрофона на одном кристалле. При этом в качестве перфорации чаще всего используются технологические отверстия для вытравливания жертвенного слоя. Возможны два варианта. В первом варианте диафрагменная часть формируется так же, как в двухкристалльной технологии. На поверхности создается структура перфорированной пластины. Межэлектродный зазор определяется толщиной жертвенного слоя. Такую конструкцию имеют микрофоны фирмы *Knowles Acoustic* [7]. Фирма *Siemens* использовала в своих первых проектах [8] поликремневую диафрагму, созданную методом поверхностной обработки. Перфорация для травления жертвенного слоя проводилась через предварительно вытравленную объемную полость на нижней части кристалла, так как в работе [8] использовался пьезорезистивный ЧЭ и не было нужды в создании второго электрода. Интересным экспериментальным результатом работы [8] было определение частоты собственных колебаний не только диафрагмы, но и перфорированной платы. Для нее частоты лежали в диапазоне 100 кГц. Толщина мембраны 800 нм, радиус мембраны изменялся от 250 до 550 мкм. Авторы считали, что мембрана растянута внутренними напряжениями, а перфорированная пластина не напряжена. Если использовать формулы расчета частоты, приведенные в работе [9], то значение внутренних напряжений в мембране должно быть порядка 60 МПа, а толщина перфорированной пластины — больше 13 мкм.

В части I нашей работы [9] был проанализирован ЧЭ, созданный на базе многослойной металлизации КМОП-структуры [10]. В этом случае каналы воздушной перфорации были созданы в виде матрицы (3 × 3) отверстий со стороной около 100 мкм. Таким образом, их общая площадь составляла  $5 \cdot 10^4 \dots 10^5 \text{ мкм}^2$ . При площади диафрагмы (1,4 × 1,4) мм<sup>2</sup> площадь перфорации была менее 5 % площади нижней пластины.

На поверхности упругой пластины из КМОП-металлизации вытравливались отверстия в форме меандра. Через них травился поддиафрагменный объем до смыкания с каналами перфорации. После этого отверстия в диафрагме запечатывались полимером. Глубина  $h_a$  полости была очень большой — 88 мкм, поэтому было использовано для возбуждения колебаний напряжение до 67 В. Для оценки взаимодействия диафрагмы с воздушной средой

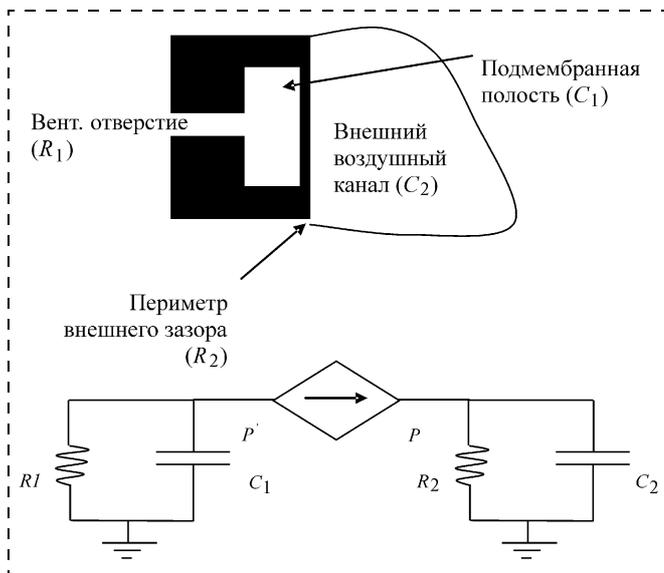


Рис. 1. Схема микрофона и эквивалентная электрическая модель [10]

была использована модель, приведенная на рис. 1, и проводились расчеты по формулам

$$R_1 = \frac{\rho C_0}{A} \quad \text{и} \quad C_1 = \frac{V_1}{\rho C_0^2} \quad \text{и т. д.}$$

Как сама модель, так и значение параметра  $R$ , отличаются от общепринятых для микрофонов и не отражают адекватно процессы, происходящие в поддиафрагменном объеме. Моделирование проводилось при следующих значениях параметров:  $A^2 = 1442 \text{ мкм}^2$ ; глубина полости  $d = 88 \text{ мкм}$ ; толщина мембраны  $h_a = 4 \text{ мкм}$ ; объем внешнего канала  $40 \text{ мм}^3$ ; для одного отверстия размером  $100 \times 100 \text{ мкм}$ ; при напряжении  $10,1 \text{ В}$ . При таком малом сечении отверстия возможно существенное влияние упругости воздушной прослойки под диафрагмой, как для модели мембраны и трубки с потерями в широкой трубе, рассмотренной выше. Действительно, был выявлен резонансный пик при частоте около  $50 \text{ кГц}$ . Более существенным результатом моделирования было обнаружение факта двукратного увеличения чувствительности при увеличении площади отверстия до  $(500 \times 500) \text{ мкм}^2$  (т. е. в 25 раз).

Работа [10] была пионерской. Конструкция через 10 лет была доработана в серийных микрофонах фирмой *Akustica* [11], эти микрофоны имеют превосходную частотную характеристику в диапазоне  $100 \text{ Гц} \dots 10 \text{ кГц}$ .

Весьма впечатляющим является технология создания конструкции микрофона градиента давления, осуществленная методом поверхностной обработки в работе [12]. В этом случае кроме мембраны рассматриваются две платы, расположенные выше или ниже мембраны. Размеры мембран —  $2 \times 2 \text{ мм}$  и  $1 \times 1 \text{ мм}$ . Для уменьшения паразитных емкостей обе платы были подвешены на растяжках (восемь

с каждой стороны). Для мембраны  $2 \times 2 \text{ мм}$  чувствительность при  $1 \text{ кГц}$  равна  $13 \text{ мВ/Па}$ , при  $U_0 = 1,5 \text{ В}$  с динамическим диапазоном от 3 до  $20 \text{ кГц}$ . При этом вклад в уровень сигнала нижней платы был в 2 раза меньше, чем верхней, вследствие больших паразитных емкостей. Было подсчитано, что для верхней платы паразитная емкость составляет 17 %, а для нижней платы — 63 %.

Были промоделированы шумы с учетом паразитных емкостей и распределенной резистивности электродов, которые достаточно хорошо совпали с измеренным значением ( $22,5 \text{ дБ}$ ). Динамический диапазон микрофона — до  $118 \text{ дБ}$ . Важнейшим преимуществом дифференциального микрофона является его практическая независимость от воздушной прослойки между электродами. Добавим, что необходимое превышение жесткости неподвижных пластин относительно жесткости диафрагмы в данной работе достигалось не только увеличением их толщины, но и более чем пятикратным увеличением уровня внутренних напряжений.

При измерениях на подложке для микрофонов задняя камера была бесконечной. Был сделан пересчет с объемом камеры около  $3,4 \text{ мм}^3$ . При этом уровень шумов возрастал до  $24 \text{ дБ}$  (стандартный уровень чувствительности). Таким образом, реально динамический диапазон составил  $96 \text{ дБ}$ .

Высокий уровень сложности конструкции вряд ли применим для массового производства. Но интересен сам подход к регулированию упругих свойств элементов конструкции микрофона, которая практически состоит из трех мембран разной толщины и с разным уровнем внутренних напряжений. Вероятно, предполагалось, что внешнее давление звуковой волны вызывает смещение только мембраны. Вместе с тем, наличие перфорации и подвесок у плат может изменить их деформационные характеристики.

К разряду специфических конструкций МЭМС-микрофонов следует отнести микрофоны с гофрированной диафрагмой. Этот способ управления динамическими свойствами диафрагмы давно используется в электроакустических приборах. Для МЭМС-микрофонов это дает возможность дополнительно управлять внутренними напряжениями и начальной деформацией. Для этих целей в работе [10] была использована медровая структура для диафрагмы на основе слоев металлизации КМОП-структуры. Компенсирующая роль гофрирования используется и для снижения влияния напряжений при посадке в корпус. Первоначально с помощью изотропного реактивно-ионного травления была воспроизведена классическая структура концентрических гофров [13]. В работе [14] был использован менее дорогой метод анизотропного травления для создания гофрированных структур на квадратной мембране. В этом случае кроме концентрических прямоугольных канавок с V-образным дном были созданы центросимметричные структуры из прямых канавок разной длины. При этом не возникает проблем защиты углов на  $90^\circ$ -ном пово-

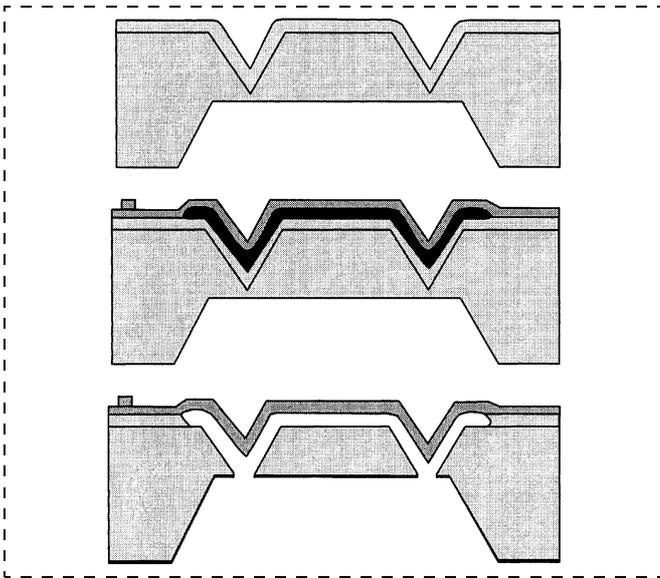


Рис. 2. Процесс создания гофрированной структуры диафрагмы

роте сплошных канавок. Было исследовано влияние параметров гофрирования на частоту первого резонанса  $f_r$  и механическую чувствительность  $S_m = W_0/P$ , где  $W_0$  — смещение центра диафрагмы;  $P$  — давление. Представление о форме сечения диафрагмы дает рис. 2, и глубина канавок гофра определяется толщиной нижней пластины с перфорацией.

Максимальная  $S_m$  достигалась при глубине перфорации  $H = 5$  мкм. Для обеспечения жесткости нижней пластины была выбрана  $H = 10$  мкм при толщине мембраны 1,2 мкм. При диапазоне внутренних напряжений 10...100 МПа удалось получить  $S_m$  больше, чем у гладкой ненапряженной диафрагмы. Разработанная технология гофрирования позволила авторам работы [15] создать конструкцию диафрагмы в форме квадратного корытца. При этом донная часть со стороной  $2a$  оказывается подвешенной на стенках. В отличие от методов оценки  $W_0$  (смещения центра гладкой квадратной диафрагмы), рассмотренных в работе [9], в данном случае были использованы другие формулы:

$$\frac{Pa^4}{Eh^4} = \frac{4,2W_0}{(1-\nu^2)h} + \frac{1,58}{(1-\nu^2)} \left(\frac{W_0}{h}\right)^3; \quad (5)$$

$$\frac{Pa^4}{Eh^4} = \frac{\pi\sigma a^2}{Eh^2} \left(\frac{W_0}{h}\right). \quad (6)$$

Первая формула получена в работе [16] для ненапряженной диафрагмы, формула (6) использовалась в работе [17] для напряженных диафрагм. Авторы работы [15] считали, что при  $W_0 < 0,3h$  можно использовать суперпозицию этих формул в следующей форме:

$$S_m = \frac{W_0}{P} = \frac{a^2}{\pi h[4,2Eh^2/\pi a^2(1-\nu^2) + \sigma]}. \quad (7)$$

Для предложенной формы диафрагмы формула (7) была изменена путем введения коэффициентов перед слагаемыми в квадратных скобках  $C_1(H)$  и  $C_2(H)$ . Они были вычислены для диафрагмы с  $2a = 1$  мм и  $h = 1,2$  мкм методом конечных элементов при  $H$  (глубина "корытца") в интервале 50...400 мкм. Моделирование значений  $S_m$ ,  $f_r$ ,  $W_0$  проводилось в зависимости от  $H$  при  $P = 0$  (начальная деформация) и  $\sigma$  в интервале 70...150 МПа. Было найдено, что наибольшие значения  $S_m$  и наименьшие для начальной деформации соответствуют наибольшим  $H$ . Для экспериментов была выбрана глубина деформации  $H \leq 250$  мкм, при этом  $f_r \geq 20$  кГц. Значение поддиафрагменного зазора было выбрано равным  $d = 2,6$  мкм. Параметры перфорации не указаны, но линия графика частотной зависимости чувствительности практически параллельна оси частот в диапазоне 0,1...10 кГц.

Главное достоинство гофрированных диафрагм состоит в уменьшении зависимости их параметров от внутренних напряжений, т. е. в меньшей чувствительности к разбросам значений параметров технологических процессов. Кардинальным решением проблемы является отказ от использования диафрагм, полученных методом поверхностной обработки.

Влияние воздушной прослойки в конструкциях МЭМС обсуждалось в большинстве работ по этому направлению. Один из последних обзоров литературы приведен в работе [18]. При наличии перфорации неподвижной пластины она определяет степень влияния воздушного зазора на характеристики микрофона. При анализе должны учитываться процессы истечения газа через отверстия и их влияние на затухание колебаний диафрагмы и упругие свойства прослойки воздуха. Обычно в модели течения газа через перфорацию принимается предположение о несжимаемости воздуха и поэтому учитывается только ее влияние на силы трения (затухания). В моделях, учитывающих сжимаемость воздуха, чаще всего не рассматривают инерциальные эффекты, но при этом определяют изменения сил упругости и затухания под влиянием перфорации. На выбор модели определяющее влияние оказывают значения воздушного зазора  $h_0$  и частоты колебаний подвижного элемента  $\omega$ .

В случае больших  $h_0$  и малых  $\omega$  обычно пренебрегают сжимаемостью воздуха, и он рассматривается как несжимаемая среда. В этом случае допустима оценка акустической податливости (величины, обратной жесткости) с помощью модели резонатора Гемгольца. При высоких частотах и малых зазорах (обычных для большинства конструкций МЭМС) сжимаемость может превалировать над эффектами истечения газа (жидкости). В работе [18] аналитическим методом был рассмотрен именно этот случай. Для оценки точности аналитического расчета проводилось численное моделирование. В аналитических расчетах [18] использовалось уравнение Рейнольдса и, следовательно, инерциальные эффекты не учитывались. Объектами, подпадающими под эту модель, могли бы быть МЭМС

Параметры перфорации для МЭМС-микрофона

Источник	$h_0$ , мкм	$\zeta_0$ , мкм	$l$ , мкм	$d$ , мкм	$\zeta_0/h_0$	$\zeta_0/r_i$	$l/d$	$f$ , кГц
[19]	4	120	13	67,7 (60 × 60)	30	3,54	0,20	20
[20]	3	64	1	45,2 (40 × 40)	21	5,7	0,04	14
[21]	1	125–150	18	85–113 (75 × 75, 100 × 100)	83–100	2,6–3	0,16–0,20	10
[5]	4,5	50	5	30 (160 × 160)	11,1	3,3	0,17	19

с воздушным зазором (0,3...6 мкм) (табл. 4). Это соответствует числам Кнудсена  $K_n$  (т. е. отношению среднего изменяющегося зазора к  $h_0$ ) от 0,01 до 0,1.

В табл. 4  $h_0$  — высота воздушного зазора;  $\zeta_0$  — шаг перфорации;  $l$  — глубина перфорации (толщина перфорированной пластины);  $r_i$  — радиус отверстия;  $d$  — диаметр отверстия;  $f$  — частота колебаний.

Модель справедлива при числах Рейнольдса  $\frac{\rho\omega h_0}{\mu} \ll 1$ . Реально рассмотрены случаи до  $Re = 0,1$ .

В решение вводилась эффективная вязкость  $\mu_{эф} = \frac{\mu}{Q_{pr}}$ , которая выражается через число Кнудсена

$Q_{pr} = 1 + 9,638 K_n^{1,159}$ . В качестве дополнительного

параметра вводится "число сжатия"  $\sigma = \frac{12\mu_{эф}\omega r_0^2}{P_a h_0^2}$ .

В этой формуле  $P_a$  — внешнее давление,  $r_0$  — внешний радиус "ячейки" давления, в центре которой находится перфорационное отверстие с радиусом  $r_i$ . Уравнение Рейнольдса решалось относительно  $\Phi = \frac{\Delta P}{P_a}$ , и определялся суммарный эффект всех (независимых) ячеек давления вокруг отверстий перфорации.

Для гармонического движения диафрагмы определялось значение силы  $F$  в комплексной форме ( $F = F_r + jF_i$ ). Сила  $F$  действует на каждую из ячеек давления;  $F_r$  меняется в фазе со смещением,  $F_i$  — в фазе со скоростью. Они записываются в форме коэффициентов жесткости и демпфирования

$$K = \left\{ \frac{F_r}{\varepsilon_0} \right\} \frac{P_a r_0^2}{h_0} \quad \text{и} \quad C = \left\{ \frac{F_i}{\varepsilon_0} \right\} \frac{P_a r_0^2}{h_0 \omega}.$$

Значения  $F_r$  и  $F_i$  в безразмерной форме приведены на графиках работы [18] и соответственно могут быть использованы при расчетах. Отметим некоторые результаты [18].

1. При любой сетке перфорации относительные значения  $F_r$  и  $F_i$  возрастают при увеличении частоты до 50 кГц.

2. Этот рост тем существеннее, чем больше  $\zeta_0/h_0$ , но при  $\zeta_0/h_0 = 20$  для прямоугольной сетки этот эффект практически отсутствует.

3. Увеличение сил с частотой колебаний наблюдается при росте  $\zeta_0/r_i$ , но при  $\zeta_0/r_i = 4$  этот эффект также практически отсутствует.

4. Эффект влияния сжимаемости воздуха тем больше, чем больше  $\sigma > 2,5$ . Оно пропорционально  $\xi_0^2$ . При малых  $\xi_0$  и низких частотах значения  $\sigma$  гораздо меньше единицы. Например, при частоте 48 кГц,  $\zeta_0 = 20$  мкм,  $h = 1$  мкм и 2 мкм значение  $\sigma$  соответственно равно 0,18 и 0,02. Косвенно это означает, что при доли площади перфорации от площади пластины  $> 0,15$  эффектом сжимаемости воздуха можно пренебречь.

Для микрофонов, как правило,  $f < 20$  кГц, и, следовательно, эффекты сжимаемости могут не учитываться [18], т. е. следует учитывать вклад только сил  $F_i$ . В частности, именно по этой причине в работе [22] решалось уравнение Пуайзеля без учета эффектов сжимаемости воздуха. Для других типов МЭМС, например, ключей или резонаторов, работающих при высоких частотах, эффект сжимаемости воздуха следует учитывать.

Работа [21] представляет интерес как конкретный пример применения метода электромеханических аналогий. Центральным моментом здесь является составление эквивалентной схемы и определение ее компонентов. В конструкции здесь жесткость перфорированной платы соизмерима с жесткостью диафрагмы. По этой причине учитывается суммарное смещение обоих электродов. В результате в эквивалентной схеме появляется параллельная цепь перфорированной платы, в отличие от классической эквивалентной цепи микрофона [9] (рис. 3). Авторы постарались учесть все возможные компоненты импеданса: радиационные и упругие для диафрагмы, движение газа в зазоре между электродами и в отверстиях перфорации. Для каждого из этих компонентов приведены соответствующие формулы (табл. 5). Их корректность нами не анализировалась, но расхождение с другими данными явно существует, например, для

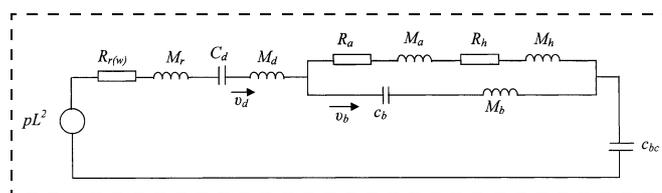


Рис. 3. Механическая эквивалентная схема конденсаторного микрофона [21]

Расчет параметров эквивалентной схемы (составлено по материалам работы [21])

$R$	$M$	Комментарии
$R_r = \frac{0,1886L^6\rho_0\omega}{\pi^3c^2}$	$M_r = \frac{2,67L^3\rho_0}{\pi\sqrt{\pi}}$	$L$ — сторона диафрагмы; $\rho_0$ — плотность воздуха; $\omega$ — частота; $c$ — скорость звука
$C_d = \frac{1}{30\sigma_d h_d}$ $M_d = \rho_d h_d L^2$	$C_b = \frac{1}{30\sigma_b h_b \sqrt{1 - \frac{4a^2}{b^2}}}$ $M_b = \rho_b h_b L^2 \sqrt{1 - \frac{4a^2}{b^2}}$	$\sigma_d$ и $\sigma_b$ — внутренние напряжения в диафрагме и нижней пластине; $h_d$ и $h_b$ — толщина диафрагмы и пластины; $2a$ — сторона отверстия; $b$ — шаг отверстий; $\rho_d$ и $\rho_b$ — плотности для материала диафрагмы и пластины
$R_a = \frac{1,22\eta\pi L^2 b^2}{h_a^3}$ [22]	$M_a = \frac{0,102\rho_0\pi L^2 b^2}{h_a} B$	$\eta$ — динамическая вязкость воздуха; $h_a$ — высота зазора; $B = \frac{1}{4} \ln\left(\frac{0,16b^2}{a^2}\right) - \frac{3}{8} + 3,133\frac{a^2}{b^2} - 4,907\frac{a^4}{b^4}$
$R_h = \frac{12\eta h_b L^2}{b^2}$ [23]	$M_h = \frac{24\rho_0 h_b a^2 L^2}{5b^2}$	$v_d$ и $v_b$ — скорости смещения; $x_d$ и $x_b$ — смещение диафрагмы и платы, $x_d = \frac{v_d}{\omega}$ ; $x_b = \frac{v_b}{\omega}$
$C_{bc} = \frac{V}{\rho_0 c^2 L_4}$ [1]		$V$ — объем камеры; $P$ — внешнее давление

жесткости мембраны, которая обсуждалась в части I нашей работы [9], она отличается на треть. Косвенным образом в приведенных формулах учет числа отверстий задается простым умножением величин, характеризующих потери в одном отверстии на их число. Аналогичным образом это делается и в работе [21]. Но сами результаты их оценки могут различаться в разы, в зависимости от модели течения газа через отверстие. Несмотря на сделанные замечания, следует отметить прекрасную теоретическую зависимость чувствительности от частоты, полученную в работе [21] для диапазона частот 100...10000 Гц.

Пример:  $2a_1 = 75$  мкм,  $2a_2 = 100$  мкм,  $h_d = 0,9$  мкм,  $h_b = 1,5$  мкм; доля общей площади отверстий 36 и 44 %.

В работе [24] исследована модель движения жесткого поршня с отверстиями на упругом подвесе с использованием формул молекулярной физики. При этом было обнаружено появление новой составляющей потерь, связанной с релаксацией давления в камере микрофона, которая дает дополнительный вклад к традиционным потерям, пропорциональным скорости поршня. При низких частотах эти потери растут пропорционально частоте. Соответственно, помимо стандартной формулы частоты собственных колебаний поршня  $\omega_0^2 = G/m$ , по-

является частота  $\omega_g^2 = \frac{aP_0}{h_0m}$ , где  $P_0$  — внешнее давление,  $h_0$  — исходный зазор,  $a$  — площадь поршня. Для поршня с большой перфорацией на частотной зависимости должен быть пик при  $\omega_0$ . Для поршня с малой перфорацией при  $\omega_g^2 = \omega^2$  также возникает

резонансный пик, который при обычных для МЭМС размерах конструкции обычно лежит при частотах  $\omega_g = \omega_0$ . При анализе величины  $f_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}$

в работе рассмотрено два случая:  $f_{01} = \frac{0,766}{D} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho}}$

и  $f_{02} = \frac{1,88h}{D^2} \sqrt{\frac{E}{\rho(1-\nu)^2}}$ , где  $D$  — диаметр поршня,

т. е. используются формулы, приведенные в части I нашей работы для мембраны и пластины [9]. Предлагается использовать среднее квадратичное значение этих величин. Влияние перфорации учтено при условии, что длина отверстия (т. е. толщина нижней пластины)  $l > d$ , т. е. толщины нижней пластины. Поэтому использована формула Пуайзеля и вычислено необходимое число отверстий  $N$ :

$$N = \frac{64\pi\eta f_g}{P_0} \frac{h_0 l}{d^4} D^2. \quad (8)$$

При этом неявно принималось, что  $h_0 \gg d$ . Для случая малых зазоров возможно  $h_0 < d$  (при  $l \gg d$ ). Если учитывать радиальные потоки в зазоре и использовать уравнение Навье—Стокса, то

$$N = \frac{3\pi\eta f_g}{P_0 h_0^2 F}, \quad (9)$$

где  $x$  — функция отношения  $d$  и  $d_{cc}$  — среднего расстояния между отверстиями. Учитывая, что  $N \cong D^2/d_{cc}^2$ , получено равенство

$$\frac{3\pi\eta f_g}{P_0 F} = \left(\frac{h_0}{d_{cc}}\right)^2. \quad (10)$$

Для  $h_0 = 1$  мкм,  $f_g = 1$  МГц,  $d = 5$  мкм значение  $d_{cc} = 24$  мкм. Следует отметить, что для МЭМС-микрофонов  $f_0 \ll f_g$  и введение этой величины следует рассматривать для них только как некий параметр, учитывающий величины  $a$ ,  $h_0$  и  $m = \rho ha$  в формулах при расчете потерь по уравнениям Пуазейля или Навье—Стокса.

Из приведенного анализа следует, что для микрофонов доля перфорации по отношению к площади нижней пластины должна быть по возможности большой (более 20 %). Ограничением может быть необходимая площадь пластины конденсатора, расположенная на той же нижней пластине. Еще раз подчеркнем, что нами рассмотрены предварительные оценки конструкции элементов микрофона при создании прототипа и его исследованиях. Только после этого целесообразно моделировать средствами САПР конкретные элементы конструкции, частотные характеристики, уровень шумов и т. д. При этом важно, чтобы в моделях проектирования не были нарушены условия применимости аналитических зависимостей, на базе которых строится модель. Например, нам известны случаи, когда при моделировании частотной зависимости чувствительности было нарушено сразу два условия для максимального смещения  $W_0 < W_{кр}$  и  $W_0 < 0,1...0,2h$  ( $h$  — толщина пластины). При анализе влияния воздушной прослойки между электродами существенным является корректность модели по отношению к частотному диапазону работы МЭМС-изделия. Следует учитывать также, что для МЭМС корпус часто является не просто элементом закрепления и защиты, но и элементом, влияющим на рабочие характеристики микросистемы. В частности, он может быть дополнительным источником различных паразитных эффектов и механических напряжений.

Электрическая (электронная) составляющая МЭМС-микрофонов, в принципе, не отличается от ее микроаналогов. Конструктивное исполнение в виде интегральных микросхем позволяет использовать их как встроенные элементы конструкции микрофона в гибридном или интегральном варианте. В последнем случае существенное значение имеет совместимость технологий МЭМС и ИС составляющих [25].

В заключение остановимся на нескольких примерах работы фирм, выпускающих МЭМС-микрофоны. Основатель фирмы *Akustica* [11] Кен Габриель предложил в 1997 г. использовать слои металлизации КМОП-структур для создания диафрагм МЭМС-микрофонов. Примером первых работ в этом направлении служит работа [10], достоинства и недостатки которой мы рассматривали в нашей статье. Фирма работает в режиме *fables* (т. е. без собственного производства). В настоящее время она выпускает два типа микрофонов (АКИ-1000 и

АКИ-2000). Гибкость предложенной структуры подтверждена ее изготовлением на девяти различных производствах по различным технологиям (от 0,6 до 0,18 мкм). Близкое расположение МЭМС и ИС структур на кристалле обеспечивает меньшие паразитные емкости и снижает уровень помех различной природы. Наличие матрицы диафрагм позволяет изготовить ненаправленные и направленные микрофоны. Например, в центре кристалла  $2,5 \times 2,5$  мм расположена матрица  $3 \times 3$  диафрагмы, а на периферии располагается ИС-электроника. В результате исследований в университете Карнеги Меллона в течение почти 10 лет (общие затраты около 30 млн долл.) был разработан коммерчески подготовленный продукт. Отметим, что на коммерциализацию МЭМС-экрана фирма *Texas Instruments (Digital high Processor™)* потратила 17 лет и почти 1 млрд долл.

В последних рекламных материалах фирмы *Akustica* сообщается о чипах  $3 \times 3,65 \times 0,5$  мм с матрицей микрофонов  $16 \times 16$ . Они имеют чувствительность 1 В/Па, диапазон 100—1000 Гц, напряжение питания 3 В. Стоимость кристаллов — 1...7 долл./шт. Высокий инновационный потенциал фирмы позволил ей выступить в качестве инициатора создания нового стандартного интерфейса — мобильного промышленного интерфейса (*Mobile Industry Processor Interface — MIPI*), который поддержали 80 лидирующих компаний.

Если фирма *Akustica* известна своим инновационным потенциалом, то фирма *Knowles Acoustics (KA)* в настоящее время является реальным лидером поставок микроминиатюрных микрофонов, прежде всего, для мобильных телефонов. С серии микрофонов *Si Sonic* фирма приступила помимо аналоговых и к выпуску цифровых МЭМС-микрофонов с питанием 1,6...2,9 В в частотном диапазоне 70 Гц...15 кГц. Фирма первоначально производила электронные микрофоны. Переход к емкостным микрофонам позволил уменьшить в 10 раз площадь диафрагмы. Вместе с тем, опыт производства электронных микрофонов фирма использовала и в серии *Si Sonic*. Фирма применяет накачку зарядов на диафрагму, считая, что это уменьшает шумы от источника питания. Заряд на диафрагме, кроме того, препятствует конденсации влаги на ней. Для направленных микрофонов на базе их матриц фирма разработала специальный программный продукт *Intelli Sonic™*. Следует отметить еще одну особенность конструкции *Si Sonic*. Обычно методом поверхностной обработки формируют диафрагму, а тело подложки используют для формирования поддиафрагменного пространства. В конструкции *Si Sonic* формируется перфорированная плата камеры микрофона методом поверхностной обработки. Дополнительно к совершенствованию акустико-механической конструкции МЭМС-микрофонов можно оптимизировать ИС-составляющую микрофона и таким образом повышать характеристики микрофона. В этом направлении работает известный поставщик микрофонов для мобильных теле-

фонов — фирма *Sonion*. Рекламируют самый маленький в мире цифровой микрофон *Digisi Mic* размером  $2,6 \times 1,6$  мм [21].

Таким образом, конструкция МЭМС-микрофона предоставляет широкие возможности оптимизации их параметров по всем трем составляющим электроакустических преобразователей. Выбор акустомеханического преобразователя связан с выбором типа диафрагмы (пластина или мембрана) и, соответственно, с выбором материалов и технологий их обработки. Вариации параметров дополнительно возможны за счет присоединения жесткого центра (прежде всего для пластины) и уровня внутренних напряжений (прежде всего для мембраны). Выбор электромеханического преобразователя в основном связан с необходимым уровнем чувствительности и, прежде всего, определяется выбранным уровнем напряжения источника питания. Для электростатического чувствительного элемента задача сводится к минимизации межэлектродного зазора в пределах, определяемых электростатическим залипанием.

Практически неизбежное обратное механоакустическое преобразование для объема воздуха под диафрагмой зависит от частоты колебаний механического элемента, уже заданного межэлектродного зазора и параметров соединения зазора с внешней средой (т. е. перфорации нижней пластины).

Полученные расчетные значения можно рассматривать как первое приближение. Реально конструкция МЭМС-микрофона всегда связана с паразитными эффектами, ухудшающими характеристики чувствительного элемента микрофона. Дополнительный вклад в эти эффекты вносит корпус микрофона. Реально эффективность конструкции можно оценить только по измерению параметров опытного образца. После этого возможно их улучшение за счет методов моделирования приборно-технологического базиса МЭМС-микрофонов.

Предыдущий анализ показал, что при выборе конструкции МЭМС-микрофонов следует выделить следующие моменты:

1. Выбор типа электромеханического преобразования.
2. Выбор материала диафрагмы и технологии ее изготовления.
3. Выбор формы и геометрических параметров диафрагмы.
4. Определение модели диафрагмы: мембрана или пластина, наличие жесткого центра; оценка частоты собственных колебаний; первичная оценка чувствительности.
5. Выбор зазора между диафрагмой и дном полости микрофона, параметров перфорации. Оценка влияния воздушного слоя под диафрагмой на характеристики акустомеханического преобразователя.
6. Моделирование акустомеханического и механического преобразования с учетом конструктивных особенностей.

7. Выбор электрической схемы преобразования и передачи сигнала в аналоговом или цифровом варианте и конструкции микрофона в корпусе.

В настоящее время имеются сотни работ по МЭМС-приборам с диафрагмой в качестве подвижного элемента, в том числе и микрофонов. В своем анализе мы специально сделали акцент на первоначальные работы в этой области, так как в них более четко видны реалии метода "проб и ошибок" при разработках конструкции. Это позволяет более эффективно выбирать ее элементы при новом проектировании.

