

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 3 (92) ✧ 2008

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ПРИКЛАДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

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

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

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.

Андреевский 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.

Тимошенков С. П.

Тодуа П. А.

Отв. секретарь

Лысенко А. В.

Редакция:

Безменова М. Ю.

Григорин-Рябова Е. В.

Чугунова А. В.

Учредитель:

Издательство

"Новые технологии"

Издается с 1999 г.

СОДЕРЖАНИЕ

НАНОТЕХНОЛОГИИ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Глухова О. Е., Мещанов В. П., Салий И. Н., Терентьев О. А. Нерегулярные нанотрубные углеродные структуры как наностержни прямолинейной ориентации	2
Потапов А. А. Принципы проектирования наносистем.	5

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Панфилов Ю. В. Практические результаты использования наноструктурированных материалов	13
Тягунов О. А. Программный комплекс для моделирования и исследования динамических характеристик микро- и наномеханических элементов и систем	19
Хорунжий И. А., Доманевский Д. С., Бобученко Д. С. Экспериментальная проверка компьютерной модели радиатора для охлаждения мощного полупроводникового прибора	25

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е. Методы и средства минимизации влияния нестационарных температур в МЭМС-структурах тонкопленочных тензорезисторных датчиков давления	28
Афонин С. М. Исследование и расчет статических и динамических характеристик пьезоактюатора нано- и микроперемещений.	34
Астахов М. В., Дутов И. В., Родин А. О. Ферромагнитный резонанс в аморфном ферромагнитном микропроводе	42

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Козлов Г. В., Афашагова З. Х., Буря А. И. Теоретическое описание эффекта наноадгезии в дисперсно-наполненных полимерных нанокompозитах: фрактальная модель	45
Комленок М. С., Пименов С. М., Кононенко В. В., Конов В. И., Шайбе Х.-И. Лазерное микроструктурирование поверхности сверхтвердых аморфных углеродных пленок	48
Александров П. А., Демаков К. Д., Шемардов С. Г., Кузнецов Ю. Ю. Применение имплантации ионов кислорода и процесса твердофазной рекристаллизации для улучшения кристаллической структуры кремния на сапфире.	54
Тарнавский Г. А., Анищик В. С., Тарнавский А. Г. Влияние защитных масок при отжиге кремниевой пластины на формирование наноразмерных гетероструктур легирующих примесей фосфора	57

НОВОСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ	66
---	----

ИНФОРМАЦИЯ	70
Contents	80

Аннотации статей журнала и требования к оформлению статей доступны на сайте журнала:
<http://www.microsystems.ru>. E-mail: it@novtex.ru

ПОДПИСКА:

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

УДК 539.2 + 546.26

О. Е. Глухова, канд. физ.-мат. наук,
В. П. Мещанов, д-р физ.-мат. наук,
И. Н. Салий, д-р физ.-мат. наук,
О. А. Терентьев,
ГОУ ВПО Саратовский государственный
университет им. Н. Г. Чернышевского

НЕРЕГУЛЯРНЫЕ НАНОТРУБНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ СТРУКТУРЫ КАК НАНОСТЕРЖНИ ПРЯМОЛИНЕЙНОЙ ОРИЕНТАЦИИ

Представлена молекулярно-механическая модель углеродных нанотрубок с нерегулярной структурой, позволяющая рассчитывать атомное строение каркаса, параметры упругости и прочности. Установлено, что нерегулярные нанотрубные углеродные однослойные структуры стручкового типа и с внутренними перемычками обладают повышенными упругостью и прочностью. Подобные нерегулярные нанотрубные структуры имеют тенденцию быть прямыми.

В настоящее время активно ведется поиск областей применения дефектных нанотрубок с нерегулярной структурой [1–7]. Нерегулярность обусловлена краевыми эффектами, изменением топологии атомного каркаса вдоль оси, возможными локальными дефектами остова (изомеризация с поворотом C—C связи на 90° [5, 8], элиминирование нескольких атомов углерода [5, 9, 10], допирование атомами углерода или других химических элементов [5, 11] и др.) и деформацией каркаса. Причиной последней могут быть прогиб, закручивание, растяжение/сжатие [12, 13], наличие внутренних перемычек (бамбукоподобная структура [14, 15]), заполнение внутренней полости фуллеренами (стручковая структура [16]), синтез полимеров в полости нанотрубки [17] и др.

Цель данной работы — теоретическое исследование нерегулярных нанотрубных структур с внутренними перемычками и стручкового типа в качестве упругих наностержней прямолинейной ориентации.

На сегодняшний день многоатомные углеродные нанотрубки с нерегулярной структурой изучаются на полуэмпирических либо на молекулярно-механических моделях, позволяющих с удовлетворительной

точностью рассчитывать геометрию каркаса и моделировать некоторые физические процессы, протекающие в наноструктурах под действием внешних сил (деформирующих сил, внешних электромагнитных полей и др.). В данной работе исследования геометрии каркаса и механических свойств (упругой деформации растяжения/сжатия, прочности на изгиб) проводятся на оригинальной, разработанной авторами, эмпирической модели.

1. Молекулярно-механическая модель углеродной нанотрубки

Эмпирическая, или молекулярно-механическая, модель определяет полную энергию углеродной тубулярной наноструктуры как многочлен, каждая составляющая которого имеет свой весовой коэффициент, задающийся в результате обработки экспериментальных данных. Нами взята за основу модель валентного силового поля с учетом взаимодействия Ван-дер-Ваальса несвязанных атомов:

$$E = \sum K_r(r - r_0)^2 + \sum K_\theta(\theta - \theta_0)^2 + \sum \left(\frac{K_a}{r^{12}} - \frac{K_b}{r^6} \right). \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое учитывает изменение длин связей в наноструктуре по отношению к длине связи в графите ($r_0 = 0,142$ нм), второе слагаемое — изменение углов между связями по отношению к углу между связями в графите ($\theta_0 = 120^\circ$), а третье слагаемое — взаимодействие Ван-дер-Ваальса (потенциал Леннарда—Джонса); $K_r = 3,25 \cdot 10^2$ Дж · м⁻², $K_\theta = 4,4 \cdot 10^{-19}$ Дж · рад⁻²; $K_a = 4,0 \cdot 10^{-139}$ Дж · пм, $K_b = 1,5 \cdot 10^{-80}$ Дж · мкм — весовые коэффициенты. Такой способ задания полной энергии углеродных тубулярных наноструктур был выбран, как один из наиболее оптимальных. Коэффициенты подобраны авторами в результате решения минимаксной задачи. Разработанная молекулярно-механическая модель реализована в программно-вычислительном пакете RING-MD.

Проведено сравнение линейных размеров нанотрубок, рассчитанных [5, 18, 19] и измеренных экспериментально [20–22], со значениями, полученными с помощью пакета RING-MD. Погрешность модели, реализованной в RING-MD, составляет менее 3 %.

Результаты сравнения расчета механических свойств (в частности, модуля Юнга) с данными экспериментальных [23] и теоретических работ [24, 25] дают основание утверждать, что разработанные молекулярно-механическая модель и пакет RING-MD могут быть использованы в исследованиях механических свойств однослойных нанотрубок с нерегулярной структурой. В частности, обнаружено, что с ростом диаметра модуль Юнга увеличивается, погрешность вычислений по сравнению с экспериментом [23] менее 10 %. Погрешность вычислений на альтернативных эмпирических моделях [24] также не превышает 10 %, но модуль Юнга уменьшается с увеличением диаметра трубки [24] или вообще от него не зависит [25].

2. Механические свойства углеродных нанотрубок стручкового типа (упругая деформация растяжения/сжатия, прочность на изгиб).

В качестве модели нанотрубки стручкового типа рассмотрена трубка (8,8), заполненная 34 фуллеренами C_{20} (рис. 1, а, б). В свободном состоянии молекулы C_{20} нестабильны, но в поле удерживающего потенциала трубки они пребывают в равновесном состоянии [26]. Теплота образования структуры $34C_{20}@ (8,8)$ равна — 1067 ккал/моль. Молекулы C_{20} дистанцированы от стенок трубки на расстояние $d_{C_{20}-tube} = 0,345$ нм и центрируются на оси трубки с шагом $d_{C_{20}-C_{20}} = 0,632$ нм (рис. 1, в).

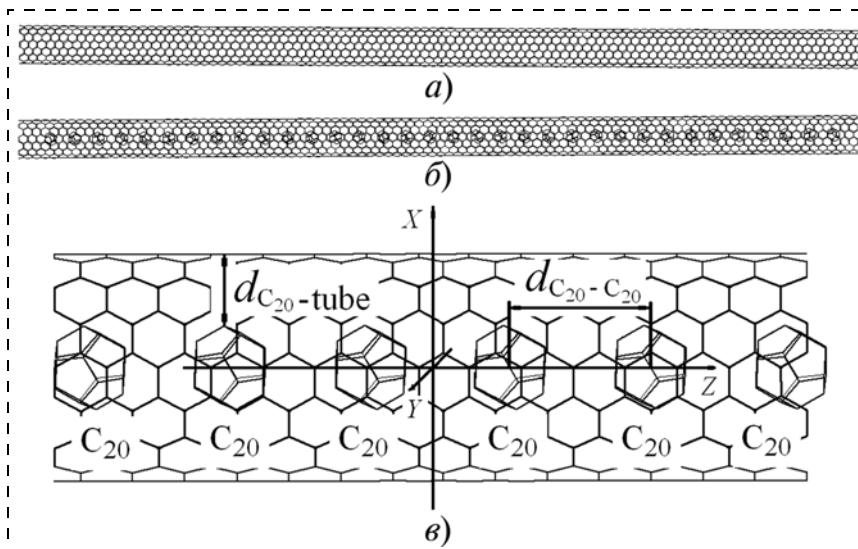


Рис. 1. Нанотрубка (8,8):

а — полая нанотрубка; б — нанотрубка, заполненная фуллеренами C_{20} ; в — фрагмент нанотрубки стручкового типа

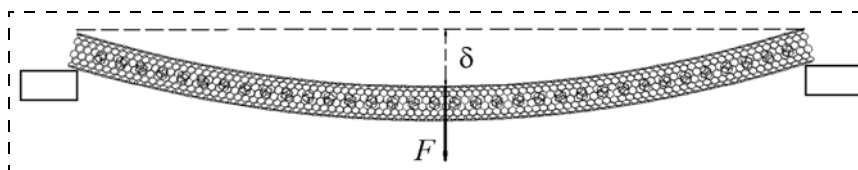


Рис. 2. Прогиб нанотрубки (8,8) стручкового типа, закрепленной на двух опорах, под действием силы F (δ — смещение от положения равновесия)

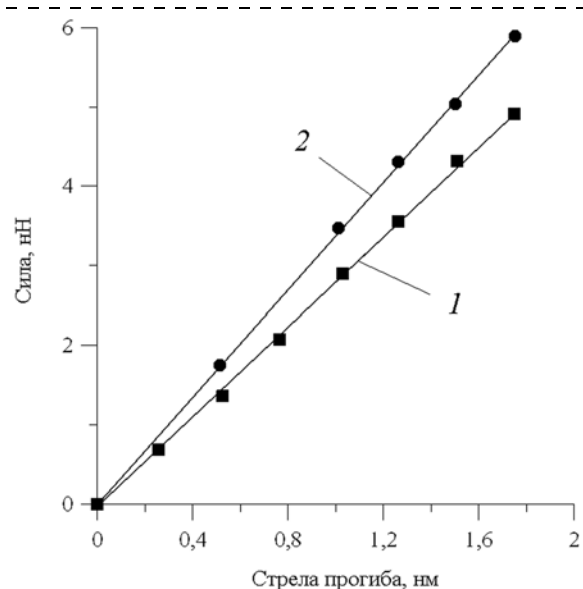


Рис. 3. Изменение силы, необходимой для прогиба нанотрубки, с увеличением стрелы прогиба:

1 — полая нанотрубка (8,8); 2 — нанотрубка (8,8) с инкапсулированными фуллеренами C_{20}

Модуль Юнга наностручка $34C_{20}@ (8,8)$, содержащего 3752 атома, равен 0,93 ТПа, что на 12 % превышает модуль Юнга (0,82 ТПа) полую трубку (8,8).

Наравне с упругостью важной характеристикой нанотрубок при конструировании на их основе элементов устройств электроники является прочность.

Экспериментально прочность нанотрубок измеряется следующим образом. К жгутам из нанотрубок, подвешенным между двумя стойками, прикладывается механическая нагрузка с помощью иглы атомного силового микроскопа. В результате устанавливается связь между нагрузкой F и стрелой прогиба δ [27]: для жгутов из полых однослойных нанотрубок эта связь линейна до некоторого значения прикладываемой силы. Нами процесс измерения прочности однослойных трубок (8,8) и $34C_{20}@ (8,8)$ симулирован с помощью пакета RING-MD и зависимость δ от F рассчитана на молекулярно-механической модели.

На рис. 2 показана нанотрубка, заполненная фуллеренами, изгиб которой составляет 35° . Приложенная сила равна 4,46 нН, стрела прогиба — 1,75 нм. Исследование прочности трубки проводилось постепенным увеличением прогиба нанотрубки (увеличивался угол изгиба) и расчетом требуемой для этого силы F . Максимальный изгиб составил 40° . График зависимости δ от F приведен на рис. 3.

Характеризовать прочность нанотрубок удобно с помощью коэффициента

$$k = \frac{F}{\delta}, \quad (2)$$

имеющего размерность ньютон на метр коэффициента жесткости в законе Гука. Для полых нанотрубки, как следует из графика на рис. 3, $k = 2,8$ Н/м, для заполненной фуллеренами C_{20} $k = 3,4$ Н/м. Этот коэффициент, имеющий прочностной смысл, также может выступать как форм-фактор наноструктуры. Действительно, если провести аналогию с классической механикой, коэффициент пропорциональности между силой и стрелой прогиба определяется модулем Юнга, длиной и моментом инерции поперечного сечения трубки [28]. Однако для наноструктур все перечисленные параметры либо неизвестны вовсе, как момент инерции поперечного сечения трубки, либо измерены с погрешностью, либо рассчитаны на тех или иных моделях с некоторыми упрощениями. Поэтому введенный нами коэффициент прочности k имеет большое преимущество, поскольку для его расчета требуются только результаты физического или численного эксперимента, даже без уточнения структуры каркаса нанотрубки, ее киральности, способа заполнения полости.

3. Упругие свойства углеродных бамбукоподобных нанотрубок

Исследование свойств бамбукоподобных нанокластеров проводилось по модели одностенной трубки с несколькими перемычками. Рассматривались трубки одного диаметра, число перемычек на единицу длины менялось. Основу тубуса составил кластер киральности (10,10). На рис. 4 показана одна из исследованных трубок длиной $\sim 3,6$ нм с тремя перемычками. Шаг перемычек составляет 0,956 нм.

Обнаружено, что модуль Юнга бамбукоподобных нанокластеров растет с увеличением числа перемычек. Характер роста отражает график, приведенный на рис. 5. Необходимо отметить, что модуль Юнга идеальных нанотрубок (10,10) составляет ~ 1 ТПа. Таким образом, идеальные тубулярные нанокластеры уступают бамбукоподобным по упругости в случае деформации растяжения.

Заключение

Углеродные однослойные нанотрубки стручкового типа имеют повышенные упругость и прочность: модуль Юнга нанотрубок, заполненных фуллеренами, превышает на 12 % модуль Юнга идентичных полых нанотрубок, а коэффициент прочности — на 21 %. Нанотрубки стручкового типа предпочтительнее полых нанотрубок в тех наноустройствах, где требуются более жесткие тубулярные наноструктуры.

Углеродные однослойные нанотрубки стручкового типа можно характеризовать тенденцией быть

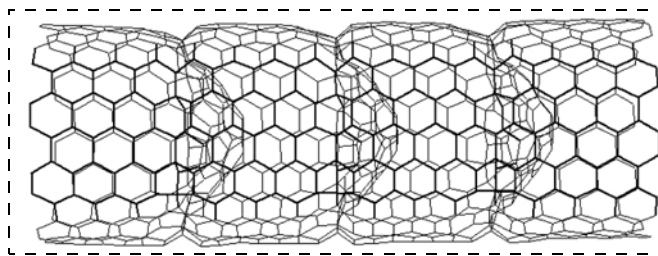


Рис. 4. Бамбукоподобный нанокластер с тремя перемычками

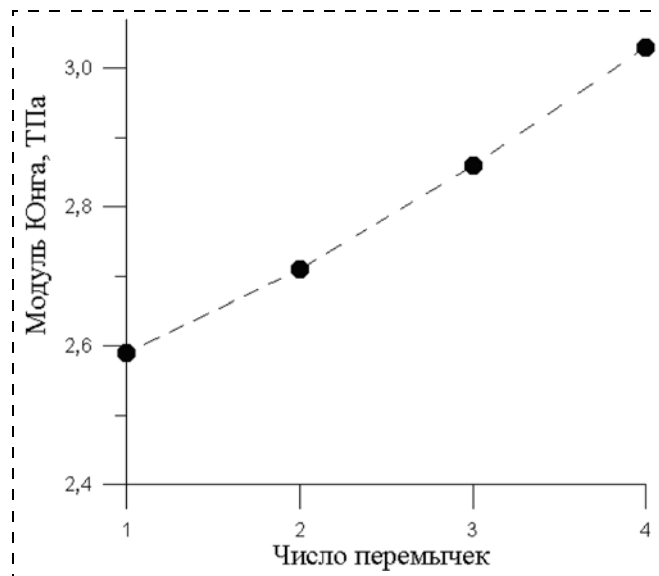


Рис. 5. Изменения модуля Юнга Убамбукообразной трубки с увеличением числа перемычек

прямыми. На данный момент известно, что прямолинейная конфигурация в пространстве присуща многослойным трубкам (поэтому в качестве игл микроскопов используются именно они), а однослойные трубки с диаметром ~ 1 нм, как правило, изогнуты [6]. Можно предположить, что введение в полость однослойных нанотрубок фуллеренов делает их заменителями многослойных прямых трубок и расширит область применения наноструктур в зондовой микроскопии и электронике.

Бамбукоподобные тубулярные нанокластеры имеют повышенную прочность (модуль Юнга бамбукоподобных нанотрубок в 2,5—3 раза выше, чем у идеальных). С ростом числа перемычек на единицу длины модуль Юнга повышается. Такие трубки могут применяться там, где необходима повышенная механическая прочность, например, в качестве наноигл в хирургии, нанопроволок и т. д.

Список литературы

1. Глухова О. Е. Функциональные наноустройства на основе наночастицы $C_{60}@C_{450}$ // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 3. С. 52—57.
2. Глухова О. Е., Мещанов В. П., Салий И. Н. Функциональные наноустройства на базе углеродных гибридных

соединений // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2007. Т. 10. № 2. С. 71—75.

3. **Запороцкова И. В.** Новые возможности и перспективы функционализации нанотруб // Труды V Российско-японского семинара "Оборудование, технологии и аналитические системы для материаловедения, микро- и нанoeлектроники". М.: Изд-во МИСиС, 2007. Т. 1. С. 285—302.

4. **Глухова О. Е., Сеницын Н. И., Торгашов Г. В.** и др. Углеродные нанотрубки с дефектами как элементы электронных устройств // Труды V Российско-японского семинара "Оборудование, технологии и аналитические системы для материаловедения, микро- и нанoeлектроники". М.: Изд-во МИСиС, 2007. Т. 1. С. 373—380.

5. **Терентьев О. А.** Атомная структура и эмиссионная способность нерегулярных углеродных тубулярных нанокластеров. Канд. дис. Саратовский ун-т, Саратов. 2007. 151 с.

6. **Харрис П.** Углеродные нанотрубки и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.

7. **Глухова О. Е., Терентьев О. А.** Конструирование наноустройств на углеродных нанотрубках с локальными дефектами остова // Сб. науч. тр. Российской школы-конференции молодых ученых и преподавателей "Биосовместимые наноструктурные материалы и покрытия медицинского назначения". Белгород: Изд-во Белгород. ун-та, 2006. С. 119—122.

8. **Ding F.** Theoretical study of the stability of defects in single-walled carbon nanotubes as a function of their distance from the nanotube end // Physical Review B. 2005. V. 72. № 24. P. 245409 (7).

9. **Kotakoski J., Krashenninnikov A. V., Nordlund K.** Energetics, structure, and long-range interaction of vacancy-type defects in carbon nanotubes: Atomistic simulations // Physical Review B. 2006. V. 74. № 24. P. 245420 (5).

10. **Глухова О. Е., Жбанов А. И.** Равновесное состояние нанокластеров C₆₀, C₇₀, C₇₂ и локальные дефекты молекулярного остова // Физика твердого тела. 2003. Т. 45. № 1. С. 180—186.

11. **Sternberg M., Curtiss L. A., Gruen D. M.** et al. Carbon Ad-Dimer Defects in Carbon Nanotubes // Physical Review Letters. 2006. V. 96. № 7. P. 075506 (4).

12. **Глухова О. Е., Терентьев О. А.** Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок zigzag и armchair от геометрических параметров // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. № 7. С. 1329—1335.

13. **Belova E., Chernozatonskii L. A.** Mechanical properties of carbon nanotube bough junctions: A theoretical study // Physical Review B. 2007. V. 75. № 4. P. 073412 (7).

14. **Chen J., Li Y., Ma Y., Qin Y., Chang L.** Formation of bamboo-shaped carbon filaments and dependence of their mor-

phology on catalyst composition and reaction conditions // Carbon. 2001. V. 39. P. 1467—1475.

15. **Глухова О. Е., Колесникова А. С.** Теоретическое изучение электронной структуры и механических свойств нанотрубок типа "бамбук" // Сб. материалов научной школы-конференции "Нелинейные дни в Саратове для молодых". Саратов: РИО журналов "Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика". 2007. С. 69—71.

16. **Pichler T., Liu X., Knupfer M., Fink J.** Electronic properties of intercalated single-wall carbon nanotubes and C₆₀ peapods // New Journal of Physics. 2003. V. 5. P. 156.1—156.23.

17. **Глухова О. Е.** Функциональные наноустройства на базе углеродных кластеров // Сб. науч. тр. Российской школы-конференции молодых ученых и преподавателей "Биосовместимые наноструктурные материалы и покрытия медицинского назначения". Белгород: Изд-во Белгород. госуниверситета. 2006. С. 112—118.

18. **Barajas-Barraza R. E., Guirado-Lo'pez R. A.** Clustering of H₂ molecules encapsulated in fullerene structures // Physical Review B. 2002. V. 66. № 15. P. 155426 (12).

19. **Verberck B., Michel K. H.** Nanotube field of C₆₀ molecules in carbon nanotubes: Atomistic versus continuous approach // Physical Review B. 2006. V. 74. № 4. P. 045421 (14).

20. **Sano N., Chhowalla M., Roy D., Amaratunga G. A. J.** Viability of sub-0,4-nm diameter carbon nanotubes // Physical Review B. 2002. V. 66. № 11. P. 113403 (4).

21. **Yu Min-Feng, Files B. S., Arepalli S., Ruoff R. S.** Tensile Loading of Ropes of Single Wall Carbon Nanotubes and their Mechanical Properties // Physical Review Letters. 2006. V. 84. № 24. P. 5552 (4).

22. **Hirahara K., Bandow S., Suenaga K.** et al. Electron diffraction study of one-dimensional crystals of fullerenes // Physical Review B. 2001. V. 64. № 11. P. 115420 (5).

23. **Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T. W.** et al. Young's modulus of single-walled nanotubes // Physical Review B. 1998. V. 58. № 20. P. 14013 (7).

24. **Shen L., Li J.** Transversely isotropic elastic properties of single-walled carbon nanotubes // Physical Review B. 2004. V. 69. № 4. P. 045414 (10).

25. **Lu J. P.** Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes // Physical Review Letters. 1997. V. 79. № 7. P. 1297 (4).

26. **Глухова О. Е., Жбанов А. И., Резков А. Г.** Вращение внутренней оболочки наночастицы C₂₀@C₈₀ // Физика твердого тела. 2005. Т. 47. Вып. 2. С. 376—382.

27. **Дьячков П. Н.** Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 293 с.

28. **Сивухин Д. В.** Общий курс физики. Механика. М.: 1979. 520 с.

УДК 621.38

А. А. Потапов, д-р хим. наук, проф.,
Институт динамики систем и теории управления
СО РАН, г. Иркутск

ПРИНЦИПЫ ПРОЕКТИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ

Рассмотрены основополагающие принципы нанопроектирования, которыми следует руководствоваться при постановке и проведении исследований в области механосинтеза.

Успех становления нанотехнологии целиком и полностью определяется уровнем ее теоретического обеспечения. В этом отношении теория конструирования наносистем по своим целям и задачам полностью совпадает с теорией электронного строения вещества, и весь опыт, приобретенный в этой области естествознания, может быть принят при разработке теоретического обеспечения нанотехнологии. В этой связи важно обобщить предшествующий опыт и сформулировать основные принципы, которые могли бы стать руководством для создания теоретических основ нанотехнологии.

Принцип наблюдаемости и познаваемости. Единственный способ постижения природы вещества и его электронного строения, имеющийся в руках исследователя, опирается на эмпирический подход к данной проблеме. Он реализуется с помощью так называемого метода "черного ящика" [1, 2] и заключается в изучении отклика x исследуемой системы на внешнее воздействие X , которое формируется из числа известных физических полей — электрического E , магнитного H , электромагнитного EH , механического P и теплового T . Причина X и следствие x в данном случае связаны между собой коэффициентом χ . Эта величина, называемая обобщенной восприимчивостью, играет в построении теории вещества ключевую роль. Она выступает в качестве меры взаимодействия вещества с соответствующим полем X и содержит всю исходную информацию о строении вещества. Именно она подлежит экспериментальному определению, так что $\chi = x/X$. Восприимчивость χ представляет собой свойство вещества и является функцией состава N , структуры s микрочастиц и энергии их взаимодействия U , так что $\chi = \chi(N, s, U)$. В общем виде эта задача не решается. Но ее можно упростить, устремляя значение U к нулю (путем перевода вещества в газовую фазу с относительно невысоким давлением). Тогда поставленная задача сводится к определению свойства одной микрочастицы, т. е. $\alpha = \chi/N$ [3]. Экспериментальная величина α является однозначной функцией электронного строения данной микрочастицы. У атомов с их сферической симметрией единственным структурным параметром выступает радиус. Связь между этими величинами в настоящее время установлена [4]. Вместе с тем, взаимодействия между внутриатомными зарядами, надо полагать, подчиняются закону Кулона. Анализ зависимости энергии связи между ядром и электронами в логической последовательности от простого (атом водорода) к сложному (многоэлектронные атомы) в порядке возрастания номера элемента таблицы Менделеева приводит к выводу о том, что положение электронов на своих оболочках строго определено. Данное обстоятельство открывает путь для установления электронного строения многоэлектронных атомов и тем самым дает возможность приступить к решению основной задачи атомной физики. Принципиальных ограничений на этом пути постижения внутриатомного строения нет. Примером тому может служить диполь-оболочечная модель атома (см. ниже).

Принцип атомизма. Этот принцип является основополагающим принципом атомистического мировоззрения и современного естествознания. Идея атомизма прошла многотрудный путь от умозрительных заключений древних философов о первоэлементах, основанных на непосредственных наблюдениях свойств и явлений объектов окружающего мира, до эмпирического подтверждения атомно-молекулярного строения вещества и создания современной теории атома. Первый шаг в эмпирическом

постижении внутреннего строения атома был сделан, когда была установлена сложная электрон-протон-нейтронная структура атома. Данное обстоятельство послужило импульсом для начала теоретических поисков непротиворечивой модели атома. Наиболее приемлемой структурной моделью на тот момент явилась оболочечная модель Н. Бора (1920 г.). Затем в стремлении дать объяснение непостижимо высокой устойчивости атомов, а также в целях описания атомных спектров была создана квантовая механика (в первую очередь усилиями Л. де-Бройля, Э. Шредингера, В. Гейзенберга), которая в последующем стала основой атомной физики. Основным достижением квантовой механики стала квантовая теория атома водорода (1926 г.), которая позволила с высокой точностью согласовать рассчитываемые и экспериментальные данные. В стремлении перенести полученный результат на многоэлектронные атомы была разработана "водородоподобная" теория Хартри—Фока (1930 г.), основанная на решении уравнения Шредингера в приближении самосогласованного поля. Одним из радикальных выводов данной теории явилось то, что атом представляет собой бесформенное, не имеющее структуры электронное облако. В результате этого вопрос о структуре атома на долгие времена был "отложен". Сегодня приходит осознание необходимости более трезвой оценки возможностей квантово-механического описания многоэлектронных атомов. В первую очередь, стала очевидной несостоятельность принятого в теории Хартри—Фока приближения самосогласованного поля. Идея самосогласованного (усредненного) внутриатомного поля находится в явном противоречии с периодическим характером данных эксперимента по потенциалам ионизации атомов и многозарядовых ионов. Внутриатомные поля сильно неоднородны благодаря оболочечному строению атомов; электрические поля внешних и внутренних оболочек могут различаться в десятки и сотни тысяч раз! Концепция самосогласованного поля не выдерживает критики и в теоретическом отношении — она противоречит известной и всесторонне апробированной теореме Гаусса о распределении зарядов внутри замкнутых оболочек. Становится все более очевидной необходимость в новых альтернативных подходах к описанию атомов.

К настоящему времени известен ряд моделей атомов и альтернативных теорий, претендующих на создание неоклассической атомной физики. При всем многообразии моделей электронного строения атомов в их основе лежит основополагающая и всесторонне апробированная оболочечная модель, в начальном варианте предложенная Н. Бором. Однако ни модель Н. Бора, ни последующие оболочечные модели не дают количественного описания атомов, не раскрывают электронную структуру атомов и не объясняют механизм формирования электронных оболочек. Важный шаг в усовершенствовании

оболочечной модели атомов был сделан в связи с обоснованием новых величин — поляризационного радиуса a_n и энергии связи ε внешних электронов атома с его ядром (остовом), имеющих статус атомных констант [3, 4]. Они имеют эмпирическое происхождение и основаны на измерении поляризуемости α атомов. В общем случае радиус атома складывается из радиуса остова атома $a_{\text{ост}}$ и расстояния d_n между внешними электронами и остовом атома, так что $a_n = d_n + a_{\text{ост}}$, причем, как правило, $a_{\text{ост}} \ll d_n$. В свою очередь, радиус остова атома складывается из внутренних межоболочечных расстояний. Эффективное расстояние непосредственно связано с поляризуемостью атома соотношением $\alpha = kd_n^3$, где k — коэффициент, равный $1/2$ для атомов первой группы таблицы Менделеева и равный 1 для всех остальных атомов. Величины d_n и ε взаимосвязаны [3, 4] универсальным соотношением $\varepsilon = -\frac{e^2}{d_n}$.

Новые данные по радиусам и энергиям связи атомов вывели построение модели атома на качественно новый уровень — на уровень их количественного описания. Была предложена непротиворечивая диполь-оболочечная модель [4, 5], в которой образование оболочек атома обязано положительному заряду остова атома, действующему как аттрактор для валентных электронов, наподобие ядра атома водорода. В данной модели многочастичную (многоэлектронную) задачу удалось свести к двухчастичной (двухзарядовой) задаче, в которой атом представляет собой систему, состоящую из положительно заряженного остова с зарядом $+eN_n$ (N_n — число электронов на внешней n -й оболочке) и заряда внешней оболочки как совокупности взаимосвязанных между собой N_n электронов. Такое сведение достигается применением теоремы Гаусса, согласно которой заряд на поверхности сферы равен сумме всех положительных и отрицательных зарядов внутри сферы, а результирующий заряд на данной сфере эквивалентен точечному заряду, помещенному в центр сферы [6].

Введение в модель атома радиуса и энергии связи, имеющих статус атомных констант, закрепляет сложившиеся представления об атоме как индивидуальной строительной единице и обеспечивает тем самым возможность количественного описания связи микро- и макроскопического уровней. Таким образом, сегодняшние представления об атоме как о микрообъекте со строго установленной внутренней электронной структурой отражают два основополагающих фактора: собственно атомистический (характеризующий индивидуальность и самотождественность атомов) и эволюционный, который выполняет структурообразующую роль в процессе химической эволюции вещества. Данное обстоятельство представляется решающим в постановке работ

в области нанопроектирования и наноконструирования.

Принцип периодичности элементов. Данный принцип является результатом и следствием открытого Д. И. Менделеевым периодического закона (1869 г.), согласно которому "Свойства элементов, а потому и свойства образуемых ими простых и сложных тел находятся в периодической зависимости от их атомного веса" [7, с. 486]. В последующем данная формулировка периодического закона была уточнена: в ней периодическая зависимость от атомного веса заменена периодической зависимостью от заряда ядра, т. е. от порядкового номера элемента. Таблица Менделеева позволила упорядочить и систематизировать все существующие элементы в соответствии с их порядковым номером. Теория периодической системы в первоначальном варианте была разработана Н. Бором (1921 г.). В последующем было предпринято немало попыток для того, чтобы усовершенствовать таблицу Менделеева и дать приемлемое объяснение ее строению.

Сложившаяся к настоящему времени периодическая система элементов — это следствие химической эволюции и результат самосборки атомов, оболочечное строение которых определяется зарядом ядра и числом электронов на оболочках. Они же формируют движущий потенциал химической эволюции, которым являются универсальные силы кулоновского взаимодействия между зарядами. В свою очередь, дискретность заряда ядра обуславливает различие атомных структур, придавая каждому элементу исключительные свойства структурной индивидуальности. Наблюдаемая периодичность свойств атомов является следствием их оболочечного строения. Все атомы имеют одинаковые первые двухэлектронные (K -оболочки), вторые восьмизлектронные (L -оболочки) и внешние (замкнутые) восьмизлектронные оболочки. Последующая за L -оболочкой M -оболочка имеет 18 электронов. Следующие внутренние N - и O -оболочки могут вместить до 18 и 32 электронов. Влияние внутренних оболочек на свойства атомов относительно невелико, хотя и здесь можно выделить подгруппы элементов (типа подгруппы железа, подгруппы скандия и т. д.) со схожими свойствами. В этом отношении периодичность элементов таблицы Менделеева, обуславливаемая электронным строением атомов, представляется совершенно естественной и закономерной.

Дальнейшее уточнение и количественное выражение периодического закона получено в рамках диполь-оболочечной модели атома [4, 5]. Согласно данной модели периодичность элементов связана с ограниченной емкостью их внешних оболочек. Дело в том, что внешние восьмизлектронные оболочки имеют весьма устойчивую конфигурацию в виде вписанного в сферу куба с электронами в его вершинах. Для такой электронной конфигурации характерна высокая симметрия и соответствующая ей предельно низкая активность атомов благородных

газов. Все это затрудняет внедрение на внешнюю оболочку гипотетического девятого электрона. Вместе с тем, увеличение заряда ядра на единицу приводит к тому, что остов такого атома приобретает положительный заряд, который сам становится центром притяжения электрона. В результате образуется новая структура, представляющая собой остов (имеющий электронную конфигурацию атома благородного газа), и вращающийся вокруг него электрон, формирующий новую электронную оболочку. По своей структуре вновь образованный атом (в приближении его квазиточечного остова) подобен атому водорода. Возможность образования такого квазиводородоподобного атома находится в полном соответствии с теоремой Гаусса [6]. Увеличение заряда ядра соответствует увеличению заряда остова атома, который выступает в качестве аттрактора для электронов, и формирование очередной оболочки осуществляется по аналогии с предыдущей восьмиелектронной оболочкой. В четвертом и последующих периодах октетная периодичность нарушается в результате дозаполнения внутренних оболочек. Сами оболочки представляют сферы, радиус которых изменяется в соответствии с изменением заряда ядра (остова). В свою очередь, радиус атома в условиях действия центральных сил самым непосредственным образом взаимосвязан с энергией связи электрона (см. выше), которая в принципе предопределяет физико-химические свойства атомов и образующих из них веществ.

Еще раз констатируем тот факт, что наблюдаемая периодичность свойств атомов (таких как потенциалы ионизации, поляризуемость, радиус и др.) причинно обусловлена периодичностью электронных конфигураций их внешних оболочек. Характер заполнения электронных оболочек задается дискретностью заряда ядра, равного единице $+e$. Заряд ядра является движущей силой в формировании элементов в целом, а заряд остова атома — в формировании их отдельных оболочек. Принцип периодичности чрезвычайно важен на стадии постановки и проектирования наноконструкций, когда возникает проблема выбора исходных структурных элементов. Дело в том, что природа предоставила для этой цели около 100 такого рода строительных кирпичиков; число возможных комбинаций из этих элементов оказывается астрономически большим, а процедура перебора всех возможных вариантов на практике представляется совершенно неприемлемой. Знание закона периодичности позволяет построить рациональную систему оптимального выбора атомов как строительных элементов будущих наноконструкций.

Принцип активности атомов. Он отражает внутренне присущую атомам способность к связыванию их в более сложные образования в виде молекул, кластеров и плотных веществ. Стремление атомов к связыванию обусловлено: 1) поляризуемостью атомов, проявляющейся в способности их электронных оболочек к упругой деформации в электрических

полях; 2) наличием у атомов конечного эффективного заряда, значение которого и его локализация на атомной поверхности изначально заданы электронной конфигурацией внешней оболочки. Обе величины имеют экспериментальное подтверждение: первая определяется в многочисленных экспериментах по наблюдению диэлектрической поляризации, а вторая — в виде энергии сродства к электрону. Именно активность атомов обуславливает принципиальную возможность связывания атомов в более сложные атомные образования и фактически предопределяет химическую эволюцию элементов.

Принцип физического и химического связывания. Высокая активность атомов приводит к тому, что большинство атомов таблицы Менделеева при обычных условиях находятся в связанном состоянии в виде молекул или других устойчивых атомных образований. Как уже было сказано, активность атомов обусловлена внутренне присущими атомам свойствами — их эффективным зарядом и поляризуемостью.

Поляризуемость проявляет себя как механизм возникновения одного из универсальных видов электромагнитных взаимодействий — так называемых дисперсионных сил взаимодействия. В его основе лежит взаимодействие индуцированных дипольных моментов атомов, а его количественной мерой выступает поляризуемость атомов. Энергия дисперсионного взаимодействия в первом приближении определяется выражением [9]

$$u(R) = -\frac{3}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{R^6} \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2},$$

где α_1 и α_2 — поляризуемость взаимодействующих атомов; R — расстояние между атомами; ε_1 и ε_2 — соответствующая энергия связи электронов внешней оболочки атомов с их ядром (остовом), в качестве которой зачастую принимается потенциал ионизации. Энергия парного взаимодействия $u(R)$ играет решающую роль на относительно малых расстояниях. Она служит основой для описания энергии физического связывания атомов и молекул ван-дер-ваальсовых систем и их устойчивости в условиях неперекрывания электронных оболочек атомов. При больших значениях поляризуемостей атомов энергия $u(R)$ становится достаточной для того, чтобы преодолеть присущий атомам энергетический барьер взаимного отталкивания. В этом случае физическое связывание атомов сменяется химическим связыванием.

Значение эффективного заряда q_n , так же как и поляризуемость, характеризует активность атомов и придает активности атомов количественное выражение. Заряд выступает в качестве источника электрического поля $E = q_n/R^2$, благодаря которому достигается взаимодействие атома с его ближайшим окружением, так что энергия взаимодействия определяется как $u = q_n q_e / R$, где q_e — эффективный заряд

"пробного" атома. Наибольшую активность имеют атомы первой группы таблицы Менделеева, характерной особенностью которых является то, что дипольный момент, образуемый остовом атома и его внешним электроном, не скомпенсирован, и заряд q_n остова атома максимально открыт для взаимодействия. Наименьшее значение заряда q_n имеют атомы второй и восьмой групп, у которых согласно диполь-оболочечной модели дипольные моменты, образуемые квазиточечным остовом и внешними электронами, попарно скомпенсированы и остов атома в наибольшей степени закрыт для взаимодействия с его окружающими атомами. Атомы остальных групп имеют промежуточные значения зарядов q_n и соответствующие им способности к связыванию. Положение зарядов q_n и q_e строго задано электронной конфигурацией внешних оболочек атомов, поэтому заряд-зарядовые взаимодействия имеют направленный характер, что объясняет направленность химических связей большинства молекул и кристаллических веществ. Гипотеза эффективных зарядов атомов находит свое экспериментальное подтверждение в виде упомянутого выше явления — сродства атома к электрону, которое заключается в способности атомов притягивать к себе электроны [10].

Таким образом, физическое и химическое связывание атомов имеет электромагнитную природу и позволяет естественным образом объяснить универсальный механизм структурообразования вещества. Данное положение лежит в основании концепции механосинтеза, являющегося одним из перспективных направлений нанотехнологии [11, 12].

Принцип структурной организации. Этот принцип заключается в возможности построения вещества с заданной надатомной (надмолекулярной) архитектурой. Основой структурной организации молекул и/или плотных веществ является активность атомов и их способность к связыванию. Как было показано выше, природа активности связана с наличием у атомов эффективного заряда и свойством поляризуемости атомов. Эти факторы лежат в основе формирования физических и химических связей. Весь имеющийся в наличии экспериментальный материал по свойствам веществ в различных агрегатных состояниях подтверждает факт причинной обусловленности электронного строения вещества его атомно-молекулярной структурой. Остается лишь установить законы структурообразования на известных примерах, которые предоставила нам сама природа. Собственно в этом и видится проблема науки о веществе. Необходимо разработать действенную теорию вещества, которая могла бы раскрыть закономерные связи между атомно-молекулярным и макроскопическим уровнями.

Исходным пунктом построения такой теории является энергия связи (сцепления) атомов или молекул, характеризующая физическое состояние вещества, его целостность и устойчивость. С этой целью

используются так называемые потенциальные функции (потенциалы), представляющие собой зависимости энергии межатомного или межмолекулярного взаимодействия от расстояния R между микрочастицами. Характерной особенностью всех потенциальных функций является наличие у них выраженного минимума энергии, соответствующего равновесному (устойчивому) состоянию вещества. Известно огромное число потенциалов, различающихся способом представления "притягивательной" и "отталкивательной" ветвей потенциальной функции.

Чтобы рассчитать энергию сцепления "из первых принципов" нужно располагать некоторыми изначально выделенными физическими константами, обеспечивающими связь их с реальным распределением электронной плотности. Очевидно, что носителями этих констант являются сами атомы — их структурные и энергетические характеристики. Обоснование поляризационного радиуса как атомной константы позволило принципиально по-новому подойти к построению парных потенциальных функций [12]. Отличительной особенностью этих потенциалов является то, что они не требуют введения в их аналитические выражения подгоночных параметров. Потенциалы такого типа могут быть приняты в качестве размерной единицы для установления характера изменений энергии межатомного и/или межмолекулярного взаимодействия в процессе образования кластеров. Можно проследить за изменениями энергии связи атомов в составе кластера в процессе последовательного увеличения числа атомов в кластере. В простейшем случае двухатомного кластера энергия физического связывания соответствует энергии парного взаимодействия $u = u_{11}$. Принимая эту энергию в качестве размерной единицы, можно с ее помощью выразить энергию связи атомов в составе кластера так, что $u = ku_{11}$, где k — коэффициент, отражающий кооперативный характер межатомных взаимодействий. Можно показать, что коэффициент k увеличивается с увеличением числа атомов в кластере и быстро достигает максимального значения $k \approx 4$, когда число контактов присоединяемого атома с кластером равно 5. Энергия сцепления атомов второй координационной сферы колеблется между $\frac{3\sqrt{3}}{2} u_{11}$ и $\frac{4}{\sqrt{2}} u_{11}$, и в зави-

симости от числа атомов, образующих углубление между атомами (лунку). Следующая координационная сфера формируется в результате последовательного заполнения 14 лунок, образуемых атомным рельефом (каждая из этих лунок образована тремя или четырьмя атомами). При последующем присоединении атомов к материнскому кластеру конфигурация в области контакта фактически повторяет конфигурации аналогичных предшествующих структур, постепенно формируя периодическую структуру объемного кристалла. В пределе бесконечного радиуса кластера (в пределе атомной поверхно-

сти) коэффициент вновь приближается к численному значению $k \approx 4$. Напомним, что приведенные здесь оценки энергии связи относятся только к ван-дер-ваальсовым системам.

У большинства атомов поляризуемости, входящие в выражение для энергии дисперсионного притяжения, имеют значения, повышающие энергию взаимного притяжения между атомами до уровня, достаточного для того, чтобы преодолеть отталкивательный барьер между этими атомами. В результате электронные оболочки атомов перекрываются и образуют ковалентно-ионные связи. Энергия данной (химической) связи намного больше энергии связи ван-дер-ваальсовых систем и достигает значений до 10 эВ. В принципиальном отношении потенциальная функция химически связанных атомов строится аналогичным образом, как и рассмотренные выше потенциальные функции для ван-дер-ваальсовых систем. Но в этом случае необходимо учитывать факт перекрывания оболочек атомов, и для расчета энергии сцепления атомов требуются знания электронного строения внутренних оболочек атомов. Вместе с тем, значения энергии сцепления большинства химических связей известны с достаточно высокой точностью и успешно могут быть применены в практике нанопроектирования, а присущая молекулам структурная устойчивость предполагает возможность использования молекул в качестве строительных блоков при конструировании наносистем. При этом у молекул сохраняется способность к физическому связыванию, поскольку у атомов в составе молекул сохраняются свойственные индивидуальным атомам поляризуемость и остаточные заряды. Благодаря этой способности молекулы определяют саму возможность образования огромного числа органических и ряда неорганических веществ с характерной для них "ажурной" надмолекулярной структурой. В рассматриваемом нами аспекте структурообразования надо отметить и то, что молекулы выступают в качестве исходного уровня для формирования следующего уровня организации вещества — супрамолекулярных систем [13].

Надо отметить, что поляризуемость и остаточные заряды на поверхности атомов, отвечающие за структурообразование молекул, изменяются практически непрерывно в широком диапазоне варьируемых элементов таблицы Менделеева. Очевидно, что при этом возможно образование самых разнообразных атомно-молекулярных структур. Сегодня известно уже более 7 млн соединений. А имеющиеся в настоящее время в распоряжении исследователя-технолога знания о природе и механизмах структурообразования вещества могут быть с успехом применены в практике нанопроектирования и наноконструирования [12].

Принцип неаддитивности свойств наносистем. Физический смысл данного явления связан с неаддитивностью сложения парных потенциалов при последовательном присоединении атомов к централь-

ному атому кластера. В случае ван-дер-ваальсовых систем наибольшие отклонения от аддитивности наблюдаются при переходе от пары атомов к тройке атомов, затем к четверке, пятерке и т. д. Такое поведение объясняется соответствующим переходом атомной конфигурации кластера от пары атомов к равносоставленному треугольнику, затем к тетраэдру, к треугольной бипирамиде и т. д. Эта зависимость выходит на постоянный уровень при достижении 13 атомов у кластера в виде объемного икосаэдра; при последующем присоединении атомов к кластеру энергия связи атомов колеблется относительно некоторого постоянного уровня. Поскольку все физико-химические свойства вещества обусловлены энергией межатомных или межмолекулярных взаимодействий, то становится понятной природа столь необычной зависимости наблюдаемых физических величин от числа атомов в кластере.