#### Список литературы

1. **Лепендин Л. Ф.** Акустика. М.: Высшая школа, 1978.
2. **Акустика:** Справочник / Под ред. М. А. Сапожникова. М.: Радио и связь, 1989.
3. **Распопов В. Я.** Микромеханические приборы. Тула: Изд. ТГУ. 2002.
4. **Скучик Е.** Основы акустики. Т. 1. М.: Мир, 1976.
5. **Hsieh Wen H., Yao Tze-Yung, Tai Yu-Chong.** A high performance MEMS thin-film Teflon electret microphone.
6. **Гринчин В. А., Драгунов В. П.** Физика микросистем. Ч. 1. Новосибирск: Изд. НГТУ, 2004.
7. <http://www.knowledgacoustics.com>
8. **Dehe A., Aigner R., Bever T., Oppermann K.-G., Pettenpaul E., Schmitt S., Timme H.-Y.** // Silicon Micromachined Microphone Chip at Siemens.
9. **Амеличев В. В., Вернер В. Д., Ильков А. В.** МЭМС-микрофон. Выбор материалов, конструкции и технологии // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 2. С. 53—61.
10. **Neumann J. J., Gabriel Jr., Gabriel K. J.** CMOS-MEMS membrane for audiofrequency acoustic actuation.
11. <http://www.akustika.com>
12. **Rombach P., Mullenborm M., Klein U., Rasmussenn K.** The first low, low noise differential silicon microphone, technology development and measurement results // Sensor and Actuators. A95., 2002. P. 196—201.
13. **Scheeper R. P., Olthus W., Bergveld P.** The design, fabrication and testing of corrugatedsilicon nitride diaphragms // J. Microelectrotech. Syst. 1994. N 3. P. 36—42.
14. **Quanbo Zou, Zhenfeng Wang, Rongming Lin, Sung Yi.** A study on corrugated diaphragms for high-sensitivity structures // J. Microtech. Microeng. 1997. N 7. P. 310—315.
15. **Wang W. J., Lin R. M., Ren Y.** Design and fabrication of high sensitive microphone diaphragm using deep corrugation technique // Microsystem technologies. 2004. N 10. P. 143—146.
16. **Chau H. L., Wise K. D.** Sealing limits in batch fabricated silicon pressure sensors // IEEE Trans. Electron Devices. 1987. Ed-34. P. 851.
17. **Jerman J. H.** The fabrication and use of micromachined corrugated silicon diaphragms // Sensor and Actuators. 2001. A21—23. P. 988—992.
18. **Mohite S. S., Kesari H., Souti V. R., Pratap R.** Analytical solutions for the stiffness and damping coefficients squeeze films in MEMS devices with perforated back plated // J. Microtech. Microeng. 2005. N 15. P. 2083—2092.
19. **Hsu P. C., Mastrandelo C. H., Wise K. D.** A high sensitivity polysilicon diaphragm condenser microphone // MEMS Conf. 1998 (Heidelberg, Germany). P. 580—585.
20. **Scheeper R. P., Olthus W., Bergveld P.** Improvement of the performance of microphones with a silicon nitride diaphragm and back plate // Sensor and Actuators A40 (1994). P. 179—186.
21. **Pedersen M., Olthus W., Bergveld P.** A silicon condenser microphone with polyimide diaphragme and back plate // Sensors and Actuators. 1997. A63. P. 97—104.
22. **Škvor Z.** On the acoustical resistance due viscous losses in air gap of electrostatic transducers// Acoustica. 1967. N 19. P. 295—299.
23. **Beranek L. L.** Acoustics. Mc Crow-Hill NY. 1954.
24. **Greywall D. S.** Micromachined optical interference microphone // Sensors and Actuators. 1999. N 75. P. 257—268.
25. **Амеличев В. В., Вернер В. Д., Ильков А. В., Сауров А. Н.** Совместимость технологии микросистемной техники с технологией микроэлектроники // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 11. С. 10—14.
26. <http://www.sonion.com>

**Б. Г. Коноплев**, д-р техн. наук, проф., **Н. К. Приступчик**, Таганрогский государственный радиотехнический университет, г. Таганрог,  
**Е. А. Рындин**, канд. техн. наук, доц., Южный научный центр РАН, г. Ростов-на-Дону

## АВТОЭМИССИОННЫЙ АКСЕЛЕРОМЕТР С ТРЕМЯ ОСЯМИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ

*Рассматриваются конструкция и особенности функционирования автоэмиссионного микромеханического акселерометра с тремя осями чувствительности. Обсуждаются результаты численного моделирования акселерометра и перспективы его использования в интегральных устройствах экстремальной электроники.*

### Введение

Для систем сейсморазведки полезных ископаемых и некоторых других приложений требуются акселерометры, характеризующиеся высокой точностью, чувствительностью, способные работать в экстремальных условиях. Предъявляемым характеристикам удовлетворяют микро- и наноэлектромеханические системы (МЭМС/НЭМС), сочетающие перечисленные выше достоинства с возможностью реализации функционально законченных приборов в микроминиатюрном исполнении [1, 2].

Цель настоящей работы — исследование конструкции и особенностей функционирования автоэмиссионного акселерометра с тремя осями чувствительности.

### Микросистемы регистрации ускорений

Принцип действия микросистемы определяется физическим процессом, положенным в основу преобразования измеряемой величины в электрический сигнал, а также конструкцией функциональных элементов, обеспечивающих заданные характеристики измерительной системы. С этой точки зрения следует различать концепции построения механических функциональных элементов (подвесов, демпферов) и непосредственно преобразователей.

Необходимо отметить все более возрастающий интерес кон-

структоров к применению в своих разработках основных принципов квантовой теории. Известны технические решения, в своей основе опирающиеся на эффект прохождения носителей заряда сквозь потенциальный барьер, разделяющий контактные элементы преобразователя перемещений, — туннельный эффект [3—6].

Благодаря экспоненциальной зависимости туннельного тока от перемещения подвижного чувствительного элемента, эти устройства предоставляют широкие возможности для микроминиатюризации, а нечувствительность к ионизирующим излучениям и воздействию температуры делает этот класс приборов приоритетным для экстремальной электро-

ники. Основной трудностью при разработке таких устройств является исключение из технологического процесса операций микросборки, уменьшающих процент выхода годных изделий, а также поиск решений, позволяющих детектировать составляющие ускорения по трем взаимно перпендикулярным направлениям.

Обеспечение заданного диапазона измерения может быть достигнуто использованием нескольких интегральных микромеханических акселерометров, размещенных на одной подложке, но имеющих различную жесткость подвесов.

Время измерения типовых приборов данного класса определяется механическими характеристиками элементов конструкции и составляет единицы миллисекунд.

Введение в конструкцию калибровочных вспомогательных электродов позволяет осуществить калибровку измерительной системы в процессе эксплуатации.

### Конструкция исследуемого акселерометра

На рис. 1, а—в представлены топология, структура и общий вид разработанного акселерометра, являющегося предметом исследований.

Конструкция содержит подложку, подвес, инерционную мас-

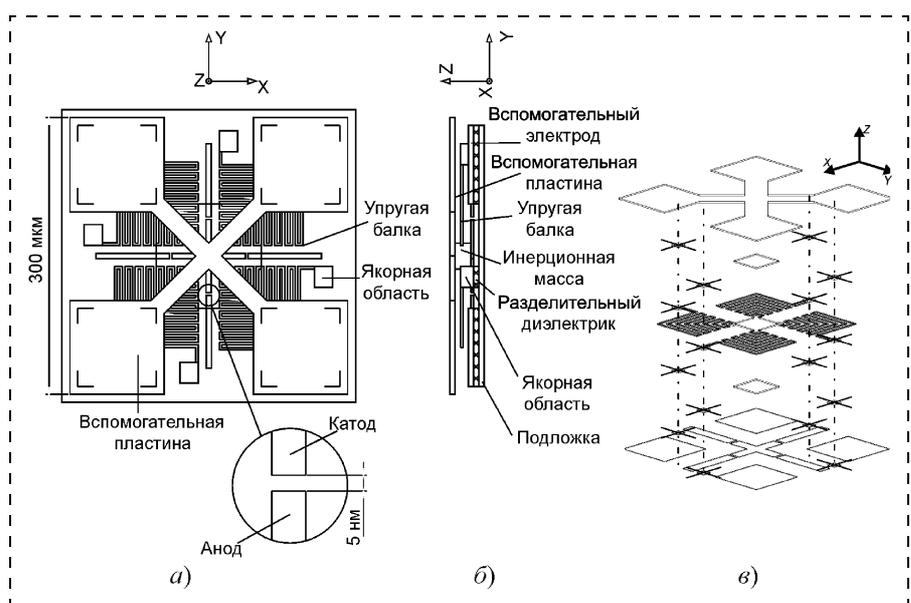


Рис. 1. Топология (а), структура (б) и общий вид (в) микромеханического автоэмиссионного акселерометра

су, четыре подвижных автоэмиссионных электрода (катоды), четыре неподвижных электрода (аноды), четыре электростатических преобразователя, образованных вспомогательными пластинами, жестко закрепленными на инерционной массе, и соответствующими вспомогательными электродами (за счет их взаимного перекрытия). Функции преобразователей перемещения выполняют автоэмиссионные контакты. Подвижные автоэмиссионные катоды соединены между собой и закреплены на нижней части инерционной массы. Области изолирующего диэлектрика исключают возможность протекания токов между электродами по поверхности подложки. Между инерционной массой, упругими балками подвеса, подвижными электродами и подложкой имеются воздушные зазоры, обеспечивающие возможность перемещения инерционной массы вдоль оси  $Z$ , перпендикулярной плоскости подложки.

Технологический маршрут изготовления микромеханического автоэмиссионного акселерометра, предполагающий применение поверхностной микрообработки, определяет концепцию построения преобразователя с горизонтальным расположением электродов. Такой подход обеспечивает возможность перемещения инерционного элемента в трех взаимно перпендикулярных направлениях путем размещения подвеса и преобразователей в различных структурных слоях (см. рис. 1). В первом структурном слое размещены неподвижные и подвижные электроды, полупроводниковые контакты к якорным областям и вспомогательные электроды. Часть диэлектрика, отделяющего первый структурный слой от подложки, расположена непосредственно под электродами, подлежит травлению с целью обеспечения зазора между подложкой и подвижными электродами. Во втором структурном слое размещены соединительные области, обеспечивающие закрепление подвижных электродов и лучей подвеса. В третьем струк-

турном слое формируется подвес, состоящий из центральной площадки и фрагментированных лучей, одними концами жестко закрепленных на соединительных областях. В четвертом структурном слое расположена соединительная область, обеспечивающая закрепление инерционной массы относительно подвеса и необходимый зазор между подвесом и вспомогательными пластинами, размещенными в пятом структурном слое (см. рис. 1, в).

Исследуемая конструкция предполагает обеспечение трех взаимно перпендикулярных осей чувствительности. Жесткость подвеса при работе на изгиб должна обеспечивать достаточное отклонение инерционной массы от положения равновесия при высокой линейности деформации (область действия закона Гука). В этой связи использованы фрагментированные упругие балки с целью уменьшения жесткости подвеса, а также увеличения амплитуды перемещений инерционной массы.

### Принцип измерения ускорения

Активация устройства осуществляется посредством подачи положительного напряжения питания на аноды относительно катодов. Токи автоэмиссии, которые являются выходными сигналами устройства, определяются вероятностью прохождения электронов сквозь потенциальные барьеры, образованные зазорами.

При подаче управляющих напряжений на вспомогательные электроды относительно вспомогательных пластин вследствие сил электростатического взаимодействия между ними в упругих балках возникают моменты сил, инициирующие изменение ориентации нормали к инерционной массе, устраняя возможный первоначальный крен подвижных электродов относительно неподвижных и тем самым осуществляя калибровку устройства. Условием завершения процесса калибровки прибора является равенство токов автоэмиссии во всех контактных группах.

При приложении ускорения в направлении оси  $Z$  инерционная масса с закрепленными на ней подвижными электродами перемещается перпендикулярно плоскости полупроводниковой подложки, инициируя деформацию упругих балок. Автоэмиссионные токи получают равные приращения вследствие одновременного изменения ширины всех воздушных зазоров, характеризуя значенные ускорения. Направление составляющей ускорения, параллельной оси  $Z$ , определяется посредством кратковременного положительного зондирующего импульса, который одновременно подается на вспомогательные электроды и инициирует перемещение инерционной массы под действием электростатических сил между вспомогательными пластинами и вспомогательными электродами, изменяя расстояние между подвижными и соответствующими неподвижными электродами. При этом кратковременное положительное приращение автоэмиссионных токов свидетельствует о направлении составляющей внешнего ускорения, противоположном направлению оси  $Z$ . В случае кратковременного отрицательного приращения автоэмиссионных токов направление рассматриваемой составляющей внешнего ускорения совпадает с направлением оси  $Z$ .

При возникновении ускорения полупроводниковой подложки в направлении осей  $X$  и/или  $Y$  инерционная масса перемещается вдоль рассматриваемых осей, инициируя деформацию упругих балок. Автоэмиссионные токи, протекающие между катодами и анодами, лежащими на рассматриваемых осях, изменяются вследствие одновременного изменения ширины соответствующих зазоров, характеризуя значенные ускорения.

### Методика исследования

Выходная характеристика микроакселерометра (зависимость выходного сигнала, в данном случае автоэмиссионного тока, от приложенного внешнего ускорения) оп-

ределяется по перемещению соответствующих электродов. Конфигурация подвеса предполагает работу его фрагментированных элементов как на изгиб, так и на кручение, что вызывает определенные осложнения при прогнозировании отклика системы. Модель последовательно соединенных упругих балок не может адекватно отображать зависимость перемещения подвижных элементов вследствие усиливающихся эффектов нелинейности при уменьшении поперечных сечений фрагментов с сохранением длин. В этой связи исследовано влияние формы поперечного сечения упругих балок на характеристики прибора методом конечных элементов.

Значительное влияние на характеристики микромеханической системы оказывают вибрационные нагрузки, возникающие в результате внешних воздействий. В этой связи определены 10 собственных частот и форм колебаний в диапазоне от 0 до 1 МГц, что позволяет судить о диапазоне рабочих частот.

Для оценки линейности характеристик акселерометра исследован отклик микромеханической системы на линейно возрастающую нагрузку с варьируемой длительностью воздействия при неизменном максимальном значении ускорения.

Также исследован отклик микросистемы на ступенчато изменяющуюся нагрузку с целью получения сведений о длительности переходных процессов, а следовательно, быстродействия.

В данной работе задачи расчета механических характеристик прибора решены с применением среды моделирования ANSYS.

### Математическое моделирование механических элементов

Сеточная модель акселерометра представлена на рис. 2. Поскольку подвижные электроды (вследствие малой массы) не оказывают существенного влияния на характер движения инерционной массы, они исключены из рассмотрения с целью повыше-

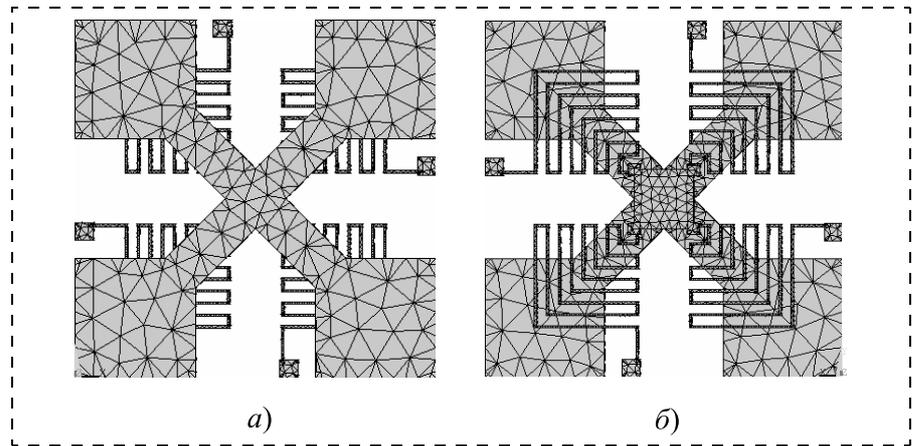


Рис. 2. Сеточная модель акселерометра: а — вид сверху; б — вид снизу

ния производительности вычислительного процесса.

Граничные условия, отвечающие требованиям поставленной физической задачи, сформулированы следующим образом:

- перемещение якорных областей относительно их первоначального расположения запрещено;
- ускорение линейно возрастает вдоль рассматриваемой оси в течение определенного периода времени.

Ниже представлены практически значимые результаты дина-

мического анализа отклика системы на воздействие внешнего ускорения.

Собственные частоты микросистемы (сечение балок  $4 \text{ мкм}^2$ ): наименьшая — 4415,7 Гц; наибольшая — 72192,0 Гц.

Результаты динамического анализа, иллюстрирующие отклик микросистемы на воздействие линейно возрастающего ускорения от 0 до  $5 \text{ м/с}^2$ , представлены на рис. 3.

Проведено также исследование отклика микросистемы на воздействие вдоль оси Z при уменьше-

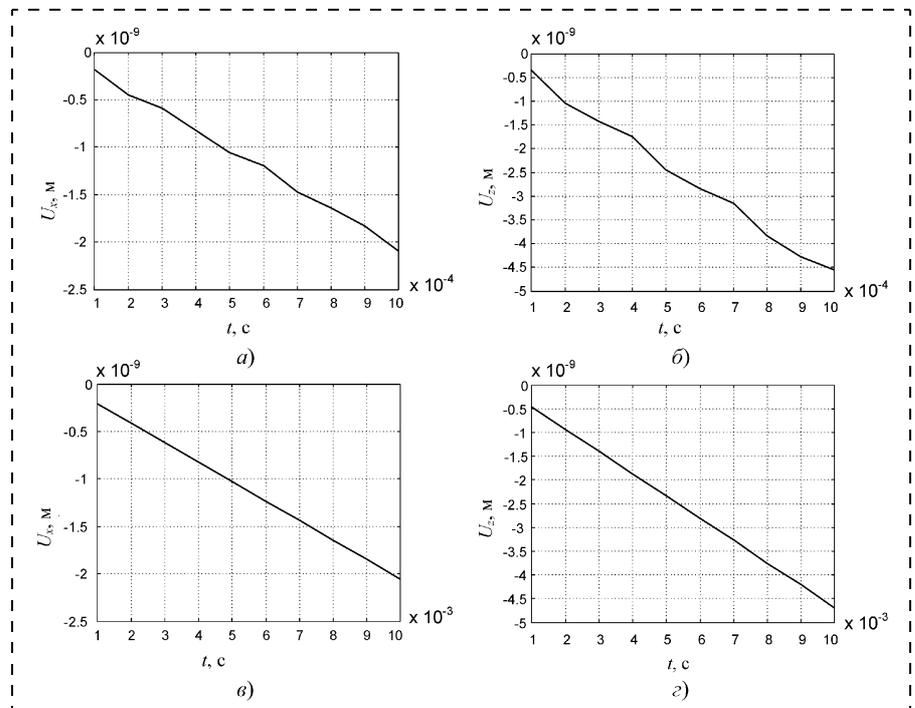
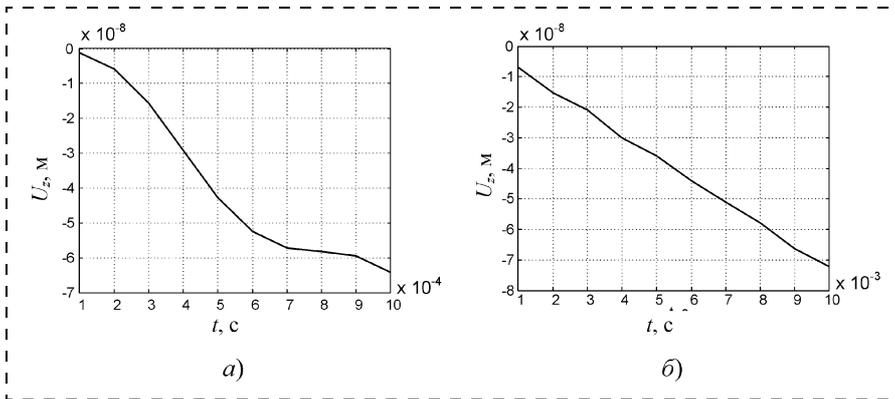


Рис. 3. Отклик на воздействие линейно возрастающего ускорения (сечение балок  $4 \text{ мкм}^2$ ): а и б — по осям X и Z за время нарастания 1 мс; в и г — по осям X и Z за время нарастания 10 мс



**Рис. 4.** Отклик на воздействие линейно возрастающего ускорения по оси  $Z$  (сечение балок  $1 \text{ мкм}^2$ ):

$a$  — в течение 1 мс;  $b$  — в течение 10 мс

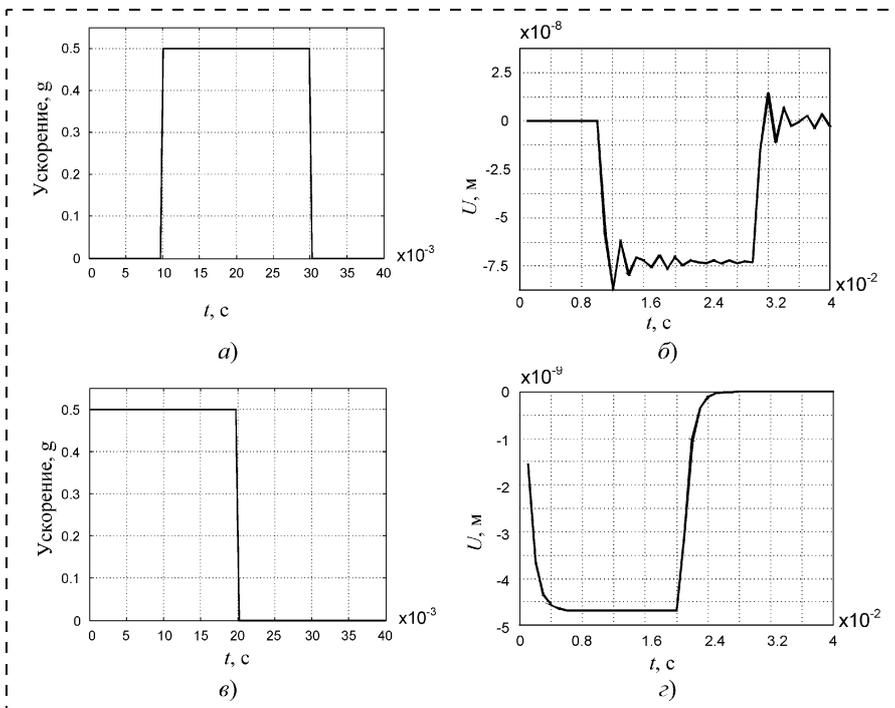
нии сечения в 4 раза. Результаты представлены на рис. 4.

Таким образом, представленные зависимости позволяют сделать вывод о степени влияния переходных процессов в микромеханической системе на линейные выходные характеристики. Чтобы оценить промежуток времени, в течение которого система стабилизируется, исследован отклик на воздействие ступенчатой нагрузки. Результаты моделирования переходных процессов представлены на рис. 5,  $a-g$ .

На рис. 5,  $b$  отчетливо виден переходной процесс. Время уста-

новления системы составляет порядка 20 мс. Необходимо отметить, что последовательные скачки ускорения могут привести к ложным показаниям вследствие накапливающейся погрешности отклонений. Быстродействие системы при сечении балок  $1 \text{ мкм}^2$  ограничено, таким образом, диапазоном рабочих частот  $0-50 \text{ Гц}$ .

На рис. 5,  $г$  видно, что переходной процесс становится аperiодическим, это позволяет сократить время установления системы до 5 мс и менее. Следовательно, быстродействие системы при сечении балок  $4 \text{ мкм}^2$  ограничено



**Рис. 5.** Моделирование переходных процессов:

$a$  и  $b$  — нагрузка и отклик (сечение балок  $1 \text{ мкм}^2$ );  $в$  и  $г$  — нагрузка и отклик (сечение балок  $4 \text{ мкм}^2$ )

максимальной рабочей частотой порядка 200 Гц.

Таким образом, в настоящей работе исследована конструкция микромеханического акселерометра, рассмотрен принцип его функционирования, получены механические характеристики, определяющие область применения таких устройств. С использованием разработанного программного обеспечения рассчитаны значения автоэмиссионных токов и определены средние значения чувствительности по входным осям (представлены в таблице).

#### Средние значения чувствительности

Зазор в автоэмиссионном контакте, нм		5	3
Чувствительность по $X, Y$	Абсолютная, нА/г	78,1	$1,3 \cdot 10^4$
	Относительная, $г^{-1}$	260,3	$4,3 \cdot 10^4$
Чувствительность по $Z$	Абсолютная, нА/г	0,4	62
	Относительная, $г^{-1}$	1,3	206,7

Результаты математического моделирования квантово-механических процессов переноса носителей заряда в автоэмиссионных контактах и построение электрофизических характеристик акселерометров будут приведены в отдельной работе.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 15324).*

#### Список литературы

1. Климов Д. М., Васильев А. А., Лучинин В. В., Мальцев П. П. Перспективы развития микросистемной техники в XXI веке // Микросистемная техника. 1999. № 1. С. 3–6.
2. Мокров Е. А., Папко А. А. Акселерометры НИИ физических измерений — элементы микросистемотехники // Микросистемная техника. 2002. № 1. С. 3–9.
3. Yazdi N., Ayazi F., Najafi K. Micromachined Inertial Sensors // Proceedings of the IEEE. 1998. V. 86. N 8. P. 1640–1659.
4. Rocksadt H. K., Kenny T. W., Reynolds J. K., Kaiser W. J., Gabrielson T. B. A miniature high-sensitivity broad-band accelerometer based on electron tunneling transducers // Sensors and Actuators A. 1994. V. 43. P. 107–114.
5. Фурсей Г. Н., Глазанов Д. В., Баскин Л. М. и др. Свойства нанометровых автоэлектронных эмиттеров // Микроэлектроника. 1997. Т. 26. № 2. С. 89–96.
6. Фурсей Г. Н., Баскин Л. М. Особенности полевой эмиссии полупроводников // Микроэлектроника. 1997. Т. 26. № 2. С. 117–122.

# НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

УДК 534.2

**Д. В. Рошупкин**, д-р физ.-мат. наук,  
**Д. В. Иржак**, канд. физ.-мат. наук,  
Институт проблем технологии микроэлектроники  
и особо чистых материалов РАН, г. Черноголовка,  
Московская область

## ЭЛЕКТРОННО- МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ И РЕНТГЕНОВСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ В ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

*Методы растровой электронной микроскопии, рентгеновской топографии и дифрактометрии являются универсальными методами, позволяющими визуализировать процесс распространения объемных и поверхностных, бегущих и стоячих акустических волн в режиме реального времени. Данные методы позволяют определять амплитуды и длины акустических волн, исследовать дифракционные явления в акустических пучках, измерять углы сноса потока акустической энергии, изучать влияние дефектов кристаллической решетки на процесс распространения акустических волн.*

### Введение

Развитие информационных сетей связано с развитием устройств, позволяющих передавать и обрабатывать информационные потоки в режиме реального времени. Среди них особое место занимают устройства на объемных и поверхностных акустических волнах [1–5]. Информация в данном случае переносится акустической волной, распространяющейся по поверхности или в объеме кристаллов. Одним из принципиальных преимуществ радиоэлектронных устройств на акустических волнах является возможность воздействовать на акустическую волну в любом месте звукопровода, т. е. осуществлять непосредственное воздействие на передаваемый информационный сигнал. Основной проблемой при создании акустоэлектронных устройств является необходимость использования пьезоэлектрических и сегнетоэлектрических кристаллов с высоким совершенством кристаллической структуры, так как наличие в кристаллах дефектов приводит к существенным искажениям акустических волновых полей и потерям акустических сигналов.

Рабочие частоты возбуждения акустических волн лежат в интервале  $f = 10 \text{ кГц} \div 5 \text{ ГГц}$ , что соответствует длинам волн  $\Lambda = 1 \text{ мм} \div 1 \text{ мкм}$ . Следует также отметить, что с ростом информационных потоков рабочие частоты имеют тенденцию к росту, т. е. длины акустических волн постоянно уменьшаются, что приводит к возрастанию плотности потока информации в акустическом тракте. Таким образом, становится весьма актуальным вопрос о методах контроля акустических волновых полей в кристаллах и исследовании влияния дефектов кристаллической структуры на процесс распространения акустических волн в акустоэлектронных устройствах.

Методы исследования распространения акустических волн в кристаллах можно разделить на четыре основные группы: радиоизмерительные, оптические, электронно-микроскопические и рентгеновские. *Радиоизмерительные* методы на основе анализа амплитудно-частотных характеристик акустоэлектронных устройств позволяют получать информацию о входных и выходных параметрах акустоэлектронных устройств (о входном сопротивлении, импедансе, затухании и т. д.), но не позволяют получать информацию о самом процессе распространения акустических волн в кристаллах [1, 4].

*Оптические* методы являются чувствительными к искажениям кристаллической решетки, вызванным распространением акустических волн. В данном случае акустическая волна выступает в качестве ультразвуковой сверхрешетки, и исследования акустических волновых полей можно осуществлять на основе анализа процессов дифракции оптического излучения, что позволяет определять амплитуды и длины акустических волн [2, 3]. Однако оптические методы обладают низким пространственным разрешением, которое непосредственно связано с размерами лазерных пучков и не превышает нескольких микрометров. Также следует отметить, что в последние годы исследования процессов распространения акустических волн проводят с использованием метода атомной силовой микроскопии, которая позволяет получать топографическое изображение акустических волн [6–7]. Метод атомной силовой микроскопии обладает существенным недостатком, связанным с очень маленькой исследуемой площадью, составляющей несколько десятков микрометров.

Для исследования акустических волновых полей в кристаллах целесообразно использовать методы *растровой электронной микроскопии и рентгеновской дифрактометрии и топографии*, которые позволяют визуализировать акустические волны на поверхности и в объеме кристаллов в режиме ре-

ального времени с высоким пространственным разрешением. Эти методы успешно развиваются в Институте проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН (ИПТМ РАН) с середины 80-х годов. В данной статье представлены основные возможности применения рентгеновских и электронно-микроскопических методов для качественного и количественного анализа процесса распространения акустических волн в пьезо- и сегнетоэлектрических кристаллах.

### Визуализация акустических волн в пьезоэлектрических кристаллах методом растровой электронной микроскопии

Впервые возможность визуализации поверхностных и объемных акустических волн в пьезоэлектрических кристаллах методом стробоскопической растровой электронной микроскопии была продемонстрирована в работах [8–13]. Принцип визуализации акустических волн в данных работах основан на принудительном стробировании падающего электронного пучка с частотой возбуждения акустических волн, что позволяет регистрировать промодулированный с данной частотой поток низкоэнергетичных вторичных электронов, эмитированных с поверхности кристалла, в котором распространяется акустическая волна. Следует отметить, что в данном случае для визуализации акустических волн необходимо использовать специальную дорогостоящую высокочастотную технику.

В 80-х годах прошлого века в ИПТМ РАН для визуализации акустических волн в пьезоэлектрических кристаллах был разработан метод *автостробоскопической растровой электронной микроскопии* [14]. Данный метод основан на автостробоскопическом эффекте, возникающем при взаимодействии электромагнитного поля акустического излучателя и пьезоэлектрического поля акустической волны и осуществляющем высокочастотную модуляцию низкоэнергетичных вторичных электронов.

На рис. 1 представлена экспериментальная схема формирования изображения поверхностных акустических волн (ПАВ) в растровом электрон-

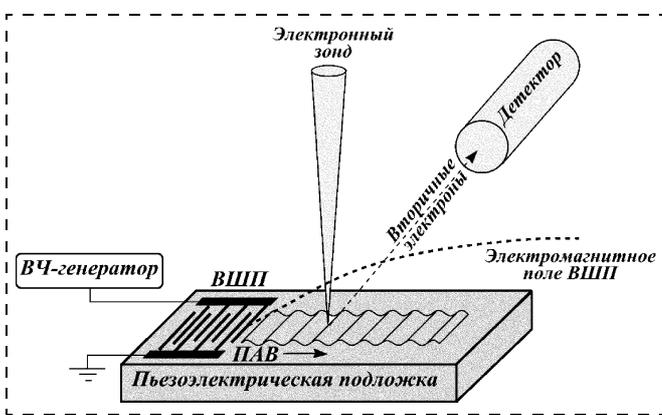


Рис. 1. Схема формирования изображения ПАВ в РЭМ

ном микроскопе (РЭМ). Изображение ПАВ на поверхности пьезо- и сегнетоэлектрических кристаллов в РЭМ формируется под влиянием электромагнитного поля встречно-штыревого преобразователя (ВШП), используемого для возбуждения ПАВ, и пьезоэлектрического потенциала, возникающего при модуляции поверхности кристалла акустической волной. Положительный поверхностный потенциал приводит к уменьшению числа эмитированных с поверхности кристалла низкоэнергетичных вторичных электронов, в то время как отрицательный потенциал приводит к увеличению эмиссии вторичных электронов. Временное стробирование потока низкоэнергетичных вторичных электронов осуществляется электромагнитным полем ВШП, частота которого соответствует частоте возбуждения ПАВ, так как они излучаются одним и тем же источником (ВШП), а длина волны электромагнитного поля в  $10^5$  раз больше длины волны ПАВ. Таким образом, в РЭМ в режиме реального времени формируется стационарное изображение распределения потенциала, создаваемого акустической волной. Данный метод позволяет визуализировать поверхностные и объемные (ОАВ), бегущие и стоячие акустические волны. Единственными недостатками данного метода является то, что процесс распространения акустических волн можно визуализировать только в кристаллах, обладающих пьезоэлектрическим эффектом, и нельзя измерить амплитуду акустических волн.

Экспериментальные исследования процесса распространения ОАВ и ПАВ в пьезоэлектрических кристаллах были выполнены с помощью РЭМ JEOL JSM-840 при ускоряющем напряжении электронов  $E_0 = 1$  кВ и токе электронов  $I_0 = 10$  пА. Использование ускоряющих напряжений более 1 кВ недопустимо, так как это приводит к формированию отрицательного поверхностного заряда, который существенно влияет на коэффициент вторичной электронной эмиссии и нерегулярным образом может отклонять первичный электронный зонд.

**Визуализация объемных акустических волн.** Исследования различных колебательных мод в кристаллах имеют важное значение для научных и технических приложений. ОАВ-резонаторы с различной формой (пластины, диски, камертоны и т. д.) могут работать при различных модах колебаний (изгибных, продольных, поперечных, сдвиговых и т. д.). Моды колебаний определяются размерами резонаторов и отражениями акустических волн, что приводит к возникновению в резонаторе акустических волновых полей со сложной структурой.

На рис. 2 представлены изображения, полученные методом РЭМ при исследовании лепесткового ОАВ-резонатора. Данный резонатор представляет собой диск  $yx1/+50'$ -срез кристалла лангасита  $La_3Ga_5SiO_{14}$ . Два Ag-электрода были напылены с двух сторон на кристалл лангасита. Фундаментальные сдвиговые колебания резонатора при резонансной частоте возбуждения  $f_0 = 22,0247$  МГц

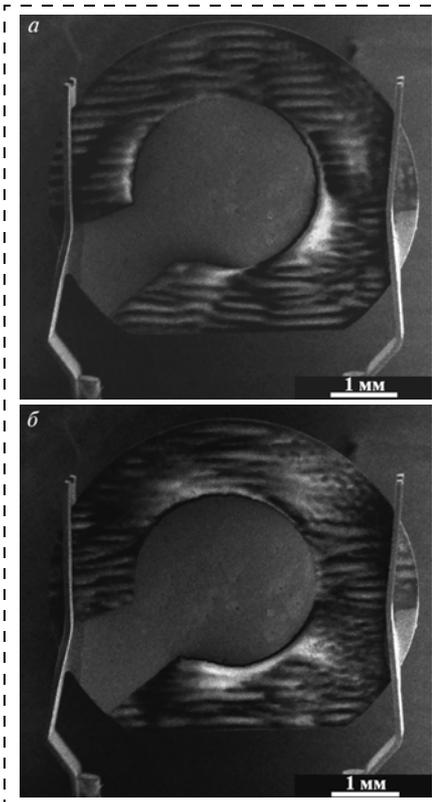


Рис. 2. РЭМ-микрофотография лепесткового резонатора на основе  $yxl/+50^\circ$ -среза кристалла лангасита  $La_3Ga_5SiO_{14}$ :  
 а —  $f_0 = 22,0247$  МГц; б —  $f = 22,1064$  МГц

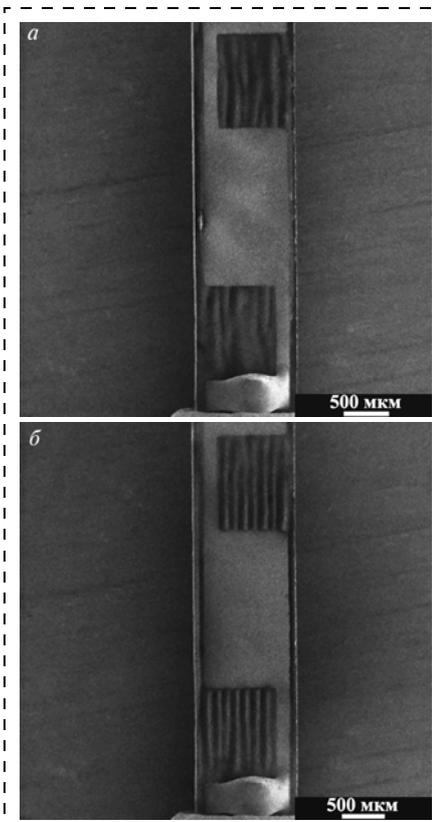


Рис. 3. РЭМ-микрофотография полоскового резонатора на основе  $Y$ -среза кристалла лангасита  $La_3Ga_5SiO_{14}$ :  
 а —  $f = 9,9500$  МГц; б —  $f_0 = 10,7769$  МГц

представлены на рис. 2, а. В этом случае в резонаторе наблюдается практически совершенная структура акустического волнового поля. Небольшие искажения волнового поля связаны с точностью геометрии резонатора и металлических электродов. Также следует отметить, что резонатор может функционировать в широком частотном диапазоне при существенном ухудшении структуры акустического волнового поля. Например, на рис. 2, б представлена структура акустического волнового поля, наблюдаемая при частоте возбуждения ОАВ  $f = 22,1064$  МГц.

На рис. 3 представлены изображения, полученные методом РЭМ при исследовании полоскового резонатора со специальной структурой Ag-электродов, изготовленного на основе  $Y$ -среза кристалла лангасита  $La_3Ga_5SiO_{14}$ . На рис. 3, а приведено изображение акустического волнового поля, сформированного на частоте  $f = 9,9500$  МГц, а на рис. 3, б — изображение акустического волнового поля, сформированного в условиях резонансного возбуждения на частоте  $f_0 = 10,7769$  МГц. Как видно на рисунках, метод РЭМ позволяет визуализировать акустические волновые поля в ОАВ-резонаторах. Единственным недостатком метода является невозможность визуализации акустических волн под металлическими электродами, которые являются эквипотенциальной поверхностью.

**Визуализация поверхностных акустических волн.** Применение метода РЭМ для исследования приборов на ПАВ позволяет наблюдать распространение ПАВ в режиме реального времени. Также возможны визуализация сноса потока акустической энергии, взаимодействие ПАВ с различными элементами акустического тракта (волноводами, отражающими решетками и т. д.) и дефектами кристаллической решетки.

Было проведено исследование процесса распространения ПАВ в  $YZ$ -срезе кристалла

$LiNbO_3$ . Для возбуждения ПАВ с длиной волны  $\Lambda = 30$  мкм на поверхности кристалла методом фотолитографии был сформирован стандартный встречно-штыревой преобразователь (ВШП), состоящий из 20 пар штырей и имеющий апертуру  $W = 50\Lambda = 1,5$  мм. ПАВ распространяется вдоль полярной оси  $Z$  со скоростью  $V = 3488$  м/с. Резонансная частота возбуждения ПАВ составляет  $f_0 = 116$  МГц. В ходе распространения ПАВ по поверхности кристалла в акустическом пучке возникает дифракционная картина. Данное явление схематично представлено на рис. 4. ПАВ дифрагирует на апертуре ВШП, что является аналогом дифракции оптического излучения на щели. Дифракционная картина ПАВ могла бы быть эквивалентной дифракционной картине в оптике, если бы кристаллические подложки были изотропными. Поскольку пьезо- и сегнетоэлектрические кристаллы являются анизотропными, дифракционная картина ПАВ является достаточно сложной. Например, изменение скорости ПАВ в зависимости от направления распространения может приводить к увеличению или уменьшению расходимости акустического пучка. Уменьшение расходимости акустического пучка получило название *автоколлимации*. При разработке устройств на ПАВ данное явление автоколлимации является востребованным, так как позволяет существенно снизить потери.  $YZ$ -срез кристалла  $LiNbO_3$  обладает такими автоколлимационными свойствами в случае распространения ПАВ вдоль полярной оси  $Z$ . Расходимость ПАВ в случае дифракции на апертуре ВШП может быть определена из дифракционного выражения для классической оптики [1]

$$F = \frac{\Lambda D(1 - 2A_d)}{W^2}, \quad (1)$$

где  $F$  — параметр Френеля;  $W$  — размер апертуры ВШП;  $D$  —

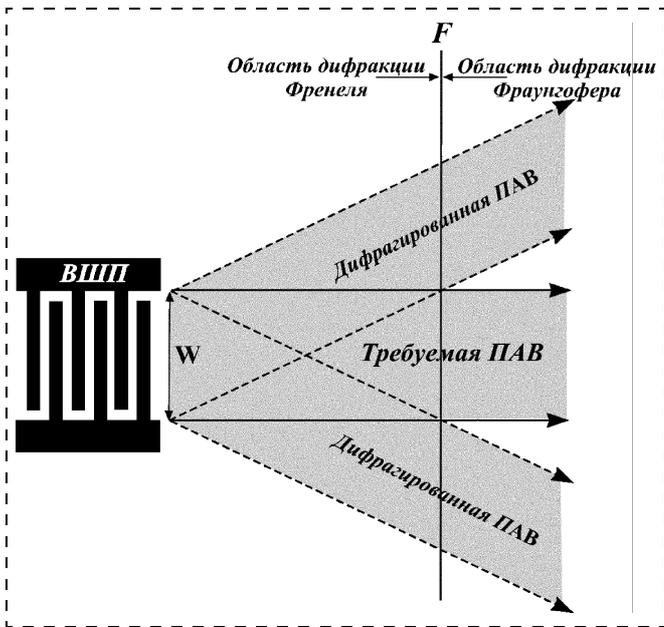


Рис. 4. Схема дифракции ПАВ на апертуре встречно-штыревого преобразователя

расстояние от апертуры ВШП до точки наблюдения;  $A_d$  — параметр анизотропии потока акустической энергии в кристалле. Поскольку  $\lambda = V/f_0$ , дифракционные потери обратно пропорциональны частоте. Значения  $F < 1$  в выражении (1) соответствуют области дифракции Френеля (ближняя зона дифракции), в которой ПАВ ограничена двумя прямыми линиями, точно параллельными волновому вектору ПАВ. В данном случае основная часть энергии ПАВ содержится в акустическом пучке с шириной, соответствующей апертуре ВШП. Значения  $F > 1$  соответствуют области дифракции Фраунгофера (дальняя зона дифракции), в которой наблюдается разделение дифракционных порядков в акустическом пучке. Следует учитывать, что нет четкой границы между зонами дифракции Френеля и Фраунгофера. Параметр анизотропии  $A_d$  может иметь как отрицательные, так и положительные значения. Положительные значения  $A_d$  позволяют использовать в акустоэлектронных устройствах большие расстояния между входным и выходным ВШП. Отрицательное значение  $A_d$  приводит к существенному уменьшению размеров области дифракции Френеля и, соответственно, требует уменьшения расстояния между входным и выходным ВШП. В  $YZ$ -срезе кристалла  $\text{LiNbO}_3$  при распространении ПАВ вдоль полярной оси  $Z$  параметр анизотропии имеет положительное значение ( $A_d = 0,54$ ), позволяющее использовать большие расстояния между двумя ВШП. Таким образом, данный  $YZ$ -срез кристалла  $\text{LiNbO}_3$  характеризуется эффектом автоколлимации.

На рис. 5 представлены РЭМ микрофотографии процесса распространения ПАВ в  $YZ$ -срезе кристалла  $\text{LiNbO}_3$  ( $\lambda = 30$  мкм,  $f_0 = 116$  МГц). Дифракционная картина Френеля представлена на

рис. 5, а. Можно наблюдать, что дифракционная картина симметрична относительно оси  $Z$ . Метод РЭМ позволяет визуализировать не только акустические волновые поля на поверхности кристалла, но и восстановить распределение пьезоэлектрического потенциала на поверхности акустически промодулированного кристалла. На рис. 5, б представлено распределение пьезоэлектрического потенциала на поверхности кристалла, соответствующее рис. 5, а. Максимумы на рис. 5, б (светлый контраст на рис. 5, а) соответствуют отрицательному поверхностному потенциалу и максимальному числу зарегистрированных вторичных электронов, в то время как минимумы соответствуют положительному значению пьезоэлектрического потенциала. Пьезоэлектрический потенциал связан непосредственно с амплитудой ПАВ и может быть использован для определения амплитуд акустических колебаний кристаллической решетки.

Метод РЭМ позволяет исследовать сложные акустические волновые поля. Например, были проведены исследования процесса взаимодействия двух ПАВ на поверхности  $YZ$ -среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$  (рис. 6). На рис. 6, а схематично представлен процесс взаимодействия двух ПАВ. На поверхности кристалла были сформированы два одинаковых ВШП таким образом, чтобы угол между направлением распространения ПАВ и осью  $Z$  был равен  $\alpha$ . ВШП имеют следующие основные параметры: длина волны ПАВ  $\lambda = 30$  мкм, апертура ВШП  $W = 50\lambda = 1,5$  мм. На рис. 6, б приведена микрофотография процесса взаимодействия двух ПАВ (область интерференционного взаимодействия) в случае  $\alpha = 45^\circ$ . В данной геометрии резонансная частота возбуждения ПАВ составляет  $f_0 = 117,3$  МГц при скорости распространения  $V = 3519$  м/с. В случае  $\alpha = 30^\circ$  интерференционная

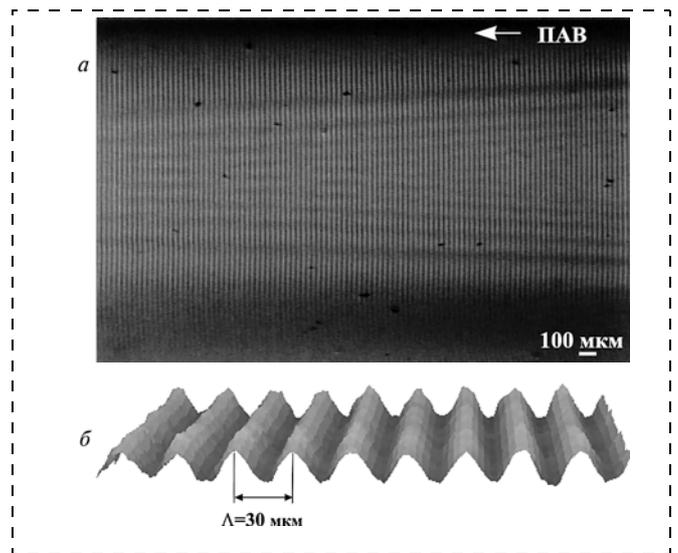
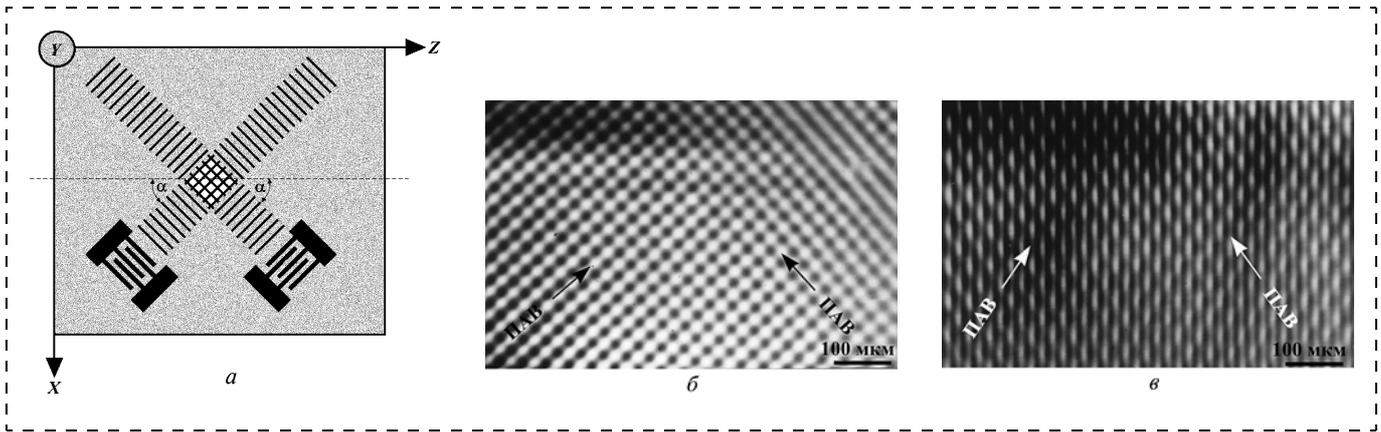


Рис. 5. Распространение бегущей ПАВ в  $YZ$ -срезе кристалла  $\text{LiNbO}_3$  вдоль оси  $Z$  ( $\lambda = 30$  мкм,  $f_0 = 116$  МГц):

а — дифракционная картина Френеля в акустическом пучке; б — распределение пьезоэлектрического потенциала ПАВ на поверхности кристалла



**Рис. 6. Интерференционное взаимодействие двух ПАВ:**

*a* — схема взаимодействия двух ПАВ; *б* —  $\alpha = 45^\circ$ ,  $f_0 = 117,3$  МГц; *в* —  $\alpha = 30^\circ$ ,  $f_0 = 114,6$  МГц

картина взаимодействия двух ПАВ, возбужденных при резонансной частоте  $f_0 = 114,6$  МГц и скорости распространения  $V = 3438$  м/с, имеет другую структуру (рис. 6, в).

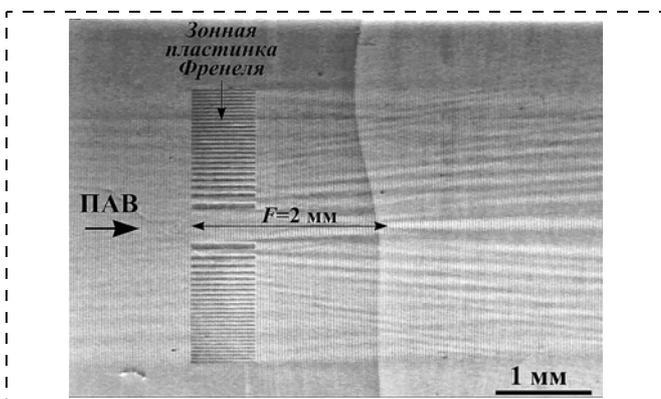
На рис. 7 представлены результаты исследования методом РЭМ процесса дифракции ПАВ на достаточно интересном объекте, каким является зонная пластинка Френеля. Данный объект является интересным с нескольких точек зрения. Во-первых, зонные пластинки Френеля широко используются в рентгеновской оптике в качестве линз для фокусировки рентгеновского излучения [15]. И, несомненно, возможность прямого наблюдения за процессами дифракции и фокусировки на зонной пластинке Френеля привлечет внимание специалистов, работающих в данной области. Во-вторых, данные экспериментальные исследования можно рассматривать в качестве первых шагов по созданию зонных фокусирующих элементов для управления пучками ПАВ. Зонная пластинка Френеля с фокусным расстоянием  $F = 2$  мм была изготовлена методом фотолитографии на поверхности  $YZ$ -среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$ . Рис. 7 демонстрирует микрофотографию дифракции ПАВ на зонной пластинке Френеля. ПАВ с длиной волны  $\Lambda = 30$  мкм распространяется вдоль полярной оси  $Z$  по нормали к зонной пластинке. На приведенной РЭМ-

микрофотографии хорошо видно, что в фокальной точке на расстоянии  $F = 2$  мм от зонной пластинки Френеля достигается некоторая фокусировка падающей ПАВ. Вместе с тем, дифракционная картина, полученная в фокальной точке, отличается от ожидаемого результата. Это можно объяснить рядом причин.

Первая причина состоит в том, что границы зон зонной пластинки были определены исходя из изотропной модели среды. Реально среда является анизотропной, а для анизотропной среды изменяются условия фазового согласования для зон зонной пластинки Френеля. Для крайних зон, фазовый путь до которых от точки фокуса максимален, фазовое рассогласование, проявляющееся в результате анизотропии среды, сказывается наиболее сильно, т. е. крайние зоны находятся в фазовом согласовании не в точке фокуса, а в другой точке поверхности. Таким образом, вместо точечного фокуса на рисунке наблюдается достаточно протяженное место фокусировки ПАВ.

Вторая причина связана с тем, что для сдвига фазы ПАВ на  $\pi$  потребовалось сформировать металлизированные зоны Френеля длиной 622 мкм при длине волны ПАВ  $\Lambda = 30$  мкм. И вместо системы щелей, что необходимо для зонной пластинки Френеля, получилась система каналов-волноводов. При этом ПАВ начинает дифрагировать не на выходе из них, что было бы желательно, а сразу после попадания в канал. Поэтому распределение акустического возмущения на выходе из зонной пластинки не соответствует заданному распределению.

Большое значение имеет возможность применения метода РЭМ для измерения углов сноса потока акустической энергии (различие в направлениях волнового вектора ПАВ и направления распространения потока акустической энергии), что имеет большое значение при создании акустоэлектронных устройств на ПАВ. На рис. 8 представлены микрофотографии распространения бегущих ПАВ в кристалле лангасита  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ . Материалы группы лангасита в последние годы привлекают большое внимание исследователей. Это связано с



**Рис. 7. Фокусировка ПАВ зонной пластинкой Френеля,  $F = 2$  мм**

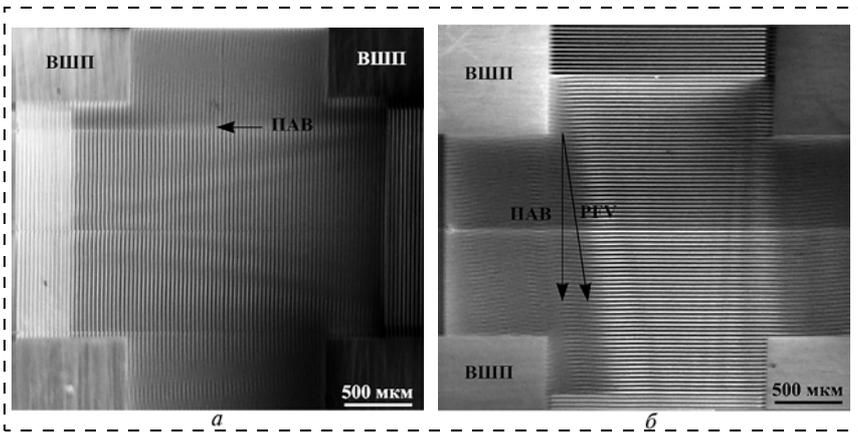


Рис. 8. Распространение ПАВ в кристалле лангасита  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ :

$a$  —  $Y$ -срез,  $\Lambda = 30$  мкм,  $f_0 = 78$  МГц;  $b$  —  $X$ -срез,  $\Lambda = 30$  мкм,  $f_0 = 81,7$  МГц,  $PFA = 6,3^\circ$

тем, что материалы данной группы занимают промежуточное положение между кристаллами  $\text{LiNbO}_3$  и кристаллами кварца  $\text{SiO}_2$ . Коэффициент электромеханической связи в данных кристаллах в несколько раз больше, чем у кварца, и одновременно ряд срезов кристаллов обладает нулевым температурным коэффициентом частоты. Также одной из особенностей данных материалов является маленькая скорость распространения ПАВ, что позволяет создавать миниатюрные акустоэлектронные устройства. На микрофотографии рис. 8,  $a$  представлен процесс распространения бегущей ПАВ с длиной волны  $\Lambda = 30$  мкм в  $Y$ -срезе кристалла лангасита  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ . Скорость распространения ПАВ в данном срезе составляет  $V = 2340$  м/с, а резонансная частота возбуждения ПАВ  $f_0 = 78$  МГц. В  $Y$ -срезе кристалла на микрофотографии в акустическом пучке наблюдается дифракционная картина Френеля, а направление волнового вектора ПАВ совпадает с направлением распространения потока акустической энергии. В случае  $X$ -среза кристалла лангасита  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  скорость распространения ПАВ составляет  $V = 2450$  м/с, а процесс распространения бегущих ПАВ характеризуется сносом потока акустической энергии, что можно наблюдать на микрофотографии рис. 8,  $b$ . Измеренный угол сноса потока акустической энергии (угол  $PFA$  между направлением волнового вектора ПАВ и направлением распространения потока акустической энергии  $PEV$ ) составляет  $6,3^\circ$ . Таким образом, использование метода РЭМ позволяет определять углы сноса потока акустической энергии, что имеет важное значение при проектировании и изготовлении акустоэлектронных устройств на ПАВ.

Метод РЭМ является полезным и при исследовании процессов взаимодействия ПАВ с дефектами кристаллической структуры. В работах [16–19] было продемонстрировано, что наличие в кристаллах ростовых дефектов в виде двойников и доменов приводит к сильному рассеянию акустических волн и, соответственно, к большим потерям акустического сигнала. Однако следует отметить, что

в последние годы ведутся работы по специальному формированию доменных структур в сегнетоэлектрических кристаллах различными методами в целях создания регулярных доменных структур и их применения в оптоэлектронике для нелинейно-оптических преобразований [20–22] и в акустоэлектронике для возбуждения объемных и поверхностных акустических волн [16, 23]. Так, например, на рис. 9 продемонстрирована возможность применения регулярных доменных структур (РДС) для возбуждения ПАВ. В данном случае в одной части кристалла  $\text{LiNbO}_3$  методом полслеростовой термоэлектрической обработки вблизи температуры Кюри ( $T_c = 1100$  °С) в условиях градиента

температуры и приложения знакопеременного электрического поля была сформирована РДС с периодом  $\sim 75$  мкм [24]. Акустоэлектронное устройство на основе РДС схематично представлено на рис. 9,  $a$ . Для возбуждения ПАВ два  $\text{Al}$ -электрода были напылены с двух сторон на доменную структуру (плоскость  $YX$ ). Приложение внешнего электрического поля  $E_3$  к  $\text{Al}$ -электродам вдоль полярной оси  $Z$  вызывает в данном направлении механические деформации за счет продольного пьезоэлектрического эффекта  $r_3 = d_{33}E_3$ , где  $d_{33}$  — пьезоэлектрическая константа. Так как соседние домены имеют противоположные направления полярной оси  $Z$ , электрическое поле  $E_3$  вызывает

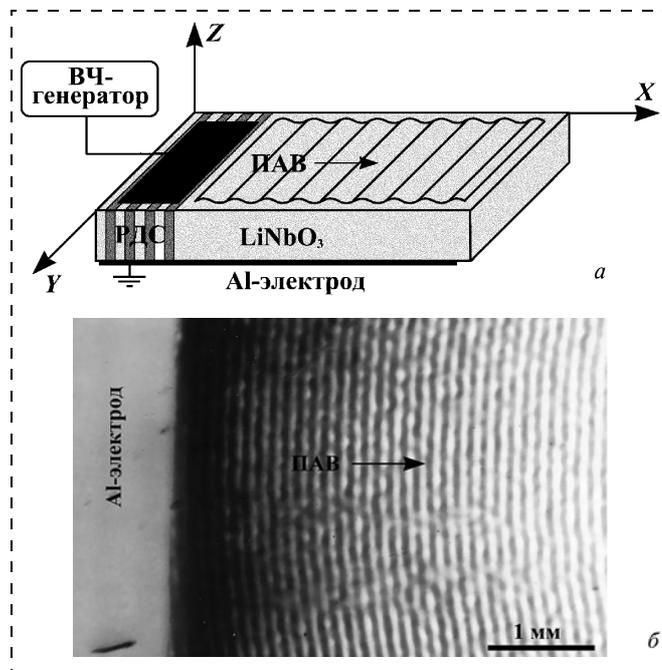


Рис. 9. Возбуждение ПАВ регулярной доменной структурой в кристалле  $\text{LiNbO}_3$ :

$a$  — схема устройства для возбуждения ПАВ;  $b$  — изображение будущей ПАВ,  $\Lambda = 150$  мкм,  $f_0 = 25,317$  МГц

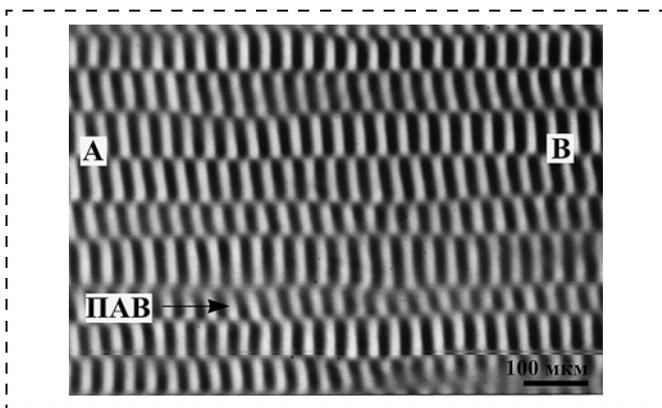


Рис. 10. Распространение ПАВ вдоль регулярной доменной структуры (*AB* — доменная стенка)

сжатие одного домена и растяжение соседнего домена вдоль полярной оси *Z*. Если приложить к А1-электродам высокочастотное электрическое поле, то РДС за счет противоположных деформаций в соседних доменах возбуждает на поверхности кристалла ПАВ, которая распространяется вдоль оси *X* со скоростью  $V = 3798$  м/с. На рис. 9, б приведена РЭМ-микрофотография изображения бегущей ПАВ, возбужденной РДС на резонансной частоте  $f_0 = 25,127$  МГц. Длина волны ПАВ составляет  $\lambda = 150$  мкм, что соответствует ширине двух доменов. Таким образом, доменные структуры могут быть использованы для возбуждения ПАВ.

Кроме возбуждения ПАВ доменные структуры могут быть использованы в качестве волноводных структур в случае распространения ПАВ вдоль доменных границ, которые осуществляют коллимацию акустических пучков. На рис. 10 представлен процесс распространения ПАВ с длиной  $\lambda = 32$  мкм вдоль доменной структуры в *YX*-срезе кристалла  $\text{LiNbO}_3$ . Сформированная в кристалле доменная структура имеет ширину доменов  $\sim 60$  мкм. Для возбуждения ПАВ на поверхности кристалла был сформирован ВШП с шириной электродов 8 мкм ( $\lambda = 32$  мкм). ПАВ распространяется по поверхности кристалла вдоль оси *X* со скоростью  $V = 3760$  м/с. Резонансная частота возбуждения ПАВ составляет  $f_0 = 117,5$  МГц. На фотографии рис. 10 можно наблюдать, что на доменных границах *AB* происходит инверсия потенциального контраста изображения ПАВ на  $\pi$ , что связано с изменением направления пьезоэлектрически активной оси *Y* в соседних доменах. В данном случае максимумы ПАВ в соседних доменах имеют противоположные по знаку пьезоэлектрические потенциалы. Также доменная структура осуществляет коллимацию акустического пучка и выступает в качестве акустического волновода.

#### Рентгеновские методы исследования акустических волновых полей

В отличие от растровой электронной микроскопии методы рентгеновской топографии и дифрак-

тометрии позволяют исследовать процесс распространения акустических волн в непьезоэлектрических материалах. Также следует отметить, что коротковолновое рентгеновское излучение чувствительно к искажениям кристаллической решетки, вызванным распространением акустических волн. Рентгеновские методы позволяют измерять амплитуды акустических волн и коэффициенты затухания акустических сигналов по глубине и вдоль направления распространения. Рентгеновские методы можно разделить на две группы. Прежде всего, это топографические методы, позволяющие визуализировать акустические волновые поля в режиме реального времени, исследовать дифракционные явления в акустических пучках, измерять углы сноса потока акустической энергии и амплитуды акустических волн. Вторая группа методов основана на исследовании процесса дифракции рентгеновского излучения на акустически промодулированных кристаллических решетках, где на основании анализа дифракционных спектров можно определить амплитуды колебаний кристаллической решетки и изучить процесс затухания акустических колебаний по глубине кристалла и вдоль направления распространения ПАВ.

#### Стробоскопическая рентгеновская топография.

Одним из первых методов, использованных для исследования процесса распространения акустических волн, является метод стробоскопической рентгеновской топографии, который позволяет получить картину распределения акустических волновых полей в кристалле [25—28]. Принцип визуализации бегущей ПАВ основан на фокусировке рентгеновского излучения минимумами ПАВ, которые можно рассматривать как фокусирующие вогнутые зеркала. Период наблюдаемой периодической структуры соответствует длине волны ПАВ. Так как ПАВ распространяется по поверхности кристалла с определенной скоростью, то для визуализации волновых полей бегущих ПАВ необходимо использовать источник синхротронного излучения и осуществлять синхронизацию процесса возбуждения бегущих ПАВ с временной структурой синхротронного излучения (стробоскопическая рентгеновская топография). На рис. 11, а схематично представлен принцип формирования изображения волнового поля бегущей ПАВ. Расстояние, на котором формируется изображение бегущей ПАВ, определяется выражением

$$D = \sin \Theta_B / h K^2 (\sin^2 \Theta_B \sin^2 \beta + \cos^2 \beta), \quad (2)$$

где  $\Theta_B$  — угол Брэгга;  $h$  — амплитуда ПАВ;  $K = 2\pi/\lambda$  — волновой вектор ПАВ;  $\lambda$  — длина волны ПАВ;  $\beta$  — угол между направлением падения рентгеновского излучения и направлением распространения ПАВ. Выражение (2) существенно упрощается, когда волновой вектор ПАВ лежит в плоскости дифракции:

$$D = \lambda^2 \sin^2 \Theta_B / 8\pi^2 h. \quad (3)$$

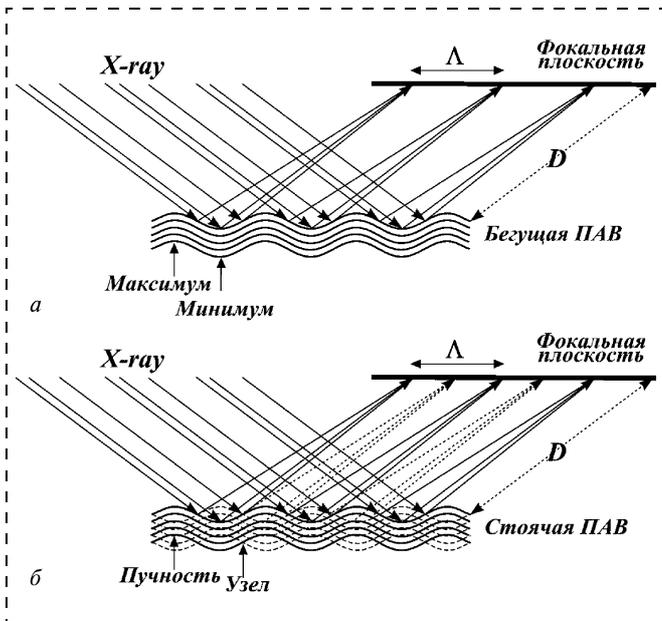


Рис. 11. Схема фокусировки рентгеновского излучения:  
 а — бегущая ПАВ; б — стоячая ПАВ

Зная расстояние  $D$ , на котором наблюдается изображение волнового поля ПАВ, можно легко определить амплитуду акустических колебаний кристаллической решетки  $h$ .

На рис. 12 представлена экспериментальная схема стробоскопической рентгеновской топографии, использованной для визуализации процесса распространения бегущих ПАВ в кристалле Si. Исследования были проведены на источнике синхротронного излучения ESRF. В качестве исследуемого объекта был использован кристалл Si(111), на поверхности которого для возбуждения ПАВ с длиной волны  $\lambda = 12$  мкм методом фотолитографии был сформирован ВШП, состоящий из 10 пар металлических электродов. Так как Si не является пьезоэлектрическим материалом, то для возбуждения ПАВ на ВШП методом магнетронного напыления была сформирована пьезоэлектрическая пленка ZnO толщиной 7,3 мкм (рис. 13). Резонансная частота возбуждения ПАВ в такой системе составляет  $f = 354$  МГц, а полоса пропускания ВШП  $\Delta f/f \approx 10\%$ .