Еще раз следует отметить то, что данный эффект свойственен только для небольших кластеров. У макроскопических веществ физические свойства не зависят от геометрических размеров образца, и для них закон аддитивности выполняется в широком диапазоне плотностей, но с одной лишь оговоркой — на поверхности образца имеет место скачок структуры, который также приводит к нарушению закона аддитивности. Поверхностный эффект играет чрезвычайно важную роль в процессах самоорганизации веществ естественной природы и, конечно же, для механосинтеза при осуществлении технологической операции сцепления. Дело в том, что поверхностные атомы (молекулы) принимают поляризованное состояние, благодаря чему их электрическая активность резко возрастает. В результате этого поверхностные силы притяжения увеличиваются, и соответственно повышается эффективность сорбции атомов из окружающей среды. Аналогичные зависимости и эффекты наблюдаются и у атомов с перекрыванием электронных оболочек. Более того, эти эффекты проявляются у них в более выраженном виде, чем у ван-дер-ваальсовых систем. В пределе переноса валентных электронов поверхностные атомы приобретают электрический заряд и соответственно максимально достижимую активность.

Принцип дизайна. Принципиальная возможность конструирования наносистем путем поатомной сборки установлена на практике и была продемонстрирована на примере осуществления атомного письма и построения ряда простых наноэлементов непосредственно из атомов и молекул. Такая возможность открылась в связи с созданием сканирующих туннельных и атомно-силовых микроскопов, которые позволили осуществлять манипулирование отдельными атомами. С их помощью удалось осуществить такие операции, как захват атома, перенос его в нужное место и закрепление в месте локализации посредством физического или химического связывания. Эти микроскопы уже сегодня стали инструментальной основой механосинтеза, по сути, являюще-

гося авангардом нанотехнологии. В принципиальном отношении они открывают возможность построения атомно-молекулярных систем любой мыслимой сложности. Создание совершенных манипуляторов, необходимых для автоматизации процедуры механосинтеза, — это дело времени.

Конструированию наноизделий и нанопродуктов предшествует стадия нанопроектирования, которая включает в себя такие этапы, как обоснование принятой схемы (химической формулы) устройства, описание конструкции и принципа ее работы, выбор структурных единиц (атомов и молекул) в качестве строительных элементов и т. д. Основой нанопроектирования является структурная формула создаваемого объекта, получаемая с помощью соответствующей теории. Фактически теория электронного строения вещества в данном случае сводится непосредственно к инженерным расчетам отдельных физических или химических связей.

В настоящей работе акцент делается в первую очередь на механосинтез, который представляет собой атомно-молекулярную сборку наноизделий и нанопродуктов на основе физического или химического связывания при достижении механического контакта. Следуя приведенному определению, успешное осуществление механосинтеза возможно, когда свойства исходных строительных единиц — атомов и молекул могут быть точно заданы. В первую очередь, это прочностные и геометрические характеристики атомов и молекул, а также их способность к сцеплению с другими микрочастицами, т. е. для проектирования и конструирования наносистем необходимо и достаточно знать: размеры атомов и молекул; параметры, характеризующие их устойчивость и прочность, а также параметр, ответственный за образование физических или химических связей. Фактически проблема механосинтеза сводится к выбору из всего имеющегося многообразия элементов наиболее приемлемых.

Для описания *геометрических размеров* атома используются около десятка различного рода атомных радиусов, таких как ван-дер-ваальсовы, орбитальные, кинетические, ковалентные и др. Однако ни один из перечисленных радиусов по своему содержанию не является радиусом атома [12]. В настоящее время в научный обиход введено понятие "поляризационный радиус", которому дано обоснование как атомной константы [4, 5]. Поляризационный радиус a_n атома определяется на основании внутренне присущей связи его с поляризуемостью. В настоящее время получены данные по поляризационным радиусам большинства атомов таблицы Менделеева. Определенность размеров атомов позволила внести определенность и в отношении геометрических размеров молекул. Действительно, геометрия молекул характеризуется межъядерными расстояниями l_n (длинами связи), углами между связями и размерами внешних электронных оболочек

атомов, формирующих внешний контур молекулы. Длины связи и углы между связями молекул известны из эксперимента с достаточно высокой точностью [14]. Данные по радиусам внешних атомов молекулы могут быть определены на основании данных по поляризационным радиусам. Так что проблема определения габаритных размеров атомных образований в первом приближении решена.

Для количественного описания *прочности атомов* используются энергия связи ϵ валентных электронов с ядром атомов и потенциал ионизации I . Последний представляет собой энергию, необходимую для отрыва от атома валентного электрона. Инструментальная точность измерения потенциалов ионизации достаточно высока (до 0,1 эВ и лучше). Однако потенциалам ионизации I присуща систематическая погрешность, обусловленная перестройкой электронной оболочки в результате удаления электрона с данной оболочки, которая может достигать единиц электрон-вольт [3]. Энергия связи ϵ в процессе измерения остается неизменной, и измерительная процедура возмущает состояние атома незначительно. Данное обстоятельство необходимо учитывать при оценке прочности атомов. Сами значения энергии атомов находятся в пределах 3...25 эВ. Для описания энергетики молекул кроме энергии связи ϵ необходимо располагать дополнительным параметром — *энергией диссоциации* D , которая характеризует энергию связи (сцепления) атомов друг с другом. Методы измерения энергии связи атомов отработаны и позволяют выполнять измерения D с достаточно высокой точностью (до сотых долей электрон-вольт). Устойчивость молекул и конструктивные особенности молекулярных систем в первую очередь определяются именно энергией диссоциации D . Численные значения энергии D находятся в пределах 1...10 эВ. Данные измерений потенциалов ионизации атомов и энергии диссоциации молекул систематизированы и приведены в соответствующих справочниках и могут быть использованы в целях проведения инженерных расчетов прочности наносистем. Операция присоединения-отсоединения атомов (молекул) относится к числу основных технологических приемов гипотетического нанопроизводства. Понятно, что она всецело определяется энергией взаимодействия между микросистемами в области контакта. При этом качество "сварки" (сцепления) атомов определяется геометрией и свойствами (поляризуемостью и устойчивостью) самих атомов, предопределяющих вид потенциальной функции (см. выше). Для практического осуществления механосинтеза также важно учитывать способность атомов образовывать одновременно несколько связей, обеспечивающих возможность создания разветвленных и сшитых цепей. В этом отношении важно и то, что двойные и тройные связи позволяют повышать прочность связи; полимерные цепи обеспечивают формирование длинных устойчивых конструкций; правильные конфигурации

многовалентных атомов позволяют конструировать молекулярные структуры типа кольцевых, пирамидальных, призматических, кубических и т. п.; гибкость химических связей позволяет образовывать конфигурации, которые могут выполнять роль тех или иных функциональных элементов (таких как шарниры, фиксаторы, рычаги, пружины, угловые повороты и т. п.).

Принцип внутреннего совершенства. Данный принцип сформулирован А. Эйнштейном и связан с верой в красоту и совершенство законов природы [15]. По отношению к нанотехнологии его можно сформулировать как стремление к созданию предельно совершенных атомно-молекулярных конструкций, предназначенных для удовлетворения насущных потребностей человека. Наступившая эра нанотехнологий — это естественный и закономерный этап в понимании сущности электронного строения вещества. Поатомная сборка позволяет создавать идеальные конструкции, недостижимые с помощью прежних традиционных технологий. Перефразируя В. Высоцкого, можно сказать, что "лучше атомных структур могут быть только атомные структуры". Теория нанотехнологии должна отвечать наивысшему уровню совершенства — уровню прогностической теории, обеспечивающей создание веществ и материалов с наперед заданными свойствами и построение наноконструкций с требуемыми характеристиками и прогнозируемыми функциями.

Принцип внешнего оправдания. Настоящий принцип, как и предыдущий, в более широком смысле сформулирован А. Эйнштейном, и раскрывает всеобщую гносеологическую и прагматическую целесообразность [15]. Данный принцип выходит непосредственно на "практику". Собственно вся наша история представляет собой непрерывное и необратимое вытеснение биосферы техносферой. Практическое освоение механосинтеза приближает человека к осуществлению его исконной мечты о создании искусственной природы, полностью подвластной разуму человека и освобождающей человека от непредсказуемых стихий естественной природы. В этом поступательном эволюционном процессе становится зримым и осязаемым переход к принципиально новым технологиям, основанным на освоении управляемого синтеза материалов и изделий путем поатомной сборки.

Рассмотренные в статье принципы позволяют сформулировать "прямую" задачу механосинтеза. Она сводится к проблеме создания эффективной прогностической теории, обеспечивающей практику знаниями того, какие исходные элементы (атомы или молекулы) надо выбрать для наносборки, каким образом и в какой последовательности их следует собирать для получения у создаваемого материала или изделия требуемых эксплуатационных свойств и функций. Чтобы решить эту фундаментальную задачу необходимо располагать данными о свойствах и электронном строении исходных структурных эле-

ментов — атомов и молекул. Но параметры атомов и молекул изначально не выделены природой. Поэтому вначале следует решить "обратную" задачу, которая в конечном итоге сводится к нахождению параметров атомно-молекулярных констант, в том числе энергетических параметров, радиусов микрочастиц, длин и углов связей. Данная задача может быть решена только на основе эмпирического подхода к проблеме: вначале определяются свойства (мерой которых служит поляризуемость) отдельных атомов или молекул на основании экстраполяции физических свойств (мерой которых служит обобщенная восприимчивость) соответствующих веществ в зависимости от их плотности; определяются энергетические параметры, характеризующие устойчивость и электронную конфигурацию атомов (энергии связи электронов с ядром или остовом атома и потенциалы ионизации). На основании этих экспериментальных данных строится приемлемая модель внутриатомного строения, отличительной особенностью которой выступает ее количественное описание с помощью радиусов электронных оболочек и параметров, характеризующих пространственное положение электронов на оболочках. Полученные таким образом атомные константы могут быть приняты для решения прямой задачи механосинтеза. Сформулированные в статье принципы позволяют сделать исследования в области нанопроектирования более целенаправленными и логически обусловленными.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. Ч. 1. Т. 5. 583 с.
2. Потапов А. А. Молекулярная диэлектриметрия. Новосибирск: Наука, 1994. 285 с.
3. Потапов А. А. Деформационная поляризация. Новосибирск: Наука, 2004. 511 с.
4. Потапов А. А. Диполь-оболочечная модель атома и периодическая система элементов // Бутлеровские сообщения. 2006. Т. 10. № 7. С. 1—23.
5. Потапов А. А. Оболочечная модель электронного строения атомов // Вестник Иркутского государственного технического университета. 2006. № 3. С. 109—115.
6. Парселл Э. Электричество и магнетизм. М.: Наука, 1975. 440 с.
7. Химическая энциклопедия. М.: Большая Российская энциклопедия, 1985. Т. 3. 639 с.
8. Кузнецов В. И. Общая химия. — М.: Высшая школа, 1989. — 288 с.
9. Каплан Н. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
10. Бацанов С. С. Экспериментальные основы структурной химии. М.: Изд-во стандартов, 1986. 240 с.
11. Нанотехнология в ближайшем десятилетии / Под ред. М. К. Роко, Р. С. Уильямса и П. Аливисатоса. М.: Мир, 2002. 292 с.
12. Потапов А. А. Состояние и перспективы построения теоретических основ механосинтеза // Нанотехника. 2005. № 4. С. 32—46.
13. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Новосибирск: Наука, 1998. 334 с.
14. Свойства неорганических соединений. Справочник. Л.: Химия, 1983. 392 с.
15. Кузнецов В. Г. Идеалы современной науки. М.: Наука, 1983. 255 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 621.38

Ю. В. Панфилов, д-р техн. наук, проф.,
МГТУ им. Н. Э. Баумана

ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Представлен аналитический обзор материалов XIII Международной научно-технической конференции "Высокие технологии в промышленности России" и XX Международного симпозиума "Тонкие пленки в электронике".

В сентябре 2007 года МГТУ им. Н. Э. Баумана и ОАО ЦНИТИ "Техномаш" провели XIII Международную научно-техническую конференцию "Высокие технологии в промышленности России" и XX Международный симпозиум "Тонкие пленки в электронике", посвященные 50-летию освоения космического пространства. Ставшие уже традиционными, разделами сборника докладов [1] были следующие.

I. Нанотехнология и фотонные кристаллы: материалы, оборудование, технология производства, обработка и исследование наноматериалов, подготовка кадров.

II. Технология и оборудование для производства приборов нанoeлектроники и электронной техники, системы и устройства средств связи.

III. Методы контроля физико-технических свойств материалов электронной техники, моделирование и информационное обеспечение исследований.

IV. Получение, свойства и применение тонких пленок и слоистых структур на их основе в электронике и машиностроении.

В представленном обзоре отражены практические результаты использования наноструктурированных материалов при изготовлении электронных приборов, деталей и узлов машин, изделий медицинского назначения. В обзор вошли наиболее интересные, по мнению автора, темы докладов:

- Углеродные наноструктуры и полупроводниковые материалы.

- Опаловые матрицы и трехмерные наноструктуры.
- Датчики на основе наноструктурированных материалов.

Углеродные наноструктуры и полупроводниковые материалы

Несмотря на то, что ажиотаж вокруг алмазных и алмазоподобных пленок давно прошел, на конференции эта тема по-прежнему занимает значительное место. Это связано, в первую очередь, с практическим применением этих пленок в электронике, машиностроении, медицине и других областях техники.

Перспективность использования в электронной технике поликластерных алмазных пленок объясняется такими свойствами алмаза, как наивысшие среди известных материалов твердость и теплопроводность, а также их акустическими и полупроводниковыми характеристиками. Для создания устройств электронной техники с улучшенными эксплуатационными характеристиками используются слоистые структуры "иридий — поликластерная алмазная пленка". Иридий наиболее подходит для использования в качестве химически пассивного материала, поскольку технически просто формируется методами ионно-плазменного распыления в виде текстурированных тонких пленок. Проведены исследования по формированию пленок иридия (Ir) с контролируемым строением кристаллической фазы и определению ориентирующего влияния пленок Ir на строение поликластерных пленок алмаза (рис. 1).

Примерами использования поликластерных алмазных пленок в устройствах электронной техники являются теплоотводы в гибридных интегральных

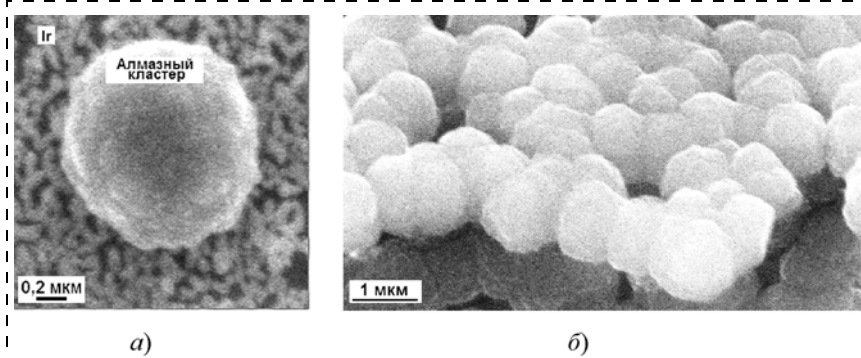


Рис. 1. Строение отдельной наночастицы (а) и скопления частиц (б) зарождающихся поликластерных алмазных пленок на стадиях глобулярного формирования, изученное с помощью растрового электронного микроскопа

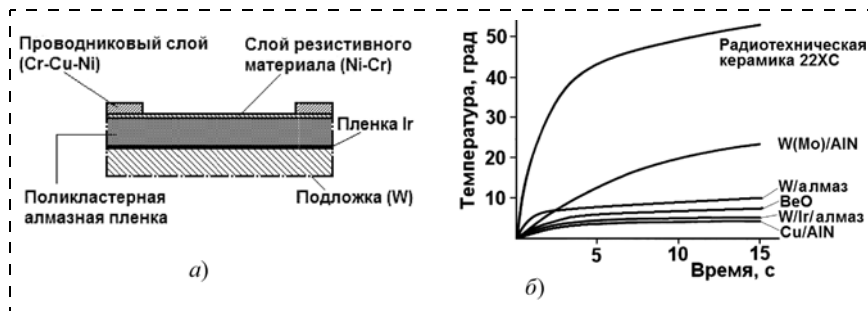


Рис. 2. Схема резистивной матрицы (а) и зависимости температуры перегрева поверхности теплопроводящих подложек от времени (б). Толщина образцов и слоев многослойных структур: 22ХС — 1 мм; W(Mo)/AlN — 1 мм/8 мкм; W/алмаз — 1 мм/86 мкм; BeO — 1 мм; Cu/AlN — 1 мм/8 мкм

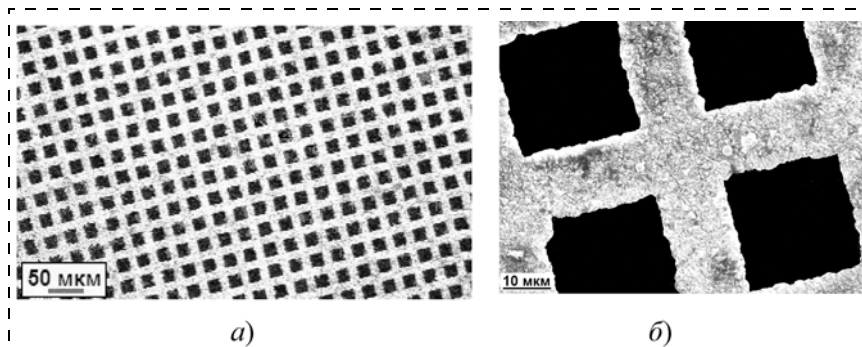


Рис. 3. Сетка (РЭМ) с шагом 40 мкм, изготовленная из свободной поликластерной пленки алмаза толщиной 20 мкм (а), и ее увеличенный фрагмент (б)

схемах, управляющие сетки электронных приборов, устройства на поверхностных акустических волнах и другие. Поликластерные алмазные пленки (теплопроводность при 303 К составляет $\lambda_T = 400...600 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$), нанесенные на подложки из вольфрама (W) ($\lambda_T = 160 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$) и вольфрама с пленкой иридия (Ir) толщиной 300 нм ($\lambda_T = 1,47 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$) применяли для отвода теплоты от сформированных на них тонкопленочных резисторов (рис. 2, а).

Была исследована зависимость температуры перегрева (T_p) резистора от материала теплопроводящей подложки (рис. 2, б). Для сравнения исследованы характеристики нашедших наибольшее применение в микроэлектронике керамических теплопроводящих подложек.

При изготовлении мощных электронных приборов (СВЧ электронных ламп с термокатодом и электронных приборов с автоэмиссионными катодами) материал управляющей сетки не должен перегреваться и провисать. Использование сетки, изготовленной из свободной поликластерной алмазной пленки (твердость по Виккерсу 8400...12 200 кг/мм²), сформированной на слое Ir, за счет уменьшения шага ячеек сетки, при сохранении механической прочности и теплопроводности позволило сократить расстояние катод — сетка до десятков микрометров и снизить управляющее напряжение, что обеспечи-

ло высокую однородность эмиссии по поверхности катода и токовую прозрачность. Сетка из поликластерной алмазной пленки (рис. 3) была изготовлена методом термохимического травления.

Поверхностные акустические волны (ПАВ) — упругие волны, в которых деформация распространяется лишь в очень тонком поверхностном слое с толщиной порядка длины волны. Устройства на ПАВ могут иметь центральную рабочую частоту от нескольких мегагерц до нескольких гигагерц, т. е. в диапазоне УКВ или СВЧ. Применение в СВЧ-устройствах на ПАВ ($f > 1 \text{ ГГц}$) монокристаллов SiO_2 , LiNbO_3 и других пьезоэлектрических материалов, а также многослойных структур $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{AlN}(\text{ZnO})$, плавленый кварц/AlN(ZnO) и других требует реализации микрометровой и субмикрометровой фотолитографии при формировании встречных штыревых преобразователей (ВШП) ввиду невысокой скорости распространения ПАВ.

На рис. 4 приведены достигнутые уровни частот устройств на ПАВ в зависимости от ширины d электродов

ВШП при использовании в качестве звукопроводов монокристаллических пьезоэлектриков (LiNbO_3 , LiTaO_3) и слоистых структур ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{AlN}(\text{ZnO})$, поликластерная алмазная пленка/AlN(ZnO)).

Наиболее перспективным материалом слоистого звукопровода является алмаз (скорость ПАВ $V_R \approx 10 \text{ км/с}$). При создании устройств на ПАВ СВЧ-диапазона ($>1 \text{ ГГц}$) пара алмаз/AlN особенно перспективна, так как AlN наиболее близок к алмазу среди пьезоэлектриков по скорости ПАВ (у AlN $V_R \approx 6 \text{ км/с}$, у ZnO $V_R \approx 3 \text{ км/с}$).

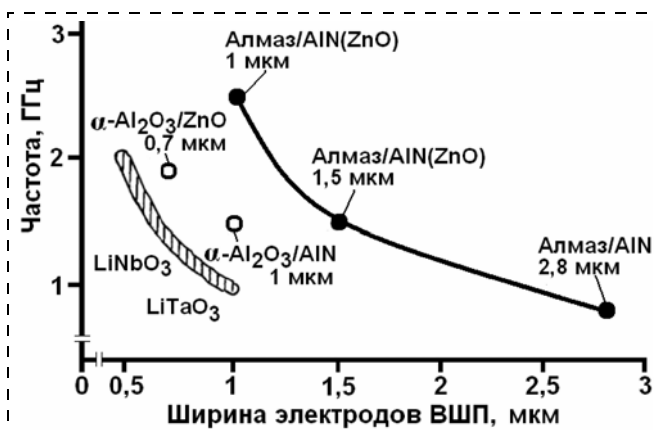


Рис. 4. Зависимость рабочей частоты устройств на ПАВ от ширины d электродов ВШП для монокристаллических и слоистых звукопроводов

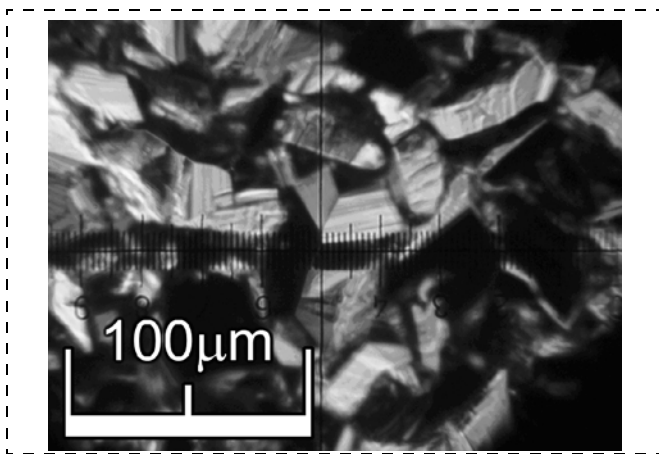


Рис. 5. Микрофотография алмазной пленки, осажденной при повышенном удельном энергетическом вкладе в плазму СВЧ-разряда

Проведены исследования условий газофазного осаждения монокристаллических алмазных пленок в CVD (*Chemical Vapor Deposition*) реакторе на основе СВЧ разряда. Эти условия изучались по результатам гомоэпитаксиального осаждения (на алмазных подложках) поликристаллических алмазных пленок и на основании численного моделирования СВЧ разряда в CVD реакторе. На рис. 5 приведена микрофотография алмазной пленки, осажденной при повышенном удельном энергетическом вкладе в плазму. В результате проведенных экспериментов были найдены условия, при которых форма отдельных кристаллов близка к октаэдру ($\alpha \approx 2,5$), со свободными от двойников гранями.

Фосфид индия (InP) является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 1,26 эВ, обладает высокой подвижностью носителей заряда и находит широкое применение в производстве высокочастотных полевых транзисторов, солнечных элементов и оптоэлектронных интегральных схем. Для получения пленок InP используются различные методы: молекулярно-лучевая эпитаксия, осаждение из газовой фазы, жидкофазная эпитаксия. В последние годы метод импульсной ионной абляции стал объектом интенсивных исследований благодаря многим областям применения, таким как осаждение тонких пленок, обработка и модификация поверхности, производство различных наноразмерных порошков.

Результаты исследований полупроводниковых пленок сложного состава InP, полученных методом импульсного ионного осаждения (пленки осаждались из абляционной плазмы, сгенерированной из массивной мишени InP при воздействии на нее серии импульсов мощного ионного пучка наносекундной длительности), показали сохранение стехиометрического состава осажденных пленок относительно исходной мишени, что проверялось методом оже-спектроскопии. Толщина пленок при этом

равнялась ~ 80 нм. Остаточное давление в камере поддерживалось на уровне $2 \cdot 10^{-4}$ Па. Морфология поверхности пленок определялась методами оптической и атомно-силовой микроскопии. Фазовый состав пленок исследовался методом малоуглового рентгеновского рассеяния, с помощью которого было установлено, что осажденная пленка является поликристаллической и состоит из двух фаз: InP—Cub (225), ее содержание 36,65 %, средний размер кристаллита 8,8 нм, и InP-Cub (216) 63,35 %, средний размер кристаллита 9,03 нм.

Перспективы применения наноразмерных углеродных и полупроводниковых структур для создания элементной базы приборных устройств необходимо рассматривать с позиции их классификации: наночастицы; квантовые точки; наноразмерные точечные дефекты и структуры на их основе; наноконпозиты; нанокерамика; нанопористые материалы; сверхпроводящие структуры; наномеханические системы; нанопроводники и нанотрубки.

Опаловые матрицы и трехмерные наноструктуры

Еще одной постоянной темой конференции являются опаловые матрицы и другие трехмерные наноструктуры. Для создания узкополосных оптических фильтров и селективных зеркал в лазерных резонаторах предлагается использовать фотонные кристаллы на основе опаловых матриц, пропитанных этиловым спиртом, которые имеют узкую полосу (менее 0,01 %) пропускания в видимой области спектра. На основе представления о фотонной запрещенной зоне предложена теоретическая модель, объясняющая наблюдаемые особенности в спектре пропускания.

Создание эффективных излучателей на основе фотонных кристаллов основывается на их способности выделять необходимые оптические моды и контролировать направления их распространения. Эти преимущества наиболее востребованы при разработке лазерных источников света. Двумерный УФ РОС-лазер (лазер с распределенной обратной связью) реализован на основе опаловой матрицы в качестве фотонного кристалла с активным слоем оксида цинка на ее поверхности. Пленки оксида цинка высокой чистоты на опаловой матрице были получены методом магнетронного распыления поликристаллической мишени ZnO при температуре 350 °С. Распыление проводили в плазме Ag при давлении 1 Па.

Исследования спектров спонтанной и стимулированной люминесценции при оптическом возбуждении слоев оксида цинка на опаловой матрице показали, что стимулированная эмиссия при длине волны 397 нм наблюдается при возбуждении азотным лазером при комнатной температуре. Порог возбуждения процесса рекомбинации электронно-дырочной плазмы для структуры ZnO — опаловая

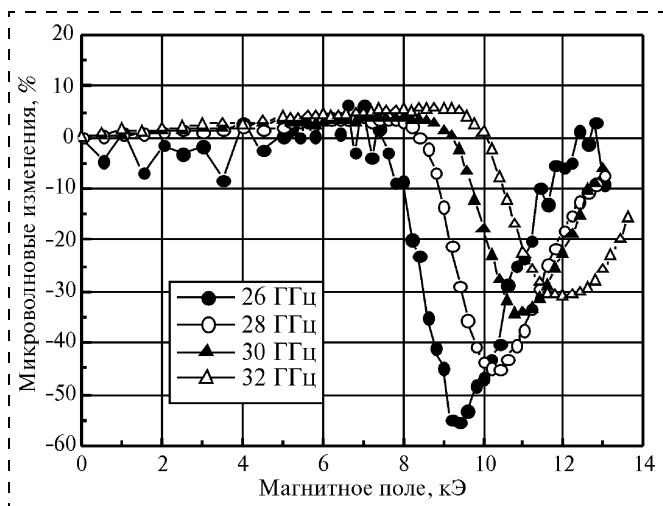


Рис. 6. Магнитный резонанс, измеренный по прохождению микроволн через образец нанокompозита, содержащего никель-цинковый феррит

матрица составил около 300 кВт/см^2 . Этот порог меньше на два порядка, чем порог для планарной структуры ZnO-SiO_2 , благодаря резонансу в структуре с распределенной обратной связью ZnO —опаловая матрица.

Приводятся результаты исследования открытого недавно эффекта фотонного пламени, который наблюдается в фотонных кристаллах или нанокompозитах на основе опаловых матриц и состоит в возникновении длительного (до нескольких секунд) свечения в сине-зеленой области спектра под действием импульса рубинового лазера длительностью 20 нс с длиной волны 694,3 нм. Изучение и практическое применение нелинейных эффектов в фотонных кристаллах может сыграть важную роль в создании нового класса оптических устройств.

Изучено взаимодействие электромагнитных волн с нанокompозитными материалами, полученными введением в межсферическое пространство опаловых матриц наночастиц никель-цинкового или марганец-цинкового феррита. Измерения выполнены в интервале частот 26...38 ГГц и магнитных полях напряженностью до 30 кЭ ($2,39 \cdot 10^4 \text{ А/м}$). Проанализирована зависимость от напряженности внешнего магнитного поля коэффициентов прохождения и отражения электромагнитных волн. В результате взаимодействия электромагнитной волны с образцом микроволновый сигнал может изменяться до 60 % (рис. 6). Столь большое значение изменений создает предпосылки использования магнитных нанокompозитов на основе опаловых матриц в управляемых электронных приборах миллиметрового диапазона.

Углеродные наноструктуры: пленки, нанотрубки, фуллерены обладают уникальными механическими, оптическими, автоэмиссионными свойствами. Представлены результаты создания эффективных

автоэммиттеров на основе углеродных нанотрубок (УНТ), выращенных CVD методом на опаловой матрице. Результаты измерения эмиссии представлены на рис. 7.

Трехмерные наноструктурированные материалы представлены периодическими металлизированными наноканалами в пористом оксиде алюминия с покрытием стенок нанопор золотом. Сформированные нанопроволочные среды образуют периодическую систему нанотрубок с уникальными оптическими свойствами. Из рис. 8, видно, что пленка золота располагается по поверхности пор, образуя

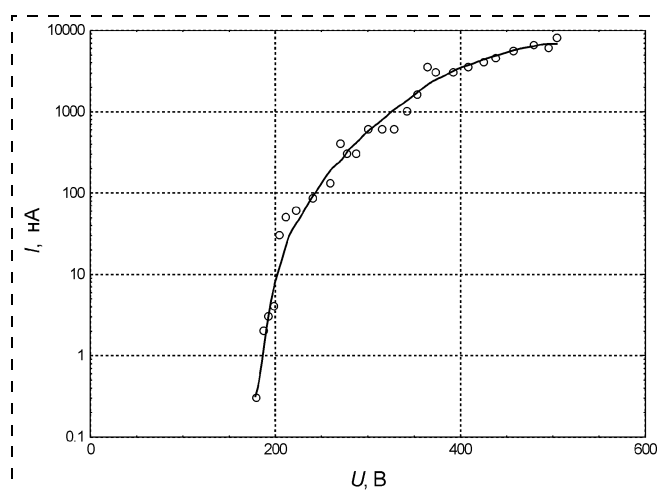


Рис. 7. Вольт-амперные характеристики автоэмиссии из УНТ, выращенных на опаловой матрице

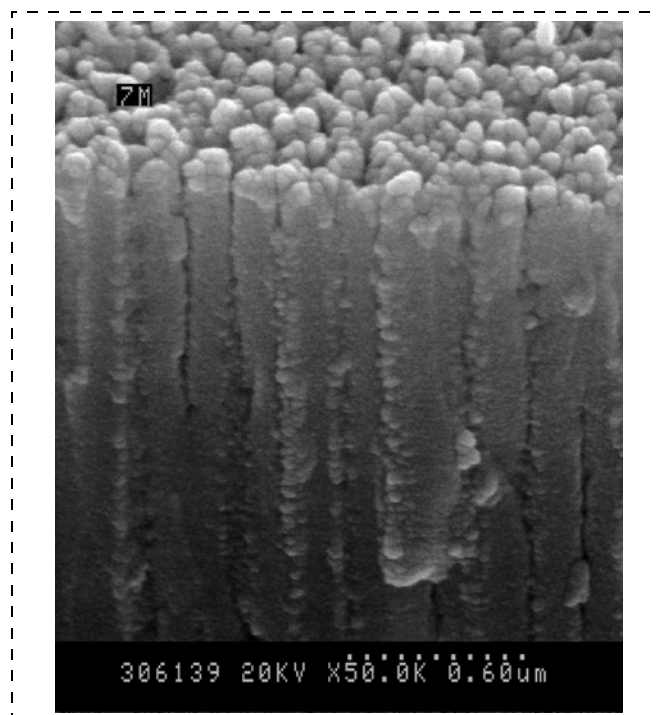


Рис. 8. Скол подложки оксида алюминия с фрагментами слоев золота, осажденного в нанопорах

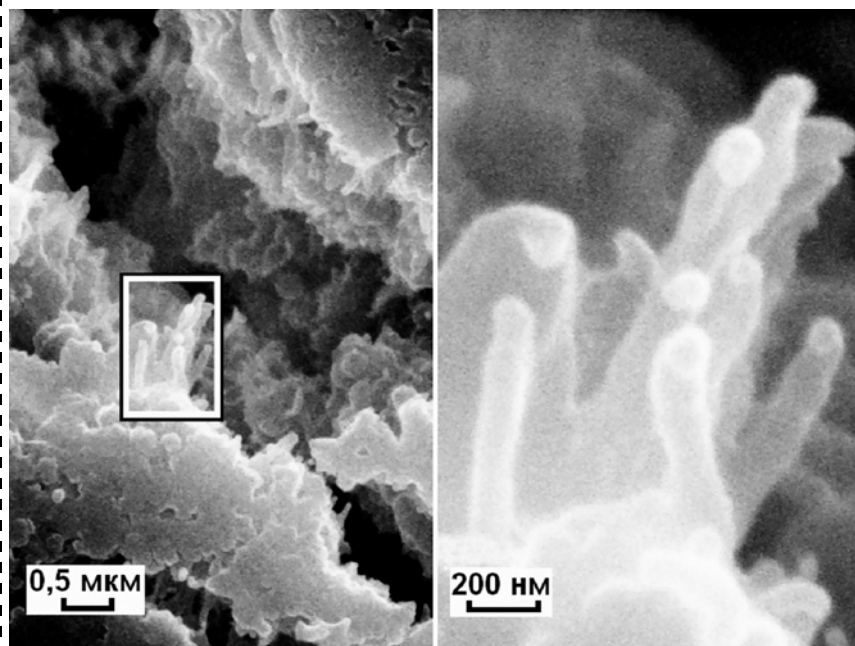


Рис. 9. Взаимодействие клеточной системы с фрагментами опаловой матрицы

трубки с толщиной стенок порядка нескольких нанометров.

Высокие технологии и тонкие пленки, применяемые в области биологии и медицины, представлены исследованиями физико-химических характеристик наноструктурированных синтетических (полиэтилентерефталата — ПЭТФ) и природных (хитозана) полимеров с антимикробной активностью, сформированных методами ионно-плазменной технологии. Результаты исследований показали возможность управления поверхностными свойствами полимеров, их антимикробной активностью путем создания материалов с наноструктурированными поверхностями (НСП).

Материалы с НСП формировались следующими методами:

- обработкой исходной поверхности полимеров потоками частиц химически активных и инертных газов (воздушная смесь) с помощью автономного источника ионов;
- модифицированием сформированного рельефа путем нанесения алмазоподобной углеродной пленки (α -C:H) толщиной от 10 до 100 нм с помощью автономного источника ионов;
- обработкой исходной поверхности полимеров частицами химически активных и инертных газов (воздушная смесь) в ВЧ-диодной системе.

Прогресс в реконструктивно-пластической хирургии различных разделов медицины в значительной мере зависит от внедрения современных наноматериалов в качестве трехмерных матриц для клеточных и тканевых культур. Выбранный для технологической проработки метод формирования наноструктур должен обеспечить получение на их

основе биоматериалов нового поколения (с учетом результатов моделирования свойств живых биологических тканей) таким образом, чтобы при необходимости они могли замещать структурные и (по возможности) функциональные дефекты, возникающие при оперативных вмешательствах, а также иметь высокую биологическую безопасность.

Показана возможность формирования и применения биосовместимых 3D-опаловых матриц для культивирования мезенхимальных стволовых клеток. Твердая фаза (фрагменты опаловой матрицы) армирует мягкую фазу (биологическая масса), давая возможность последней для объемного роста. Таким образом, формируется двухфазная структура сферической формы, состоящая из биологической массы, армированной каркасом из частиц опаловой матрицы.

При взаимодействии клеток с фрагментами опаловой матрицы наблюдается появление характерных нитевидных отростков (рис. 9).

Датчики на основе наноструктурированных материалов

Датчики на основе наноструктурированных материалов имеют более высокую чувствительность по сравнению с датчиками, полученными традиционными технологиями. Приводятся результаты исследования топографии поверхности и газовой чувствительности тонких пленок олова со сверхразвитой поверхностью, сформированных на подложках из синтетического опала. На рис. 10 представлены графики, которые показывают, во-первых, высокую чувствительность пленок олова с развитой поверхностью к парам аммиака (NH_3), во-вторых, их способность к восстановлению.

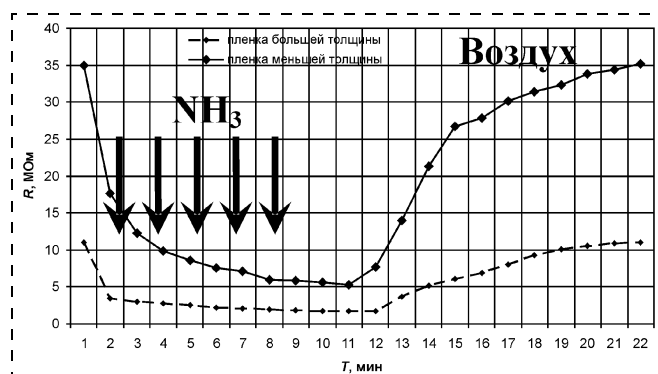


Рис. 10. Кинетика отклика поверхностного сопротивления тонких пленок олова на поверхности опаловой матрицы

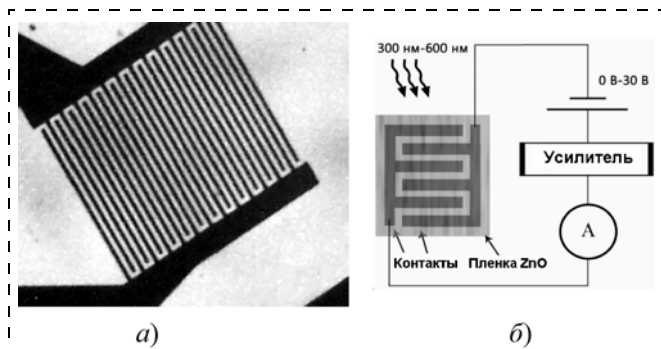


Рис. 11. Фотография сформированных на пленке ZnO электродов (а) и схема детектора УФ-излучения (б)

Пленки ZnO, предназначенные для создания чувствительных элементов датчиков УФ-излучения (рис. 11), получены методом магнетронного ВЧ-распыления, при этом применялась дополнительная магнитная система, помещенная за подложкодержателем.



Рис. 12. Внешний вид лабораторной вакуумной установки модульного типа

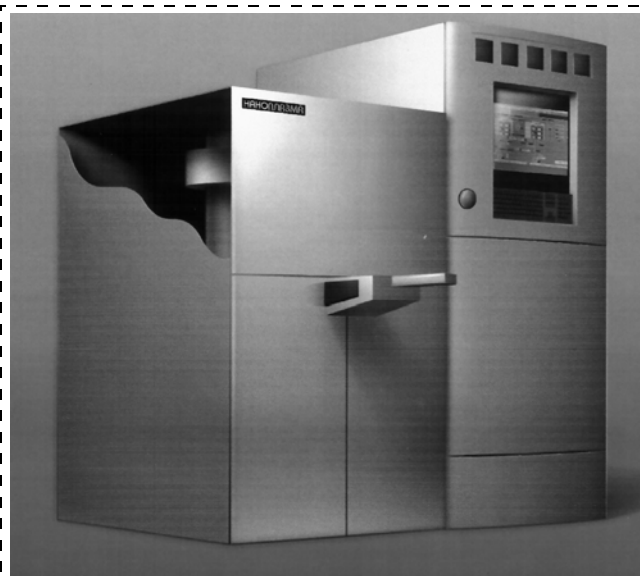


Рис. 13. Внешний вид промышленной установки ионно-плазменного травления "Наноплазма"

Разработка технологического оборудования

Если аналитическое оборудование для нанотехнологии — зондовые (туннельные и атомно-силовые) микроскопы, просвечивающие электронные микроскопы и т. п. можно приобрести как в России, так и за рубежом, то технологическое оборудование для изготовления наноструктурированных материалов и изделий на их основе нужно создавать. Разработана вакуумная нанотехнологическая установка модульного типа (рис. 12), предназначенная для формирования наноструктурированных тонких пленок методами термического и дугового испарения, магнетронного распыления и стимулированного плазмой газофазного осаждения.

В ОАО "НИИ точного машиностроения" разработаны вакуумные установки нового поколения для нанесения тонких пленок, вакуумно-плазменного травления, формирования углеродных алмазоподобных пленок и нанотрубок (рис. 13).

Литература

1. **Высокие** технологии в промышленности России (материалы и устройства функциональной электроники и нанофотоники) // Материалы XIII Международной научно-технической конференции "Тонкие пленки в электронике" / Материалы XX Международного симпозиума. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2007. 460 с.

О. А. Тягунов, канд. техн. наук,
МИРЭА (ТУ)

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МИКРО- И НАНОМЕХАНИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И СИСТЕМ

Рассматриваются особенности использования программного комплекса "Анализ систем" для моделирования и исследования динамических свойств микро- и наномеханических элементов, которые широко используются при построении систем автоматического управления различного назначения.

Введение

В последние годы происходит бурное развитие микро- и нанотехнологий, позволяющих создавать новые классы малогабаритных интегрированных многофункциональных систем для решения задач получения и хранения информации, вычисления и управления и т. д. [1]. Преимущества микро- и наномеханических элементов и приборов по сравнению с традиционными хорошо известны — малые габаритные размеры, малое энергопотребление, практически неограниченный ресурс работы, малая стоимость при массовом исполнении, устойчивость к большим перегрузкам и возможность интеграции с электронной частью прибора в одном кристалле полупроводника. Отметим лишь наиболее известные области применения микромеханических датчиков и систем: автомобилестроение, военная техника, космические системы, робототехника, медицинские приборы, бытовая техника [2—3].

Важным этапом разработки и проектирования микро- и наномеханических элементов и приборов является построение математических моделей и математическое моделирование процессов в этих системах. В настоящее время методология математического моделирования процессов в динамических системах разработана достаточно хорошо [4]. Вместе с тем отсутствуют публикации, в которых отмечались бы особенности использования программных систем для моделирования процессов в микро- и наномеханических элементах. Настоящая статья посвящена описанию возможностей разработанной автором программной среды "Анализ систем" для моделирования и исследования динамики систем управления с микро- и наномеханическими элементами.

Принцип работы и основные подсистемы программного комплекса "Анализ систем"

В настоящее время для решения задач исследования систем автоматического управления (САУ) различного назначения достаточно широко используются такие зарубежные коммерческие программные комплексы, как MatLab-SIMULINK [5]. Из отечественных разработок следует отметить комплексы "Экспресс-Радиус" [6], "МВТУ" [7—8] и др. Однако практически все они достаточно громоздки, требуют значительных вычислительных ресурсов, предъявляют высокие требования к квалификации пользователя и не всегда удобны в учебном процессе и проведении научно-исследовательских работ.

Поэтому перспективны специализированные программные комплексы для моделирования и исследования САУ, которые, с одной стороны, были бы легки в освоении, а с другой стороны, охватывали большинство приложений теории автоматического управления. Программный комплекс "Анализ систем" был разработан на кафедре "Проблемы управления" МИРЭА и отвечает перечисленным выше требованиям.

Достаточно подробно программный комплекс "Анализ систем" был описан в [9], поэтому отметим кратко его основные особенности:

- компактность и легкость в обучении и освоении;
- возможности, сравнимые с системами типа MatLab, SIMULINK;
- возможность использования в современных вариантах построения обучающих систем, в том числе и дистанционных;
- использование современных информационных и интеллектуальных технологий в целях расширения функциональных возможностей программных средств.

В основу построения комплекса положен принцип структурного представления описания системы управления. Этот принцип хорошо зарекомендовал себя при математическом описании как сосредоточенных, так и, особенно, распределенных объектов управления [10].

К возможностям программного комплекса "Анализ систем" можно отнести:

- создание произвольных структурных схем систем управления;
- построение переходных процессов и фазовых портретов;
- построение частотных характеристик;
- исследование устойчивости системы;
- упрощение структурной схемы контура;
- синтез структуры регулятора по заданному объекту управления с помощью метода обратных задач динамики;
- параметрическая оптимизация;
- генерация текстов программ на различных языках программирования, таких как: Pascal (Delphi);

C++;
QBasic;
Assembler для семейства микропроцессоров Intel8086;
Assembler для семейства микропроцессоров Intel8051;
Assembler для семейства микропроцессоров Intel8096;
Assembler для микропроцессоров семейства DEC.

Библиотека блоков состоит более чем из 50 блоков, которые функционально можно разделить на классы.

Генераторы

Генератор постоянного сигнала.
Генератор пилообразного сигнала.
Генератор меандра.
Генератор гармонического сигнала.
Генератор равномерного распределения на отрезке.

Единичный импульс от t_1 до t_2 .

Функциональный генератор (генератор сигнала пользователя).

Сумматоры

Положительный сумматор.
Отрицательный сумматор.
Перемножитель.

Линейные блоки

Пропорциональное звено.
Интегральное звено.
Дифференциальное звено.
Форсирующее звено.
Апериодическое звено.
Колебательное звено.
Звено задержки.
Реальное дифференциальное звено.

Нелинейные блоки

Блок с зоной нечувствительности.
Блок с нелинейностью типа "ограничение".
Блок с зоной нечувствительности и ограничением.
Двухпозиционное реле.
Двухпозиционное реле с гистерезисом.
Трехпозиционное реле.
Трехпозиционное реле с гистерезисом.
Квантователь по уровню.
Блок с люфтом.
Блок с нелинейностью пользователя.

Импульсные блоки

АИМ.
ШИМ.
ЧИМ.

Математические блоки

Делитель
Блок функции $\max(x_1, x_2, x_3)$.
Блок функции $\min(x_1, x_2, x_3)$.
Блок арктангенса с учетом четверти.

Прочие

Нечеткий регулятор.
Нейросеть.

Блок пользователя.

Инкрементный датчик скорости.

Блок управления параметром другого блока.

Включатель структуры.

Выключатель структуры.

Ждущий мултивибратор.