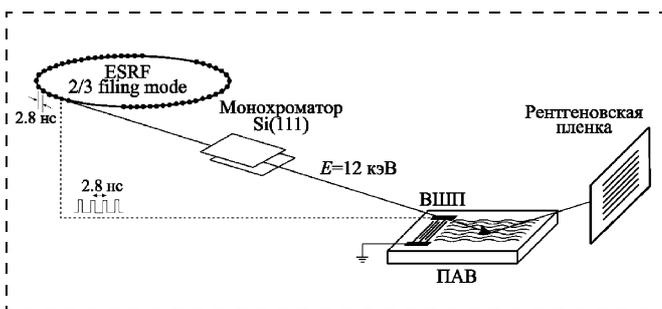


Рис. 12. Экспериментальная схема стробоскопической рентгеновской топографии бегущих ПАВ

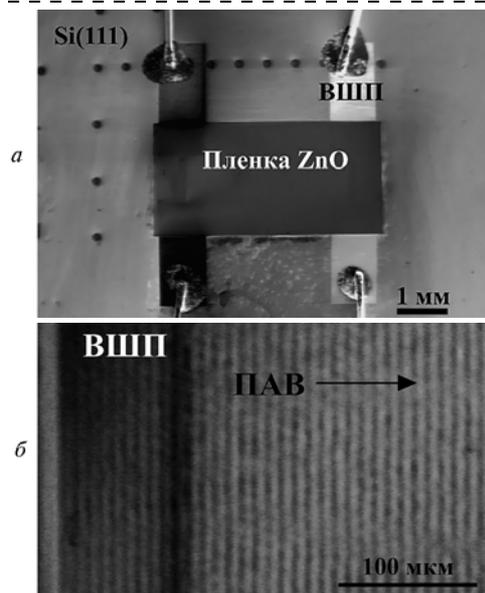


Рис. 13. Распространение ПАВ в Si:

а — схема образца; б — РЭМ-микрофотография бегущей ПАВ в пленке ZnO,  $\lambda = 12$  мкм,  $f = 354$  МГц

Для визуализации акустического волнового поля бегущей ПАВ на поверхности кристалла была использована специальная мода синхротронного излучения ESRF, когда большая часть кольца (2/3) занята пакетами электронов, расстояние между центрами которых составляет  $\tau = 2,8$  нс, что соответствует частоте повторения рентгеновских импульсов  $f = 357$  МГц, находящейся в пределах полосы пропускания ВШП. Как продемонстрировано на рис. 12, данный высокочастотный сигнал был использован непосредственно для возбуждения ПАВ, что приводит к фазовой синхронизации синхротронного излучения и процесса возбуждения ПАВ. Исследования были проведены при энергии рентгеновского излучения  $E = 12$  кэВ ( $\lambda = 0,1033$  нм), выделенного с помощью двойного кристалла-монокроматора Si(111). После монокроматора рентгеновское излучение было сколлимировано щелью с размером  $1 \times 1$  мм. Рентгеновское излучение под углом Брэгга  $\Theta_B = 9,48^\circ$  падает на кристалл Si(111) и дифрагирует на поверхности кристалла, промодулированной бегущей ПАВ. Изображение акустического волнового поля регистрируется на рентгеновской пленке, расположенной на расстоянии  $D$  от промодулированной поверхности кристалла.

На рис. 14 представлена рентгеновская топограмма волнового поля бегущей ПАВ, полученная на расстоянии  $D = 30$  мм от исследуемого объекта. В данном случае, согласно выражению (3), амплитуда ПАВ составляет  $h = 0,13$  нм. Изображение бегущей ПАВ соответствует периодически изменяющемуся контрасту, причем более темные штрихи отвечают минимумам бегущей ПАВ. Период полученной структуры соответствует длине волны бегу-

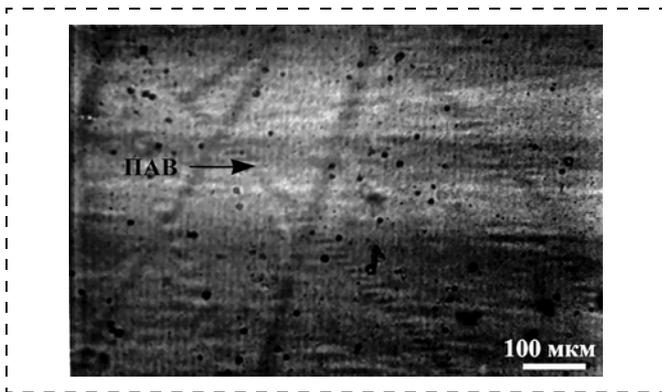


Рис. 14. Рентгеновская топограмма бегущей ПАВ на свободной поверхности Si. Отражение Si(111),  $\Theta_B = 9,48^\circ$ ,  $D = 30$  мм,  $\Lambda = 12$  мкм,  $f_0 = 354$  МГц

щей ПАВ  $\Lambda = 12$  мкм. На рентгеновской топограмме можно наблюдать неравномерность распределения акустического волнового поля ПАВ, что связано с тем, что изображение было получено от области поверхности кристалла, расположенной сразу после ВШП (область дифракции Френеля для акустического пучка). На топограмме можно наблюдать также искажение волнового акустического фронта и отдельные дифрагированные акустические пучки, что связано с наличием дефектов в структуре кристалла Si(111). Таким образом, рентгеновская стробоскопическая топография бегущих ПАВ позволяет визуализировать не только распределение акустического волнового поля на поверхности кристаллов и определять амплитуду ПАВ, но и выявлять дефекты кристаллической структуры и исследовать их влияние на процесс распространения ПАВ в кристаллах. Следует также отметить основное ограничение метода стробоскопической рентгеновской топографии, связанное с необходимостью синхронизации ПАВ с временной структурой синхротронного излучения, что существенно ограничивает частотный диапазон исследуемых акустоэлектронных устройств.

**Рентгеновская топография.** В случае визуализации волнового поля стоячей ПАВ синхронизация процесса возбуждения ПАВ с временной структурой рентгеновского излучения не нужна, что позволяет проводить исследования на лабораторных источниках рентгеновского излучения во всем частотном диапазоне возбуждения ПАВ без использования специальной стробоскопической техники.

В случае стоячих ПАВ на поверхности кристалла появляются неподвижные точки (узлы), расстояние между которыми составляет половину длины волны ПАВ, а участки по обе стороны от узла (пучности) осуществляют поочередно фокусировку и дефокусировку рентгеновского излучения. Принцип формирования изображения стоячей ПАВ схематично представлен на рис. 11, б. Расстояние  $D$ , на котором наблюдается изображение стоячих ПАВ, также как и в случае с бегущими ПАВ, определяется из выражений (2)—(3). В отли-

чие от бегущей ПАВ, период изображения стоячей ПАВ соответствует половине длины волны ПАВ.

Для получения рентгеновских топограмм с изображением волнового поля стоячих ПАВ в качестве источника рентгеновского излучения была использована установка с вращающимся медным анодом (излучение  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ,  $\lambda = 0,154$  нм). Для возбуждения стоячих ПАВ была использована резонаторная структура, сформированная на поверхности YZ-среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$ . Длина волны ПАВ, возбуждаемой ВШП, составляла  $\Lambda = 100$  мкм при резонансной частоте возбуждения  $f_0 = 34,88$  МГц (скорость распространения ПАВ в данном срезе составляет  $V = 3488$  м/с). С двух сторон от ВШП были сформированы отражающие решетки с периодом 50 мкм. Бегущая ПАВ отражается от решетки, и в результате суперпозиции падающей и отраженной волн на поверхности кристалла формируется стоячая ПАВ. Исследования были проведены в геометрии, когда угол между проекциями направления падения рентгеновского излучения на поверхность кристалла и направления распространения ПАВ составляет  $\beta = 0^\circ$ . Соответствующая экспериментальная схема представлена на рис. 15. Размер источника рентгеновского излучения составлял 50 мкм по горизонтали и 10 мм по вертикали. После кристалла монохроматора Si(111) рентгеновское излучение падает на поверхность кристалла, промодулированного стоячей ПАВ, под углом Брэгга. Дифрагированное рентгеновское излучение регистрировалось на рентгеновской пленке, расположенной параллельно поверхности кристалла. Так как проекция рентгеновского пучка на поверхность кристалла достаточно мала, то для получения изображения всей поверхности кристалла, промодулированного стоячей ПАВ, осуществлялось одновременное перемещение образца и рентгеновской пленки.

На рис. 16 приведена рентгеновская топограмма YZ-среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$ , промодулированного стоячей ПАВ с длиной волны  $\Lambda = 100$  мкм. Топограмма была получена в случае симметричного брэгговского отражения от плоскостей (300), расположенных параллельно поверхности кристалла. Угол Брэгга в данном случае  $\Theta_B = 31,19^\circ$ . Расстояние от поверхности акустически промодулированного кристалла до плоскости наблюдения состав-

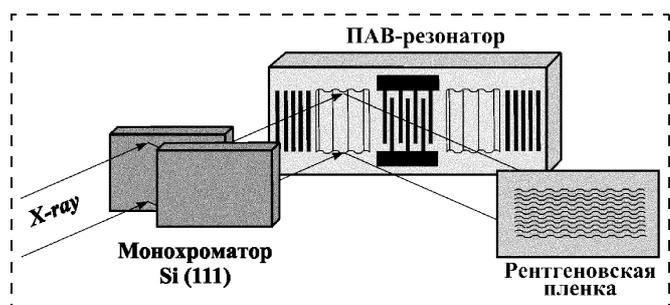


Рис. 15. Экспериментальная схема двухкристалльной рентгеновской топографии для исследования волновых полей стоячих ПАВ

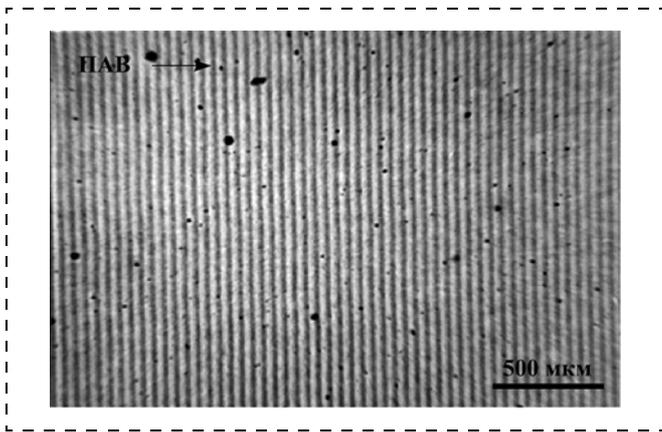


Рис. 16. Рентгеновская топограмма с изображением волнового поля стоячей ПАВ в YZ-срезе кристалла  $\text{LiNbO}_3$ :

$\Lambda = 100$  мкм;  $f_0 = 34,88$  МГц; отражение (300);  $\Theta_B = 31,19^\circ$ ;  $D = 30$  мм;  $h \approx 1,1$  нм

ляло  $D = 30$  мм. Исходя из выражения (3) рассчитанное значение амплитуды стоячей ПАВ равно  $h = 1,1$  нм. Периодичность структуры акустического волнового поля на топограмме составляет 50 мкм, что соответствует половине длины волны ПАВ. Темный контраст на топограмме соответствует пучностям стоячей ПАВ, а светлый контраст соответствует узлам волн.

Таким образом, метод рентгеновской топографии позволяет визуализировать акустические волновые поля стоячих ПАВ на поверхности кристаллов в режиме реального времени и определять амплитуды акустических колебаний кристаллической решетки.

**Рентгеновская дифрактометрия.** Высокорастворимая рентгеновская дифрактометрия может быть использована для исследования распространения акустических волновых полей в кристаллах: определение акустических длин волн, измерение амплитуд и затуханий ультразвука, исследование процесса возбуждения и распространения акустического сигнала в слоистых структурах [31–40]. Распространение ПАВ в кристалле вызывает синусоидальную модуляцию кристаллической решетки, которая, в свою очередь, выступает в качестве ста-

ционарной дифракционной решетки для рентгеновского излучения, так как скорость рентгеновских фотонов в  $10^5$  раз выше скорости распространения ПАВ. Модуляция кристаллической решетки акустической волной приводит к появлению дифракционных сателлитов на кривой качания вокруг брэгговского пика. В случае брэгговской геометрии дифракции и рэлеевских ПАВ угловые положения дифракционных порядков могут быть определены из выражения

$$\cos\Theta_m = \cos\Theta_0 + m(\lambda/\Lambda), \quad (4)$$

где  $\lambda$  — длина волны падающего рентгеновского излучения;  $\Theta_0$  — угол падения рентгеновского излучения;  $\Theta_m$  — угол выхода  $m$ -го порядка дифракции по отношению к поверхности кристалла.

В случае измерения кривой качания при брэгговском положении детектора угловая расходимость между дифракционными сателлитами  $\delta\Theta_{mRC}$  может быть определена из следующего выражения:

$$\delta\Theta_{mRC} = m\lambda/2\Lambda \sin\Theta_B = md/\Lambda, \quad (5)$$

где  $d$  — межплоскостное расстояние.

Процесс распространения ПАВ методом рентгеновской дифрактометрии может исследоваться как на лабораторных, так и на синхротронных источниках рентгеновского излучения. Более целесообразно экспериментальные исследования проводить на источниках синхротронного излучения, которые позволяют использовать различные энергии рентгеновского излучения. Дифракция рентгеновского излучения на  $127^\circ$  Y'-срезе кристалла  $\text{LiNbO}_3$ , промодулированного ПАВ с длиной волны  $\Lambda = 4$  мкм, была исследована в схеме высокоразрешающего двухкристального рентгеновского дифрактометра на оптической линии VM5 источника синхротронного излучения третьего поколения ESRF. На рис. 17 схематично представлена схема двухкристального рентгеновского дифрактометра.

Рентгеновское излучение с энергией  $E = 13$  кэВ после двойного кристалла-монохроматора Si(111) дифрагирует в вертикальной плоскости. Для коллимации рентгеновского излучения была использована щель размером  $0,1 \times 0,1$  мм. Второй кристалл-монохроматор Si(333) был установлен непо-

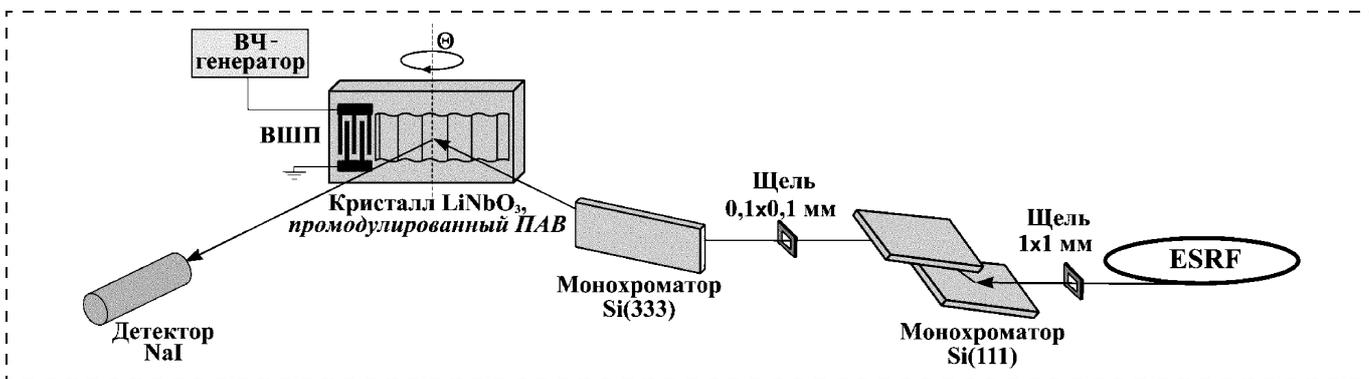


Рис. 17. Схема двухкристального рентгеновского дифрактометра для исследования распространения ПАВ в кристаллах

средственно перед исследуемым кристаллом  $\text{LiNbO}_3$  в целях получения высокомонокроматизированного рентгеновского пучка ( $\Delta\lambda/\lambda \approx 10^{-6}$ ). Для регистрации дифрагированного рентгеновского излучения был использован NaI-сцинтилляционный детектор, установленный в точное брэгговское положение. Для измерения кривых качания акустически промодулированного кристалла осуществлялось угловое сканирование образца по углу  $\Theta$  вблизи брэгговского пика. Для экспериментальных исследований было использовано отражение (104) от  $127^\circ$   $Y'$ -среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$ , которое имеет следующие основные характеристики:  $d_{104} = 0,2736$  нм;  $\Theta_B = 10,04^\circ$ . Для возбуждения ПАВ на поверхности кристалла методом электронно-лучевой литографии был сформирован ВШП с параметрами: апертура  $W = 300$  мкм, резонансная частота возбуждения ПАВ  $f_0 = 952$  МГц, длина волны ПАВ  $\Lambda = 4$  мкм, число пар штырей  $N = 10$ . На поверхности кристалла ПАВ распространяется вдоль оси  $X$  со скоростью  $V = 3980$  м/с. Амплитуда ПАВ в кристалле  $\text{LiNbO}_3$  может быть изменена от нуля до нескольких десятых нанометра за счет изменения амплитуды входного высокочастотного электрического сигнала на ВШП, причем данная зависимость имеет линейный характер.

На рис. 18 приведены кривые качания  $127^\circ$   $Y'$ -среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$  (отражение (104)), полученные в отсутствие (рис. 18, а) и при возбуждении ПАВ с длиной волны  $\Lambda = 4$  мкм и амплитуды входного сигнала на ВШП  $U = 11$  В (рис. 18, б). В отсутствие акустического возбуждения полуширина брэгговского пика составляет  $FWHM = 6,2''$ . Возбуждение ПАВ приводит к появлению на кривой качания дифракционных спутников вокруг брэгговского пика. Угловая расходимость между дифракционными спутниками на кривой качания (рис. 18, б) составляет  $\delta\Theta_{mRC} = 14,3''$ , что соответствует расчетному значению из выражения (5). Интенсивность и число дифракционных спутни-

тов зависят от амплитуды ПАВ. С увеличением амплитуды ПАВ возрастает число дифракционных спутников. На основе анализа дифракционных спектров и использования кинематической или динамической теории дифракции можно точно определить значение амплитуды ПАВ [33, 36, 37, 40]. Следует отметить, что для оперативного определения амплитуды ПАВ можно использовать довольно простой метод, предложенный в работе [33]. Данный метод основан на том, что амплитуда ПАВ  $h_0$  на поверхности кристалла может быть определена из числа дифракционных спутников  $m$ , наблюдаемых на кривой качания, при использовании следующего выражения:

$$h_0 \approx md/2\pi. \quad (6)$$

Данное соотношение легко получить путем сопоставления угловой расходимости между двумя соседними дифракционными спутниками  $\delta\Theta_{mRC} = d/\Lambda$  (5) и максимальной угловой деформацией кристаллической решетки, определяемой как  $h_0 \times K$ , где  $K = 2\pi/\Lambda$  — волновой вектор ПАВ. Минимальная амплитуда ПАВ может быть определена только при появлении  $\pm 1$  дифракционных спутников. Определим амплитуду ПАВ  $h_0$  на основе анализа кривой качания на рис. 18, б, полученной при амплитуде входного высокочастотного сигнала на ВШП  $U = 11$  В. Число наблюдаемых дифракционных спутников равно  $m = 7$ . Подставляя соответствующие значения  $m$  и межплоскостного расстояния  $d_{104}$  для отражения (104) в выражение (6), получаем значение амплитуды ПАВ  $h_0 \approx 0,3$  нм, соответствующее амплитуде входного сигнала на ВШП  $U = 11$  В. Данная методика позволяет достаточно быстро, но с определенной погрешностью определить амплитуду ПАВ. Точность данного метода существенно возрастает с увеличением числа наблюдаемых на кривых качания дифракционных спутников. Исходя из полученного значения амплитуды ПАВ  $h_0$  достаточно легко определить амплитуду

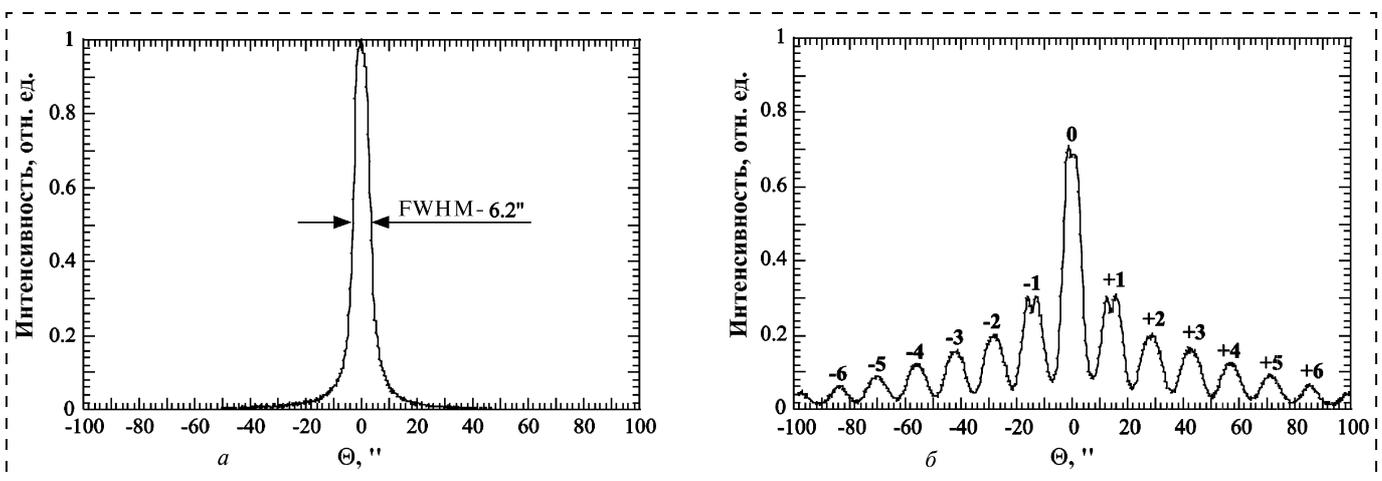


Рис. 18. Кривые качания  $127^\circ$   $Y'$ -среза кристалла  $\text{LiNbO}_3$ , полученные в отсутствие возбуждения ПАВ (а) и при амплитуде входного сигнала на ВШП  $U = 11$  В (б). Отражение (104),  $E = 13$  кэВ,  $\Theta_B = 10,04^\circ$

ПАВ при других амплитудах входного высокочастотного сигнала на ВШП, так как они имеют линейную зависимость  $h_0 \sim U$ .

Также следует отметить расщепление дифракционных сателлитов на рис. 18, б, связанное с растяжением и сжатием кристаллической решетки в максимумах и минимумах акустической волны, соответственно.

## Заключение

В работе представлены уникальные возможности применения методов растровой электронной микроскопии и высоко разрешающей рентгеновской дифрактометрии и топографии для исследования процесса распространения объемных и поверхностных акустических волн в пьезоэлектрических материалах. Данные методы позволяют визуализировать акустические волновые поля в режиме реального времени, исследовать дифракционные явления в акустических пучках и влияние дефектов кристаллической решетки на процесс распространения акустических волн, определять амплитуды акустических волн и углы сноса потока акустической энергии.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 04-02-16456).*

## Список литературы

1. **Campbell C.** Surface Acoustic Wave Devices and Their Signal Processing Applications. London: Academic Press, 1989. 470 p.
2. **Dieulesaint E. and Royer D.** Ondes Elastique dans les Solids. Paris: Masson, 1974. 339 p.
3. **Оливер А.** Поверхностные акустические волны. М.: Мир, 1981. 390 с.
4. **Речицкий В. И.** Акустоэлектронные радиокомпоненты. М.: Радио и связь, 1987. 193 с.
5. **Кайно Г.** Акустические волны. М.: Мир, 1990. 652 с.
6. **Rohrbeck W. and Chilla E.** Detection of Surface Acoustic Waves by Scanning Force Microscopy // Phys. Stat. Sol.(a). 1992. Vol. 131. P. 69–71.
7. **Hesjedal T. and Behme G.** High-Resolution Imaging of Surface Acoustic Wave Scattering // Appl. Phys. Lett. 2001. Vol. 78(13). P. 1948–1950.
8. **Gerdes R. J. and Wagner C. E.** Scanning Electron Microscopy of Resonant Quartz Crystals // Appl. Phys. Lett. 1971. Vol. 18(2). P. 39–41.
9. **Bahadur H., Hepworth A., Kall V. K. and Parshad R.** Electron Contrast Effects from Oscillating Quartz Crystals by the Scanning Electron Microscope // IEEE Transactions on Sonics and Ultrasonics. 1978. Vol. SU-25(5). P. 309–312.
10. **Bahadur H. and Parshad R.** Scanning Electron Microscopy of Vibrating Quartz Crystals // IEEE Transactions on Sonics and Ultrasonics. 1980. Vol. SU-27(6). P. 303–317.
11. **Bahadur H. and Parshad R.** Scanning Electron Microscopy of Vibrating Quartz Crystals // Scanning Electron Microscopy. 1980. Vol. 1. P. 509–522.
12. **Tanski W. J. and Wittels N. D.** SEM Observations of SAW Resonator Transverse Modes // Appl. Phys. Lett. 1979. Vol. 34(9). P. 537–539.
13. **Eberharter G. and Feuerbaum H. P.** Scanning-Electron-Microscopy Observations of Propagating Acoustic Waves in Surface Acoustic Wave Devices // Appl. Phys. Lett. 1980. Vol. 37(8). P. 698–699.
14. **Дремова Н. Н., Ерко А. И., Рошчупкин Д. В.** Зарядовый механизм формирования метастабильного потенциального контраста поверхностной акустической волны в РЭМ // ЖТФ. 1988. Т. 58(9). С. 1763–1766.
15. **Basov Yu. A., Roshchupkin D. V., Schelokov L. A. and Yakshin A. E.** Two-dimensional X-ray Focusing by a Phase Fresnel Zone

Plate at Grazing Incidence // Optics Communications. 1995. Vol. 114. P. 9–12.

16. **Roshchupkin D. V. and Brunel M.** Scanning Electron Microscopy Observation of Surface Acoustic Wave Propagation in the LiNbO<sub>3</sub> Crystals with Regular Domain Structures // IEEE Transaction on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 1994. Vol. 41(4). P. 512–517.

17. **Alexeyev A. N. and Roshchupkin D. V.** Diffraction of Surface Acoustic Waves on Zigzag Domain Wall in a Cd<sub>2</sub>(MoO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> Crystal // Appl. Phys. Lett. 1996. Vol. 68(2). P. 159–160.

18. **Рошчупкин Д. В. и Ткачев С. В.** Применение метода растровой электронной микроскопии для дефектоскопии пьезоэлектрических и сегнетоэлектрических кристаллов // Заводская лаборатория. 1996. № 8. С. 32–34.

19. **Roshchupkin D. V. and Tkachev S. V.** Surface Acoustic Waves Interaction with Twin Structure in the LiNbO<sub>3</sub> Crystal // Ferroelectric Letters. 1997. Vol. 22. P. 135–141.

20. **Yamada N., Nada N., Saitoh M. and Watanabe K.** First-Order Quasi-Phase Matched LiNbO<sub>3</sub> Waveguide Periodically Poled by Applying an External Field for Efficient Blue Second-Harmonic Generation // Appl. Phys. Lett. 1993. Vol. 62(1). P. 435–436.

21. **Gupta M. C., Kozlovsky W. and Nutt A. C. G.** Second-Harmonic Generation in Bulk and Waveguide LiTaO<sub>3</sub> with Domain Inversion Induced by Electron Beam Scanning // Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 64(24). P. 3210–3212.

22. **Rosenman G., Urenski P., Agronin A., Rosenwaks Y. and Molotskii M.** Submicron Ferroelectric Domain Structures Tailored by High-Voltage Scanning Probe Microscopy // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 82(1). P. 103–105.

23. **Roshchupkin D. V., Fournier Th., Brunel M., Plotitsyna O. A. and Sorokin N. G.** Scanning Electron Microscopy Observation of Excitation of the Surface Acoustic Waves by the Regular Domain Structures in the LiNbO<sub>3</sub> Crystals // Appl. Phys. Lett. 1992. Vol. 60(19). P. 2330–2331.

24. **Antipov V. V., Blistanov A. A. and Sorokin N. G.** Formation of Regular Structures in the Ferroelectrics LiNbO<sub>3</sub> and LiTaO<sub>3</sub> Near the Phase Transition // Sov. Phys. Crystallogr. 1985. Vol. 30. P. 428–430.

25. **Goddard P. A., Tanner B. K. and Clark G. F.** Direct Imaging of Travelling Rayleigh Waves by Stroboscopic X-Ray Topography // Nature. 1982. Vol. 299. P. 44–46.

26. **Cerva H. and Graeff W.** Contrast Investigation of Surface Acoustic Waves by Stroboscopic Topography. I. Orientation Contrast. // Phys. Stat. Sol. (a). 1984. Vol. 82. P. 35–45.

27. **Sauer W., Streibl M., Metzger T. H., Haubrich A. G. C., Manus S., Wixforth A., Peisl J., Mazuelas A., Härtwig J., and Baruchel J.** X-Ray Imaging and Diffraction from Surface Phonons on GaAs // Appl. Phys. Lett. 1992. Vol. 75(129). P. 1709–1711.

28. **Рошчупкин Д. В., Иржак Д. В., Тукулу Р., Матон О.** Стробоскопическая рентгеновская топография бегущих поверхностных акустических волн в кристаллах Si(111) // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2003. № 2. С. 25–27.

29. **Иржак Д. В., Рошчупкин Д. В.** Рентгеновская топография стоячих поверхностных акустических волн // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2002. № 1. С. 36–40.

30. **Roshchupkin D. V., Roshchupkina H. D., Irzhak D. V.** X-Ray Topography Analysis of Acoustic Wave Fields in the SAW-Resonators Structures // IEEE Transaction on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2005. Vol. 52(11). P. 2081–2087.

31. **Tucoulou R., Pascal R., Brunel M., Mathon O., Roshchupkin D. V., Schelokov I. A., Cattan E., Remiens D.** X-ray diffraction from perfect silicon crystals distorted by surface acoustic waves // Journal of Applied Crystallography. 2000. Vol. 33. P. 1019–1022.

32. **Рошчупкин Д. В., Щелоков И. А., Тукулу Р., Матон О.** Дифракция рентгеновского излучения на кристаллах Si и LiNbO<sub>3</sub>, промодулированных поверхностными акустическими волнами // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2001. № 1. С. 27–32.

33. **Tucoulou R., de Bergevin F., Mathon O., Roshchupkin D.** X-ray Bragg Diffraction of LiNbO<sub>3</sub> crystals excited by surface acoustic waves // Physical Review B. 2001. Vol. 64. P. 134108 (9).

34. **Рошчупкин Д. В., Иржак Д. В., Тукулу Р., Матон О.** Дифракция рентгеновского излучения на 127° Y-срезу кристалла LiNbO<sub>3</sub>, промодулированном коротковолновой поверхностной акустической волной // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2002. № 1. С. 10–16.

35. Иржак Д. В., Рошупкин Д. В., Бузанов О. А., Сахаров С. А., Тукулу Р., Матон О. Дифракция рентгеновского излучения на кристалле  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ , промодулированном поверхностной акустической волной // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2003. № 1. С. 42–47.

36. Roshchupkin D. V., Irzhak D. V., Tucoulou R., Buzanov O. A. X-ray Bragg diffraction from langasite crystal modulated by surface acoustic wave // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 94. P. 6692–6696.

37. Schelokov I. A., Roshchupkin D. V., Irzhak D. V., Tucoulou R. Dynamical theory for calculation of X-ray spectra from crystals modulated by surface acoustic waves // Journal of Applied Crystallography. 2004. Vol. 37. P. 52–61.

38. Рошупкин Д. В., Иржак Д. В., Рошупкина Е. Д., Буза-

нов О. А., Сахаров С. А. Исследование дифракции рентгеновского излучения на  $Y$ -срезе кристалла лангасита, промодулированного поверхностной акустической волной, на лабораторном источнике рентгеновского излучения // Известия академии наук. Сер. физическая. 2004. Т. 68. № 4. С. 535–539.

39. Щелоков И. А., Рошупкин Д. В., Иржак Д. В. Брэгговская дифракция на кристаллах, промодулированных поверхностными акустическими волнами // Известия академии наук. Сер. физическая. 2004. Т. 68. № 4. С. 526–532.

40. Tucoulou R., Mathon O., Ferrero C., Mocella V., Roshchupkin D. V., Kumon R. E. Investigation of surface acoustic wave fields in silicon crystals by X-ray diffraction: A dynamical theory approach // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 97. P. 113505 (5).

УДК 681.5

О. Е. Глухова, канд. физ.-мат. наук,  
ГОУ Саратовский государственный университет имени  
Н. Г. Чернышевского

## ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОУСТРОЙСТВА НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦЫ $C_{60}@C_{450}$

*Представлены результаты теоретического исследования относительного движения фуллерена  $C_{60}$  в поле нанотрубки  $C_{450}$ . Показано на базе наночастицы  $C_{60}@C_{450}$ , что в случае инкапсулированного тубелена  $C_{60}$  возможно конструирование элемента памяти нанокomпьютера, а при инкапсулировании фуллерена  $C_{60}$  — создание наногирискапа.*

### Введение

Исследованию наностручков (углеродных нанотрубок с инкапсулированными фуллеренами) уделяется большое внимание: изучаются их оптические свойства [1], энергетика [2, 3] и ориентация фуллеренов в трубке [4], теплопроводность [5] и термодинамические свойства [6]. Уже реально рассматривается возможность конструирования на их основе наноэлементов памяти [7]. Экспериментальные и теоретические исследования доказали возможность относительного вращения оболочек наночастицы  $C_n@C_m$ , которое может осуществляться направленной подачей энергии [8, 9]. Эмпирически установлено, например, что в твердой фазе  $\text{Sc}_2\text{C}_{84}$  молекула  $C_2$ , заключенная в фуллерене  $C_{84}$ , обладает квантованным вращательным движением [10]. Это демонстрирует рамановский спектр в диапазоне  $50\text{--}150\text{ см}^{-1}$ . Будет ли вращаться инкапсулированная молекула, зависит от значения по-

тенциального барьера. Если барьер внутреннего вращения нулевой или, по крайней мере, очень незначителен, то вращение возможно, в том числе, и при достаточно высоких значениях температуры (до 200 К) [10].

Целью работы является детальное исследование двух типов движения молекулы  $C_{60}$  в закрытой нанотрубке  $C_{450}$ : поступательного вдоль оси нанотрубки и вращательного внутри нее. Необходимость изучения первого типа вызвана возможностью конструирования наноэлемента памяти в случае наличия для молекулы в капсуле двух и только двух потенциальных ям одинаковой глубины. Во втором случае наличие малого "трения" — благоприятный фактор для создания наногирискапа на основе фуллерена.