Программный комплекс "Анализ систем" выполнен по технологии MDI-приложения Windows. Это подразумевает наличие одного или нескольких окон графического редактора. Рабочее поле каждого окна разбивается на квадраты фиксированного размера, что значительно упростило реализацию графического редактора. В настоящий момент реализован вариант редактора с размером поля 200 на 200 квадратов, однако максимальный размер поля ограничен только быстродействием компьютера. В результате переноса необходимых блоков на координатное поле и прокладки всех соединительных линий пользователь получает схему САУ.

У ПК имеется объемная справочная система поддержки, состоящая из более чем 300 разделов, которая отвечает не только на вопрос "что?", но и на вопросы "как?" и "почему?".

При выборе пользователем любой опции расчета блок "*Компиляции структурных схем*" преобразует схему из окна редактора в граф. При необходимости граф сортируется по алгоритмам, описанным в [11]. На входе блока компиляции — структурная схема, на выходе — граф этой системы.

Блок "*Расчет временных характеристик*" по полученному графу системы рассчитывает переходные процессы в системе. При этом непрерывная модель каждого блока заменяется его разностной аппроксимацией.

Полученные таким образом временные характеристики отображаются в виде переходного процесса или фазового портрета соответственно в блоках "*Переходный процесс*" и "*Фазовый портрет*".

При вычислении частотных характеристик граф системы поступает на вход блока "*Расчет $W(s)$* ". При этом в блоке "*Разложение*" выполняется операция разложения числителя и знаменателя передаточной функции на простые сомножители с помощью процедуры отыскания корней алгебраических уравнений произвольного порядка, основанной на использовании алгоритма Берстоу.

Блок "*Вывод $W(s)$* " отображает на экране передаточную функцию произвольного контура структурной схемы САУ, при этом может использоваться передаточная функция, полученная с помощью блока "*Разложение*".

Передаточная функция, представленная в виде простых сомножителей, используется блоками "*ЛАЧХ/ФЧХ*", "*Годограф*", "*Критерий Попова*". Эти блоки соответственно отображают на экране ЛАЧХ/ФЧХ, годограф, модифицированный годограф для исследования нелинейных систем с помощью критерия абсолютной устойчивости В. М. Попова.

Блок "Анализ нелинейностей" имеет на своем входе граф системы. Данный блок в выбранном контуре осуществляет поиск нелинейных элементов, их преобразование, а также расчет эквивалентного комплексного коэффициента усиления (ЭККУ) нелинейного элемента, при этом используется база знаний по нелинейностям. Блок "Годограф" предназначен для построения ЭККУ на плоскости годографа.

Блок "Анализатор" выполняет функции расчета параметров и устойчивости возможных периодических режимов, вызываемых наличием нелинейных элементов в исследуемом контуре САУ (метод гармонического баланса).

Данные о секторе, в котором находится нелинейность, полученные с блока "Анализ нелинейностей", а также данные о разложенной передаточной функции с блока "Разложение" используются блоком "Критерий Попова". По этим данным строится модифицированный годограф и прямая Попова и решается задача определения абсолютной устойчивости нелинейной системы с помощью критерия В. М. Попова.

Блок "Синтез" предназначен для нахождения передаточной функции и параметров управляющей подсистемы (регулятора) по передаточной функции неизменяемой части САУ с использованием метода обратных задач динамики на основе данных из базы знаний о синтезе. На выходе блока "Синтез" получается синтезированная структурная схема регулятора, которая может быть перенесена в структурную схему САУ.

Блок "Оптимизация" предназначен для решения задачи параметрической оптимизации, т. е. нахождения значений параметров блоков системы по выбранному критерию оптимизации. Проведение оптимизации возможно по трем используемым критериям качества регулирования переходного процесса: интегрально-квадратичному, интегрально-квадратичному с первой производной, интегрально-квадратичному со второй производной. В программном

комплексе реализованы три метода оптимизации: градиентный спуск, равномерный зонд и покомпонентный спуск.

Программный комплекс "Анализ систем" с 2001 г. используется в МИРЭА и ряде других вузов Российской Федерации при проведении занятий по курсам, связанным с изучением основных разделов теории автоматического управления.

Примеры использования программного комплекса "Анализ систем" при решении задач моделирования и исследования микро- и наномеханических элементов

В настоящее время в системах управления оборудования, используемого в нанотехнологии, нанобиологии, энергетике, микроэлектронике и адаптивной оптике, начинают широко использоваться точные электромеханические приводы на основе пьезопреобразователей [12, 13]. Эффект перемещения достигается при приложении электрического напряжения за счет деформации пьезопреобразователя (пьезодвигателя нано- и микроперемещений) в диапазоне перемещений исполнительного преобразователя от единиц нанометров до единиц микрометров с погрешностью до десятых долей нанометров.

В работе [14] на основе решения волнового уравнения построена структурно-параметрическая модель пьезопреобразователя для электромеханического привода нано- и микроперемещений, с помощью которой исследовалось влияние геометрических и физических параметров преобразователя и внешней нагрузки на статические и динамические характеристики. Вместе с тем, следует сказать, что исследования проводились без использования средств моделирования. Продемонстрируем возможности программного комплекса "Анализ систем" при разработке различных схем моделирования пьезопреобразователей. На рис. 1 приведена заимствованная из [14] схема пьезопреобразователя при поперечном пьезо-

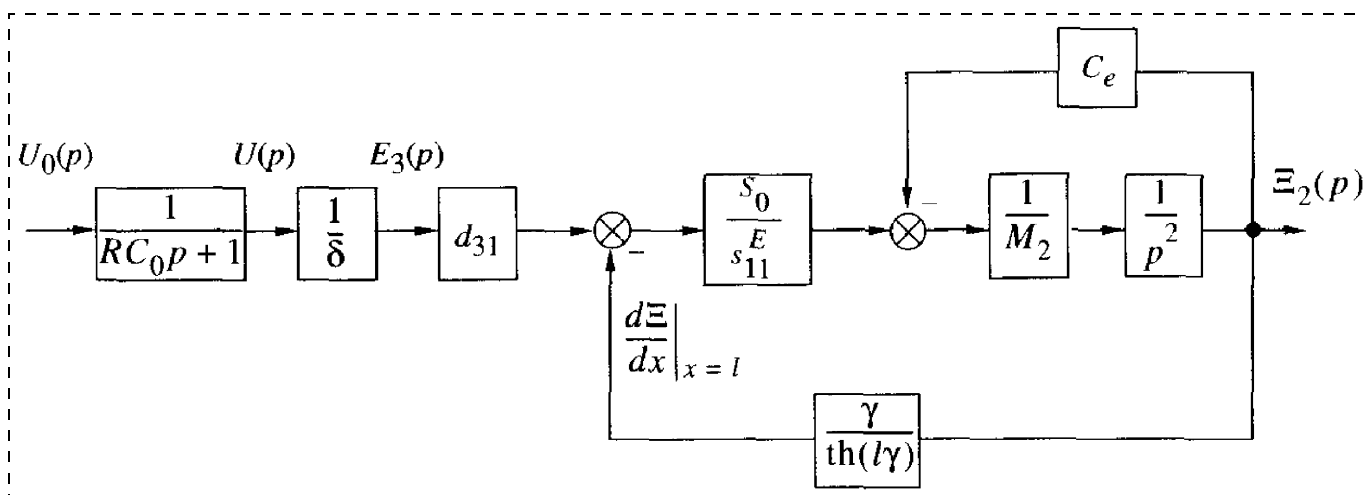


Рис. 1. Схема пьезопреобразователя при поперечном пьезоэффекте с управлением по напряжению при упругоинерционной нагрузке

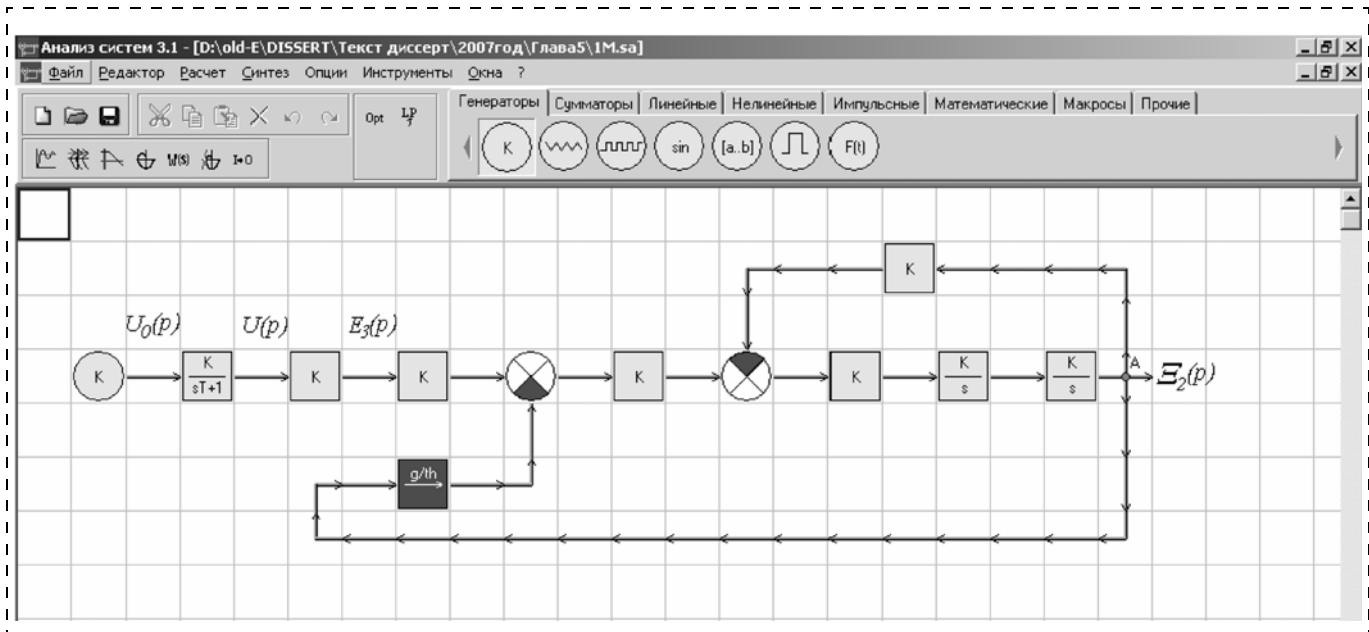


Рис. 2. Схема моделирования пьезопреобразователя с использованием макровставок

эффекте с управлением по напряжению при уругоинерционной нагрузке, а на рис. 2 представлена соответствующая схема моделирования средствами "Анализ систем". На рис. 2 при создании нестандартного элемента с передаточной функцией $\gamma/th(l\gamma)$, где $\gamma = p/c^E + \alpha$ и $th(l\gamma) = \frac{\exp(l\gamma) - \exp(-l\gamma)}{\exp(l\gamma) + \exp(-l\gamma)}$, использо-

валась технология создания макровставок, очень удобная при создании моделей сложной структуры, причем блок с именем g/th — это блок макровставки.

На рис. 1—2 используются следующие обозначения: l — длина пластины, α — коэффициент затухания; c^E — скорость звука в пьезокерамике; U_0 — на-

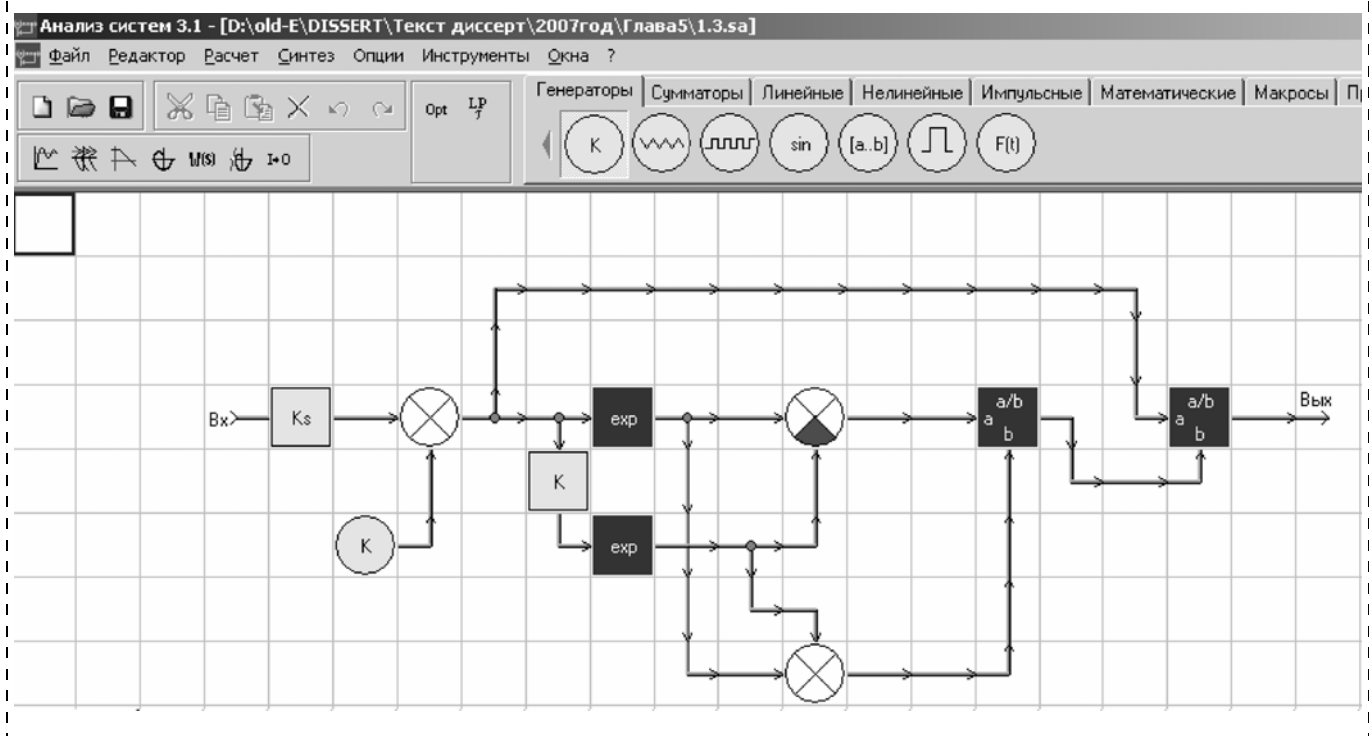


Рис. 3. Схема моделирования элемента макровставки

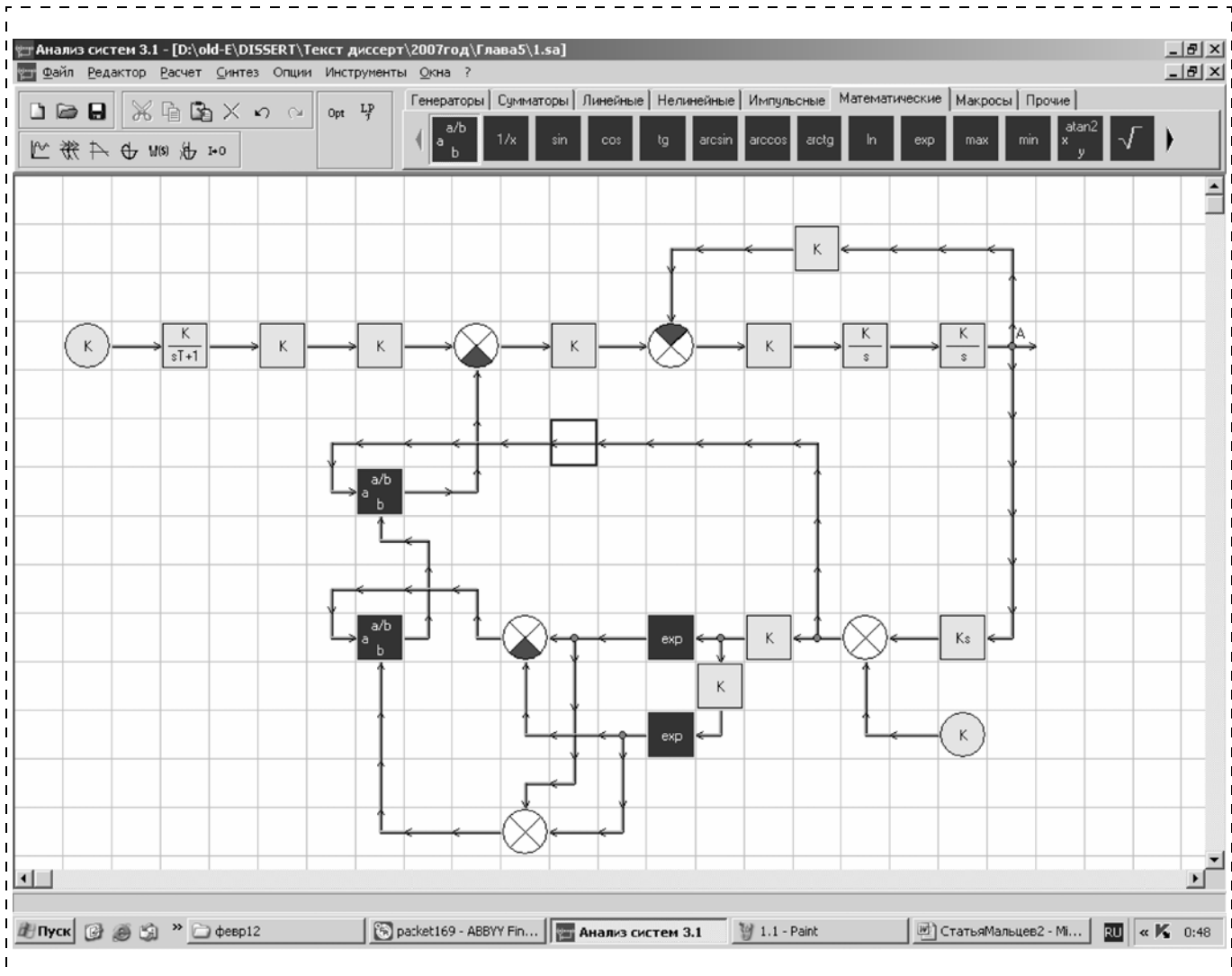


Рис. 4. Схема моделирования пьезопреобразователя без использования макровставок

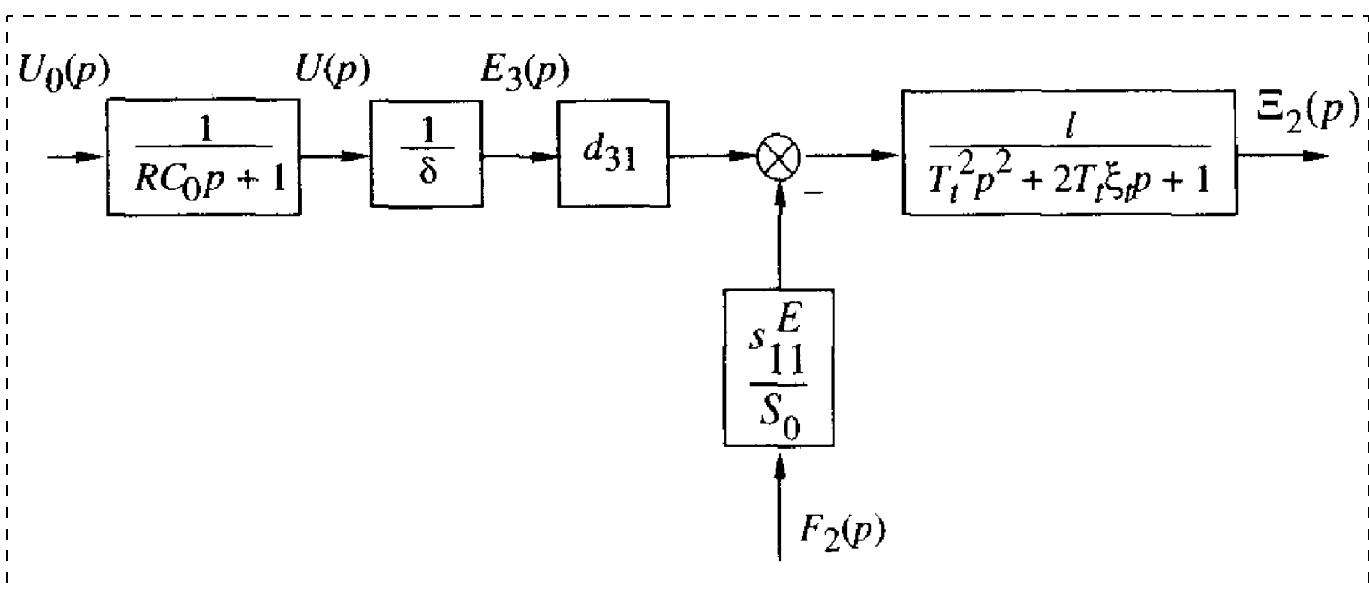


Рис. 5. Структурная схема пьезопреобразователя, жестко закрепленного одним торцом при поперечном пьезоэффекте с управлением по напряжению

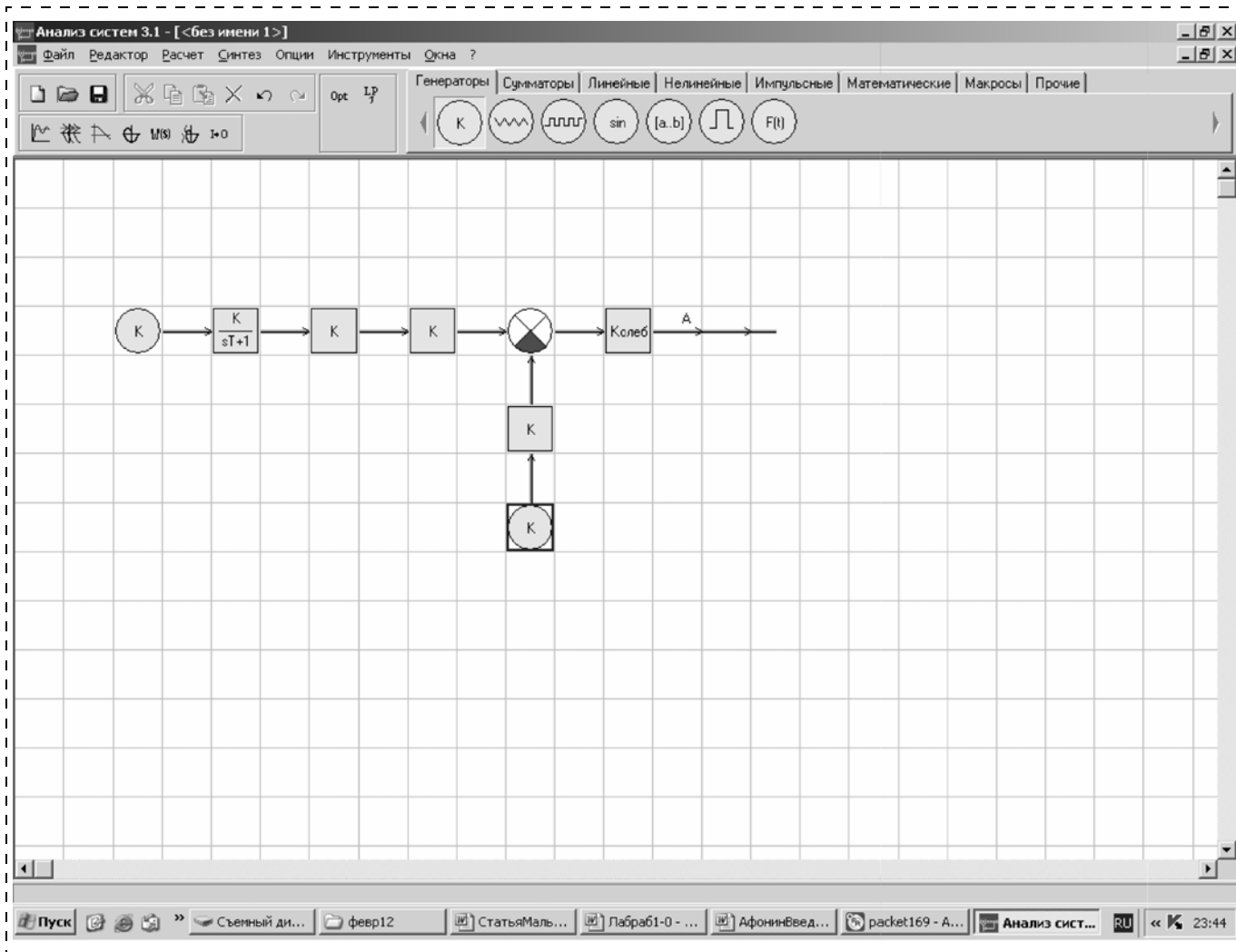


Рис. 6. Схема моделирования пьезопреобразователя, жестко закрепленного одним торцом при поперечном пьезоэффekte с управлением по напряжению

пряжение источника питания; U — напряжение на электродах пластины; E_3 — напряженность электрического поля; R — сопротивление внешней цепи; C_0 — статическая емкость пьезопластины; δ — коэффициент преобразования; d_{31} — пьезомодуль при поперечном пьезоэффekte; s_0, s_{11}^E — коэффициенты упругой податливости; M — перемещаемая масса, C_e — коэффициент обратной связи.

Структурная же схема блок макровставки g/th приведена на рис. 3.

Использование технологии макровставок представляется достаточно удобным. Для примера на рис. 4 приведена исходная схема моделирования без макровставок.

На рис. 5 приведена рассмотренная в [13] упрощенная структурная схема пьезопреобразователя, жестко закрепленного одним торцом при поперечном пьезоэффekte с управлением по напряжению,

а на рис. 6 — схема моделирования преобразователя средствами "Анализ систем".

Были проведены многочисленные численные эксперименты по моделированию процессов в пьезопреобразователе при различных значениях параметров системы, показавшие достаточно хорошее совпадение результатов моделирования с экспериментальными данными.

В настоящее время накоплен опыт по моделированию и исследованию процессов с использованием комплекса "Анализ систем" для различных типов микро- и наномеханических элементов, например, микромеханических вибрационных гироскопов [15].

В целом можно отметить, что программный комплекс "Анализ систем" может быть использован не только для проведения научных исследований по разработке и проектированию систем управления различного назначения, но и в учебном процессе высших учебных заведений страны при обучении студентов различных специальностей.

Список литературы

1. **Нанотехнологии** в электронике / Под ред. Ю. А. Чаплыгина. М.: Техносфера, 2005. 448 с.
2. **Телец В., Алфимов С., Иванов А.** и др. Прикладные аспекты нанотехнологий // *Наноиндустрия*. 2007. № 2. С. 16—23.
3. **Телец В., Алфимов С., Иванов А.** и др. Прикладные аспекты нанотехнологии // *Наноиндустрия*. 2007. № 4. С. 4—11.
4. **Самарский А. А., Михайлов А. П.** Математическое моделирование. М.: Физматлит, 2003. 320 с.
5. **Ануфриев И. Е., Смирнов А. Б., Смирнова Е. Н.** Mat-Lab 7. СПб.: БХВ-Петербург, 2005.
6. **Дорри М. Х., Кочемасов А. В., Рошин А. А.** Автоматизированное проектирование систем и средств управления. Пакет "Экспресс-Радиус 2.1". М.: Изд-во МИРЭА, 2000.
7. **Козлов О. С., Кондаков Д. Е., Скворцов Л. М.** и др. Программный комплекс для исследования динамики и проектирования технических систем // *Информационные технологии*. 2005. № 9. С. 20—25.
8. **Козлов О. С., Скворцов Л. М.** Исследование и проектирование автоматических систем с помощью программно-

го комплекса "МВТУ" // *Информационные технологии*. 2006. № 8. С. 9—15.

9. **Евстигнеев Д. В., Кормилкин А. А., Тягунов О. А.** Программный комплекс для моделирования и исследования систем автоматического управления // *Мехатроника, автоматизация, управление*. 2007. № 6. С. 41—45.

10. **Бутковский А. Г.** Структурная теория распределенных систем. М.: Гл. ред. физмат. лит.-ры, 1977. 320 с.

11. **Клюкин Н. Г.** Цифровая система моделирования в задачах динамики // *Труды ЦАГИ*. 1983. Вып. 2172. С. 18—35.

12. **Партон В. З., Кудрявцев Б. А.** Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. М.: Наука. Гл. ред. физмат. лит., 1988.

13. **Drexler K. E.** Nanosystems. N. Y.: J. W., 1992.

14. **Афонин С. М.** Обобщенная структурно-параметрическая модель электромагнитно-упругого преобразователя нано- и микроперемещениями // *Теория и системы управления*. Изв. РАН. 2006. № 2. С. 158—166.

15. **Тимошенков С. П., Зотов С. А., Морозова Е. С.** и др. Передаточные функции чувствительного элемента микро-механического вибрационного гироскопа // *Нано- и микросистемная техника*. 2007. № 9. С. 32—34.

УДК 532.536.248

И. А. Хорунжий, канд. физ.-мат. наук, доц.,
Д. С. Доманевский, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Д. С. Бобученко, канд. физ.-мат. наук,
Белорусский национальный технический
университет, г. Минск
e-mail: igor.khorunzhii@newmail.ru

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ РАДИАТОРА ДЛЯ ОХЛАЖДЕНИЯ МОЩНОГО ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ПРИБОРА

Представлены результаты экспериментальной проверки компьютерной модели теплового радиатора для мощного полупроводникового прибора (~1 кВт тепловой мощности), представленной авторами ранее [1]. Проверка осуществлялась путем сравнения расчетных значений температуры в девяти различных точках, расположенных на поверхности радиатора, с экспериментально измеренными значениями температуры. Для измерения температуры использованы тонкопленочные металлические сопротивления, осажденные на поверхность радиатора. Получено хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных.

Компьютерная модель игольчатого радиатора с принудительным жидкостным охлаждением для мощного полупроводникового устройства (тепловая мощность ~1 кВт) была представлена авторами в предыдущей статье [1]. Для обеспечения надежности результатов, полученных методом компьютерно-

го моделирования, необходима их экспериментальная верификация, т. е. необходимо сравнить значения параметров, полученные в результате расчетов, с их экспериментально измеренными значениями. Экспериментальная проверка компьютерной модели осуществлялась путем сравнения расчетных и экспериментально измеренных значений температуры на поверхности радиатора. При проведении измерений основное внимание было сосредоточено на максимально точном измерении теплового потока, направляемого от системы нагрева к теплому радиатору. Для уменьшения потерь теплоты вследствие теплообмена нагревательной системы с окружающей средой система нагрева была изготовлена из двух частей — верхней и нижней, каждая из которых включает три электронагревательных элемента (рис. 1). Нижний нагреватель генерирует теплоту, отводимую за счет теплопроводности через исследуемую систему охлаждения, а верхний служит для создания "теплового зеркала". Идея "теплового зеркала" состоит в том, что мощность верхнего нагревателя подбирается таким образом, чтобы температуры на верхней и нижней поверхностях стальной призмы, вставленной между нагревателями, были одинаковы. При этом в стальной призме отсутствует градиент температуры в вертикальном направлении, и, следовательно, для нижнего нагревателя реализуются сверху условия теплоизоляции. Для дополнительного снижения потерь теплоты нагреватель и теплообменник при проведении измерений помещают в теплоизолирующую оболочку. Контроль мощности, рассеиваемой тепловым радиатором, осуществлялся двумя способами. Во-первых, измеряя силу тока и напряжение на электронагревателях, можно

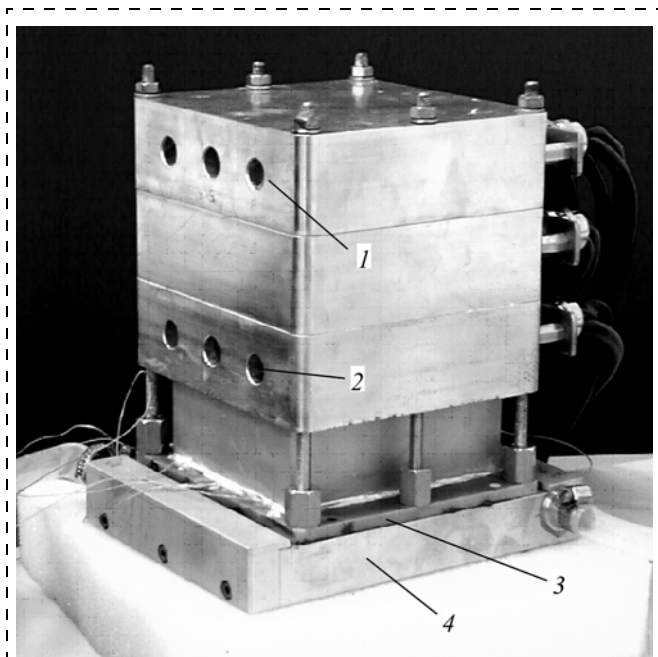


Рис. 1. Фотография нагревательной системы, установленной на систему охлаждения (внешняя теплоизоляция снята):
1 — верхний нагреватель; 2 — нижний нагреватель; 3 — игольчатый радиатор; 4 — корпус системы охлаждения

легко рассчитать суммарную тепловую мощность нижнего нагревателя; во-вторых, можно измерять температуру охлаждающей жидкости на входе в систему охлаждения и на выходе из нее, а также объемную скорость прокачки жидкости (при измерениях использовалась вода). Зная теплоемкость воды, можно рассчитать тепловую мощность, отводимую от системы охлаждения жидкостью. При измерениях в стационарном режиме и при тепловой мощности нижнего нагревателя порядка ~ 1 кВт разница между результатами измерения тепловой мощности указанными способами не превышала 2—3 %.

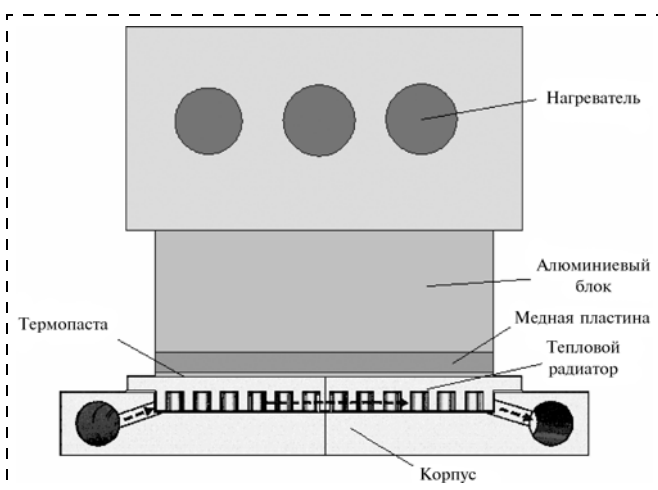


Рис. 2. Сгенерированное компьютерной программой изображение расчетной модели с нагревателем

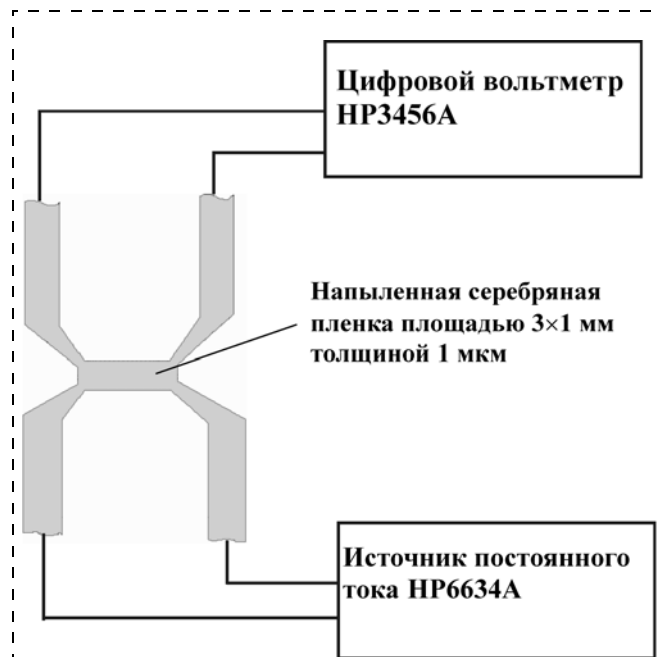


Рис. 3. Схема пленочного термосопротивления и схема его подключения

В компьютерной модели [1] в качестве одного из граничных условий рассматривается тепловой поток, подводимый к верхней поверхности радиатора и однородно распределенный по площади 100×110 мм. Экспериментально добиться однородности теплового потока чрезвычайно сложно, поэтому для более корректного сравнения расчетных и экспериментальных значений компьютерная модель [1] была дополнена нагревательной системой и в качестве исходных параметров задавалась мощность нижнего нагревателя, а на внешних границах использовалось условие теплоизоляции (рис. 2).

При проведении измерений одной из главных проблем было измерение температуры на верхней поверхности теплового радиатора. Сложность проблемы обусловлена тем, что температура радиатора быстро изменяется от поверхности в глубину, поэтому при использовании термопары, вставленной в углубление на поверхности, возникает неопределенность с интерпретацией результата измерения. Дополнительной проблемой является создание надежного теплового контакта термопары с поверхностью радиатора.

Чтобы избежать этих проблем, был выбран другой метод измерения температуры. На радиатор, изготовленный из алюминий-нитридной керамики, являющейся хорошим изолятором, были нанесены пленочные терморезисторы (термодатчики). Каждый резистор представляет собой небольшую (3×1 мм) полоску серебра толщиной 1 мкм, получаемую методом вакуумного осаждения на поверх-

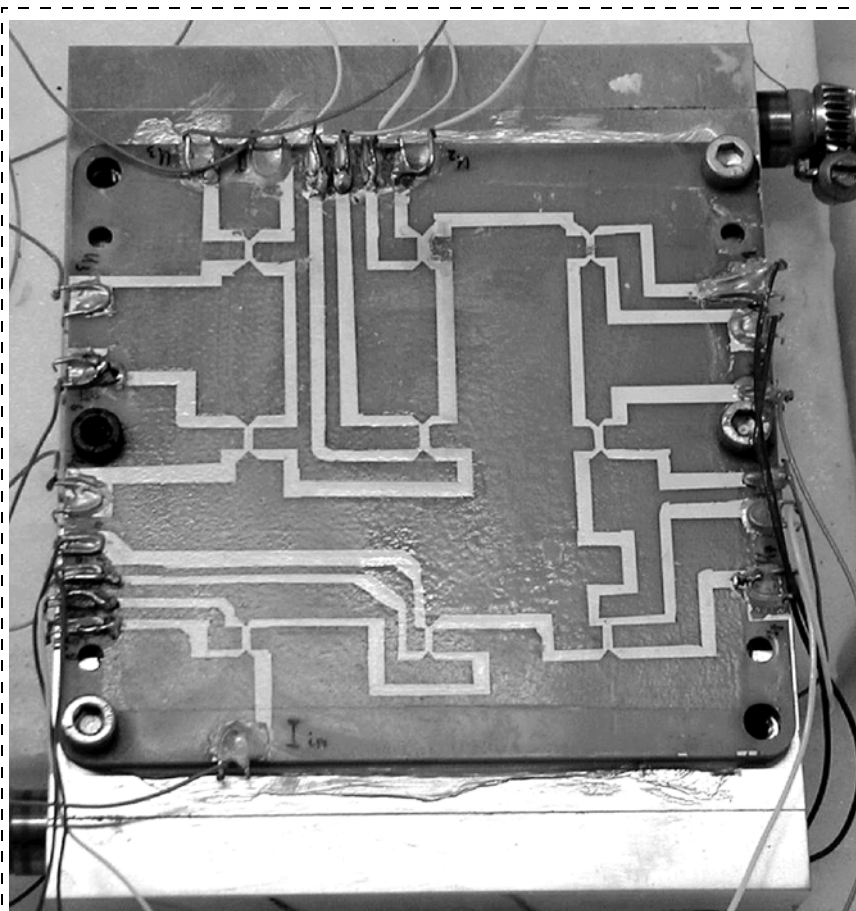


Рис. 4. Фотография системы охлаждения с нанесенными на верхнюю поверхность радиатора термодатчиками

ность радиатора. К каждому датчику подведено четыре контакта в виде напыляемых металлических дорожек. Два контакта служат для подведения к датчику постоянного электрического тока, а два других — для подключения высокоточного цифрового вольтметра. Таким образом, зная силу тока и измеряя напряжение на терморезисторе, можно, воспользовавшись законом Ома, рассчитать электрическое сопротивление датчика, а используя температурную зависимость сопротивления, определить локальную температуру на поверхности радиатора. При данной методике измерения сопротивление контактных дорожек не влияет на значение измеренного сопротивления датчика. Схема и принцип действия датчика представлены на рис. 3. На верхнюю поверхность радиатора было нанесено девять таких датчиков, причем постоянный ток проходил последовательно через все датчики, а вольтметр мог переключаться на нужный датчик при проведении измерения. После изготовления датчики покрывались электроизолирующим лаком, а электрические контакты прикреплялись специальным электропроводящим клеем. Фотография радиатора с нанесенными на него пленочными термодатчиками представлена на рис. 4.

Преимуществами данной методики измерения являются:

- хороший тепловой контакт термодатчиков с поверхностью радиатора;
- измерение температуры непосредственно на поверхности радиатора;
- пленочные термодатчики не создают проблем для установки на радиатор нагревательной системы.

Электрическое сопротивление пленочных термодатчиков при комнатной температуре составляло примерно 10^{-3} Ом. Поместив радиатор с изготовленными на его поверхности термодатчиками в термостат и выполняя измерения при разных температурах, проводилась градуировка всех термодатчиков.

После подготовки и настройки экспериментальной установки измерялась температура на поверхности радиатора. Все измерения проводились в стационарном режиме. Сначала настраивались электрические мощности нижнего и верхнего нагревателей, а также скорости движения жидкости и подбирались состояние "теплового зеркала" между нагревателями. После того как все измеряемые температуры переставали изменяться, система выдерживалась в таком режиме еще полчаса, после чего проводились измерения температур в девяти точках на верхней поверхности штырькового радиатора.

Полученные при измерениях значения электрической мощности нижнего нагревателя, температура охлаждающей жидкости на входе в систему охлаждения и объемная скорость прокачки жидкости использовались как исходные данные при проведении моделирования. Результаты моделирования сравнивались с экспериментальными данными.

На рис. 5 приведено полученное в результате компьютерного моделирования распределение температуры на верхней поверхности радиатора. В приведенном примере тепловая мощность нижнего нагревателя составляла 1 кВт, объемная скорость движения жидкости 5 л/мин, в качестве охлаждающей жидкости использовалась вода, температура воды при входе в систему охлаждения составляла 10 °С. Для точек, в которых нанесены температурные датчики, приведены расчетные и экспериментальные значения температуры. Из полученных данных видно, что максимальная разница между экспериментальными и соответствующими расчетными значениями температуры составляет 0,9 °С. Так как перегрев верхней поверхности радиатора относительно температуры охлаждающей жидкости составляет 10–12 °С, то разница между измеренным и расчетным значениями температуры не превышает 9 % от перегрева. Аналогичные

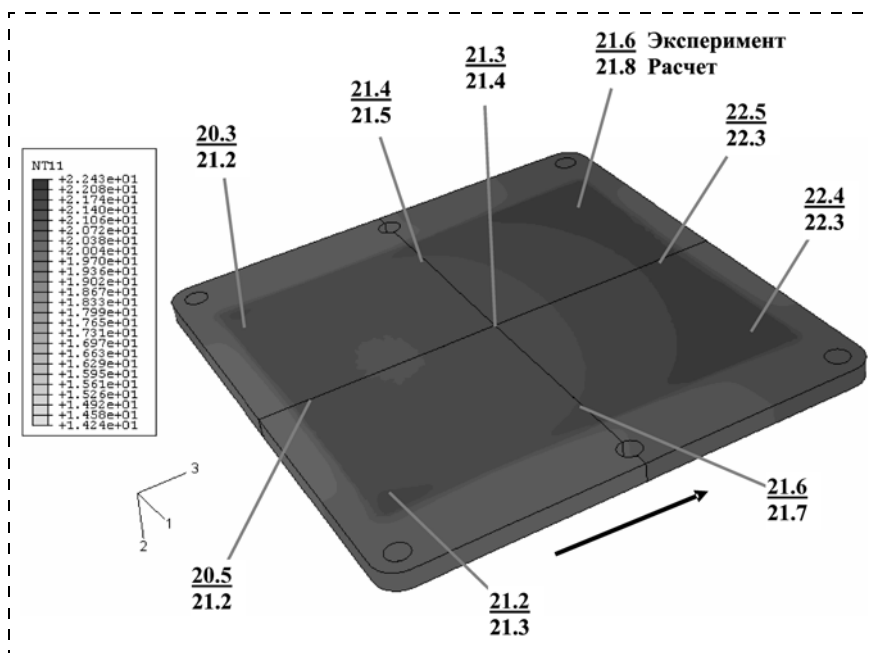


Рис. 5. Полученное методом компьютерного моделирования распределение температуры на верхней поверхности теплового радиатора и сопоставление экспериментальных (в числителе) и расчетных (в знаменателе) значений температуры. Стрелка указывает направление движения охлаждающей жидкости. Шкала температуры в градусах Цельсия

результаты были получены и при других скоростях прокачки охлаждающей жидкости и варьировании мощности нагрева.

Таким образом, проведена экспериментальная проверка компьютерной модели системы охлаждения мощного полупроводникового прибора, предложенной в работе [1], и показано хорошее совпадение расчетных значений температуры на поверхности радиатора с измеренными значениями температуры в соответствующих точках. Показано, что измерение температуры на поверхности радиатора можно проводить с помощью тонкопленочных термосопротивлений.

Литература:

1. Хорунжий И. А., Доманевский Д. С., Бобученко Д. С. Компьютерная оптимизация параметров радиатора для охлаждения мощного полупроводникового прибора // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 1. С. 70—74.

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

УДК 531.781.2.084.2:629.7

Е. М. Белозубов, канд. техн. наук,
Н. Е. Белозубова,
ФГУП "НИИ физических измерений", г. Пенза

МЕТОДЫ И СРЕДСТВА МИНИМИЗАЦИИ ВЛИЯНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕМПЕРАТУР В МЭМС-СТРУКТУРАХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ТЕНЗОРЕЗИСТОРНЫХ ДАТЧИКОВ ДАВЛЕНИЯ

Предложены методы и средства минимизации влияния нестационарных температур в МЭМС-структурах тонкопленочных тензорезисторных датчиков давления. Рассмотрены их основные особенности, позволяющие создавать тонкопленочные тензорезисторные датчики давления для экстремальных условий эксплуатации в ракетной и авиационной технике.

В настоящее время для измерения давлений в изделиях ракетной техники при экстремальных условиях эксплуатации наиболее широко используются тонкопленочные тензорезисторные датчики давления (ТТДД). Характеристики ТТДД во многом определяются характеристиками их чувствительных элементов, которые выполнены в виде МЭМС-структур. Учитывая, что в ракетной технике информация о давлении в условиях воздействия нестационарных температур обладает наибольшей ценностью, задача минимизации погрешности измерения в этих режимах является весьма актуальной. В соответствии с [1] нестационарная температура меняется как во времени, так и в пространстве. В изделиях ракетной и авиационной техники вследствие их функциональных особенностей температура (за исключением случаев искусственного термостатирования) меняется во времени и пространстве. Поэтому температура, воздействующая на ТТДД в изделиях ракетной и авиационной техники, в общем случае нестационарна.