### 1. Метод изучения углеродных нанокластеров

Метод сильной связи хорошо известен и успешно применяется для изучения многоатомных мо-

лекул и кристаллов [9, 11, 12]. Предложенная в работе [12] модификация параметров метода (атомных термов, межатомных матричных элементов гамильтониана) позволяет рассчитывать атомную и электронную структуры углеродных кластеров (фуллеренов, нанотрубок, наноторов, эндоэдральных соединений и др.) при различных локальных изменениях каркаса и в случае относительного движения компонентов соединения. Матрица гамильтониана формируется в реальном пространстве в базисе  $s$ - и  $p$ -орбиталей внешних электронных слоев атомов углерода. Новая параметризация [12] хорошо зарекомендовала себя в вычислениях таких важных характеристик кластеров, как длина связей, энергетическая щель, ионизационный потенциал. Их значения для ряда фуллеренов и нанотрубок подтверждаются экспериментальными данными [9, 12, 15].

Предлагается [12] полную энергию кластера представлять в виде:

$$E = E_{\text{тер}} + E_{\text{bond}}, \quad (1)$$

где  $E_{\text{тер}}$  — феноменологическая энергия;  $E_{\text{bond}}$  — энергия заполненных электронных уровней. Феноменологическая энергия, учитывающая межэлектронное и межъядерное взаимодействия, представляется суммой парных отталкивательных потенциалов

$$E_{\text{тер}} = \sum_{i < j} V_{\text{тер}}(|r_i - r_j|), \quad (2)$$

где  $i, j$  — номера взаимодействующих атомов;  $r_i, r_j$  — декартовы координаты. Функция  $V_{\text{геп}}$  определяется выражением

$$V_{\text{геп}}(r) = V_{\text{геп}}^0 \left(\frac{1,54}{r}\right)^{4,455} \times \exp \left\{ 4,455 \left[ -\left(\frac{r}{2,32}\right)^{22} + \left(\frac{1,54}{2,32}\right)^{22} \right] \right\}, \quad (3)$$

где  $V_{\text{геп}}^0 = 10,92$  эВ. Энергия заполненных уровней

$$E_{\text{bond}} = 2 \sum_n \varepsilon_n, \quad (4)$$

где  $\varepsilon_n$  — энергия заполненного состояния с номером  $n$ , собственное значение гамильтониана (цифра "2" учитывает спин электрона). Межатомные матричные элементы гамильтониана задаются в виде:

$$V_{ij\alpha}(r) = V_{ij\alpha}^0 \left(\frac{1,54}{r}\right)^{2,796} \times \exp \left\{ 2,796 \left[ -\left(\frac{r}{2,32}\right)^{22} + \left(\frac{1,54}{2,32}\right)^{22} \right] \right\}, \quad (5)$$

где  $r$  — расстояние между атомами;  $i, j$  — орбитальные моменты волновых функций;  $\alpha$  — индекс, указывающий тип связи ( $\sigma$  или  $\pi$ ). Значения атомных термов  $\varepsilon_s, \varepsilon_p$  и равновесных интегралов пере-

крытия  $V_{ss\sigma}^0, V_{sps}^0, V_{pps}^0, V_{pp\pi}^0$ , вычисленные в работе [12], приведены в табл. 1.

Заключительным этапом модифицированного метода сильной связи является нахождение геометрии и энергетика кластера, соответствующих его основному состоянию. Это реализуется минимизацией (компоненты вектора варьируемых параметров — линейным параметрам каркаса кластера) полной энергии  $E$ , определяемой формулой (1).

## 2. Атомная структура и энергетика соединения $C_{60}@C_{450}$

Известно, что каркас  $C_{450}$  образован двумя фуллереновыми шапочками и трубкой (15,0), содержащей 300 атомов. Строение каркаса  $C_{450}$  было установлено методом, изложенным выше: молекула  $C_{450}$  есть закрытая нанотрубка симметрии  $D_{5h}$ . На рис. 1 представлена образованная поперечным сечением половина остова  $C_{450}$ , где  $C_2$  и  $C_5$  — оси симметрии;  $\sigma_h$  — горизонтальная плоскость симметрии. Фуллереновый фрагмент молекулы образован шестью правильными пятиугольниками и пятью правильными шестиугольниками (длины связей отмечены цифрами 1 и 2). Кроме того, шапочка содержит

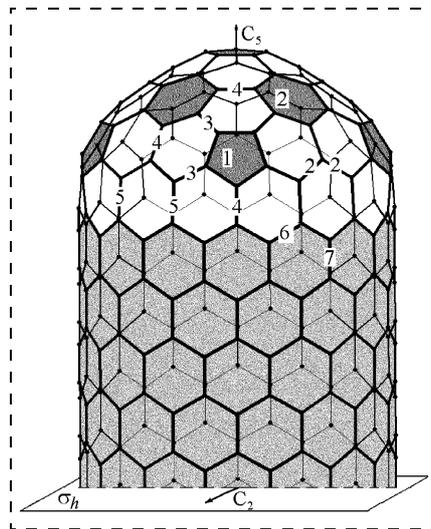


Рис. 1. Углеродная нанотрубка  $C_{450}$  ( $D_{5h}$ )

гексагоны, образующие в местах стыка с трубкой длины связей 3, 4 и 5. Цилиндрический фрагмент молекулы (собственно нанотрубка) собран из неправильных гексагонов с длинами связей 6 и 7.

Численные значения длин связей, потенциала ионизации  $I$ , энергетической щели  $E_g$ , энергии на атом  $E_1$ , энергии атомизации  $E_a$ , приращения энтальпии молекулы  $\Delta H(C_n)$  приведены в табл. 2. Диаметр каркаса трубки равен 11,64 Å (1,164 нм), длина — 31,42 Å (3,142 нм).

Известно, что молекула  $C_{60}$  может быть и фуллереном, и тубеленом.

Таблица 1  
Атомные термы углерода и равновесные интегралы перекрытия (эВ)

$\varepsilon_s$	$\varepsilon_p$	$V_{ss\sigma}^0$	$V_{sp\sigma}^0$	$V_{pp\sigma}^0$	$V_{pp\pi}^0$
-10,932	-5,991	-4,344	3,969	5,457	-1,938

Таблица 2

### Геометрические и энергетические характеристики наночастицы $C_{60}@C_{450}$

Параметры	Трубка $C_{450}$ ( $D_{5h}$ )	Инкапсулированный фуллерен $C_{60}$ ( $D_{5d}$ )	Наночастица $C_{60}$ ( $D_{5d}$ )@ $C_{450}$	Инкапсулированный тубелен $C_{60}$ ( $D_{6d}$ )	Наночастица $C_{60}$ ( $D_{6h}$ )@ $C_{450}$
$r_1, \text{Å}$	1,388	1,461	—	1,421	—
$r_2, \text{Å}$	1,405	1,453	—	1,504	—
$r_3, \text{Å}$	1,386	1,458	—	1,434	—
$r_4, \text{Å}$	1,425	1,412	—	1,430	—
$r_5, \text{Å}$	1,540	1,402	—	1,440	—
$r_6, \text{Å}$	1,405	1,364	—	—	—
$r_7, \text{Å}$	1,420	1,393	—	—	—
$I(C_n), \text{эВ}$	6,482	7,326	6,462	7,081	6,544
$E_g(C_n)$	0,213	1,626	0,426	0,701	0,082
$E_1(C_n), \text{эВ/атом}$	-43,038	-42,955	-43,155	-42,867	-43,150
$E_a(C_n), \text{эВ/атом}$	7,005	6,922	7,122	6,834	7,114
$\Delta H(C_n), \text{ккал/моль} \cdot \text{атом}^{-1}$	9,775	11,684	7,084	13,715	7,268

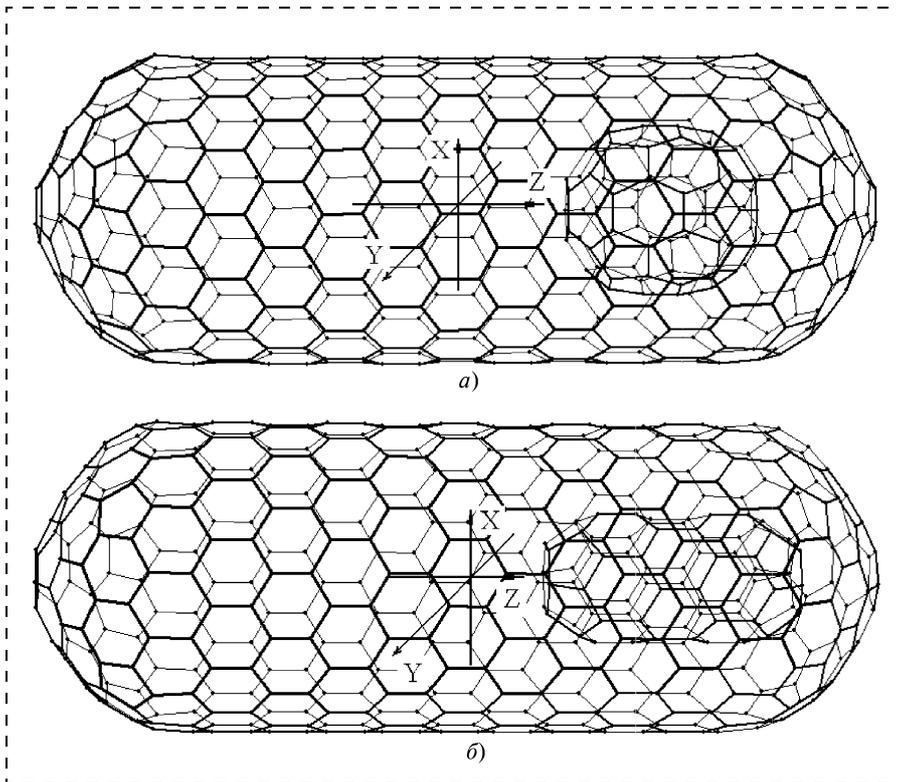


Рис. 2. Наночастица  $C_{60}@C_{450}$ :

*a* — с инкапсулированным фуллереном; *b* — с тубеленом

Молекула  $C_{60}$  как фуллерен в свободном состоянии имеет симметрию  $I_h$  и обнаруживает две длины связи: 1,45 и 1,4 Å (0,145 и 0,14 нм) [13]. Атомы лежат на сфере радиусом 6,7 Å (0,67 нм).

Методом сильной связи была

изучена инкапсуляция фуллерена  $C_{60}$  в  $C_{450}$ , приведшая к образованию наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  (рис. 2, *a*). Обнаружено, что действие симметричного внешнего поля  $C_{450}$  вызвало, во-первых, понижение группы симметрии

каркаса  $C_{60}$  с  $I_h$  до  $D_{5d}$ , и, во-вторых, его поперечную деформацию. В результате фуллерен  $C_{60}$  принял геоидную форму с размерами: 7,038 Å (0,7038 нм) по оси  $Z$  и 6,432 Å (0,643 нм) в поперечном сечении (рис. 3, *a*).

Результаты расчета длин связей и энергетических параметров  $C_{60}$  ( $D_{5d}$ ) и наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  приведены в табл. 2.

Молекула  $C_{60}$  как тубелен детально изучена в работе [12]. Каркас (рис. 3, *b*) соответствует группе симметрии  $D_{6h}$  и характеризуется пятью длинами  $C-C$  связей: стороной правильного шестиугольника на крышке тубелена (1 — 1,421 Å), ребром, смежным двум пятиугольникам (2 — 1,505 Å) и тремя различными сторонами гексагона, не лежащего на крышке кластера (3 — 1,434 Å, 4 — 1,430 Å, 5 — 1,411 Å). В длину каркас имеет 9,451 Å, в поперечнике — 4,916 Å.

В результате инкапсулирования тубелена  $C_{60}$  в трубку  $C_{450}$  образовался новый изомер наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  (см. рис. 2, *b*). В поле капсулы  $C_{450}$  каркас тубелена  $C_{60}$  остался практически неизменным с сохранением группы симметрии  $D_{6h}$ . Значения длин связей и энергетических параметров тубелена  $C_{60}$  ( $D_{6h}$ ) и соответствующей наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  приведены в табл. 2.

Установлено [15], что необходимыми условиями возможности существования движений (поступательного или вращательного) молекулы  $C_{60}$  внутри нанотрубки являются экзотермичность инкапсулирования  $C_{60}$  и слабая (оптимально — нулевая) деформируемость нанотрубки. Имея в виду дальнейшие исследования, также методом сильной связи были рассчитаны соответствующие характеристики  $C_{60}@C_{450}$ . Выяснилось, что диаметр каркаса нанотрубки остался неизменным 11,64 Å при инкапсулировании молекулы  $C_{60}$  (и как фуллерена, и как тубелена), а численное значение изменения энтальпии  $\Delta H = -2,717$  ккал/моль · атом<sup>-1</sup> и  $\Delta H = -3,125$  ккал/моль · атом<sup>-1</sup> соответственно.

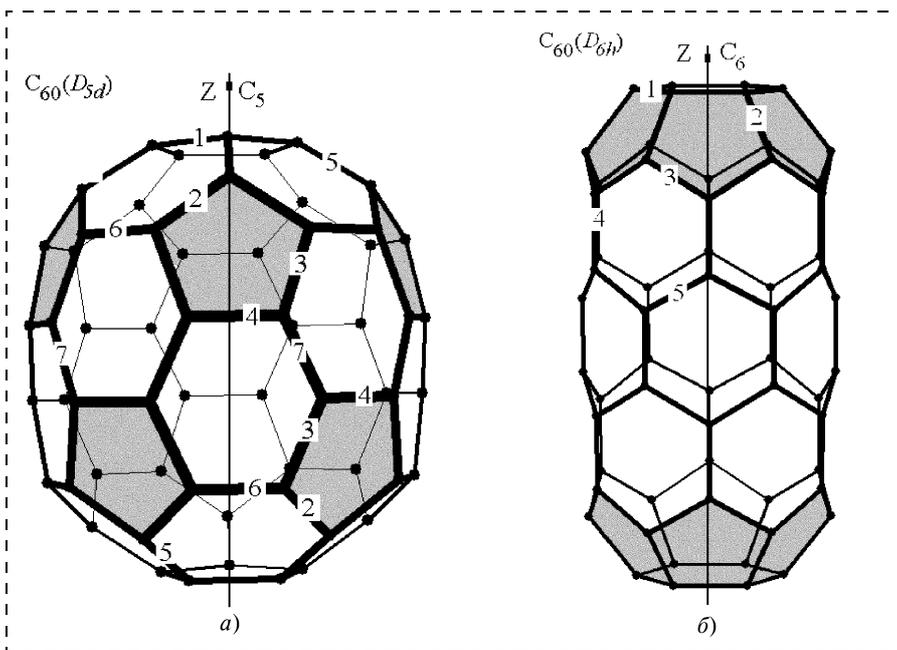


Рис. 3. Молекула  $C_{60}$  после инкапсулирования в трубку  $C_{450}$ :

*a* — фуллерен; *b* — тубелен

### 3. Функциональные устройства на базе наночастицы C<sub>60</sub>@C<sub>450</sub>

**Наноэлемент памяти.** Идея создания наноэлемента памяти заключается в равновероятном обнаружении молекулы C<sub>60</sub> в приконцевых потенциальных ямах распределения энергии взаимодействия молекулы с трубкой. Положению молекулы в той или иной концевой яме можно условно поставить в соответствие 0 или 1 бит информации. Перескок из одного состояния в другое происходит практически мгновенно под действием внешней силы, например, напряженности внешнего электрического поля. Поэтому сама возможность создания наноэлемента памяти с необходимостью требует наличия двух и только двух потенциальных ям энергии взаимодействия молекулы C<sub>60</sub> и C<sub>450</sub> в процессе поступательного движения C<sub>60</sub> вдоль оси трубки.

Нашей ближайшей задачей как раз и является исследование распределения энергии по длине трубки. Исходным для анализа является следующее выражение энергии взаимодействия E<sub>1-2</sub> фуллерена с полем трубки:

$$E_{1-2} = \sum_{i=1}^{N_{1-2}} (E_{\text{геп}_i} + U_i). \quad (6)$$

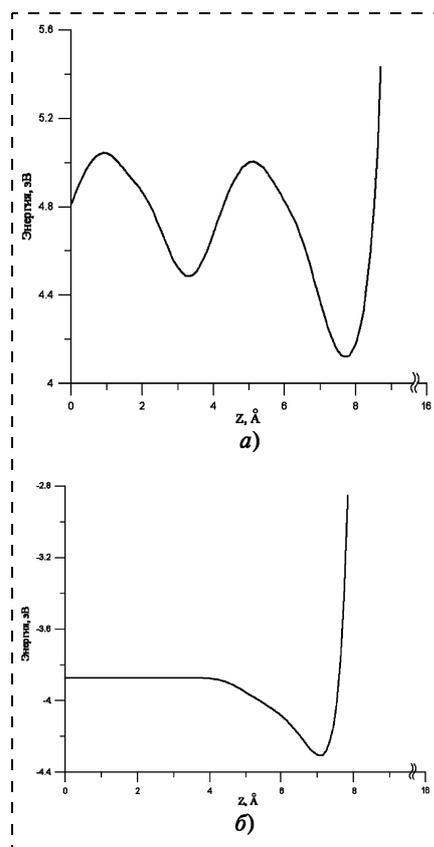
Здесь E<sub>геп</sub> — феноменологическая энергия, учитывающая молекулярное и межэлектронное взаимодействия между атомами разных оболочек; U — потенциал Леннарда—Джонса; i — счетчик пар атомов, принадлежащих разным оболочкам наночастицы; N<sub>1-2</sub> — число пар (для молекулы C<sub>60</sub> N<sub>1-2</sub> = 27000); E<sub>геп<sub>i</sub></sub> рассчитывается по формуле (2) с учетом того, что i, j — номера двух атомов двух разных объектов соединения C<sub>60</sub>@C<sub>450</sub>; U<sub>i</sub> — потенциал взаимодействия Ван-дер-Ваальса [14]:

$$U_i = \frac{A}{\sigma^6} \left( \frac{1}{2} y_0^6 \frac{1}{(r_i/\sigma)^{12}} - \frac{1}{(r_i/\sigma)^6} \right), \quad (7)$$

где r<sub>i</sub> — расстояние между атомами i-й пары; σ = 1,42 Å — длина C—C связи; y<sub>0</sub> = 2,7 и A = 24,3 · 10<sup>-79</sup> Дж · м<sup>6</sup> — эмпирически подобранные параметры [14].

На рис. 4 приведены зависимости энергии взаимодействия молекулы C<sub>60</sub> с полем трубки E<sub>1-2</sub>, рассчитанной по формуле (6); z — координата центра масс молекулы C<sub>60</sub>, движущейся от середины (z = 0) нанотрубки C<sub>450</sub> к ее периферии. Отсюда видно, что основой для создания элемента памяти может служить молекула C<sub>60</sub> только как тубелен C<sub>60</sub>.

**Наногироскоп.** В основе конструкции наногироскопа лежит следующая идея. Молекула-ги-



**Рис. 4.** Кривая энергии взаимодействия молекулы C<sub>60</sub>, движущейся от центра трубки к ее фуллереновой шапочке, с трубкой C<sub>450</sub>:

a — фуллерен; б — тубелен

роскоп должна иметь возможность свободного вращения в поле внешней оболочки (вращательный барьер — нулевой или очень незначителен), но иметь одно фиксированное положение оси вращения. Такую ориентацию оси гироскопа может обеспечить удерживающий внешний потенциал, не оказывающий заметного деформирующего эффекта на молекулу фуллерена, с одной стороны, и не допускающий при этом сколько-нибудь существенной переориентации оси вращения в поле внешней оболочки, с другой стороны. Фуллерен C<sub>60</sub> инкапсулированный в C<sub>450</sub>, полностью удовлетворяет этим требованиям.

Кроме того, рассчитана поверхность полной энергии E (1) фуллерена, находящегося в глубокой потенциальной яме, при последовательных поворотах вокруг осей Z и X (рис. 5, а) в капсуле C<sub>450</sub>. Анализ многоямной поверхности показал значительное возрастание энергии при вращении вокруг оси X (потенциальный барьер достигает более 20 эВ), что делает вращение вокруг оси X невозможным. Для вращения вокруг оси Z барьер незначителен — 0,41 эВ. Формы потенциальных барьеров при поворотах вокруг осей Y и Z показаны на рис. 5, б. Таким образом, ось C<sub>5</sub> (ось Z, см. рис. 2, а) — главная ось инерции фуллерена — является осью вращения наногироскопа.

Если наночастице C<sub>60</sub>@C<sub>450</sub> с инкапсулированным фуллереном подается энергия, часть ее идет на вращательное движение C<sub>60</sub> вокруг оси Z и фуллерен, как было показано выше, становится гироскопом. Такая подача энергии частице возможна, например, в процессе ориентационного плавления [9], при квазиупругом и неупругом столкновении фуллеренов, сопровождающемся передачей энергии 1,5...21,5 эВ [16]. Частота наногироскопа квантована. Энергия вращения C<sub>60</sub> вычислена в рамках модели симметричного волчка, два из главных моментов инерции волчка совпадают

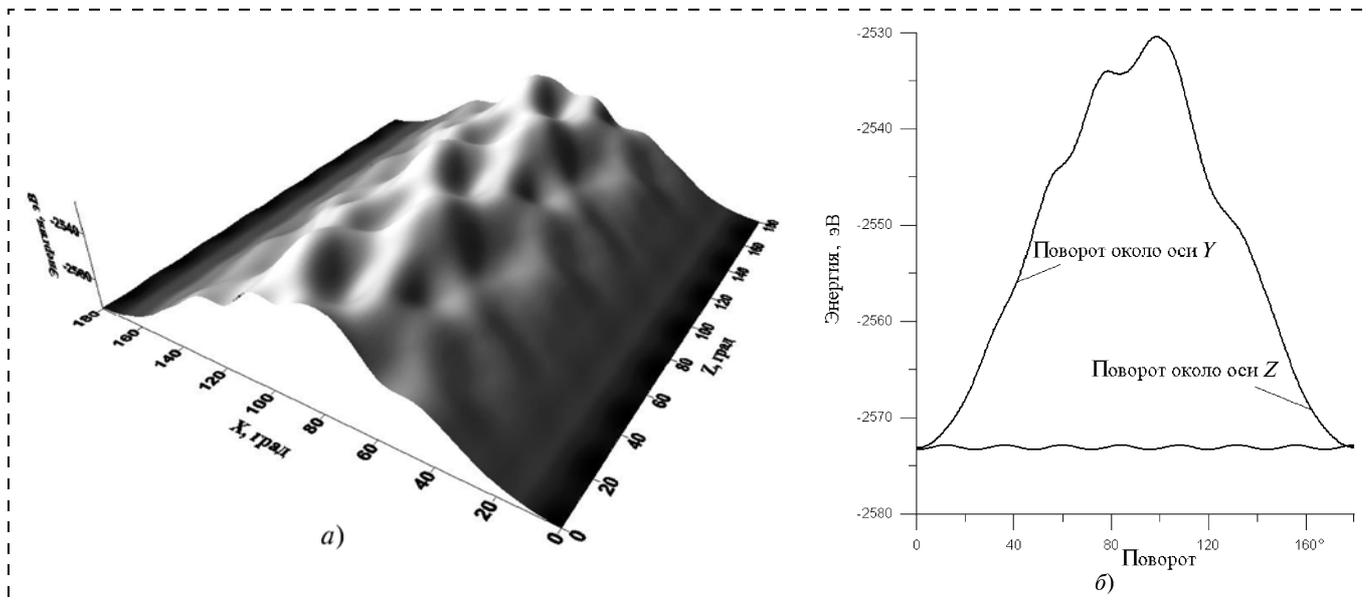


Рис. 5. Полная энергия фуллера  $C_{60}$ :

*a* — поверхность энергии при последовательных поворотах около осей  $Z$  и  $X$ ; *б* — вращательный барьер при поворотах  $C_{60}$  около осей  $Z$  и  $Y$

Таблица 3

Вращательные уровни фуллера  $C_{60}$ , инкапсулированного в нанотрубку  $C_{450}$

$k$	0	+1	2	3	4	5	6
Частота, $см^{-1}$	0,278	0,476	1,070	2,061	3,448	5,231	7,411
$k$		7	8	9	10	11	12
Частота, $см^{-1}$		9,986	12,958	16,327	20,091	24,252	28,809

( $I_A = I_B \neq I_C$ ;  $I_X = I_Y = 6,17 \cdot 10^{-42}$ ;  $I_Z = 5,50 \cdot 10^{-44}$   $кг \cdot м^2$ ). Стационарные вращательные состояния фуллера характеризуются тремя квантовыми числами: моментом вращения  $J$ , его проекцией  $J_\zeta$  на ось волчка и его проекцией  $J_z$  на фиксированную в пространстве ось  $Z$ . В нашем случае  $J_\zeta$  и  $J_z$  совпадают. Собственные значения  $J_\zeta$  обозначим буквой  $k$ :  $k = -J, \dots, +J$ , где  $J$  (целое число) — значение момента волчка. Тогда в состоянии с определенными значениями  $J$  и  $k$  энергия равна [17]

$$E_k^J = \frac{\hbar^2}{2I_A} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{I_C} - \frac{1}{I_A} \right) k^2. \quad (8)$$

Вырождение будет наблюдаться при одинаковых по модулю

значениях  $k$  (что соответствует взаимно противоположным направлениям момента относительно оси волчка); при  $k \neq 0$  уровни энергии симметричного волчка будут двукратно вырожденными. Вращательные уровни представлены в табл. 3. Для сравнения, при том же значении  $J = 12$  эксперимент дает квантованный набор значений от 11 до 76  $см^{-1}$  вращающейся молекулы  $C_2$  в поле фуллера  $C_{84}$  [10] при моменте инерции  $1,617 \cdot 10^{-46}$   $кг \cdot м^2$ .

### Выводы

Результатом выполненных исследований явилось доказательство следующих утверждений.

1. Образование наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  экзотермично и происходит без изменения каркаса закрытой нанотрубки  $C_{450}$ .

2. Инкапсулирование фуллера  $C_{60}$  в трубку  $C_{450}$  сопровож-

дается его изомеризацией с одновременной поперечной деформацией остова и понижением группы симметрии каркаса  $C_{60}$  с  $I_h$  до  $D_{5d}$ . Инкапсулирование же тубулена  $C_{60}$  ( $D_{6h}$ ) изменений строения его каркаса не вызывает.

3. Основное состояние наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  соответствует расположению молекулы  $C_{60}$  в приконцевых потенциальных ямах — в областях фуллереновых шапочек нанотрубки  $C_{450}$ .

4. На основе наночастицы  $C_{60}@C_{450}$  можно конструировать как наноэлемент памяти, так и наногироскоп. В первом случае в качестве молекулы  $C_{60}$  в трубку  $C_{450}$  надо инкапсулировать тубулен, во втором — фуллерен.

### Список литературы

1. Katura H., Maniwa Y., Fujiwara M. et al. Optical properties of fullerene and non-fullerene peapods // Appl. Phys. A, 2002. V. 74. P. 349–354.
2. Dubay O., Kresse G. Density functional calculations for C60 peapods // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. N 16. P. 165424(10).
3. Otani M., Okada S., Oshiyama A. Energetics and electronic structures of one-dimensional fullerene chains encapsulated in zigzag nanotubes // Phys. Rev. B. 2003. 68. N 12. P. 125424(8).
4. Suenaga K., Okazaki T., Hirahara K. et al. High-resolution electron microscopy of individual metallofullerene molecules on the dipole orientations in peapods // Appl. Phys. A. 2003. V. 76. P. 445–447.

5. Noya E. G., Srivastava D., Chernozatonskii L. A. et al. Thermal conductivity of carbon nanotube peapods // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. N 11. P. 115416(5).

6. Girifalco L. A., Hodak M. One-dimensional statistical mechanics models with application to peapods // Appl. Phys. A. 2003. V. 76. P. 487–498.

7. Lee C. H., Kang K. T., Park K. S. et al. The nano-memory devices of a single wall and peapod structural carbon nanotube field effect transistor Jpn // Appl. Phys. 2003. V. 42. P. 5392–5394.

8. Porto M., Urbakh M., Klafter J. Atomic Scale Engines: Cars and Wheels // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. N 26(1). P. 6058–6061.

9. Глухова О. Е., Жбанов А. И., Резков А. Г. Исследование вращения внутренней оболочки наночастицы  $C_{20}@C_{80}$  // ФТТ. 2005. Т. 47. № 2. С. 376–382.

10. Krause M., Nuhman M., Kuzmany H. et al. Fullerene Quantum Gyroscope // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. N 13. P. 137403(4).

11. Хохряков Н. В., Савинский С. С., Молина Дж. М. Фотонные спектры углеродных нанотрубок // Письма в ЖЭТФ. 1995. V. 62. № 7. С. 595–598.

12. Глухова О. Е., Жбанов А. И. Равновесное состояние нанокластеров  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{72}$  и локальные дефекты молекулярного остова // ФТТ. 2003. V. 45. № 1. С. 180–186.

13. Copley J. R. D., Neumann D. A., Cappelletti R. L., Kamitakahara W. A. Neu-

tron scattering studies of  $C_{60}$  and its compounds // Phys. Chem. Solids. 1992. V. 53. N 1. P. 1353–1356.

14. Qian D., Liu W. K., Ruoff R. S. Mechanics of  $C_{60}$  in Nanotubes // J. Phys. Chem. B. 2001. V. 105. P. 10753–10758.

15. Глухова О. Е., Дружинин А. А., Жбанов А. И., Резков А. Г. Структура фуллеренов высоких групп симметрии // ЖСХ. 2005. Т. 46. № 3. С. 514–520.

16. Xia Y., Xing Y., Tan C., Mei L. Dimerization and fusion of  $C_{60}$  molecules caused by molecular collision // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. N 20. P. 13871–13876.

17. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Теоретическая физика. Т. 3. М.: Наука, 1989. 768 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\*.

### V. Резонансно-туннельные структуры

*В данной части работы систематизированы и проанализированы модели резонансно-туннельных структур твердотельной наноэлектроники.*

#### Введение

Основными приборами на эффекте резонансного туннелирования в многослойных твердотельных структурах [1–3] являются диоды и транзисторы [1–5]. С использованием резонансно-туннельных диодов (РТД) и транзисторов (РТТ) разработано большое число разнообразных аналоговых, цифровых и аналого-цифровых схем [4–8]. Обращают на себя внимание удачные примеры интеграции РТД и РТТ с такими приборными структурами микроэлектроники, как диоды Шоттки, КМОП-элементы, гетероструктурные биполярные транзисторы, гетероструктурные полевые транзисторы с селективным легированием и др. Более того, возможно создание функционально-интегрированных элементов, включающих РТД, РТТ и элементы микроэлектроники. В данных случаях речь часто идет об элементах гибридной наноэлектроники.

В целом схемы, включающие РТД и РТТ, обладают следующими основными достоинствами, на-

пример, по сравнению с традиционными логическими схемами (КМОП и др.), а именно [6]:

- относительно меньшей сложностью схем на одну выполняемую функцию;
- более низкой мощностью;
- повышенным быстродействием.

Отметим, что в настоящее время созданы РТД с частотами функционирования более 2 ТГц. Это самые быстродействующие приборы твердотельной электроники. Рассмотренные причины и привели к выводу [8], что РТД является "наиболее "созревшей" из всех приборных технологий" наноэлектроники. Необходимо отметить перспективность использования резонансно-туннельных структур и в оптоэлектронике [9]. Принципиально важным является работоспособность ряда приборных структур наноэлектроники данного типа при комнатных температурах.

Проанализируем модели РТД, как наиболее развитые в настоящее время среди моделей не только резонансно-туннельных приборов, но и других приборных структур наноэлектроники. Это, с одной стороны, позволит провести достаточно полную систематизацию моделей, а с другой — прогнозировать основные направления создания моделей элементов наноэлектроники других типов, а также выделить перспективные принципы их моделирования.

Несмотря на, казалось бы, относительно простой принцип функционирования РТД [1–3] протекающие в реальном приборе физические процессы, как правило, существенно усложняются вследствие следующих факторов:

- прибор является квантовой открытой системой, так как имеет место обмен энергией и частицами, в частности, с источником питания, а следовательно, принципиально важны его взаимодействия с окружением (включая влияние температуры окружающей среды);

\* См. Ч. I и II в № 8, 9 за 2006 г., Ч. III и IV в № 1, 2 за 2007 г.

- электроны в приборе могут рассеиваться на фонах, неровностях поверхностей раздела, примесях, дефектах, электронах и др.;
- значительное влияние могут оказывать различного рода флуктуации (толщин слоев, распределения примеси, состава и др.);
- важна реальная зонная структура исследуемой системы;
- значительное влияние могут оказывать заряды на поверхностях раздела и др.

Эти факторы существенно усложняют задачу, приводят к дополнительным резонансному и последовательному туннелированию механизмов транспорта и делают ее фактически неразрешимой в строгом виде даже для РТД. К сожалению, практически невозможна и строгая постановка задачи моделирования конкретного РТД.

Как же поступить в данном случае? На помощь приходит понятие грубости модели [10]. Использование трех методов синтеза моделей [11, 12] приводит также к созданию моделей двух основных разновидностей [12]: физико-топологических и электрических. При этом в рамках рассмотренных формализмов [13] могут быть, в принципе, построены подобные (полуклассическому подходу [12]) иерархии моделей (см. ниже).