Задача минимизации влияния нестационарных температур на датчики, измеряющие давление в из-

делях ракетной техники, возникла еще до освоения в нашей стране (1978 г.) серийного производства ТТДД. Методы и средства минимизации влияния нестационарных температур ТТДД рассмотрены в [2–5]. Вследствие недостаточной эффективности, сложности реализации и отсутствия системного подхода применение известных методов и средств минимизации влияния нестационарных температур в серийных ТТДД не позволило достичь требуемых результатов, что делает необходимым создание новых эффективных методов и средств минимизации влияния нестационарных температур и их системное использование совместно с известными методами и средствами.

Методы и средства минимизации влияния нестационарных температур в МЭМС-структурах ТТДД условно можно разделить следующим образом:

- методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур;
- методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур и термодформаций;
- методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур с измерением температур тензорезисторов;
- методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур с компенсацией технологического разброса геометрических размеров и физических характеристик тензорезисторов;
- методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур с использованием термоЭДС.

Методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур

Рассмотрим их на примере модели МЭМС-структуры ТТДД, изображенной на рис. 1. Она содержит контактные площадки 1–6, мембрану 7, тензорезисторы 8–11, термокомпенсационный резистор 12 в виде змейки, перемычку 13. Термокомпенсационный резистор выполнен в виде тонкопленочной структуры с температурным коэффициентом сопротивления (ТКС), существенно большим ТКС тензорезисторов, и расположен на мембране в зоне максимального градиента нестационарного температурного поля [6].

Сущность метода состоит в следующем. При нормальных климатических условиях измеряют выходные сигналы ТТДД при полностью замкнутом термокомпенсационном резисторе 12 и при полностью включенном этом резисторе. Затем воздействуют на чувствительный эле-

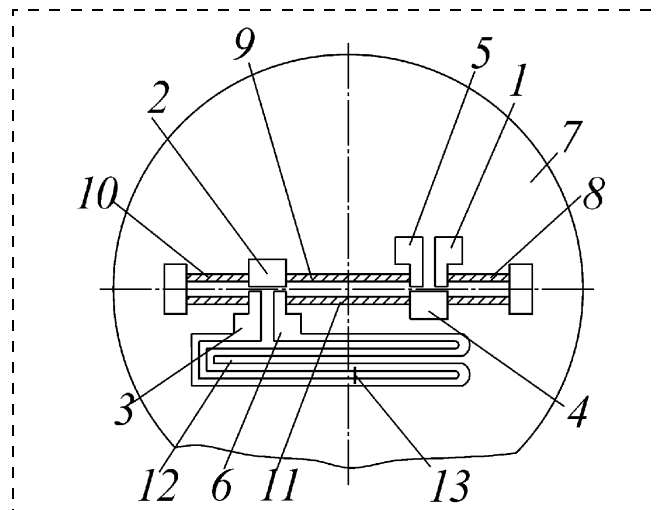


Рис. 1. Модель МЭМС-структуры ТТДД с минимизацией влияния нестационарного температурного поля

мент жидким азотом и измеряют при этом его выходной сигнал. С учетом указанных значений выходных сигналов расчетным путем получают значение термокомпенсационного резистора 12, которое достигается закорачиванием части змейки перемычкой 13.

Методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур и термодформаций

Рассмотрим их на примере МЭМС-структуры, изображенной на рис. 2. Она содержит упругий элемент 1 в виде жесткозашемленной мембраны с диэлектриком 2, на котором расположена мостовая тензочувствительная схема, состоящая из тензорезисторов R_1 , R_{k2} , R_3 , R_4 и контактных площадок 3–8. В мостовую схему включены два компенсационных резистора. Один из них — тензокомпенсационный резистор 9 — выполнен с большим по сравнению с тензорезисторами коэффициентом тензочувствительности [7].

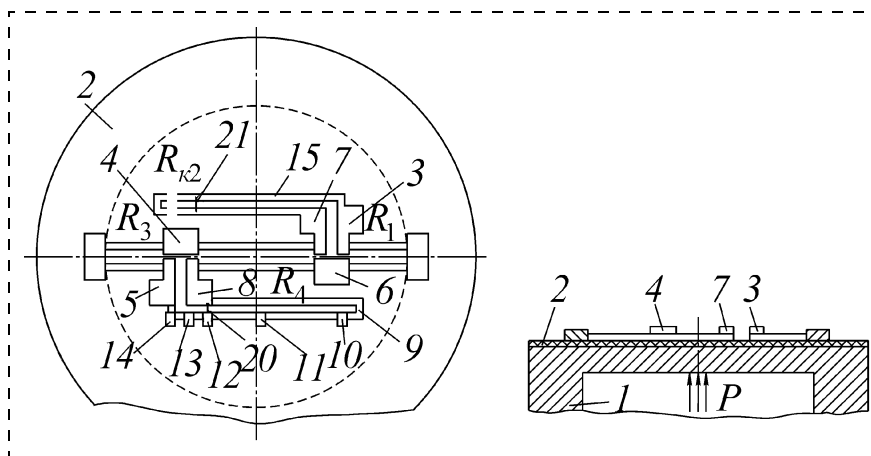


Рис. 2. Модель МЭМС-структуры ТТДД с минимизацией влияния нестационарных полей температур и термодформаций

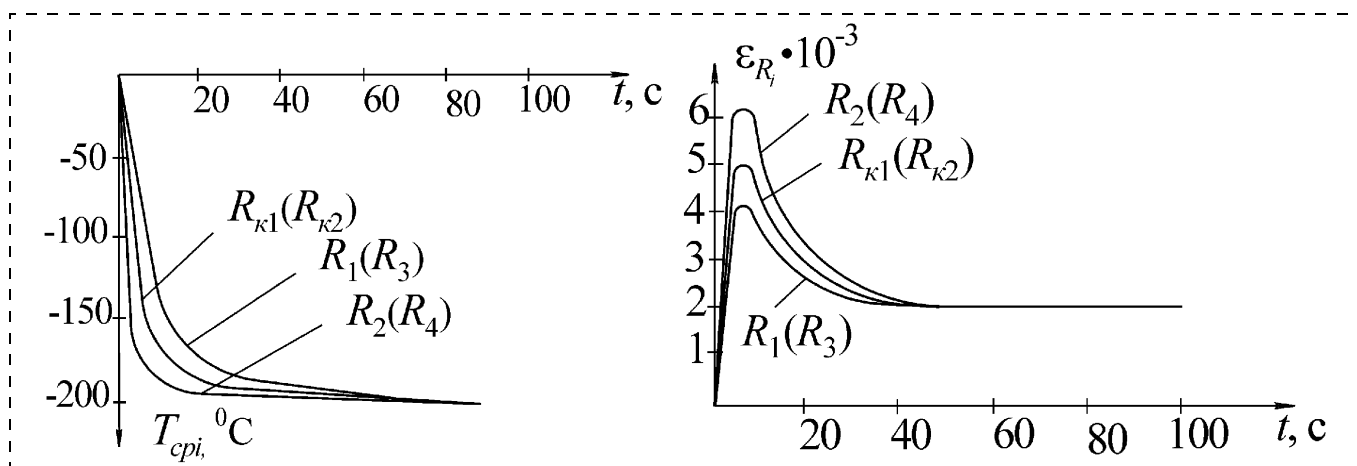


Рис. 3. Распределение температур (слева), термдеформаций (справа) при воздействии нестационарных температур на МЭМС-структуру ТТДД

Для удобства изменения сопротивления резистора 9 на нем выполнены дополнительные контактные площадки 10–14. Термокомпенсационный резистор 15 выполнен с большим ТКС по сравнению с тензорезисторами.

При воздействии нестационарной температуры нестационарное температурное поле и поле температурных деформаций приводят к неидентичности среднеинтегральных температур и термдеформаций, воспринимаемых тензорезисторами, во время нестационарного процесса. Экспериментально определенные зависимости среднеинтегральных температур и термдеформаций, воспринимаемых тензорезисторами и компенсационными резисторами для датчика с мембраной толщиной 0,22 мм и толщиной заделки 1,5 мм, приведены на рис. 3 [7].

На рисунке видно, что скорость изменения среднеинтегральных температур и термдеформаций тензорезисторов R_2 и R_4 , расположенными в центре мембраны, больше по сравнению с тензорезисторами R_1 и R_3 , расположенными на периферии мембраны. При этом среднеинтегральные температуры и термдеформации компенсационных резисторов R_{k1} и R_{k2} занимает промежуточное положение как по значению, так и по характеру изменения.

Метод [7] реализуется следующим образом. При нормальных климатических условиях измеряют выходные сигналы ТТДД при полностью закороченных термокомпенсационном и тензокомпенсационном резисторах и при полностью включенных этих резисторах. Затем воздействуют на датчик жидким азотом и измеряют при этом выходной сигнал при полностью закороченных термокомпенсационном и тензокомпенсационном резисторах и при полностью включенных этих резисторах. С учетом указанных значений выходных сигналов тензомоста расчетным путем получают сопротивления термокомпенсационного и тензокомпенсационного резисто-

ров, которые достигаются закорачиванием части этих резисторов перемычками.

Чем больше неравномерность температурного поля и разность ТКС тензорезисторов, тем больше потребуется ТКС термокомпенсационного резистора при его определенной максимальной среднеинтегральной температуре. Чем больше неравномерность поля температурных деформаций и разность коэффициентов тензочувствительности тензорезисторов, тем больше потребуется коэффициент тензочувствительности тензокомпенсационного резистора при его определенной максимальной среднеинтегральной температурной деформации.

Методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур с измерением температур тензорезисторов

Предлагаемое решение целесообразно при использовании микропроцессорных систем для обработки информации и невозможности измерения температур тензорезисторов с помощью терморезисторов, размещенных над тензорезисторами. В наибольшей степени преимущества решения проявляются в датчиках с токопроводящей мембраной, так как в этом случае отпадает необходимость использования двух диэлектрических слоев (для изоляции тензорезисторов от мембраны и терморезисторов от тензорезисторов). В других случаях применение решения оправдано уменьшением числа выводов с 12 до 8.

МЭМС-структура (рис. 4) содержит корпус 1, мембрану 2, тензомост 3, сформированный на мембране. Тензомост состоит из тензорезисторов 4–7. Тонкопленочные терморезисторы 8–11 совмещены с соответствующими тензорезисторами. Сопротивления терморезисторов не менее чем на два порядка больше сопротивлений тензорезисторов. Терморезисторы частично расположены между мембраной и соответствующим тензорезистором и частично вне тензорезисторов, вдоль одной из наибольшей сторо-

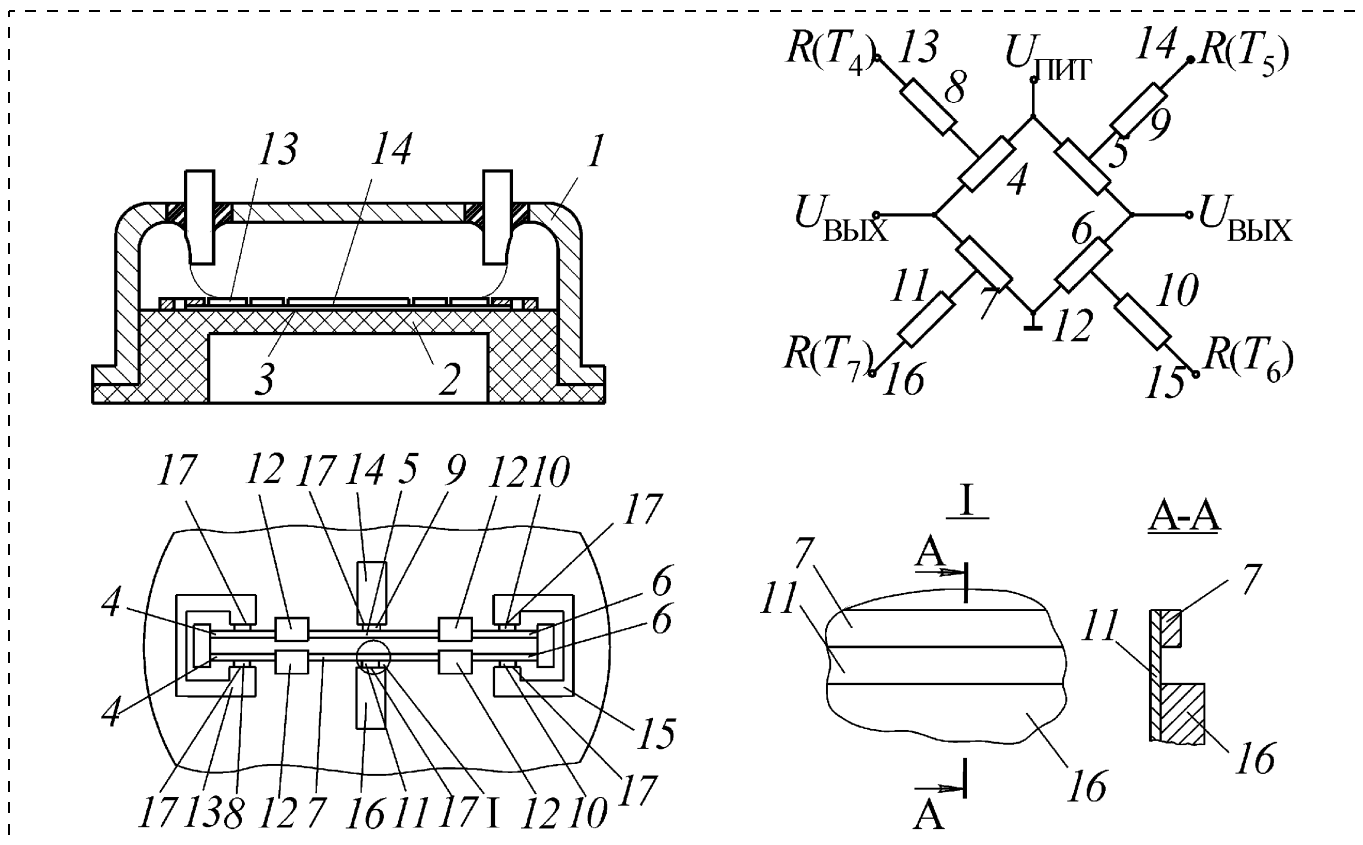


Рис. 4. Модель МЭМС-структуры ТТД с измерением температур тензорезисторов

ны соответствующих тензорезисторов, не касаясь их контактных площадок 12. Каждый терморезистор 8—11 имеет только одну контактную площадку 13—16, общим выводом терморезисторов служит одна из контактных площадок чувствительного элемента, что упрощает коммутацию элементов. Граница 17 между каждым терморезистором и его контактной площадкой выполнена параллельно наибольшей стороне соответствующего тензорезистора [8].

При воздействии нестационарной температуры сопротивления тензорезисторов изменяются в зависимости от их номинала, ТКС и местоположения. Так как терморезисторы частично расположены между мембраной и соответствующими тензорезисторами, а частично — вне соответствующих тензорезисторов вдоль одной из наибольшей стороны соответствующего тензорезистора, температура терморезистора с высокой точностью отслеживает температуру тензорезисторов вследствие малого термического сопротивления между тензорезисторами и терморезисторами.

Так как сопротивление терморезисторов существенно больше сопротивления тензорезисторов, влияние терморезисторов на тензорезисторы и тензорезисторов на терморезисторы будет незначительным. Изменение сопротивления терморезисторов от температуры совместно с выходным сигналом тен-

зомоста подается на вход микропроцессора, в котором запрограммирована индивидуальная корреляционная характеристика выходного сигнала тензомоста и сопротивлений терморезисторов.

Преимуществом решения является уменьшение влияния нестационарной температуры за счет возможности отдельного учета температуры каждого из тензорезисторов. Кроме того, преимуществом рассматриваемого решения является то, что индивидуальный учет температуры каждого тензорезистора позволяет учесть индивидуальные температурные характеристики каждого.

Недостатком перечисленных выше решений является сравнительно большая погрешность измерения давления в условиях воздействия нестационарных температур вследствие имеющегося при реальном производстве технологического разброса геометрических размеров и физических характеристик тензорезисторов: удельного поверхностного сопротивления, ТКС и т. д., приводящих к различной реакции окружных и радиальных тензорезисторов на воздействие даже одинаковых температур. Кроме того, их недостатком является также сравнительно большая погрешность измерения в условиях воздействия нестационарных температур вследствие наличия нескомпенсированной суммарной интегральной термоЭДС. Нескомпенсированная термоЭДС является результатом взаимодействия множе-

ства термоЭДС, возникающих на границах разделов тензоэлементов и перемычек вследствие несовершенства структуры и неидентичности физических характеристик тензоэлементов и перемычек.

Методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур с компенсацией технологического разброса геометрических размеров и физических характеристик тензорезисторов

Эти методы и средства реализуются в МЭМС-структуре, изображенной на рис. 5. Она содержит корпус 1; круглую мембрану 2 с периферийным основанием 3, по которому мембрана закреплена в корпусе; соединенные перемычками 4 из низкоомного материала и включенные соответственно в противоположные плечи измерительного моста окружные 5 и радиальные 6 тензорезисторы; выполненные в виде одинакового числа соединенных перемычками 4, имеющих одинаковую форму тензоэлементы 7, расположенные по окружности на периферии мембраны. Одна из перемычек, соединяющих окружные 5 и радиальные 6 тензорезисторы, имеет две контактные площадки 8 и 9, соединенные резистивной полосой 10 в виде части кольца, размещенного на минимально возможном расстоянии от тензорезисторов 5 и 6 по окружности с центром, находящемся в центре мембраны. Отдельные участки резистивной полосы 10 закорочены дополнительными перемычками 11. Выводные проводники 16 обеспечивают электрическую связь измерительного моста с гермовыводами 17 [9].

При воздействии нестационарной температуры на датчик вследствие того, что мембрана 2 круглая и закреплена с помощью периферийного основания 3, температурное поле на планарной стороне мембраны имеет осесимметричный характер. Реакция ок-

ружных и радиальных тензорезисторов на воздействие нестационарного температурного поля могла бы быть полностью идентична и компенсация негативного воздействия нестационарного температурного поля была бы полная в случае отсутствия технологического разброса геометрических размеров и физических характеристик тензорезисторов при изготовлении.

Различие реакции тензорезисторов проявляется, в отличие от сопротивлений окружных 5 и радиальных 6 тензорезисторов, в один и тот же момент времени. Причем в силу случайности распределения технологических разбросов формы и размеров превалирование сопротивлений окружных или радиальных тензорезисторов носит также случайный характер для партии датчиков, оставаясь детерминированным для каждого конкретного датчика.

Поэтому различная реакция окружных 5 и радиальных 6 тензорезисторов на воздействие температуры компенсируется выполнением одной из перемычек, соединяющих окружные и радиальные тензорезисторы, в виде двух контактных площадок 8 и 9, соединенных резистивной полосой 10 в виде части кольца, расположенного на минимальном расстоянии от тензорезисторов по окружности с центром, находящимся в центре мембраны.

Перемычка содержит две контактные площадки 8 и 9 для обеспечения возможности включения ее в плечо измерительного моста окружного 5 или радиального 6 тензорезисторов. В том случае, когда в результате технологического разброса сопротивлений окружных тензорезисторов 5 больше сопротивлений радиальных тензорезисторов 6, перемычка (резистивная полоса 10) включается в плечо радиального тензорезистора 6, для чего, например, снятие сигнала осуществляют с контактной площадки 8.

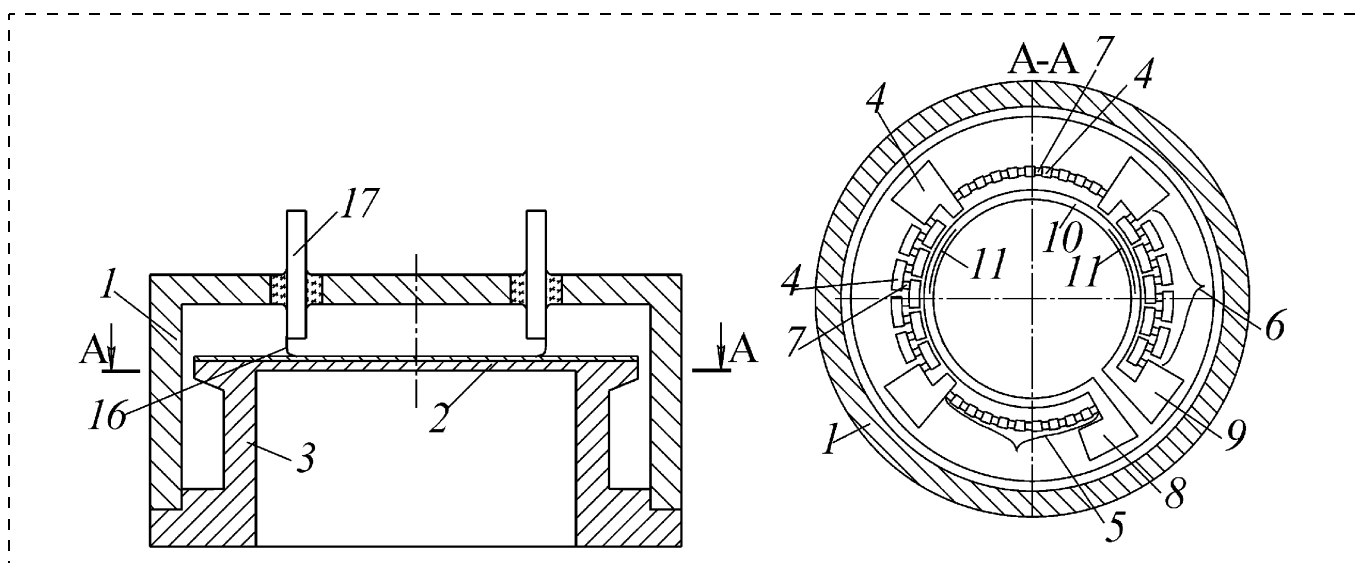


Рис. 5. Модель МЭМС-структуры с компенсацией технологического разброса геометрических размеров и физических характеристик тензорезисторов

Если в результате технологического разброса сопротивления окружных тензорезисторов 5 меньше сопротивлений радиальных тензорезисторов 6, то снятие сигнала осуществляют с контактной площадки 9. Выполнение резистивной полосы 10 в виде части кольца, расположенного на минимальном расстоянии от тензорезисторов по окружности с центром, находящемся в центре мембраны и расположенного симметрично центру мембраны, обеспечивает работу перемычки в условиях, наиболее близких к условиям работы тензорезисторов.

Расположение резистивной полосы 10 по окружности с центром, находящимся в центре мембраны, учитывает осесимметричное распределение температурного поля на поверхности мембраны. При любом другом расположении резистивной полосы 10 в ней в результате воздействия нестационарной температуры измеряемой среды возникает термоЭДС Томсона, которая исказит условия компенсации. Замыкание отдельных участков резистивной полосы 10 дополнительными перемычками 11 обеспечивает ввод в плечо окружного или радиального резистора необходимого сопротивления. Таким образом, осуществляется компенсация влияния технологического разброса геометрических размеров и физических характеристик тензорезисторов на погрешность при воздействии нестационарной температуры.

Методы и средства минимизации влияния нестационарных полей температур с использованием термоЭДС

Эти методы и средства реализуются в МЭМС-структуре, изображенной на рис. 6. В части кольца выполнен разрыв, в котором размещена дополнительная резистивная полоса 12 (расположенная не по окружности с центром, находящемся в центре

мембраны) и соединенные с частью кольца две вторые дополнительные резистивные полосы 13, расположенные по обе стороны от дополнительной резистивной полосы. Каждая из вторых дополнительных резистивных полос 13 соединена с дополнительной резистивной полосой с помощью вторых дополнительных перемычек 14.

Дополнительная резистивная полоса 12 выполнена из материала, контактная разность потенциалов которого относительно второй дополнительной перемычки 14 отличается от контактной разности потенциалов второй дополнительной резистивной полосы 13 относительно второй дополнительной перемычки 14 [9].