Упрощенные модели (см., например, обзоры в [14—19]), которые в соответствии с определением [12] могут быть названы физико-топологическими, к сожалению, дают малоудовлетворительные результаты. Они, как правило, приводят лишь к грубым качественным оценкам. Так, при расчете таких важных характеристик РТД, как контрастность и крутизна вольт-амперных характеристик (ВАХ), предельная частота генерации, погрешность может достигать 100 % и намного больше. Для получения удовлетворительных результатов согласования с экспериментальными данными даже по отдельным характеристикам ряд исходных параметров моделей становится чисто подгоночным. Причиной этого является излишне идеализированный характер упрощенных физико-топологических моделей. В них, как правило, учтен лишь основной принцип функционирования РТД. При этом не учитывается большинство из отмеченных факторов. В результате *в настоящее время нет упрощенных моделей, с помощью которых можно было бы удовлетворительно относительно экспериментальных данных рассчитать ВАХ приборных структур на эффекте резонансного туннелирования в более или менее широком диапазоне прикладываемых напряжений, технологических и электрофизических параметров.* Ситуация здесь подобна с некоторыми упрощенными физико-топологическими моделями элементов микроэлектроники. Электрические же модели в основном предназначены для анализа схем, включающих резонансно-туннельные структуры. Поэтому далее рассмотрим вопросы численного моделирования с применением более адекватных распределенных дискретных моделей.

## Модели формализма волновых функций

При использовании этого формализма не решается многочастичная задача, которую, строго говоря, необходимо было бы рассматривать при моделировании резонансно-туннельных приборных структур. Традиционным стало применение одночастичного приближения и метода эффективной массы в усредненном поле частиц в приборе (эффективный учет и многочастичных эффектов), приводящих к более простому уравнению Шредингера. В результате многие микроскопические детали не нужны, а следовательно, они теряются. Преимуществом является то, что такие численные модели относительно просты, могут быть практически реализованы на современных ЭВМ, однако, к сожалению, часто приводят к малоудовлетворительным результатам. Несмотря на то, что в рамках данных моделей доминирующий эффект резонансного туннелирования, в принципе, описывается верно, для адекватного моделирования ВАХ приборных структур необходимо учесть, по крайней мере, некоторые из отмеченных ранее факторов.

Основным исходным уравнением в стационарном случае в одночастичном приближении при использовании метода эффективной массы является уравнение Шредингера следующего вида [20]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ ;  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор пространства;  $m^*$  — эффективная масса частицы;  $V(\mathbf{r})$  — потенциал (эффективный), характеризующий влияние внешних полей;  $\psi(\mathbf{r})$  — одночастичная волновая функция;  $E$  — энергия частицы. Традиционно рассматривается одномерный случай.

В классической упрощенной модели Тсу—Есаки [2] было использовано более десяти физических предположений. Кроме отмеченных, дополнительно применялись следующие допущения:

- пренебрегалось изменением эффективных масс от слоя к слою;
- период решетки меньше, чем длина свободного пробега носителей;
- слои моделируются потенциальными барьерами и ямами постоянной высоты и глубины;
- перенос заряда преимущественно осуществляется одним типом носителей (электронами);
- поле в структуре однородное;
- нет источников и стоков на переходных слоях и др.

Интересно заметить, что несмотря на то, что "сценарий развития" моделей в рамках данного формализма фактически происходил по пути уменьшения числа предположений модели Тсу—Есаки, некоторые из них остались и в самых высокоадекватных дискретных моделях рассматри-

ваемого формализма (хорошие обзоры численных моделей приведены в [16, 21]). Причина этого в исключительно высокой степени сложности задачи (большая чувствительность к различным воздействиям и др.) и невозможности учета влияния всех отмеченных ранее факторов в полном объеме.

В соответствии с основным уравнением моделей данного формализма (1) две величины обычно и определяют их адекватность — это потенциал  $V(\mathbf{r})$  и эффективная масса  $m^*$ . Поэтому главные проблемы здесь связаны с заданием именно этих двух величин. Много, конечно, зависит от корректности постановки граничных условий. Так как туннелирование — это фактически частный случай одномерного рассеяния, то основные сложности все же связаны с заданием  $V(\mathbf{r})$ . К сожалению, строгое определение этой величины практически невозможно, хотя бы вследствие ее эффективного характера. В [21] приведен перечень ее составляющих, определяемых сдвигом зон на гетеропереходах, прикладываемым напряжением к прибору, профилем легирования и подвижными зарядами, корреляционными и обменными взаимодействиями. В целом, данный потенциал должен учитывать не только эти, но и другие факторы из отмеченных ранее, что значительно усложняет описание поведения РТД. К сожалению, этого пока никто не сделал!

Вначале были попытки задать потенциал  $V(\mathbf{r})$  в (1) с помощью простых аналитических аппроксимаций. В результате задача сильно упрощается и необходимо решать только уравнение Шредингера (1). Традиционно при этом считается, что носители движутся баллистически в различных областях структуры. При введении дальнейших упрощений для построения моделей часто используются следующие хорошо известные и отработанные методы: Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна, матриц переноса, сильной связи, аналогии с расчетом линий передач. Более строгие модели обычно основаны на численном решении уравнения Шредингера с помощью методов конечных разностей или матриц переноса (см., например, [16, 21]). К сожалению, модели, в которых применяются простые аналитические аппроксимации потенциала  $V(\mathbf{r})$ , как правило, дают неудовлетворительные результаты согласования с экспериментом. Очевидно, что это связано с низкой точностью задания  $V(\mathbf{r})$ .

В более строгих моделях для нахождения потенциала дополнительно обычно используется уравнение Пуассона [21]. При этом для концентраций подвижных носителей заряда применяются квантовомеханические соотношения, по крайней мере, в квантовой яме (см., например [21—24]). Далее электростатический потенциал  $\phi$  используется для нахождения  $V(\mathbf{r})$ . Таким образом, необходимо решать систему уравнений Шредингера и Пуассона, т. е. самосогласованную задачу. После этого проходящий ток вычисляется на основе известного строгого квантовомеханического соотношения [21] или с помощью формулы Тсу—Есаки [2].

Так как нет работ, в которых учитывалась бы вся гамма отмеченных ранее факторов, то имеется много не только относительно простых, но и численных моделей, плохо согласующихся с экспериментальными данными. Удовлетворительное согласование может быть получено с использованием моделей, в которых учитываются, по крайней мере, следующие факторы: заряд квантовой ямы, последовательные сопротивления пассивных областей, рассеяние в квантовой яме. Это достигается с помощью некоторых численных моделей [21—23, 25].

Учет заряда в пассивных областях и квантовой яме важен при расчете ВАХ РТД [21]. Не менее важно представление при моделировании структуры РТД в виде подобластей, в частности, где имеет место тепловое равновесие, где можно использовать полуклассический подход (макроскопические области), где принципиально необходимо применять квантовомеханический подход, так как разбиение обычно сильно влияет на заряд в квантовой яме и плотность проходящего тока. Как проводить это разбиение? В настоящее время не совсем ясно, так как оно зависит от таких факторов, как структура, прикладываемые смещения и температура. Интересно заметить, что *разработка таких комбинированных моделей, в которых применяются полуклассический и квантовомеханический подходы, фактически обязательна* не только для экономии вычислительных ресурсов ЭВМ, но и вследствие возможных численных проблем при использовании только квантовомеханического подхода для всего прибора.

Учет неупругого рассеяния обычно также является важным [21]. Один из наиболее экономичных подходов здесь основан на введении комплексной составляющей в эффективный гамильтониан [21, 25, 26]. В ряде случаев важен учет многозонных эффектов [21], второго измерения [27], поверхностного заряда на границах раздела [25, 28]. Более того, возможно "усиление" влияния при одновременном учете некоторых из отмеченных факторов, например, температуры и эффектов рассеяния [29], что еще больше усложняет задачу.

Кратко о другой величине. Метод эффективной массы, как известно, является приближенным и, строго говоря, применим в окрестности экстремумов зон полупроводника. Кроме того,  $m^*$  — это тензор, а следовательно, использование изотропных по слоям величин при моделировании РТД, по крайней мере, не совсем корректно. Ситуация еще более усложняется вследствие того, что при расчетах эффективные массы берутся равными значениями для соответствующих объемных материалов. Не вызывает сомнений то, что для низкоразмерных областей эти величины могут отличаться от указанных. Вследствие изложенного *при моделировании РТД эффективные массы целесообразно задавать в качестве подгоночных параметров при согласовании с экспериментом, особенно в упрощенных моделях.*

К сожалению, по описанным причинам в настоящее время в рамках рассматриваемого формализма пока не создано модели РТД для расчета ВАХ, которая могла бы быть применима в широком диапазоне конструктивно-технологических параметров и воздействий и при этом дающая хорошее согласование с экспериментом. Несмотря на это модели данного формализма широко используются ввиду их относительной простоты, вычислительной эффективности и, по крайней мере, возможности правильного предсказания качественного поведения электрических характеристик приборов. В целом, здесь предстоит еще многое сделать.

*Кардинальное направление качественного улучшения моделей формализма волновых функций должно быть, по-видимому, в переходе к решению многочастичной задачи и в отказе от использования метода эффективной массы. Серьезные опасения [30] вызывает и обычное применение формулы Тсу—Есаки для плотности тока одномерного приближения. Желательна и разработка двух- и трехмерных моделей. Необходимо также создание более совершенных комбинированных моделей, описывающих взаимодействие классических и квантовомеханических областей на основе иерархии моделей, обладающих требуемой адекватностью моделирования для соответствующих областей прибора. Возможно более строгое рассмотрение и на основе системы уравнений Шредингера, описывающих все подсистемы (например, электроны, дырки, фононы и т. п.), входящие в исследуемую приборную структуру и оказывающие влияние на ее функционирование. Ясно, что эта система уравнений должна учитывать хотя бы определяющие взаимодействия между подсистемами. В целом, модели, базирующиеся на формализме волновых функций, целесообразно по-прежнему развивать для приборных структур на эффекте резонансного туннелирования несмотря на встречающиеся сложности на данном пути.*

### Модели формализма матриц плотности

Данный формализм при моделировании РТД используется нечасто (см., например, [31, 32]). При этом обычно рассматривается одночастичная матрица плотности и применяется приближение эффективной массы, а следовательно, упрощенное кинетическое уравнение, которое, строго говоря, необходимо вывести из уравнения Лиувилля—фон Неймана (2) из [13]. Интересный возможный вариант такого подхода описан в книге [32]. Кинетическое уравнение для одночастичной матрицы плотности  $\rho(x, x', t)$  записывается в виде [32]

$$i\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla_x^2 - \nabla_{x'}^2) + V(x) - V(x') \right\} \times \rho(x, x', t) + i\hbar \left\{ \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} \right\}_c, \quad (2)$$

где  $t$  — время;  $i$  — мнимая единица;  $m^*$  предполагается независимой от координаты  $x$ , а последний член в (2) является общим представлением рассеяния, который записывается в полуклассической манере [12, 32]. Это позволяет легко ввести в уравнение квазиуровни Ферми, что существенно облегчает анализ. При моделировании РТД получаемое из (2) уравнение решается совместно с уравнением Пуассона. Основными дополнительными ограничениями данного подхода являются следующие [32]: не включаются антисимметричные компоненты в решаемое уравнение для матрицы плотности; для задания граничных условий на контактах для матрицы плотности используется равновесная функция распределения Ферми—Дирака. К сожалению, в настоящее время не исследована допустимость этих предположений при моделировании приборных структур наноэлектроники. Справедливости ради отметим, что аналогичные недостатки, как правило, характерны и для формализма функций Вигнера (одночастичный случай). Сложности также возникают при задании тока на границах. Чтобы избежать их, необходимо вывести дополнительное соотношение, что несложно в одномерном случае. В [32] не приведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, что не позволяет оценить реальные возможности описанного подхода.

К сожалению, формализм матриц плотности при моделировании резонансно-туннельных приборных структур не получил такого широкого распространения, как в физике твердого тела. Считается [31], однако, что решить уравнение для матрицы плотности проще, чем для функции распределения Вигнера.

### Модели формализма функций Вигнера

Данный формализм при моделировании РТД используется достаточно часто. Впервые он применялся в работе [33], однако без уравнения Пуассона. В дальнейшем [34, 35] начали использовать кинетическое уравнение для функции Вигнера совместно с уравнением Пуассона. Несмотря на то, что вигнеровское представление квантовой механики эквивалентно традиционному, считается, что для формализма функций Вигнера в рассматриваемых задачах свойственны следующие основные достоинства: хорошая применимость для моделирования переходных процессов и малосигнального анализа; наиболее естественный учет процессов рассеяния.

*Анализ переходных процессов чрезвычайно важен именно для наноэлектронных приборных структур, хотя бы вследствие высокой чувствительности данных структур к разнообразным взаимодействиям (возможны, например, различные внутренние неустойчивости, флуктуации на границах). Так, в работах [36, 37] было показано, что для адекватного моделирования области отрицательной дифферен-*

циальной проводимости ВАХ ("плато", гистерезис, область внутренней бистабильности) целесообразно исследование переходных процессов. В области "плато", в частности, возникают осцилляции очень высокой частоты (терагерцового диапазона) при постоянных смещениях на РТД. "Плато" же на ВАХ, по-видимому, получается фактически в результате усреднения во времени. Таким образом, для глубокого исследования этих областей желателен нестационарный анализ. Кроме того, необходимо констатировать, что модели формализма волновых функций в настоящее время для анализа переходных процессов менее развиты, хотя и требуют меньше вычислительных ресурсов ЭВМ [21, 24].

Учет рассеяния также часто принципиально необходим для нанoeлектронных приборов, и формализм функций Вигнера позволяет сделать это достаточно естественно. Это связано с отмеченной ранее определенной аналогией получаемых квантовых кинетических уравнений данного формализма с кинетическим уравнением Больцмана (КУБ) [13]. Вспомним, что в полуклассическом подходе учет рассеяния относительно неплохо отрабатан [12]. Поэтому возможно использование уже наработанных подходов. По описанной причине формализм функций Вигнера более удобен по сравнению с эквивалентным формализмом матриц плотности.

Рассмотрим кратко дискретные модели формализма функций Вигнера. И здесь *ключевыми являются одночастичное приближение и приближение эффективной массы* [21]. В результате квантовое кинетическое уравнение для одночастичной функции Вигнера может быть получено из уравнения Лиувилля—фон Неймана несколькими путями [34], включая вывод с помощью формализма неравновесных функций Грина. Удобной для анализа является следующая форма записи кинетического уравнения (сравни с (2)) для одночастичной функции Вигнера  $f$  [38]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{L}f}{i\hbar} + \hat{C}f, \quad (3)$$

где  $\hat{L}$  — оператор, описывающий баллистическое движение носителей заряда, а  $\hat{C}$  — оператор соударений. В соответствии с видом (3) *одной из главных проблем при разработке моделей данного формализма является поиск операторов  $\hat{L}$  и  $\hat{C}$ , адекватно описывающих физические процессы, протекающие в нанoeлектронной приборной структуре, включая диссипативные.*

Традиционно при моделировании РТД используется следующий более конкретный вид (соответствующий оператор  $\hat{L}$ ) кинетического уравнения в одномерном случае [21]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} = & -\frac{\hbar k}{m^*} \frac{\partial f(x, k, t)}{\partial x} - \\ & - \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \left\{ 2 \int_{-\infty}^{\infty} dy \sin[(k - k')y] \left[ V\left(x + \frac{y}{2}\right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - V\left(x - \frac{y}{2}\right) \right] \right\} f(x, k', t) + \left( \frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} \right)_c, \quad (4) \end{aligned}$$

где  $k$  — волновое число;  $V(x)$  — потенциальная энергия;  $(\partial f/\partial t)_c$  — столкновительный член. Видно, что данное уравнение подобно КУБ (1) в [12]. Для более полного учета влияния электрического поля необходимо решать (4) совместно с уравнением Пуассона. Хотя кинетическое уравнение вида (4) может быть выведено достаточно строго, получаемые выражения для столкновительного члена не используются. Это связано с чрезвычайной сложностью и громоздкостью данных соотношений. Поэтому традиционным стало фактически полуклассическое включение столкновительного члена в модель [21]. В результате выражение для интеграла столкновений принимает вид (3) в [12]. Хотя в литературе иногда и приводятся несколько возможных аппроксимаций для него [38], при расчетах, как правило, применяется приближение времени релаксации [21].

Остановимся на основных проблемах численного моделирования РТД. Их первопричиной является, конечно же, очень высокая степень сложности физических процессов в приборной структуре, приводящая к необходимости рассмотрения многочастичной задачи, а также учета влияния сильных полей, различного рода неоднородностей, диссипативных процессов.

Одним из наиболее важных и сложных вопросов является постановка *граничных условий*. Это связано с необходимостью учета двух групп диссипативных процессов при моделировании элемента нанoeлектроники, а именно:

- *внутренних*, вызванных взаимодействием электронов с другими видами частиц и между собой (в меньшей степени) собственно в самом элементе;
- *внешних*, определяемых обменом, взаимодействием носителей заряда с внешней схемой, а в более широком смысле — с окружением (резервуаром).

Особая сложность рассмотрения диссипативных процессов для нанoeлектронных приборных структур заключается в том, что эти две группы процессов могут быть здесь гораздо более взаимосвязанными по сравнению с элементами микроэлектроники. В результате для корректной постановки граничных условий требуется знание состояния системы на границе, определяемое не только окружением, но и процессами внутри самого прибора. Иными словами, строго говоря, необходимо знать "точное" решение полной самосогла-

сованной задачи для всей замкнутой системы "прибор—окружение". Очевидно, что в общем случае этого добиться невозможно. При моделировании собственно элемента возможно несколько подходов [33, 35, 39]:

- расширить области решения достаточно далеко от источника квантовых эффектов, так чтобы дополнительные области характеризовались классическим поведением, т. е. равновесной функцией распределения;
- использовать другие уравнения, модели в целях определения функции Вигнера на границе.

Так, если при постановке граничных условий не учитывать характер нанoeлектронного прибора как открытой системы, то в процессе их моделирования могут возникать неустойчивости [33, 39]. Чтобы этого не происходило, необходимо вводить диссипативность через граничные условия. К сожалению, это достаточно сложная задача, которая, в принципе, должна решаться путем рассмотрения микроскопической модели взаимодействия контактов, т. е. резервуара, дополняющего нашу открытую систему, в данном случае — активную часть приборной структуры, до замкнутой системы (второй подход). Поэтому традиционно используется первый подход, в частности, считается, что контакты — идеальные резервуары для носителей заряда, т. е. все частицы в контактах приходят в равновесное состояние, характерное для данных резервуаров. В результате функция распределения Вигнера на контактах, как правило, задается с помощью равновесных функций распределения Ферми—Дирака, Больцмана или смещенных распределений. Такая модель контактов полностью соответствует используемой в рамках полуклассического подхода [12] и у ряда специалистов вызывает опасения в случае моделирования РТД. Этими серьезными опасениями являются возможные нарушения соотношения неопределенностей и ухудшения согласования с экспериментом [33, 39]. Поэтому в работе [33] справедливо отмечается, что используемые граничные условия достаточно грубые, хотя и описывают основные качественные особенности взаимодействия "открытая система—резервуар" в данном случае. Рассмотренный упрощенный (первый) подход является во многом вынужденным, так как получение строгой модели взаимодействия резервуара с открытой системой на основе матрицы плотности (функции Вигнера) практически невозможно [13]. В связи с этим целесообразна разработка лишь более простых моделей в рамках второго подхода. Таким образом, при постановке граничных условий ситуация весьма далека от завершенной. Перспективным, по-видимому, и здесь будет являться разработка комбинированных моделей, сочетающих элементы первого и второго подходов.

Две другие проблемы связаны с видом оператора  $\hat{L}$  в кинетическом уравнении (4). Первая серьез-

ная проблема заключается в возможной потере, иногда очень существенной, информации о квантовом характере поведения системы. О том, что решения уравнения для функции Вигнера "могут не соответствовать квантовомеханическим задачам, если на начальные условия к нему не наложено дополнительное ограничение, определяющее допустимый класс квантовых распределений", отмечалось в обзоре [40]. Так, оказывается, что уравнение (4) не описывает квантовые закономерности, характерные для гармонического осциллятора [35, 40]. В частности, после подстановки потенциала соответствующей квадратичной зависимости [41] в (4) получается классическое решение, так как (4) переходит в КУБ. В результате не описывается физически правильное поведение одного из самых простых объектов квантовой механики! Следствием этой проблемы является то, что для детального анализа энергетических состояний квантовых ям в РТД приходится дополнительно решать уравнение Шредингера [37]. Следовательно, *фактически необходимо строить комбинированную модель, основанную на двух формализмах.*

Вторая проблема связана с учетом зависимости эффективной массы от координаты в  $\hat{L}$ . Оказывается, что в работах, в которых используется уравнение (4), эффективная масса берется постоянной по всему прибору. Ясно, что это не соответствует действительности. В работах [42, 43] были выведены кинетические уравнения для функции Вигнера, позволяющие учитывать зависимость эффективной массы от координаты. К сожалению, модифицированные кинетические уравнения сильно усложняются по сравнению с (4). Были получены результаты с их применением в случае неучета рассеяния [42], а также без учета уравнения Пуассона [43]. Не было проведено и сравнение с экспериментальными данными. И тем не менее, в работах [42, 43] показана важность учета зависимости эффективной массы от координаты (как и в формализме волновых функций [21]) при расчете ВАХ РТД путем сравнения с другими, более простыми моделями. В то же время использование упрощенного кинетического уравнения, подобного (4), может приводить к отрицательным значениям тока долины и контрастности ВАХ [43], т. е. физически бессмысленным результатам.

*Проблематичным в настоящее время является и задание оператора  $\hat{C}$  в кинетических уравнениях, т. е. учет рассеяния.* С одной стороны, важная мотивировка использования формализма функций Вигнера — удобство учета рассеяния, а с другой стороны — применяются полуклассические подходы его учета. При этом параметры (времена релаксации, скорости рассеяния) для каждого из механизмов рассеяния задаются, как правило, постоянными для всего прибора, соответствующими объемным материалам. Так как обычно используется

приближение времени релаксации, то суммарное время релаксации при учете нескольких механизмов рассеяния определяется согласно (10) в [12]. При таких подходах эти фактически макроскопические параметры носят явно подгоночный характер при моделировании РТД. В то же время не вызывает сомнения, что для адекватного анализа резонансно-туннельных структур учет рассеяния принципиально необходим вследствие чрезвычайной чувствительности поведения структур к его влиянию [21, 34, 35, 37]. Желательно было бы также принимать во внимание и электрон-электронное взаимодействие. В этом случае в кинетическое уравнение необходимо вводить двухчастичную функцию Вигнера и использовать дополнительные приближения и соотношения. В настоящее время, к сожалению, этого никто не сделал для рассматриваемой задачи. Следует также напомнить о том, что полуклассическое "раскрытие"  $(\partial f/\partial t)_c$  фактически приводит к единственному источнику квантовомеханических коррекций в решениях, определяемому членом, содержащим потенциал в (4). Опасности этого уже отмечались. По изложенным причинам весьма актуальной является задача разработки более адекватных квантовомеханических подходов к учету рассеяния при моделировании РТД.

Достаточно серьезная проблема — создание численных методов решения рассматриваемой самосогласованной задачи. Главной объективной причиной этого является то, что даже в стационарном одномерном случае (см. (4)) модель фактически двумерная (по пространству  $x$  и волновому числу  $k$ , т. е. в фазовом пространстве). Здесь уместно отметить, что для формализма волновых функций, несмотря на осуществляемый перебор по энергиям (на контактах), а точнее  $k$ , задача для каждого из значений энергии все же одномерная. В случае необходимости моделирования переходных процессов модель еще более усложняется. Заметим также, что с помощью некоторых численных моделей формализма функций Вигнера стационарный анализ проводится путем расчета установившегося переходного процесса, т. е. через динамику. В итоге, для моделирования РТД в рамках данного формализма требуется применение вычислительных систем высокой производительности: суперЭВМ и др. Поэтому *повышение эффективности используемых численных методов является весьма актуальной задачей.*

Приходится констатировать, что исследования данного рода очень малочисленны. Так, при конечно-разностной аппроксимации применяются, как правило, стандартные методы [44], в частности, используются разностные отношения против потока для члена, содержащего градиент в (4), а для уравнения Пуассона — центрально-разностные отношения второго порядка точности. Вначале при аппроксимации градиента в (4) применялись разностные отношения против потока первого порядка [35, 42]. Однако впоследствии было по-

казано, что такие аппроксимации могут приводить не только к количественным, но и качественным ошибкам даже при нулевых смещениях РТД [45]. Очень значительные погрешности получаются и при расчете ВАХ и моделировании переходных процессов в РТД [45]. Поэтому целесообразно использовать разностные отношения против потока не первого, а второго порядка точности [37, 45, 46]. В работе [39] было показано, что построение дискретных моделей РТД требует особого внимания, так как могут возникать немалые ошибки усечения в выполнении ряда физически важных соотношений, включая некоторые законы сохранения. Так, возможен ощутимый "ненулевой ток" при нулевых прикладываемых смещениях. Поэтому необходим обязательный контроль шагов сетки дискретизации в фазовом пространстве. Теоретический анализ различных моделей РТД [39], включая модель формализма матриц плотности [31], по ошибкам усечения при выполнении указанных соотношений позволил установить [39], что в зависимости от задачи исследования та или иная дискретная модель может иметь определенные преимущества и недостатки. Это целесообразно учитывать при их использовании.

К сожалению, *физические подходы типа [10] к построению дискретных моделей данного формализма пока не разрабатываются.* Можно лишь предположить, что после разработки таких новых конечно-разностных аппроксимаций рассматриваемой самосогласованной задачи нас могут ожидать подобные отмеченным выше разочарования по поводу полученных ранее результатов. Определенные основания к этому есть — относительно небольшое число узлов сеток дискретизации, как правило, используемое в упомянутых моделях как по  $x$  (до 90), так и по  $k$  (до 90), причем традиционно равномерных. Заметим, что такое ограничение по числу узлов в некоторых моделях может быть следствием возможностей даже достаточно мощных вычислительных систем (см., например [45]). Нормальную точность расчета при таком малом числе узлов равномерной сетки пространственной дискретизации можно получить, судя по всему, рассматривая только активную область прибора и пренебрегая протяженными пассивными областями [47]. Влияние же последних может быть важным, особенно при согласовании с экспериментом.

*При моделировании переходных процессов* используются как явные, так и неявные методы интегрирования по времени для кинетического уравнения [35—37, 45, 47], причем *предпочтение отдается неявным разностным схемам.*

Крайне слабо разработаны и исследованы методы итерационного решения нелинейных уравнений дискретной модели, а жаль. Отмечу, пожалуй, единственную серьезную работу [46] в данном направлении. В ней сравнивались по эффективности, точности и надежности четыре итерационных метода, а именно: последовательной и одновре-

менной концепций для анализа стационарных и переходных процессов. В качестве теста осуществлялся расчет ВАХ РТД. Особую сложность при этом представляет моделирование "плато" в области отрицательной дифференциальной проводимости. Было показано, что каждый из методов при решении данной задачи имеет свои достоинства и недостатки. Поэтому в программах численного моделирования РТД желательно иметь реализацию нескольких итерационных методов, в частности, для анализа как стационарных, так и переходных процессов. Обычная же практика — использование методов для анализа либо стационарных, либо переходных процессов. В [46] показано, что это опасная практика, так как в некоторых случаях физически корректные результаты могут быть получены только лишь с помощью определенного итерационного метода из четырех исследованных.

Очень важным, как отмечалось в [46], является и выбор критерия сходимости внешних итераций. Так, оказывается, что сходимость для уравнения Пуассона даже с относительно высокой точностью (по невязке) не является достаточной в некоторых случаях. Более удовлетворительно дополнительное использование критерия по изменению приращению электростатического потенциала до относительно малых значений (меньше  $10^{-6}$  В). Однако и применение данных двух критериев бывает недостаточным, например, при анализе стационарных режимов через динамику. В этих случаях необходимо уменьшать изменение плотности тока по длине прибора до относительно малого значения [46]. Таким образом, данный критерий во многом подобен описанному и рекомендованному ранее [10]. Отметим, что при поиске решения в областях неустойчивостей и устойчивых высокочастотных осцилляций числовые значения верхних границ оцениваемых погрешностей должны быть иногда на четыре порядка меньше [46] по сравнению с другими областями ВАХ РТД, т. е. задача сильно усложняется в математическом плане. При этом для расчетов иногда необходимо использовать суперЭВМ. В целом, результаты [46] убедительно доказывают *высокую актуальность разработки и глубокого исследования численных методов реализации дискретных моделей нанозлектронных приборных структур несмотря на возможные серьезные проблемы на этом пути.*

Следствием описанных проблем является то, что *с применением дискретных моделей формализма функций Вигнера практически нет убедительных примеров согласования результатов расчета ВАХ РТД с экспериментальными данными\** [21], т. е. эти модели еще достаточно грубы. По этой причине, по-видимому, не надо бояться введения дополнительных зависимостей согласующих параметров моделей, в частности, эффективных масс, времен ре-

*лаксации, скоростей рассеяния и др., от режима работы приборной структуры нанозлектроники и иных факторов.* Напомним, что это уже давно традиционный методический подход для электрических моделей МОП- и биполярных транзисторов кремниевых ИС, например для коэффициентов передачи [48]. Почему подобные методики не могут использоваться и здесь? Автор не видит к этому никаких серьезных оснований. Главный же аргумент в пользу данного подхода — чрезвычайно высокая степень сложности задачи. Поэтому мы фактически еще *находимся в начале очень сложного пути построения адекватных дискретных моделей нанозлектронных приборных структур и методик идентификации их параметров.*

Рассмотрение данного формализма завершим следующей цитатой из работы [40]: "сама по себе функция Вигнера лишена физического смысла, и наглядность вигнеровского представления в значительной степени является кажущейся".

### Модели формализма функций Грина

Общепризнанным в квантовой механике является то, что для описания систем одинаковых частиц наиболее удобен метод вторичного квантования [41]. Его особая ценность заключается в применимости для систем с несохраняющимся числом частиц. В данном методе в качестве независимых переменных вместо полного набора механических величин того или иного индивидуального состояния частиц берутся числа заполнения частиц в этих состояниях. В результате гамильтониан системы выражается через операторы рождения и уничтожения. Решение же задачи при этом обычно упрощается.

Функции Грина в рассмотрение вводятся как средние величины (с точностью до коэффициента, в который входит мнимая единица) от различных произведений гейзенберговских операторов рождения и уничтожения частиц в методе вторичного квантования. В результате, например, одночастичные функции Грина зависят уже от двух пространственно-временных точек, т. е. число временных координат, вообще говоря, удваивается по сравнению с одночастичными матрицей плотности и функцией Вигнера! Так как функции Грина связаны достаточно простыми соотношениями с матрицами плотности, функциями Вигнера, то получаемые уравнения движения, к сожалению, обладают тем же серьезным недостатком [13]. В частности, в уравнения движения для одночастичных функций Грина входят двухчастичные функции Грина и т. д. (иерархия уравнений). В связи с этим для получения из цепочек уравнений упрощенных кинетических уравнений для одночастичных функций Грина введение аппроксимаций для двухчастичных функций является, по существу, также обязательным [49, 50].

\*Сравнение обычно проводится для фактически активной области (длиной до 60 нм) РТД работы [47].

Кроме отмеченного недостатка, заключающегося в появлении дополнительных временных координат, для формализма функций Грина характерно и увеличение числа уравнений движения. Так, для одночастичных функций Грина получаются четыре уравнения Каданова—Бейма [50], точные в термодинамическом пределе. В данные уравнения входят также собственно энергетические функции, которые могут быть выражены через те же функции Грина и для которых необходимо получать дополнительные соотношения. В этом случае набор уравнений Каданова—Бейма можно считать замкнутым. Определенное ослабление отмеченного недостатка было достигнуто в рамках диаграммной техники Л. В. Келдыша [51]. Так, путем введения трех функций Грина (опережающей, запаздывающей и корреляционной) удается систему четырех очень сложных интегро-дифференциальных уравнений свести к двум независимым уравнениям. Поэтому в литературе данный, наиболее эффективный, подход получил название формализма Келдыша—Каданова—Бейма и часто используется в задачах физики твердого тела.

Здесь следует обратить внимание на одно замечание работы [51], касающееся диаграммной техники вообще. Смысл его в том, что получаемые с ее помощью результаты корректны для времен, больших по сравнению с временем релаксации. Возможна же и такая постановка вопроса, когда в момент времени  $t_0$  задана произвольная матрица плотности  $\rho(t_0)$  и необходимо проанализировать релаксацию этого состояния к установившемуся. Такая задача, судя по всему, не может быть описана любыми диаграммными техниками, так как в их основе лежит аппроксимация двух-, трех- и т. д. частичных функций Грина с помощью одночастичных, по крайней мере, в виде бесконечного ряда. Следовательно, *при моделировании переходных процессов с помощью одночастичных функций Грина очень осторожно необходимо относиться к результатам, полученным при малых временах, меньших времени релаксации системы. Аналогичное заключение, по-видимому, справедливо и для других рассмотренных ранее формализмов, так как они обычно основываются на одночастичных приближениях.*

Несмотря на отмеченное повышение эффективности формализма функций Грина с помощью диаграммной техники Л. В. Келдыша использование получаемых уравнений для моделирования нанoeлектронных приборов, к сожалению, очень сложно даже в стационарном случае. Интересный приближенный метод, приводящий к неплохим результатам, был развит в работах Датты (S. Datta) с соавторами [52—54]. В его основе лежит известный подход Ландауэра—Буттикера (R. Landauer, M. Büttiker). Так, для тока (в точке контакта  $\mathbf{r}$ ) на единицу энергии и объема обосновано уравнение

$$I(\mathbf{r}, E) = \frac{e}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r}' T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) [f(\mathbf{r}, E) - f_{\tau}(\mathbf{r}', E)], \quad (5)$$

где  $e$  — заряд электрона;  $T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$  — коэффициент происхождения;  $f(\mathbf{r}, E)$  — функция заполнения;  $f_{\tau}(\mathbf{r}', E)$  — эффективная функция заполнения, учитывающая процессы неупругого рассеяния. Для вычисления коэффициента прохождения, функции заполнения и скоростей рассеяния (входят в  $f_{\tau}(\mathbf{r}', E)$ ) в рамках формализма Келдыша—Каданова—Бейма получена система замкнутых уравнений [55], в которую входит и упрощенное кинетическое уравнение для Фурье-образа одночастичной функции Грина. Основными физическими допущениями в данной стационарной одномерной модели РТД являются:

- справедливы одночастичное приближение и метод эффективной массы;
- моделируется электронный транспорт в одной зоне проводимости;
- предполагается специальный вид потенциалов для нескольких учитываемых механизмов неупругого рассеяния.

При численном решении кинетического уравнения для Фурье-образа запаздывающей функции Грина используются элементы метода сильной связи (при аппроксимации закона дисперсии на соответствующей сетке), что приводит к уравнениям, характеризующим разреженной матрицей. Это значительно упрощает численное решение кинетического уравнения.

Хотя метод и позволяет вычислять концентрацию подвижных электронов и плотность тока внутри структуры, для него свойственно нарушение консервативности плотности тока на границе "прибор—контакт" [53]. Кроме того, эффективная масса берется постоянной по всей структуре, а интенсивность неупругого рассеяния подбирается с помощью "некоторой функции" [53]. Модель, к сожалению, требует для реализации очень больших вычислительных ресурсов ЭВМ.

Последний недостаток рассмотренного приближенного метода в значительной степени усугубляется тем, что в РТД традиционно существуют достаточно протяженные пассивные области. Желательно также учесть большее число механизмов рассеяния. Для ослабления первого недостатка используется достаточно *общий подход*, часто применяемый в рамках формализма волновых функций, а именно: *протяженные пассивные области РТД рассматриваются как продолжение контактов и для них строится более простая модель*. Таким образом, *необходимо разрабатывать комбинированную модель, требующую меньших вычислительных ресурсов ЭВМ.*

Данный эффективный подход в рамках формализма функций Грина был реализован в работах [56, 57]. В частности, прибор был разбит на два "больших резервуара" (эмиттерный и коллекторный) и "короткий прибор". Для "больших резервуаров" использованы простые соотношения, справедливые при ряде предположений. Фактически эти области трактуются как продолжение контак-

тов. Введение допущений в "коротком приборе" позволило получить кинетические уравнения для одночастичных функций Грина в приближении эффективной массы с учетом влияния этих протяженных контактов. В результате "несамосогласованных аппроксимаций" выведены и упрощенные соотношения для необходимых собственно энергетических функций для различных механизмов рассеяния только в "коротком приборе", а именно: на полярных оптических фононах, на акустических фононах, на неоднородностях соединений, на шероховатостях границ раздела и на ионизированных примесях. Поэтому отметим достоинство модели, заключающееся в учете широкого спектра механизмов рассеяния в рамках единого формализма. При задании закона дисперсии в дискретной модели возможно применение одно-, двух- и десятизонной моделей с использованием элементов метода сильной связи [57]. В более сложных моделях по отношению к однозонной учитывается непараболичность зон. Для вычисления тока получена обобщенная интегральная формула для туннельного тока непосредственно через функции Грина в случае неучета рассеяния. Она подобна формуле Тсу—Есаки [2].

В рамках формализма функций Грина с применением десятизонной модели был учтен дополнительный эффект в РТД на основе GaAs/AlAs, связанный с нарушением трансляционной симметрии на гетерогранице [58]. Хотя в этой работе проведено и несколько других модификаций по сравнению с моделью [57], включая самосогласование, авторами [58] не учитывались механизмы рассеяния и влияние "температурных эффектов", поэтому не проводилось сравнение результатов расчета ВАХ с экспериментальными данными. Другая модификация модели [57] — использование уравнения для плотности тока диффузионно-дрейфовой модели в "больших резервуарах" эмиттера и коллектора — не привела к подтверждению принципиальной необходимости решения такой более строгой задачи в этих протяженных областях по сравнению с ранее применяемым квазиравновесным предположением в них [59]. Заметим, что это очень важный результат, так как данное предположение обычно используется и в комбинированных моделях РТД, основанных на формализме волновых функций. По-видимому, оно допустимо для данных приборов в макроскопических областях эмиттера и коллектора.

Анализ показывает, что к основным недостаткам моделей формализма функций Грина следует отнести: несогласованность аппроксимаций, применяемых на различных этапах построения модели; громоздкость; требуемые большие вычислительные ресурсы ЭВМ. Первый недостаток наиболее серьезен и характерен не только для моделей нанoeлектронных приборных структур, основанных на формализме функций Грина, но и вообще для рассматриваемого формализма в целом в различных зада-

чах. Он связан с крайней громоздкостью подхода и большим числом исходных уравнений. Поэтому для существенных, вынужденных упрощений и приходится применять самые разнообразные аппроксимации на различных этапах построения моделей, к сожалению, часто не согласованных между собой, а иногда просто противоречащих друг другу. Результатом являются такие очень серьезные недостатки моделей нанoeлектронных элементов, как отсутствие баланса в равновесных условиях (при нулевых смещениях!) [57], возможное нарушение консервативности плотности тока [53, 57]. В общей теории формализма функций Грина рекомендуется такие сложные ситуации обходить с помощью дополнительного использования законов сохранения [50], что, строго говоря, справедливо для замкнутых систем и добавляет в модель новые уравнения и, естественно, еще больше ее усложняет. В отмеченных моделях вместо этого применяются лишь простые качественные физические соображения, что весьма опасно именно для нанoeлектронных приборных структур как открытых систем.

Несмотря на повышение эффективности модели [57] по сравнению с рассмотренной ранее [53, 55], число уравнений дискретной модели все же просто огромное. Так, в случае учета только упругого рассеяния в однозонной модели типичные числа таковы [57]:  $N_L = 50$  (число слоев);  $N_k = 200$  (число узлов сетки по импульсу), что приводит к полной матрице, характеризующей систему линейных алгебраических уравнений с  $10^8$  элементами! Для решения таких огромных систем используется "медленный" итерационный метод, в частности, метод Якоби в сочетании с последовательной верхней релаксацией [57]. При учете неупругого рассеяния задача, конечно же, еще более усложняется, по крайней мере, в 3 раза увеличивается число уравнений [57]. Все это и приводит к значительным затратам вычислительных ресурсов ЭВМ как по памяти, так и по времени. В итоге модель сложна в использовании, требует большого числа согласующих параметров, т. е. ее применение, вообще говоря, — искусство. В связи с изложенным *модели данного формализма пока, к сожалению, явно не предназначены для широкого использования.*

Анализ моделей РТД рассматриваемого формализма целесообразно завершить цитатой из книги [49]: "*... метод функций Грина ... в расчетном отношении ... отнюдь не обязательно является самым простым. Иногда он позволяет решить задачу только с помощью довольно "лихих" аппроксимаций*". Комментарии, как говорится, излишни.

Таким образом, возлагаемые, очень большие надежды на кинетические модели РТД, основанные на формализмах функций Вигнера и Грина, пока, к сожалению, *не оправдались*. Для них в той или иной мере характерны следующие серьезные недостатки: громоздкость; большие затраты вычислительных ресурсов ЭВМ (даже для одномерных стацио-

нарных моделей); часто неудовлетворительное согласование с экспериментом.

Главным направлением развития кинетических моделей в рамках формализмов функций Грина и Вигнера, судя по всему, будет разработка комбинированных моделей, т. е. реализация отмеченного ранее эффективного подхода. Определенные положительные результаты уже получены и для формализма функции Вигнера для модели, в которой решается кинетическое уравнение для функций Вигнера в квантовой (активной) области прибора и используется метод Монте-Карло в макроскопических областях [60, 61]. В разработанных комбинированных моделях обоих формализмов имеется ряд недостатков, в частности, согласующими параметрами являются ширины барьеров и ям, уровни легирования (!) [62], высота барьера [61], что в целом нехорошо. С одной стороны, все же существуют определенные сложности в экспериментальном определении этих исходных данных. С другой стороны, экспериментальные исследования позволили также установить очень высокую чувствительность ВАХ РТД к изменению ширин барьеров, квантовых ям, мольной фракции и уровней легирования (см., например [63]). Кроме того, в комбинированной модели [60, 61] могут возникать проблемы и со сходимостью для реальных концентраций примесей. И несмотря на недостатки отмеченных комбинированных моделей подход, бесспорно, перспективен ввиду существенной экономии вычислительных ресурсов ЭВМ без существенной потери точности моделирования.

Для реализации моделей РТД различных формализмов иногда применяются методы Монте-Карло [64–66]. Это так называемые "квантовые методы Монте-Карло", в отличие от рассмотренных в [12] "классических (полуклассических) методов Монте-Карло". Так же, как и ранее, возможны два варианта, а именно: 1) метод Монте-Карло используется в качестве численного метода решения интегродифференциальных уравнений; 2) метод Монте-Карло применяется как метод имитации движения частиц. Здесь есть одна проблема методологического характера, состоящая в неприменимости понятия "траектория" в квантовой механике. Ее можно, однако, обойти, например, с помощью использования "траекторий Бома", вычисляемых на основе волновых функций [64, 65]. Метод Монте-Карло в результате становится более формальным по сравнению с полуклассическим случаем. К сожалению, квантовые методы Монте-Карло требуют при реализации просто огромных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ, что приводит к необходимости введения существенных приближений и применения суперЭВМ. При этом обычно используются теория возмущений и диаграммная техника. Серьезные проблемы возникают и со сходимостью методов [66]. Большая экономичность алгоритмов характерна при учете рассеяния в квантовой яме в рамках формализма волновых

функций [29], а также в рамках комбинированной модели [60, 61] в данных случаях, однако при использовании классических методов Монте-Карло. Как и ранее, все же имеется значительный резерв повышения эффективности моделей, основанных на квантовых методах Монте-Карло, в частности, путем построения комбинированных моделей. Определенные положительные результаты в этом направлении уже достигнуты [64, 65].

Итак, главным направлением практического усовершенствования моделей всех (!) формализмов, судя по всему, будет создание комбинированных моделей. Именно такие модели, как правило, и позволяют получить удовлетворительное согласование с экспериментом. Бесспорно, важными для РТД будут являться следующие основные направления повышения адекватности моделей:

- отказ от одночастичного и переход к многочастичным приближениям (сначала к двух- и трехчастичным);
- отказ от метода эффективной массы;
- переход к анализу многомерных и переходных физических процессов;
- более полный учет влияния контактов, приконтактных и других пассивных областей, границ раздела;
- более детальное описание процессов рассеяния;
- более детальный учет реальных электрофизических свойств низкоразмерной системы, входящей в приборную структуру;
- более детальный учет взаимодействия прибора с окружением.

Важным является и повышение экономичности моделей.

К сожалению, даже отдельные из отмеченных направлений повышения адекватности приводят к неизбежному усложнению моделей (не говоря о всех направлениях, учитываемых совместно), а следовательно, к дальнейшему понижению их эффективности. В этой связи уместно привести некоторые данные из работы [21] по сравнению моделей

Сравнение моделей различных формализмов

Искомая функция	Модель формализма			
	Волновая	Матрица плотности	Вигнера	Грина
Учет рассеяния	Да	Да	Да	Да
Трактовка рассеяния	Различные аппроксимации	Аппроксимация времени релаксации	Аппроксимация времени релаксации	Собственно энергетические функции
Переходной анализ	Да	Да	Да	Нет
Вычислительные ресурсы ЭВМ	Незначительные	Средние	Средние	Значительные

рассмотренных формализмов (см. таблицу). Хотя приведенные сведения и носят скорее качественный характер, они, тем не менее, полезны, так как в целом характеризуют достигнутые успехи в разработке моделей различных формализмов повышенной адекватности. Выбирать читателю.

Итак, более реальным является другой подход, особенно при отсутствии высокопроизводительной вычислительной техники, — переход к еще более простым по сравнению с отмеченными основными уравнениям, т. е. дальнейшая эксплуатация свойства грубости модели.

### Модели на основе других уравнений

Привлекательный путь заключается в поиске относительно простых уравнений и в разработке на их основе моделей повышенной эффективности, обладающих в то же время требуемой степенью адекватности моделирования. *Наиболее естественное здесь направление — использование более простых кинетических уравнений по сравнению с рассмотренными. Интерес для моделирования приборов нанoeлектроники могут представить следующие уравнения: основное (управляющее\*) кинетическое уравнение Паули; обобщенное основное кинетическое уравнение Ван Хофа; обобщенное основное кинетическое уравнение Пригожина—Ресибуа; обобщенное кинетическое уравнение Больцмана и др.*

Из отмеченных кинетических уравнений для анализа РТД применялось основное уравнение Паули [67]. В модели [67] осуществляется самосогласованное решение этого уравнения, уравнений Шредингера и Пуассона. Отмечается, что использование основного уравнения Паули допустимо в случае, когда можно пренебречь влиянием недиагональных членов в матрице плотности. Это обычно справедливо для слабых взаимодействий и не очень быстрых адиабатических процессов. Для решения основного уравнения Паули применяется метод Монте-Карло. Модель использовалась для одномерного анализа стационарных процессов в РТД. "Метод Монте-Карло, применяемый здесь, ... вносит элемент неустойчивости и осцилляционного поведения" [67] в решение. Это характерно для данного метода и в других моделях, что, вообще говоря, затрудняет обработку полученных результатов. Несмотря на это метод Монте-Карло при решении основного уравнения Паули требует все же более или менее реальных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ [67].

Другое важное направление связано с уравнениями квантовой гидродинамики. Данные уравнения можно выводить из уравнения Шредингера, Лиувилля—фон Неймана и кинетических в различных формализмах отличающимися способами. В результате можно получать разные системы уравне-

ний, причем со своими дополнительными соотношениями, а следовательно, и параметрами. С помощью моделей, основанных на таких уравнениях, допустимо, в принципе, учитывать многомерные эффекты. К сожалению, полная система квантовых гидродинамических уравнений для моделирования РТД использовалась нечасто. Иногда применяются уравнения только для нулевого и первого моментов [32, 68].

И. А. Обухов с соавторами [69] поставили еще более интересную задачу, а именно: *получить квантовый аналог фундаментальной системы уравнений [12], т. е. обобщить эту систему.* Для этих целей можно просто использовать некоторые из уравнений квантовой гидродинамики с дополнительными соотношениями. Однако был выбран отличающийся от традиционно применяемого подход [69]. Замечу, что и в этом случае уравнение (2) из [70] для каждого сорта частиц ("самостоятельная фаза для некоторого квантового газа" [70]) имеет традиционный вид уравнения для нулевого момента (см. (11) из [12])\*. Подход, однако, позволил получить явные выражения для столкновительных членов через химический потенциал каждого сорта частиц. Именно это является чрезвычайно важным. Поэтому уравнение непрерывности для плотности электронов каждого сорта ("фазы") частиц является, по существу, уравнением, определяющим химический потенциал соответствующего сорта частиц. Здесь необходимо отметить, что в ряде даже высокоадекватных моделей формализмов волновых функций и функций Грина для химического потенциала обычно используются различные аппроксимации. Хотя и показана их допустимость для РТД [59], однако это все же аппроксимации. На данном этапе недостатком модели [69, 70] являются необходимость решать уравнение Шредингера с детерминированным потенциалом для каждой "фазы" для всего прибора, включая и протяженные макроскопические области, а также задание "некоторого известного потенциала, отвечающего за тот или иной вид случайного взаимодействия" [70]. Бесспорным достоинством модели является хорошее согласование расчетов ВАХ РТД с экспериментальными данными [69, 70]. Подчеркну, что удовлетворительное согласование с экспериментом в настоящее время достигается только с помощью нескольких комбинированных моделей формализма волновых функций [21, 25, 28], функций Грина и Вигнера [57, 61, 62]. Кроме того, на основе модели [69, 70] построена комбинированная модель, учитывающая двумерные эффекты в РТД, в частности, было оценено влияние подложки [69, 70].

Рассмотренная модель [69, 70] интересна и в методологическом плане, так как подтверждает положение (недостающее звено), что и для нанoeлектронных приборных структур (на примере РТД)

\*Речь идет о "master equation". В русскоязычной специальной литературе используются два названия, а именно: "основное уравнение" или "управляющее уравнение".

\*Вид уравнений для нулевого момента в квантовом и полуклассическом случаях одинаков.

можно на практике построить подобную иерархию (по крайней мере основных) классов моделей, как и для элементов микроэлектроники [12], а именно: квантовые кинетические\* модели, квантовые методы Монте-Карло; квантовые гидродинамические модели; квантовые квазигидродинамические модели; квантовые диффузионно-дрейфовые модели; комбинированные модели. Причины этого уже разяснялись. Заметим, что отличие в названиях классов моделей по сравнению с ранее рассмотренными [12] обычно в добавлении одного слова — "квантовые". Важным в этих классах моделей является то, что при определенных предположениях (в макроскопических областях) они переходят в соответствующие классы моделей полуклассического подхода (нет лишь прямого аналога у моделей формализма волновых функций, хотя и для них существует квазиклассическое приближение). Таким образом, в рамках единого формализма можно описывать как квантовые, так и классические области. В итоге, более рационально возможно также строить комбинированные модели, в частности, задавать границы областей применимости различных моделей, т. е. для решения главной проблемы данного класса моделей.

\*\*\*

В заключение необходимо отметить, что для других уравнений, используемых при моделировании РТД, крайне желательно получить оценки допустимых диапазонов их применимости, как это было сделано для моделей полуклассического подхода [12]. Такая оценка в настоящее время сделана только лишь для основного уравнения Паули [67].

Итак, какой из формализмов использовать? Ответить на этот вопрос непросто, так как каждый из рассмотренных формализмов имеет свои достоинства и недостатки. Решать самому читателю. Здесь еще раз обратим внимание на одно достоинство формализма волновых функций — относительно высокая экономичность моделей. По крайней мере, более или менее строгий двух- и трехмерный квантовомеханический анализ переходных процессов в приборных структурах осуществлялся только с помощью уравнения Шредингера.

Читателю также следует помнить, что при использовании других формализмов с нелинейными функциями (от волновых функций) возможны потери при описании некоторых важнейших свойств квантовых объектов. В этих случаях применение комбинации формализмов с обязательным привлечением волновых функций фактически является вынужденным!

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю признательность профессорам И. Г. Не-

\*Несколько неудачно это название для моделей формализма волновых функций. Здесь, однако, следует вспомнить, что уравнение Шредингера описывает и явления переноса. Традиционно также используется и одночастичное приближение, характерное для кинетических моделей.

известному, G. I. Haddad, A. Seabaugh, доктору G. Klimeck, канд. физ.-мат. наук И. А. Обухову за любезно предоставленные публикации, а также моим ученицам И. А. Гончаренко и Н. В. Коломейцевой, совместно с которыми были проведены исследования по моделированию РТД и частично описанные в работах [23, 25, 28].

#### Список литературы

1. Иогансен Л. В. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. Вып. 2. С. 207—213.
2. Tsu R., Esaki L. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Lett. 1973. V. 22. N 11. P. 562—564.
3. Chang L. L., Esaki L., Tsu R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers // Appl. Phys. Lett. 1974. V. 24. N 12. P. 593—595.
4. Resonant tunneling device with multiple negative differential resistance: Digital and signal processing applications with reduced circuit complexity / S. Sen, F. Capasso, A. Y. Cho, D. Sivco // IEEE Trans. 1987. V. ED-34. N 10. P. 2185—2191.
5. Quantum functional devices: Resonant-tunneling transistors, circuits with reduced complexity, and multiple-valued logic / F. Capasso, S. Sen, F. Beltram, L. M. Lunardi, A. S. Vengurlekar, P. R. Smith, N. J. Shah, R. J. Malik, A. Y. Cho // IEEE Trans. 1989. V. ED-36. N 10. P. 2065—2082.
6. Digital circuit applications of resonant tunneling devices / P. Mazumder, S. Kulkarni, M. Bhattacharya, J. P. Sun, G. I. Haddad // Proc. IEEE. 1998. V. 86. N 4. P. 664—686.
7. Resonant-tunneling mixed-signal circuit technology / A. Seabaugh, B. Brar, T. Broekaert, F. Morris, P. van der Wagt, G. Frazier // Solid-State Electron. 1999. V. 43. P. 1355—1365.
8. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compañó // EC IST programme Future and Emerging Technologies, Second Edition, 2000. 104 p.
9. Алферов Ж. И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. 1998. Т. 32. Вып. 1. С. 3—18.
10. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. III. Численное моделирование в рамках полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 1. С. 36—46.
11. 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.
12. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26—36.
13. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. IV. Квантовомеханические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24—32.
14. Тагер А. С. Размерные квантовые эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их применения в электронике СВЧ. Ч. 1. Физические основы // Электронная техника. Сер. Электроника СВЧ. 1987. Вып. 9. С. 21—34.
15. Пожела Ю. Физика быстродействующих транзисторов. Вильнюс: Моклас, 1989. 264 с.
16. Долманов И. Н., Толстихин В. И., Еленский В. Г. Полупроводниковые приборы с резонансным туннелированием электронов // Зарубежная радиоэлектроника. 1990. № 7. С. 66—89.
17. Бузанева Е. В. Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь. 1990. 304 с.
18. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы нанoeлектроники: Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. 332 с.
19. Демиховский В. Я., Вугальтер Г. А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.
20. Киреев П. С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1975. 584 с.
21. Resonant Tunneling diodes: Models and properties / J. P. Sun, G. I. Haddad, P. Mazumder, J. N. Schuhman // Proc. IEEE. 1998. V. 86. N 4. P. 641—661.

22. **Gawlinski E., Dzurak T., Tahir-Kheli R. A.** Direct and exchange-correlation carrier interaction effects in a resonant tunnel diode // *J. Appl. Phys.* 1992. V. 72. N 8. P. 3562—3569.
23. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А.** Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // *Электромагнитные волны и электронные системы.* 2002. Т. 7. № 3. С. 54—60.
24. **Pinaud O.** Transient simulation of a resonant tunneling diode // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 92. N 4. P. 1987—1994.
25. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Коломейцева Н. В.** Комбинированная модель резонансно-туннельного диода // *ФТП.* 2005. Т. 39. Вып. 9. С. 1138—1145.
26. **Sun J. P., Haddad G. I.** Self-consistent scattering calculation of resonant tunneling diode characteristics // *VLSI Design.* 1997. V. 3. P. 1—4.
27. **Peak** width analysis of current-voltage characteristics of triple-barrier resonant tunneling diodes / M. Nagase, M. Suhara, Y. Miyamoto, K. Furuya // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000. V. 39. Part 1. N 6A. P. 3314—3318.
28. **Abramov I. I., Goncharenko I. A., Kolomejtseva N. V.** The influence of classical and quantum-mechanical regions interaction on IV-characteristics of RTD, based on different materials // *Proc. SPIE* 2004. V. 5401. P. 482—487.
29. **Influence** of impurity and phonon scattering effects in resonant tunneling structures / Y. Fu, Q. Chen, W. Willander, H. Brugger, U. Meiners // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 3. P. 1874—1878.
30. **Boykin T. B., Carnahan R. E., Martin K. P.** Inadequacy of the one-dimensional approximation for resonant-tunneling diode current-voltage calculations // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 51. N 4. P. 2273—2281.
31. **Frensley W. R.** Simulation of resonant-tunneling heterostructure devices // *J. Vac. Sci. Technol. B.* 1985. V. 3. N 4. P. 1261—1266.
32. **Quantum** transport in ultrasmall devices / Ed. by D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, A.-P. Jauho, New York, London: Plenum Press, 1995. NATO ASI Ser. B. V. 342. 544 p.
33. **Frensley W. R.** Transient response of a tunneling device obtained from the Wigner function // *Phys. Rev. Letters.* 1986. V. 57. N 22. P. 2853—2856.
34. **Quantum** tunneling properties from a Wigner function study / N. C. Klusdahl, A. M. Krivan, C. Ringhofer, D. K. Ferry // *Solid-State Electron.* 1988. V. 31. N 3/4. P. 743—746.
35. **Self-consistent** study of the resonant-tunneling diode / N. C. Klusdahl, A. M. Krivan, D. K. Ferry, C. Ringhofer // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. N 11. P. 7720—7735.
36. **Jensen K. L., Buot F. A.** Numerical simulation of intrinsic bistability and high-frequency current oscillations in resonant tunneling structures // *Phys. Rev. Letters.* 1991. V. 66. N 8. P. 1078—1081.
37. **Creation** and quenching of interference-induced emitter-quantum wells within double-barrier tunneling structures / P. Zhao, D. L. Woolard, B. L. Gelmont, H.-L. Cui // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. N 3. P. 1833—1849.
38. **Frensley W. R.** Quantum transport modeling of resonant-tunneling devices // *Solid-State Electron.* 1988. V. 31. N 3/4. P. 739—742.
39. **Frensley W. R.** Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // *Rev. of Modern Physics.* 1990. V. 62. P. 745—791.
40. **Татарский В. И.** Вигнеровское представление квантовой механики // *УФН.* 1983. Т. 139. Вып. 4. С. 587—619.
41. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория: Учеб. пос. М.: Наука, 1974. 752 с.
42. **Tsuchiya H., Ogawa M., Miyoshi T.** Simulation of quantum transport in quantum devices with spatially varying effective mass // *IEEE Trans.* 1991. V. ED-38. N 6. P. 1246—1252.
43. **Shih J.-J., Huang H.-C., Wu G. Y.** Effect of mass discontinuity in the Wigner theory of resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. N 4. P. 2399—2405.
44. **Роч П.** Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
45. **Buot F. A., Jensen K. L.** Lattice Weyl-Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. N 15. P. 9429—9457.
46. **Biegel B. A., Plummer J. D.** Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. N 11. P. 8070—8082.
47. **Jensen K. L., Buot F. A.** The methodology of simulating particle trajectories through tunneling structures using a Wigner distribution approach // *IEEE Trans.* 1991. V. ED-38. N 10. P. 2337—2347.
48. **Абрамов И. И.** Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
49. **Займан Дж.** Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971. 288 с.
50. **Каданов Л., Бейм Г.** Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов. М.: Мир, 1964. 256 с.
51. **Келдыш Л. В.** Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ.* 1964. Т. 47. Вып. 4. С. 1515—1527.
52. **Datta S.** Steady-state quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. N 8. P. 5830—5833.
53. **Datta S.** A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1990. V. 2. P. 8023—8052.
54. **Lake R. K., Datta S.** Nonequilibrium Green's-function method applied to double-barrier resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 45. N 12. P. 6670—6685.
55. **Quest:** User's manual / G. Klimeck, R. K. Lake, M. J. McLennan, S. Datta // Technical report TR-EE 93-17, School of Electrical Engineering, Purdue University, West Lafayette, IN 47907-1285; April, 1993. 118 p.
56. **Quantum** device simulation with a generalized tunneling formula / G. Klimeck, R. Lake, R. C. Bowen, W. R. Frensley, T. S. Moise // *Appl. Phys. Lett.* 1995. V. 67. N 17. P. 2539—2541.
57. **Single** and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices / R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, D. Jovanovic // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81. N 12. P. 7845—7869.
58. **Ogawa M., Sugano T., Miyoshi T.** Full multiband simulation of quantum electron transport in resonant tunneling devices // *Solid-State Electron.* 2000. V. 44. P. 1939—1947.
59. **Klimeck G.** Quantum and semi-classical transport in NEMO-1D // *J. of Comput. Electron.* 2003. V. 2. P. 177—182.
60. **Coupling** between the Liouville equation and a classical Monte Carlo solver for the simulation of electron transport in resonant tunneling diodes / F. Martin, J. Garcia-Garcia, X. Oriols, J. Suñé // *Solid-State Electron.* 1999. V. 43. P. 315—323.
61. **Garcia-Garcia J., Martin F.** Simulation of multilayered resonant tunneling diodes using coupled Wigner and Boltzmann distribution function approaches // *Appl. Phys. Lett.* 2000. V. 77. N 21. P. 3412—3414.
62. **Resonant-tunneling** diodes with emitter prewells / T. B. Boykin, R. C. Bowen, G. Klimeck, K. L. Lear // *Appl. Phys. Lett.* 1999. V. 75. N 9. P. 1302—1304.
63. **Experimental** sensitivity analysis of pseudomorphic InGaAs/AlAs resonant-tunneling diodes / T. S. Moise, Y.-C. Cao, A. J. Katz, T. P. E. Broekaert, F. G. Celii // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 78. N 10. P. 6305—6317.
64. **Bohm** trajectories for the Monte Carlo simulation of quantum-based devices / X. Oriols, J. J. Garcia-Garcia, F. Martin, J. Suñé, T. González, J. Mateos, D. Pardo // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 72. N 7. P. 806—808.
65. **Towards** the Monte Carlo simulation of resonant tunneling diodes using time-dependent wavepackets and Bohm trajectories / X. Oriols, J. J. Garcia-Garcia, F. Martin, J. Suñé, J. Mateos, T. González, D. Pardo, O. Vanbésien // *Semicond. Sci. Technol.* 1999. V. 14. P. 532—542.
66. **Jacoboni C., Bordone P.** The Wigner-function approach to nonequilibrium electron transport // *Rep. Prog. Phys.* 2004. V. 67. N 7. P. 1033—1071.
67. **Fischetti M. V.** Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli master equation // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 83. N 1. P. 270—291.
68. **Grubin H. L., Kreskovsky J. P.** Quantum moment balance equations and resonant tunneling structures // *Solid-State Electron.* 1989. V. 32. N 12. P. 1071—1075.
69. **Обухов И. А.** Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. Севастополь: Вебер, 2005. 226 с.
70. **Обухов И. А.** Моделирование статистических характеристик резонансно-туннельных приборов // *Микросистемная техника.* 2001. № 2. С. 23—28.

**В. В. Крутов**, канд. техн. наук,  
**В. Г. Михалевич\***, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
**А. А. Шука**, д-р техн. наук, проф.,  
 Московский государственный институт  
 радиотехники, электроники и автоматики  
 (технический университет),  
 E-mail: v\_krutov@mirea.ru  
 \*Институт общей физики РАН, Москва

## СОЗДАНИЕ НАНОДОМЕННЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ НА ИНТЕРФЕРИРУЮЩИХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ

*Предложен метод формирования периодической доменной структуры в сегнетоэлектриках на температурной решетке, индуцированной интерферирующими оптическими волнами. Рассмотрены два варианта: "оптический" и "оптико-микроволновый". Показано, что, например, в кристаллах  $\text{LiNbO}_3$  и  $\text{LiTaO}_3$  данный метод позволяет создавать доменные структуры с периодом  $0,08 \text{ мкм} < h < 1,0 \text{ мкм}$ .*

### Введение

В 1993 г. авторами работы [1] были получены регулярные доменные структуры (РДС) типа "голова к хвосту" в сегнетоэлектриках с помощью внешнего электрического поля. Этот метод в настоящее время широко используется для формирования РДС такого типа [2, 3]. Однако напряженность электрического поля для таких кристаллов, как ниобат и танталат лития, должна быть значительной, превышающей 20 кВ/мм. Для снижения столь высокого значения можно использовать нагрев сегнетоэлектрика. Так, при нагревании кристалла  $\text{LiTaO}_3$  до 220 °С это значение уменьшается до 9 кВ/мм против 20 кВ/мм для комнатной температуры [4].

Формирование РДС в условиях нагрева электромагнитным полем рассматривалось в работе [5]. При этом основное внимание уделено определению условий создания однородного температурного поля.

Вышеупомянутые методы требуют для формирования доменного рисунка приложения неоднородного электрического поля, которое создается с помощью гребенчатого электрода. Нанесение электрода с периодом в несколько микрометров на поверхность кристалла требует использования фотолитографии, что ограничивает минимальный период РДС значением порядка 1 мкм.

Метод формирования РДС, не требующий применения фотолитографии, рассматривался в работе [6], где показана возможность создания РДС с периодом порядка 100 мкм и более.

В данной работе рассмотрен метод формирования РДС с периодом порядка 1 мкм и менее, также не требующий применения фотолитографии. Основой предлагаемого метода является использование температурной зависимости коэрцитивного поля в сочетании с интерференционными и термическими свойствами оптических волн, длина волны которых в кристалле определяет период формируемой регулярной доменной структуры.

### 1. Пространственная модуляция температуры

Предлагаемый метод формирования структур антипараллельных доменов типа "голова—хвост" основан на применении температурной решетки (пространственной модуляции температуры) в качестве технологической маски, задающей пространственный период РДС. Такая решетка создает различные условия для переключения доменов электрическим полем в холодных и нагретых областях сегнетоэлектрика.

На практике данная решетка может быть реализована при быстром неоднородном нагреве. При определенных условиях такой нагрев может быть реализован с помощью интерферирующих оптических волн с учетом термического действия максимумов (пучностей) и конечной теплопроводности кристалла. В этом случае период интерференционной картины будет определять период температурной решетки, которая, в свою очередь, определит период доменной структуры типа "голова—хвост".

Очевидно, что градиенты температуры в созданной температурной решетке со временем будут стремиться к нулю ввиду теплопроводностного механизма выравнивания температуры. Поэтому для поддержания такой квазистатической решетки скорость неоднородного нагрева должна быть не меньше скорости выравнивания температуры за счет механизма теплопроводности:

$$\left| \left( \frac{dT}{dt} \right)_{\text{внеш}} \right| \geq \left| \left( \frac{dT}{dt} \right)_{\text{T}} \right|, \quad (1)$$

где  $\left( \frac{dT}{dt} \right)_{\text{внеш}}$  и  $\left( \frac{dT}{dt} \right)_{\text{T}}$  — скорости изменения температуры в пучностях за счет внешнего нагрева и механизма теплопроводности соответственно.

Для создания контрастной температурной решетки необходима неподвижная интерференционная картина, что обеспечивается только для вынужденных по частоте интерферирующих волн. Кроме того, интерферирующие оптические волны должны иметь одинаковые амплитуду и поляризацию.

Необходимо отметить также, что для создания температурной решетки затухание волн в среде является неперемным условием. Поэтому для поддержания стоячей волны колебания должны быть вынужденными, т. е. необходима подкачка энергии от внешнего источника с частотой, близкой к одной из собственных частот резонатора (предпо-

лагается, что кристалл выполнен в виде резонатора Фабри—Перо).

Учитывая, что для формирования структуры антипараллельных доменов внешнее электрическое поле необходимо прикладывать вдоль главной оси  $Z$  кристалла, модуляция температуры создается в плоскости  $XU$ . Полученное чередование холодных и нагретых областей обеспечивает селективное инвертирование доменов однородным электрическим полем.

## 2. "Оптический вариант" создания температурной решетки

Для создания температурной решетки на интерферирующих оптических волнах в простейшем случае необходимо взаимодействие двух встречных плоских волн с одинаковой частотой, амплитудой и поляризацией при выполнении условия (1).

Очевидно, что "оптический вариант" малоэффективен за пределами диапазона прозрачности данного кристалла. Например, учитывая, что диапазон прозрачности ниобата и танталата лития  $\lambda_0 = 0,35...4,5$  мкм, "оптический вариант" для данных кристаллов применим лишь для формирования РДС с периодом  $h = \lambda_0/2n$  в интервале значений  $0,08$  мкм  $< h < 1,0$  мкм. Для кристалла ниобат-бария стронция эти значения лежат в диапазоне  $0,08$  мкм  $< h < 1,6$  мкм.

Следовательно, "оптический вариант" является весьма перспективным для формирования субмикронных РДС (нанодоменных структур), необходимых, в частности, для создания управляемых электрооптических брэгговских отражателей.

Вместе с тем, существует ограничение, связанное с характером температурной зависимости сегнетоэлектрического кристалла. "Оптический вариант" применим в случае, когда практически отсутствует температурная зависимость показателя преломления  $n(T)$  в рабочем диапазоне температур:

$$n(T) \approx \text{const.} \quad (2)$$

Такое требование продиктовано следующим обстоятельством. Учитывая, что длина волны в среде зависит от показателя преломления  $\lambda = \lambda_0/n$ , изменение показателя преломления при нагревании вызывает изменение длины волны, которое, в свою очередь, вызывает смещение узлов и пучностей и, следовательно, нарушение неподвижности интерференционных полос и, соответственно, ухудшение контрастности температурной решетки.

## 3. "Оптико-микроволновый" вариант создания температурной решетки

Для предотвращения нелинейных эффектов перекачки энергии основной частоты в волны кратных и комбинационных частот целесообразно использовать двухступенчатый метод, суть которого заключается в следующем.

На первом этапе создается слабая пространственная модуляция температуры с заданным пространственным периодом с помощью интерференции волн допороговых интенсивностей (затравочная температурная решетка). Под термином "допороговые" подразумеваются интенсивности, при которых перекачка энергии основной частоты в волны других частот незначительна.

На втором этапе с помощью быстрого объемного СВЧ нагрева кристалла достигается усиление (раскачка) затравочной температурной решетки до уровня, необходимого для селективного переключения доменов электрическим полем. Причем, очевидно, что усиление температурной решетки обеспечивается лишь в случае нагрева кристалла, имеющего возрастающую температурную зависимость диэлектрической проницаемости  $\epsilon(T)$  в рабочем диапазоне температур

$$d\epsilon/dT > 0. \quad (3)$$

Действительно, как известно [7], поглощаемая мощность при СВЧ нагреве пропорциональна диэлектрической проницаемости. Поэтому возрастающий характер зависимости  $\epsilon(T)$  приводит к более энергичному нагреву областей с более высокой температурой (а значит с большей диэлектрической проницаемостью) по сравнению с холодными, что, в свою очередь, приведет к еще большему росту диэлектрической проницаемости горячих областей и т. д. (температурно-диэлектрическая неустойчивость). Если темп СВЧ нагрева превышает скорость выравнивания температуры, обеспечивается усиление индуцированной температурной решетки. Например, кристалл ниобата лития, как экспериментально показано в работе [8], характеризуется возрастающей зависимостью  $\epsilon(T)$  в рабочем диапазоне температур.

Отметим, что условие (1) должно выполняться на всех этапах, а интервал времени между окончанием создания "затравочной температурной решетки" и началом СВЧ нагрева не должен превышать времени  $\tau$ , выравнивания температуры на расстоянии периода решетки.

Очевидно, что темп СВЧ нагрева всех горячих областей данного кристалла должен быть одинаков. Это имеет место, как показано в работе [5], в случае, когда частота  $f$  электромагнитных колебаний удовлетворяет следующему условию:

$$\frac{d(T_p - T_0) \left( \alpha_1 \frac{S_1}{S_2} + \alpha_2 \right)}{2\pi\epsilon\epsilon_0 U_d^0 \text{tg}\delta} < f \ll \frac{c_0}{\pi r_k \sqrt{\epsilon}}, \quad (4)$$

где  $d$  — расстояние между электродами;  $T_0$  — температура окружающей среды;  $T_p$  — рабочая температура,  $\alpha_1, \alpha_2$  — коэффициенты теплоотдачи боковой поверхности кристалла и электродов соответственно;  $S_1, S_2$  — площади боковой поверхности кристалла и электродов соответственно;  $\epsilon, \epsilon_0$  — ди-

электрическая проницаемость кристалла и вакуума соответственно;  $U_d$  — действующее значение СВЧ напряжения на кристалле;  $\delta$  — угол диэлектрических потерь кристалла;  $c_0$  — скорость света в вакууме;  $r_k$  — радиус кристалла.

#### 4. Особенности переключения доменов в условиях квазистатической (динамической) температурной решетки

В отличие от традиционного метода [1], в предлагаемом альтернативном методе для формирования РДС вместо гребенчатых электродов используются однородные электроды, предварительно нанесенные на  $Z$ -поверхность кристалла. На указанные электроды подается высокое напряжение, создающее однородное электрическое поле, превышающее коэрцитивное значение в нагретых областях. В результате происходит селективное инвертирование доменов в горячих сечениях с образованием РДС с заданным пространственным периодом.

Длительность процесса инвертирования сегнетоэлектрических доменов  $\tau_S$  внешним электрическим полем зависит от конкретного типа сегнетоэлектрика и составляет, например, для объемного кристалла  $\text{LiNbO}_3$  значения в пределах 1...60 мс (в зависимости от толщины пластины и напряженности инвертирующего поля).

Покажем, что время  $\tau_S$  для сегнетоэлектриков класса  $3m$  значительно превышает время релаксации  $\tau_r$  квазистатической температурной решетки с периодом порядка 1 мкм. Действительно, время  $\tau_r$  распространения теплоты на расстояние порядка  $r$

$$\tau_r = \rho C_p r^2 / K, \quad (5)$$

где  $K$ ,  $\rho$ ,  $C_p$  — коэффициент теплопроводности, плотность и удельная теплоемкость кристалла соответственно.

Подставляя теплофизические параметры ниобата лития, получим  $\tau_r \approx 0,4$  мкс.

Итак, для ниобата лития

$$\tau_S \gg \tau_r. \quad (6)$$

Можно показать, что для танталата лития это неравенство тем более выполняется. Отсюда вытекает необходимость многократной регенерации температурной решетки в процессе переключения доменов в указанных кристаллах с периодом 1 мкм и менее. СВЧ нагрев (в том числе импульсно-периодический режим) обеспечивает такую регенерацию для кристаллов с возрастающей температурной зависимостью диэлектрической проницаемости при выполнении условия (1). В случае импульсно-периодического режима важно, чтобы за межимпульсный интервал не происходило полного выравнивания температуры.

Отключение высокого напряжения осуществляется после прохождения удельного заряда  $Q/A = 2P_S$  через кристалл. Соблюдение этого условия необходимо для предотвращения бокового роста доменов.

#### Заключение

Необходимо отметить, что в отличие от методов формирования РДС, предложенных в работах [1, 5], в рассмотренном методе используются однородные электроды и, соответственно, однородное электрическое поле.

Таким образом, данный метод имеет два существенных преимущества. Во-первых, не требует столь высоких значений напряженности инвертирующего электрического поля и, во-вторых, не требует применения фотолитографии, что позволит формировать не только микрометровые, но и субмикрометровые РДС (нанодоменные структуры), необходимые, в частности, для создания управляемых электрооптических брэгговских отражателей.

Показано, что, например, в кристаллах  $\text{LiNbO}_3$  и  $\text{LiTaO}_3$  данный метод позволяет создавать доменные структуры с периодом  $0,08 \text{ мкм} < h < 1,0 \text{ мкм}$ . Для кристалла ниобат-бария стронция эти значения лежат в диапазоне  $0,08 \text{ мкм} < h < 1,6 \text{ мкм}$ .

Интерференция встречных плоских волн в сочетании с импульсом инвертирующего поля позволит создавать одномерные, а интерференция более сложных волновых фронтов — двумерные фотонные кристаллы с доменными структурами типа "голова к хвосту".

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 03-07-90256.*

#### Список литературы

1. Yamada M., Nada N., Saitoh M., Watanabe K. First-order quasi-phase matched  $\text{LuNbO}_3$  waveguide periodically poled by applying an external field for efficient blue second-harmonic generation // Appl. Phys. Lett. 1993. N 62 (5). P. 435.
2. Hu X. P., Zhu Y. Y. Efficient generation of red light by frequency doubling in a periodically-poled nearly-stoichiometric  $\text{LiTaO}_3$  crystal // Appl. Phys. Lett. 2004. 85. N 2. P. 188.
3. Tillman K. A. Mid-infrared absorption spectroscopy across a 14,4 THz spectral range using a broadband femtosecond optical parametric oscillator // Appl. Phys. Lett. 2004. 85. N 16. P. 3366.
4. Battle C., Kim S., Gopalan V. Ferroelectric domain reversal in congruent  $\text{LiTaO}_3$  crystals at elevated temperatures // Appl. Phys. Lett. 2000. N 76 (17). P. 2436.
5. Krutov V. V., Shchuka A. A., Mikhalevich V. G. Formation of regular domain structures in ferroelectrics upon heating by electromagnetic field // Phys. of Wave Phenom. 2005. 13. N 3. P. 128.
6. Krutov V. V., Shchuka A. A., Mikhalevich V. G. Possibility of formation of ferroelectrics domain structures using Bessel temperature gratings // Phys. of Wave Phenom. 2006. V. 14. N 1. P. 24.
7. Von Hippel A. R. Dielectrics and waves. Boston: Artech, 1995.
8. Чкалова В. В., Бондаренко В. С., Фокина Г. О., Стрижевская Ф. Н. Температурные исследования диэлектрических, пьезоэлектрических и упругих свойств монокристалла ниобата лития // Известия АН СССР. Серия физическая. 1971. Т. 35. № 9. С. 1886.

## Новое нанопокрывание эффективно уничтожает бактерии

Наноматериалы не перестают преподносить ученым приятные сюрпризы. Так, учеными было создано нанопокрывание, которое при облучении его светом убивает находящиеся на его поверхности вирусы и бактерии.

Новое покрытие было испытано в Колледже Текстиля при Университете Северной Каролины (*North Carolina State University College of Textiles*) совместно с учеными из Медицинской Школы при Университете Эмори (*Emory University School of Medicine*). Как показали результаты, 99,9 % вирусов, в том числе вирусы гриппа и птичьего гриппа, были уничтожены благодаря нанопокрыванию.

Технология фотоактивного нанопокрывания была разработана доктором Стивенем Михельсеном (*Stephen Michielsen*) из Университета Северной Каролины, доктором Игорем Стожилковичем (*Igor Stojilivic*) и профессором Гордоном Черчвардом (*Gordon Churchward*) из Университета Эмори.

Само покрытие представляет собой полимерные нановолокна, обработанные наночастицами — фотокатализаторами. В его разработке также помогла компания *Light Activated Anti Microbials*, получившая почти 400 000 долл. от сторонних инвесторов для производства прототипов покрытия, разработанного учеными. Ожидается, что покрытие найдет применение для обеззараживания вещей пациентов в больницах, а также для комнат ожидания и палат в госпиталях.

**Источник:** EurekAlert: NC State Start-Up Looks to Turn 'Lights Out' on Flu, Other Viruses (<http://news.ncsu.edu/releases/2006/oct/187.html>).

## Суперкомпьютеры в биологических исследованиях

Ученые из Политехнического института Ренсслера (*Rensselaer Polytechnic Institute*) продолжают улучшать свои вычислительные системы. Компания IBM наградила институт новым суперкомпьютерным оборудованием на сумму 2,23 млн долл. Эта акция прошла в рамках программы IBM *Shared University Research (SUR)*, укрепляющей развитие вычислительных сетей университетов, работающих над фундаментальными проблемами.

Новая система на ядре *Blue Gene* будет основой нового вычислительного центра *Computational Center for Nanotechnology Innovations (CCNI)* для проведения математических вычислений в области нанотехнологий.

Как говорят ученые, *Blue Gene* поможет, в первую очередь, при моделировании биологических наносистем, ДНК-наноструктур и построении молекулярных моделей вирусов.

**Источник:** EurekAlert: Supercomputing equipment to advance the frontiers of computational biology ([http://www.eurekalert.org/pub\\_releases/2006-12/rpi-set120706.php](http://www.eurekalert.org/pub_releases/2006-12/rpi-set120706.php)).

## Соевый пластик становится прочнее

То, что из белков сои и кукурузы можно синтезировать биodeградируемый (разлагающийся со временем в естественной природной среде) пластик, ученые знали довольно давно. Однако он недостаточно прочен. Ученые из Университета Айовы (*Iowa State University*) решили усовершенствовать пластик, придав ему прочность с помощью наноклея.

Обычно при изготовлении свернутые белки сои или кукурузы "выпрямляют" с помощью глицерина в длинные цепочки, которые затем формируют пластик. Теперь же в ходе этого завершающего этапа производства ученые добавили в пластик частички наноклея. Определенной трудностью было разделение клея на отдельные нанокусочки размерами от 10 до 20 нанометров. Для того ученые использовали мощный высокочастотный ультразвуковой источник.

Дальнейшая обработка пластика (плавление и производство готовых изделий) происходила на специальном оборудовании от фирмы *Trexel Inc.*

Как говорит Дэвид Грэвелл (*David Grewell*), руководитель команды исследователей, новый пластик будет широко востребован в индустрии пищевых продуктов, производстве цветочных горшков и для сельскохозяйственных мешков (рис. 1).



Рис. 1. Дэвид Грэвелл представляет новый пластик

На сегодняшний день исследовательские работы ученых поддержаны грантом Штата Айовы в размере 68758 долл.

**Источник:** EurekAlert: Iowa State researchers improving plastics made from corn and soy proteins ([http://www.eurekalert.org/pub\\_releases/2006-10/isu-isr103006.php](http://www.eurekalert.org/pub_releases/2006-10/isu-isr103006.php)).

## Политехнический институт Уорчестера получил грант на развитие биомедицинских исследовательских центров

Две различные исследовательские программы, проводящиеся Политехническим институтом Уорчестера (*Worcester Polytechnic Institute*), получили финансирование от правительства США в размере 2 млн долл. — по одному на каждую программу.

Финансирование охватывает два центра Института: Центр Мобильного Здравоохранения (*Center for Untethered Healthcare*) и Центр Нейропротезирования и БиоМЭМС (*Center for Neuroprosthetics and BioMEMS*).

Исследования Центра Мобильного Здравоохранения лежат в области разработки и конструирования беспроводных датчиков и сенсоров, позволяющих быстро определить состояние пациента в любой момент времени. Особенно это будет востребовано при мониторинге состояния солдат на поле боя. На разработку систем мониторинга и выживания направлен первый грант в размере 1 млн долл.

Центр Нейропротезирования и БиоМЭМС занимается, в основном, разработкой искусственных органов, которыми может управлять непосредственно головной мозг пациента. Второй миллионный грант направлен на разработку искусственных протезов нового поколения.

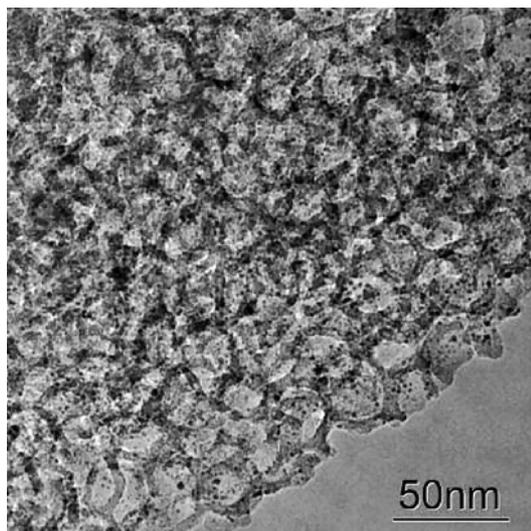
"Эти важнейшие направления исследований будут иметь сильное влияние на развитие национальной безопасности и здравоохранения во всем мире, — сказал президент Института Деннис Беркли (*Dennis D. Berkey*). Благодаря государственному финансированию Институт сможет побороться за мировое лидерство в области биомедицинских исследований и биоинженерии".

Программы, развернутые в Политехническом институте Уорчестера, — часть оборонного билля США, принятого Сенатом (*U. S. Senate Defense Appropriations Bill*). По нему на усиление национальной безопасности выделяется 12,3 млн долл.

**Источник:** EurekAlert: Worcester Polytechnic Institute receives \$2 million in federal funds for biomedical research centers ([http://www.eurekalert.org/pub\\_releases/2006-10/wpi-wpi103006.php](http://www.eurekalert.org/pub_releases/2006-10/wpi-wpi103006.php)).

## Фабрика из энзимов

Для того, чтобы лучше понять работу клеточных машин-энзимов, ученые создали субстанцию с плотностью энзимов как в обычной клетке. Ранее было трудно изучить их работу в растворе из-за то-



**Рис. 2.** Энзимы в порах. Для микроэлектронной фотографии потребовалось покрыть образец золотыми наночастицами

го, что в клетке поведение биологических машин отличается благодаря их "плотной упаковке".

Открытие произошло случайно. Ученые из Тихоокеанской Северо-Западной лаборатории США (*Pacific Northwest National Laboratory*) исследовали энзимы, находящиеся в холодильнике уже после прохождения срока их пригодности к использованию в лабораторных тестах. Считалось, что они неактивны, так как слишком много времени прошло с момента их заморозки. Однако после помещения их в специальный наноструктурированный материал они "ожили".

Энзимы — это белки, выполняющие в клетках функции катализаторов и "преобразователей" химических веществ. Обычно они выполняют механические операции над молекулами в клетке.

Эти энзимы были помещены в специальный материал, называющийся мезопорированным силикатом (FMS). Если же поместить энзимы до образования мезопорированного материала, то они могут вообще утратить свои функции.

Благодаря уникальным способностям энзимов-белков, они были помещены в гексагональные поры размером около 30 нм (рис. 2).

Теперь ученые получили своеобразную "фабрику" энзимов. Так, например, изомераза глюкозы (GI) перерабатывает глюкозу, попавшую на материал, во фруктозу.

Это довольно важное открытие ученых может привести к созданию сложных молекулярных машин, которые могут одновременно синтезировать или перерабатывать большое количество химических веществ. Также ученые уверены, что гибридный нанопор и энзимов позволит создать сверхточные биосенсоры.

**Источник:** EurekAlert: Night of the living enzyme ([http://www.eurekalert.org/pub\\_releases/2006-11/dnnl-not112806.php](http://www.eurekalert.org/pub_releases/2006-11/dnnl-not112806.php)).

## Ультрафиолет открывает тайны наноматериалов

Международная команда ученых, экспериментирующая с различными материалами для нанoeлектроники, недавно обнаружила, что некоторые ультратонкие материалы спонтанно становятся электрически поляризованными.

Ученые из университетов Пуэрто-Рико, Мичигана, Висконсина, NASA и Национального Аэрокосмического агентства Аргентины назвали эти материалы "случайными ферроэлектриками".

Для того, чтобы установить истинную природу поляризации, ученые провели несколько экспериментов с пленками титаната бария ( $\text{BaTiO}_3$ ) толщиной всего 0,4 нм. Толщина этого материала — размер одной молекулы титаната бария, поэтому ученые утверждают, что это тончайший на сегодняшний день материал для нанoeлектроники, удивительные свойства которого можно будет применить в "умных чипах" и кредитных карточках. Оказалось, что этот материал — ферроэлектрик, проявляющий свои свойства при комнатной температуре. Для проверки ученые покрыли материал мономолекулярным слоем неферроэлектрика титаната стронция. Как и предполагали исследователи, первый слой в "бутерброде" продолжал демонстрировать ферроэлектрические свойства.

Для детального изучения появления эффекта команда исследователей применила ультрафиолетовую (УФ) спектроскопию, после чего ученым стало ясно, что фазовый переход в материале происходит из-за нарушения симметрии его кристаллической структуры (рис. 3).

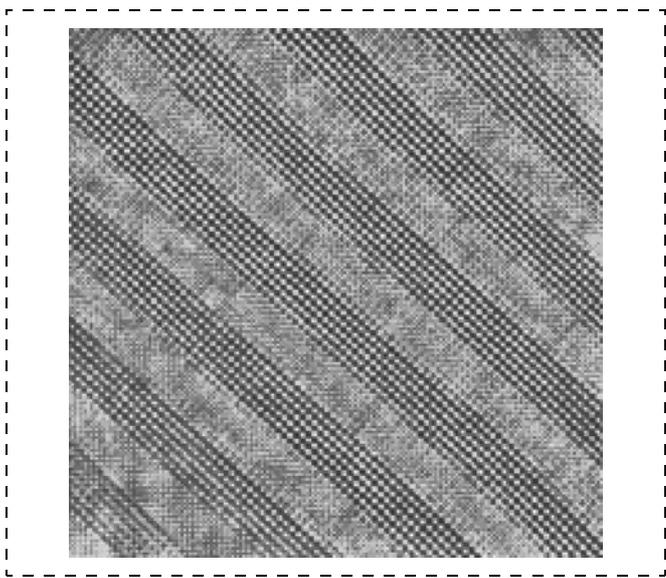


Рис. 3. Наноматериал под воздействием УФ лучей

Теперь ученым предстоит дополнительные исследования нового наноматериала с помощью спектроскопии, так как использование его в нанoeлектронике может существенно улучшить современные электронные кредитные карточки, различные чипы идентификации и "smart chips".

**Источник:** EurekAlert: Ultraviolet Light Reveals Secrets of Nanoscale Electronic Materials (<http://www.science.psu.edu/alert/Xi10-2006.htm>)

## Ученые наладили массовый выпуск транзисторов на нанотрубках

Исследователи из Северо-Западного Университета США продемонстрировали ключ на основе нанотрубки с двумя устойчивыми состояниями, изготовленный с помощью традиционных технологий массового производства электронных компонентов.

Создание ключей и других электронных устройств на основе нанотрубок — не новость. С 1998 г. технология транзисторов на основе нанотрубок постоянно совершенствовалась, однако до их массового производства так и не доходило.

Однако теперь есть все шансы, что в обозримом будущем на рынках появятся элементы памяти на нанотрубках, процессоры и другие микро- и нанoeлектронные устройства.

"Использовать нанотрубочную электронику довольно выгодно, так как для дальнейшего уменьшения размеров чипов необходимо изобретать альтернативные подходы, потому что мы уже довольно плотно приблизились к размерному пределу, где закон Мура уже не сможет действовать. А чипы на основе квантовых элементов механических транзисторов или нанотрубок позволяет оставить закон Мура в силе. Только вот пока никому не удалось поставить производство нанотрубочной электроники на поток", — сказал Горацио Эспиноза, ученый из Северо-Западного Университета.

Ключ, созданный исследователями, довольно прост. Это многослойная нанотрубка, один конец которой закреплен, а другой через пространство менее 10 нм электростатически взаимодействует с электродом. Устройство использует туннельный принцип.

Простая конструкция ключа позволит ученым соединять ряд ключей в двумерные матрицы, которые будут использоваться для различных электронных устройств.

Следующим шагом Горацио и его коллег будет создание из матрицы ключей работоспособной логической ячейки модуля памяти. И, естественно, ученым предстоит разработать простую технологию ее массового производства.

**Источник:** Nanotechweb.org: Carbon nanotube switch compatible with mass production (<http://www.nanotechweb.org/artivles/news/5/10/15/1>).

## Квантовые биосенсоры помогут создать новые вакцины

Ученые-иммунологи из Онкологического центра Киммель при Университете им. Томаса Джефферсона, США, создали с помощью нанотехнологий биосенсор, позволяющий решить один из вопросов иммунологии: как Т-клетки иммунной системы находят и атакуют патогенные вирусы.

Как они установили, даже очень небольшой вирус может вызвать иммунный ответ со стороны Т-клеток, которые каким-то образом замечают его присутствие в организме. Для изучения рецепторов Т-клеток и был построен биосенсор нового типа на основе полупроводниковых квантовых точек.

Сенсор удалось сконструировать, соединив ряд специфических для вирусов белков с полупроводниковыми квантовыми точками. Так ученые получили маркированные белки, на которые охотятся Т-клетки. Теперь ученые смогли проследить работу Т-клеток с самого начала.

Как говорит один из ученых, профессор микробиологии и иммунологии Юрий Шилалев, медицина может получить новые противовирусные вакцины благодаря исследованиям различных вариантов иммунных ответов Т-клеток с помощью новых квантовых агентов.

**Источник:** TJHospital: Immune Cell Communication, Cooperation Keys to Hunting Viruses, Jefferson Immunologists Show (<http://www.jeffersonhospital.org/news/2006/article12962.html>).

## Наноманипуляторы вырастают из лесов нанотрубок

Одна из проблем, часто встающих перед исследователями, работающими с объектами нанометровых размеров, — это манипулирование ими. Сегодня для этой цели применяют атомно-силовые и

сканирующие туннельные микроскопы, которые недостаточно гибки в управлении. В перспективе ученые планируют сконструировать специальные наноманипуляторы, которые позволят оперировать отдельными атомами. Если ранее для этого планировали использовать сложное наномеханическое устройство, работающее по принципу "рука робота", то теперь есть возможность использовать углеродные нанотрубки, которые могут справиться с рядом задач по перемещению и захвату нанометровых объектов.

Так, учеными из Технического Университета Дании и группой исследователей из Кембриджского Университета была создана "рабочая платформа" из многослойных углеродных нанотрубок, с помощью которой можно манипулировать различными объектами микромира.

"Обычно мы не можем отделить органические нановолокна, которые производятся методом самосборки практически на любом из субстратов. Теперь же, используя платформу из многослойных нанотрубок в качестве "рабочего станка", работать с органическими наноструктурами становится гораздо легче. Мы даже не деформируем их при отделении от платформы", — говорит один из ученых, Питер Боггилд.

Достичь "мягкого" манипулирования органикой на поверхности нанотрубчатого леса удалось благодаря силам Ван-Дер-Ваальса. Как утверждает Боггилд, пучки нанотрубок могут выступать в роли своеобразных молекулярных пинцетов, которыми можно передвигать отдельные молекулы. Но для этого уже необходима наноэлектромеханическая основа, координирующая работу "пинцета". Сейчас ученые работают над этой проблемой в составе Европейской 6-й рамочной программы.

**Источник:** EurekAlert: Carbon nanotube forests could branch out into nanomanipulation (<http://www.nanotechweb.org/articles/news/5/9/16/1>)

## САЛОН "НАНОТЕХНОЛОГИИ"

*в рамках*

VIII международной выставки  
"Высокие технологии XXI века"

23—26 апреля 2007 года

Россия, Москва, ЦВК "Экспоцентр"

*Уважаемые господа!*

ЗАО "Экспоцентр" приглашает Вас принять участие в работе специализированного салона "НАНОТЕХНОЛОГИИ". Впервые в России салон организуется в рамках VIII международной выставки "Высокие технологии XXI века".

Цель Салона — объединить на одной площадке научно-технологический потенциал и достижения отдельных групп разработчиков для установления взаимовыгодного партнерства между отечественными и зарубежными научными центрами и производителями, демонстрации готовой продукции и реализации перспективных проектов в области нанотехнологий и внедрения нанотехнологий в другие отрасли экономики.

### Тематика Салона:

- продукция, созданная на базе нанотехнологий и наноматериалов, обеспечивающих повышение конкурентоспособности и расширение присутствия России на мировом рынке наукоемкой высокотехнологичной продукции;
- технологии снижения уровня угроз террористических актов, техногенных катастроф и других факторов неблагоприятных внешних воздействий путем широкого внедрения специальной наносистемной техники;
- профилактика, диагностика и лечение заболеваний путем внедрения в практическое здравоохранение средств и методов диагностики, лекарственных средств нового поколения и лечебной аппаратуры на основе достижений нанотехнологий и наноматериалов;
- экологическая безопасность и комфортность среды обитания за счет применения наносистемной техники для мониторинга и защиты окружающей среды;
- улучшение качества различных конструкционных материалов: механохимический синтез, обработка давлением многослойных композитов, контролируемая кристаллизация из аморфного состояния, формирование пленок методами физического и химического осаждения и др.;
- средства защиты персонала от электромагнитного излучения, защиты различной аппаратуры от помех, защиты от несанкционированного доступа к информации, созданные с использованием нанотехнологий.

Во время Салона будут организованы научно-практические конференции по вышеупомянутой тематике.

**Для получения  
подробной  
информации,  
пожалуйста,  
обращайтесь:**

**ЗАО "Экспоцентр",  
дирекция № 2**  
Давыдов Сергей Иванович  
Тел.: 255-28-33,  
факс: 205-60-55  
e-mail: davydov@expocentr.ru  
<http://www.expocentr.ru>

**Распопов В. Я.**

Микромеханические приборы: учебное пособие. — М.: Машиностроение, 2007. — 400 с: ил.  
ISBN 5-217-03360-6

Изложены терминология, классификация, конструкции и принципы работы микромеханических осевых и маятниковых акселерометров, датчиков давления и гироскопов LL-, LR- и RR-типов. Даны описание и расчет прямых (датчиков перемещений и деформаций) и обратных (датчиков сил и моментов) преобразователей в микромеханическом исполнении, схемы электронной обработки сигналов.

Приведены примеры электронного устранения ошибок микрогироскопов, в частности квадратурной; описана электронная частотная настройка режимов работы микрогироскопов. Рассмотрены конструктивные схемы и расчет упругих подвесов и мембран, динамика чувствительных элементов, включающая уравнения движения, передаточные функции, частотные характеристики и функциональные зависимости перемещений чувствительных элементов от измеряемой величины. Даны расчет газового и конструкционного демпфирования, теория и расчет измерительных цепей приборов прямого и компенсационного преобразований, а также основные погрешности измерений, примеры вычислений.

Для студентов вузов, обучающихся по специальности "Приборостроение", а также может быть полезна аспирантам и инженерно-техническим работникам.

## РЕЦЕНЗИЯ

### на учебное пособие В. Я. Распопова "Микромеханические приборы"

Учебное пособие В. Я. Распопова затрагивает одно из важнейших направлений развития прецизионного приборостроения микромеханические системы (МЭМС).

В настоящее время это направление получило бурное развитие во всем мире. Однако учебной литературы по данному комплексу вопросов крайне мало. Рецензируемое учебное пособие обладает, на наш взгляд, несомненными достоинствами, так как в должной мере в нем сочетаются теоретические положения с материалами по современным вопросам технологического характера.

Пособие содержит ясные по физическому смыслу и корректные по математической постановке примеры, что несомненно является достоинством этой работы. Список литературы содержит не только ссылки на фундаментальные исследования, но и на свежие работы последних лет. Пособие написано ясным языком, легко читается и может быть полезным не

только обучаемым, но и преподавателям. Оно, несомненно, положительным образом скажется на подготовке высококвалифицированных специалистов, например:

**1. 653700**

— Приборостроение

— ЕН. Ф. 06 Физические основы получения информации;

— ОПД. Ф. 08 Основы проектирования приборов и систем;

— СД. Ф. 03 Схемотехника измерительных устройств.

**2. 652300** — Системы управления движением и навигации.

**3. 651600** — Автоматизация и управление.

Издание учебного пособия д-ра техн. наук, проф. Распопова В.Я. "Микромеханические приборы" — очень полезный и важный шаг для эффективной подготовки специалистов высокого уровня.

Зам. директора по науке Института проблем точной механики и управления Саратовского отделения РАН,  
д-р техн. наук, проф. **В. М. Панкратов**

# CONTENTS

<i>Amelichev V. V., Danilova N. L., Pankov V. V., Tarasov V. A. Design and Technology Basis for Multi-Versioned Production of Integrated Semiconductor Tensoresistive Transducers. . . . .</i>	2
<i>Zolotov Yu. N., Timoshenkov S. P., Shelepin N. A. Application of Complex Methods of Designing During the Development of Integrated Transducers of Mechanical Values . . . . .</i>	4
<i>Amelichev V. V., Galushkov A. I., Reznev A. A., Saurov A. N., Sukhanov V. S. Visualization of Induced Non-Uniformities of Magnetic Field of Earth . . . . .</i>	11
<i>Amelichev V. V., Pavlov A. Yu., Pogalov A. I., Chaplygin Yu. A. Optimization of Design of Physical Type Integrated Transducers . . . . .</i>	14
<i>Dyagilev V. V., Mikhailov Yu. A., Ignat'eva E. V., Sheshukova S. Yu. Some Results of Development and Improvement of Silicon Integrated Strain Gage Microchips Manufacture. . . . .</i>	17
<i>Amelichev V. V., Galushkov A. I., Dyagilev V. V., Kasatkin S. I., Muravyev A. M., Lopatin V. V., Reznev A. A., Saurov A. N., Sukhanov V. S. Microelectronic Magneto-Resistive Processing. . . . .</i>	22
<i>Amelichev V. V., Verner V. D., Il'kov A. V. MEMS-Microphone. Choice of Materials, Designs and Technologies. Part II. . . . .</i>	27
<i>Konoplev B. G., Pristupchik N. K., Ryndin E. A. Three-Axis Autoemission Accelerometer . . . . .</i>	36
<i>Roshchupkin D. V., Irzhak D. V. Investigations of Acoustic Wavefields in Piezoelectric Crystals Using Scanning Electron Microscopy and X-Ray Methods. . . . .</i>	40
<i>Glukhova O. E. Functional Nanodevices on the Basis of Nanocluster C<sub>60</sub>@C<sub>450</sub>. . . . .</i>	52
<i>Abramov I. I. Problems and Principles of Physics and Simulation of Micro- and Nanoelectronics Devices. Part V. Resonant-Tunneling Structures . . . . .</i>	57
<i>Krutov V. V., Mikhalevich V. G., Shchuka A. A. Formation of Nanodomain Periodical Structures in Ferroelectrics Using Optical Interference . . . . .</i>	71

## For foreign subscribers:

*Journal of "NANO and MICROSYSTEM TECHNIQUE" (Nano- i mikrosistemnaya tekhnika, ISSN 1813-8586)*

*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; <http://www.microsystems.ru>**

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромьинский пер., 4/1. Телефон редакции журнала (495) 269-5510. E-mail: 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. В. Арбузова

Сдано в набор 19.01.2007. Подписано в печать 21.02.2007. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 9,8. Уч.-изд. л. 11,83. Заказ 353. Цена договорная

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