Вследствие того, что каждая из вторых дополнительных резистивных полос 13 соединена с дополнительной резистивной полосой 12 с помощью вторых дополнительных перемычек 14 (причем резистивная полоса 12 выполнена из материала, контактная разность потенциалов которого относительно второй дополнительной перемычки 14 отличается от контактной разности потенциалов материала второй дополнительной полосы 13 и второй дополнительной перемычки 14), при воздействии нестационарной температуры в местах соединения вторых дополнительных перемычек 14 с дополнительной резистивной полосой 12 возникают термоЭДС.

Так как дополнительная резистивная полоса 12 расположена по радиусу мембраны 2, то термоЭДС при размещении мест соединений на различном расстоянии от центра мембраны 2 будут отличаться друг от друга в связи с тем, что температура на мембране при воздействии нестационарной температуры зависит от расстояния до центра мембраны.

Вследствие того, что две вторые дополнительные резистивные полосы 13 расположены по обе стороны от дополнительной резистивной полосы 12, эти термоЭДС будут включены последовательно

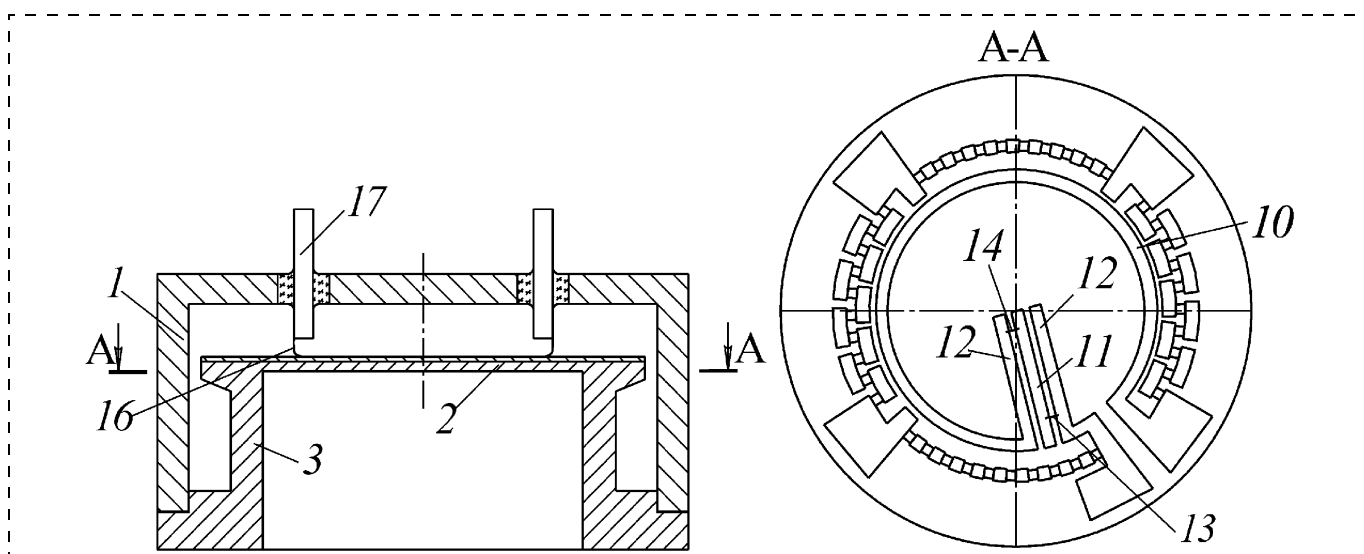


Рис. 6. Модель МЭМС-структуры с использованием термоЭДС

и встречно. Так как две вторые дополнительные полосы 13 соединены с частью кольца 10, то возникающие термоЭДС включены последовательно с частью кольца.

Таким образом, изменяя расстояние между местами соединения вторых дополнительных перемычек 14 с дополнительной резистивной полосой 12, можно подобрать необходимую результирующую термоЭДС, необходимую для сведения к минимуму нескомпенсированной термоЭДС.

Такое решение позволяет скомпенсировать технологический разброс геометрических и физических характеристик тензорезисторов, являющихся причинами возникновения разной реакции окружных и радиальных тензорезисторов на воздействие нестационарных температур, и технологический разброс, вызывающий несовершенство структуры и неидентичность физических характеристик тензоэлементов и перемычек, приводящих к появлению нескомпенсированной термоЭДС при воздействии нестационарных температур.

Предложенные методы и средства компенсации влияния нестационарных температур при их системном применении совместно с другими конструктивно-технологическими решениями позволяют существенно, примерно на порядок, уменьшить погрешность ТТДД при их эксплуатации в условиях воздействия нестационарных температур [10].

Список литературы

1. Исаченко В. П., Осипова В. А., Сукомел А. С. Теплопередача. М.: Энергоиздат, 1981. 416 с.
2. Датчики теплофизических и механических параметров. Справочник в 3-х томах. Т. 1 (кн. 1) / Под общ. ред. Ю. Н. Коптева; Под ред. Е. Е. Богдатыева, А. В. Гориша, Я. В. Малкова. М.: ИПРЖ, 1998. 458 с.
3. Проектирование датчиков для измерения механических величин / Под ред. Е. П. Осадчего. М.: Машиностроение, 1979. 480 с.
4. Тихоненков В. А. Температурные погрешности датчиков механических величин при воздействии нестационарных тепловых полей. Ульяновск: УлГУ, 1998. 152 с.
5. Тихоненков В. А., Тихонов А. И. Теория, расчет и основы проектирования датчиков механических величин. Ульяновск: УлГТУ, 2000. 452 с.
6. Белозубов Е. М. Патент РФ № 2031355, 6G01B 7/16. Способ термокомпенсации тензомоста. Оpubл. 20.03.95. Бюл. № 8.
7. Белозубов Е. М., Михайлов П. Г. Патент РФ 2028584 6G01L 9/04. Тонкопленочный датчик давления и способ его настройки. Оpubл. 09.02.95. Бюл. № 4.
8. Белозубов Е. М. Патент РФ № 1569613, 6G01L 9/04. Датчик давления. Оpubл. 07.06.90. Бюл. № 21.
9. Мокров Е. А., Белозубов Е. М. Патент РФ № 2261420. Тонкопленочный датчик давления. Оpubл. 27.09.05. Бюл. № 27.
10. Мокров Е. А., Белозубов Е. М. Тонкопленочные тензорезисторные датчики давления нового поколения ДАВ084, ДАВ085, Вт206.1А, Вт206Б, Вт212А1, ДАВ092 для авиационной и ракетной техники // Тез. докл. 4-й междунар. конф. "Авиация и космонавтика — 2005". 10—13 октября 2005 г. Москва. М.: Изд-во МАИ, 2005. С. 100.

УДК 621.315

С. М. Афонин, канд. техн. наук,
Московский государственный институт
электронной техники

ИССЛЕДОВАНИЕ И РАСЧЕТ СТАТИЧЕСКИХ И ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЬЕЗОАКТЮАТОРА НАНО- И МИКРОПЕРЕМЕЩЕНИЙ

Рассчитаны статические и динамические характеристики пьезоактюатора нано- и микроперемещений для оборудования нанотехнологии и микроэлектроники, построена параметрическая структурная схема пьезоактюатора и определено влияние физических и геометрических параметров пьезоактюатора на его статические и динамические характеристики.

Введение

Пьезоактюатор микроперемещений работает на основе обратного пьезоэффекта, в котором перемещение достигается за счет деформации пьезоэлемента при приложении внешнего электрического на-

пряжения. Пьезоактюаторы для приводов нано- и микроперемещений имеют диапазон перемещения от нескольких нанометров до десятков микрометров, чувствительность менее 10 нм/В, нагрузочную способность до 1000 Н, мощность на выходном валу до 100 Вт и полосу пропускания порядка нескольких десятков герц. Применение пьезоактюатора (пьезопреобразователя, пьезодвигателя) решает задачи точного совмещения в микроэлектронике и нанотехнологии, компенсации температурных и гравитационных деформаций, а также атмосферной турбулентности путем коррекции волнового фронта [1—4]. Исследование статических и динамических характеристик пьезоактюатора нано- и микроперемещений как объекта управления необходимо для расчета систем управления пьезоприводами нано- и микроперемещений.

Так как предельные разрушающие механические напряжения в пьезокерамике на сжатие в среднем в 10 раз по значению превышают предельные разрушающие напряжения на растяжение, то из соображений прочности целесообразно осуществлять предварительное поджатие пьезоэлемента с помощью пружины или мембраны. Усилие предварительного поджатия должно превышать максимальную

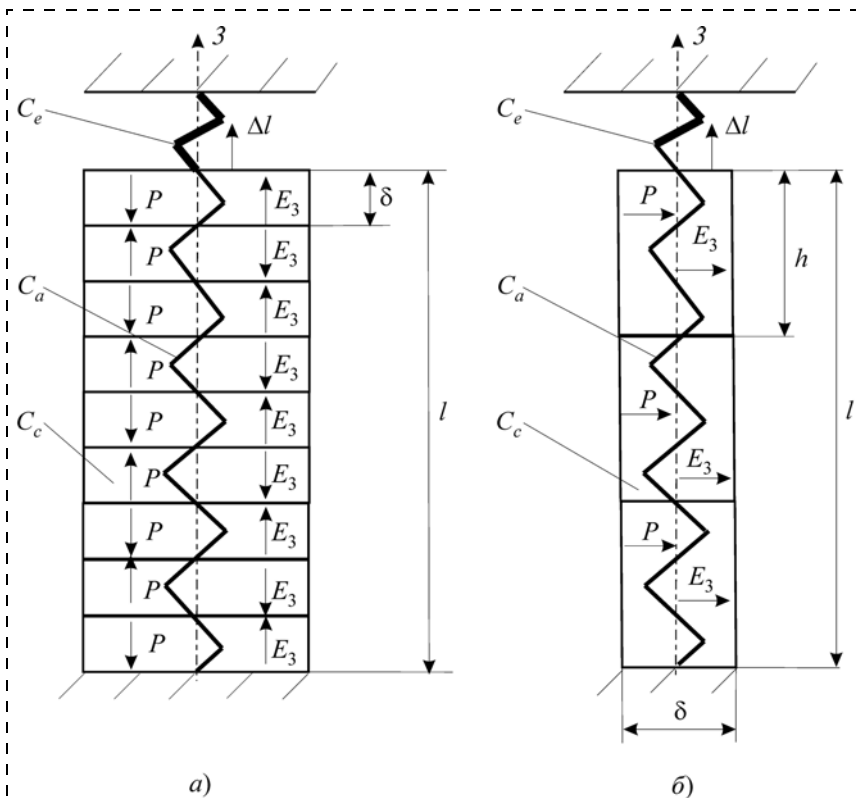


Рис. 1. Кинематическая схема пьезоактюатора нано- и микроперемещений: а — при продольном пьезоэффекте; б — при поперечном пьезоэффекте

растягивающую нагрузку, чем обеспечивается гарантированное рабочее сжатие пьезоэлемента. Увеличение диапазона перемещения достигается при использовании составного пьезоактюатора, изображенного на рис. 1, а, б, при продольном и при поперечном пьезоэффекте, где E_3 — напряженность электрического поля в пьезоактюаторе по оси 3; Δl — перемещение пьезоактюатора; P — вектор поляризации; C_a — жесткость армирующего элемента; C_c — жесткость составного пьезоактюатора; C_e — жесткость нагрузки; δ — толщина пьезоактюатора.

Пьезоактюатор собирается следующим образом: предварительно сжатый для выбора зазоров составной пьезопреобразователь стягивается упругим элементом в виде шпильки или мембраны (рис. 1). Составной (блочный) пьезоактюатор выполняется в различных конструктивных исполнениях — спеченный, склеенный, составленный из пьезоэлементов пьезопреобразователь или многослойный пьезоэлемент.

Использование точных электромеханических приводов, работающих на основе электромагнитоупругости (пьезоэлектрического, пьезомагнитного, электрострикционного, магнитострикционного эффектов), перспективно для оборудования нанотехнологии, нанобиологии, энергетики, микроэлектроники и адаптивной оптики [2, 3]. Точные электромеханические приводы работают в пределах рабочих нагрузок,

обеспечивающих упругие деформации исполнительного устройства.

Пьезоактюаторы имеют высокие значения пьезоэлектрических модулей (пьезомодулей), поэтому широко применяются для наноперемещений. Они работают на основе обратного пьезоэффекта, в котором результат перемещения достигается после приложения электрического напряжения за счет деформации пьезопреобразователя в диапазоне от единиц нанометров до единиц микрометров с погрешностью в пределах десятых долей нанометров [1–4]. Для увеличения диапазона перемещения пьезопривода до десятков микрометров используется составной пьезоактюатор.

Решение волнового уравнения с учетом соответствующего уравнения пьезоэффекта, граничных условий на двух нагруженных рабочих поверхностях пьезоактюатора позволяет построить структурно-параметрическую модель пьезоактюатора, на основе которой могут быть получены его передаточные функции, определены статические и динамические характеристики пьезоактюатора.

1. Статические характеристики пьезоактюатора

Основным параметром внешней нагрузки пьезоактюатора является жесткость, т. е. отношение силы упругой реакции нагрузки к значению деформации нагрузки. В зависимости от жесткости нагрузки выбираются конструктивные параметры пьезоактюатора.

После армирования при внешней упругой нагрузке перемещение пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте уменьшается, что получаем из выражения для продольного пьезоэффекта [5]:

$$S_3 = d_{33}E_3 + s_{33}^E T_3, \quad (1)$$

где S_3 — относительная деформация пьезоактюатора по оси 3 (см. рис. 1); d_{33} — пьезомодуль; E_3 — напряженность электрического поля в пьезоактюаторе по оси 3; s_{33}^E — упругая податливость при $E = \text{const}$ и управлении от источника напряжения; T_3 — механическое напряжение в пьезоактюаторе по оси 3. Вектор поляризации P направлен по оси 3 (см. рис. 1).

Для пьезоактюатора статические характеристики вида $S(T)$ или $\Delta l(F)$ будем называть механическими характеристиками (рис. 2) при продольном и поперечном пьезоэффекте, где Δl — перемещение; F — внешняя сила, а характеристики вида $S(E)$ или $\Delta l(U)$ — регулировочными характеристиками пьезо-

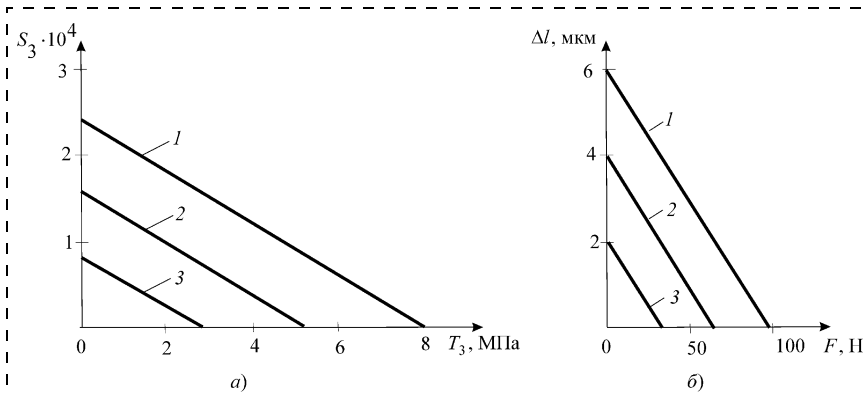


Рис. 2. Механическая характеристика пьезоактюатора:
а — при продольном пьезоэффекте; б — при поперечном пьезоэффекте

актюатора (рис. 3), где U — напряжение на электродах пьезоактюатора.

Измерения проводились на прессе марки УММ-5 в диапазоне рабочих нагрузок при механических напряжениях до 150 МПа [3]. Отклонение экспериментальных характеристик от расчетных не превышало 10 %.

Экспериментальные механические характеристики приведены на рис. 2, а для пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте из пьезокерамики ЦТС-19 с пьезомодулем $d_{33} = 4 \cdot 10^{-10}$ м/В и упругой податливостью $s_{33}^E = 3 \cdot 10^{-11}$ м²/Н, спеченного из пьезопластин диаметром $D = 15$ мм и толщиной $\delta = 0,6$ мм, $n = 25$ при $E_3 = 600, 400, 200$ кВ/м, соответствующие зависимости обозначены 1, 2, 3.

Из выражения (1) при $E = \text{const}$ получим уравнение статической механической характеристики пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте и управлении по напряжению:

$$\Delta l = d_{33}nU - s_{33}^E Fl/S_0, \quad (2)$$

где Δl — перемещение пьезоактюатора; $l = n\delta$ — длина составного пьезоактюатора; n — число пьезопластин в составном пьезоактюаторе; δ — толщина пьезопластины.

В статике при продольном пьезоэффекте и управлении по напряжению при $F = 0$ максимальное перемещение составного пьезоактюатора Δl_{max} имеет вид $\Delta l_{\text{max}} = d_{33}nU_m$, где U_m — максимальное напряжение на электродах пьезоактюатора.

Определим из выражения (2) при $\Delta l = 0$ максимальное рабочее усилие F_{max} в виде

$$F_{\text{max}} = d_{33}nU_m S_0 / (s_{33}^E l) = d_{33}S_0 U_m / (s_{33}^E \delta) = d_{33}S_0 E_3 / s_{33}^E,$$

где S_0 — площадь поперечного сечения пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте.

Соответственно при продольном пьезоэффекте и управлении по напряжению получаем из уравне-

ния обратного пьезоэффекта (1) максимальное механическое напряжение по оси 3 в виде

$$T_{3\text{max}} = -d_{33}E_3 / s_{33}^E.$$

Аналогично для пьезоактюатора при поперечном пьезоэффекте (см. рис. 1, б) из уравнения обратного пьезоэффекта

$$S_1 = d_{31}E_3 + s_{11}^E T_1 \quad (3)$$

получаем при $F = 0$ максимальное перемещение Δl_{max} в виде выражения $\Delta l_{\text{max}} = d_{31}(nh/\delta)U_m$, где $l = nh$ — длина составного пьезоактюатора при поперечном пьезоэффекте; h — высота пьезопластины, и при $\Delta l = 0$ максимальное рабочее усилие F_{max} в виде

$$F_{\text{max}} = d_{31}(nh/\delta)U_m S_0 / (s_{11}^E l) = d_{31}S_0 U_m / (s_{11}^E \delta) = d_{31}S_0 E_3 / s_{11}^E,$$

где S_0 — площадь поперечного сечения пьезоактюатора при поперечном пьезоэффекте.

Механические характеристики (см. рис. 2, б) пьезоактюатора при поперечном пьезоэффекте получены для пьезопластины из пьезокерамики ЦТС-19 с пьезомодулем $d_{31} = 2 \cdot 10^{-10}$ м/В, высотой $h = 30$ мм, шириной $b = 10$ мм, толщиной $\delta = 0,6$ мм, упругой податливостью $s_{33}^E = 1,25 \cdot 10^{-11}$ м²/Н при $U = 200, 400, 600$ В и соответствующие зависимости пронумерованы 1, 2, 3.

Соответственно получаем при $U = 600$ В максимальное перемещение $\Delta l_{\text{max}} = 6$ мкм и максимальное усилие $F_{\text{max}} = 96$ Н (см. рис. 2, б).

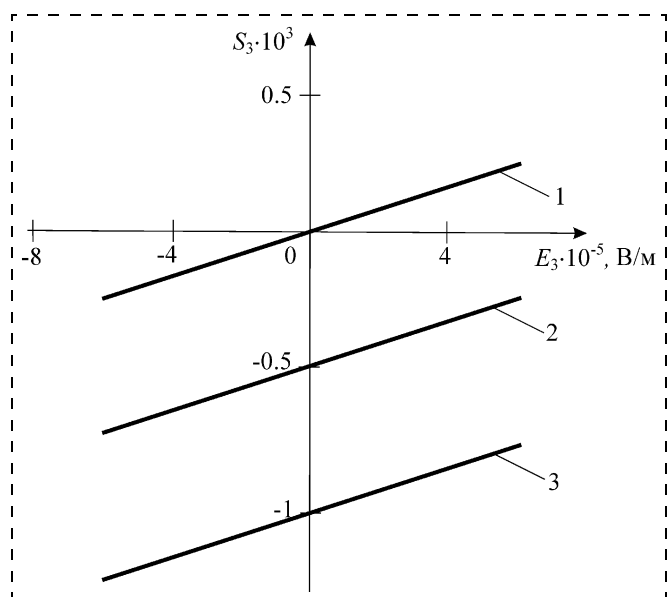


Рис. 3. Регулировочная характеристика пьезоактюатора

Уравнение (1) при $T = \text{const}$ позволяет рассчитать регулировочную характеристику (см. рис. 3) пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте, выполненного в виде составного пьезоактюатора с пьезомодулем $d_{33} = 4 \cdot 10^{-10}$ м/В и упругой податливостью $s_{33}^E = 7,5 \cdot 10^{-11}$ м²/Н, составленного из восьми пьезопакетов П-3, при механических напряжениях $T_3 = 0; 6,7; 13,3$ МПа, соответствующие зависимости обозначены 1, 2, 3.

Из полученных уравнений механической и регулировочной характеристик пьезоактюатора следует, что наряду с большим пьезомодулем одним из важнейших физических параметров пьезоактюатора является упругая податливость. Для увеличения жесткости механической характеристики выбираем конструктивное исполнение с минимальной упругой податливостью составного пьезоактюатора.

Рассмотрим статические характеристики составного пьезоактюатора или пьезопакета, армированного упругим элементом, при управлении по напряжению. Из уравнения обратного пьезоэффекта (1) получаем относительное перемещение

$$\Delta l/l = d_{33}U/\delta - s_{33}^E F/S_0.$$

Соответственно перемещение (рис. 4) составного пьезоактюатора

$$\Delta l = d_{33}nU - F/C_c; F = F_0 + C_a \Delta l + C_e \Delta l; F_0 = \sigma_{a0}S_0,$$

где $C_c = S_0/(s_{33}^E l)$ — жесткость составного пьезоактюатора с управлением по напряжению при продольном пьезоэффекте; F — внешняя сила; F_0 — сила предварительного начального поджатия упругим элементом; σ_{a0} — механическое напряжение первоначального армирования в пьезоактюаторе; C_a — жесткость армирующего элемента, причем практи-

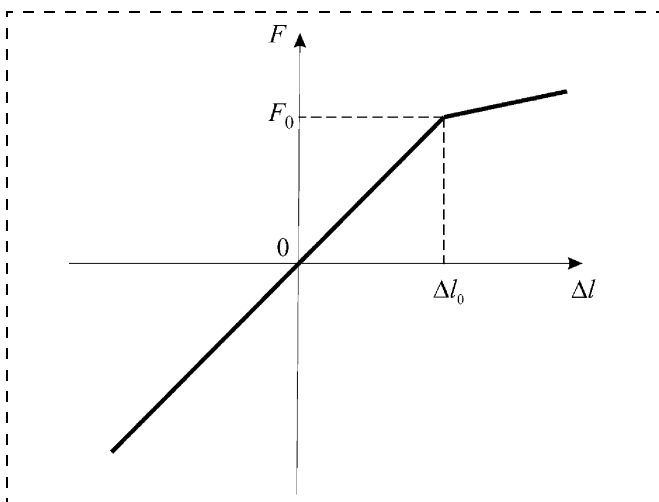


Рис. 4. Статическая характеристика составного пьезоактюатора, армированного упругим элементом

чески выбираем $C_a = 0,1 C_c$; C_e — жесткость нагрузки [6].

Откуда имеем

$$\Delta l/[1 + (C_a + C_e)/C_c] = d_{33}nU - F_0/C_c.$$

Соответственно, получим выражение для перемещения армированного пьезоактюатора (рис. 4) при продольном пьезоэффекте и упругой нагрузке

$$\Delta l = \frac{d_{33}nU_m}{1 + (C_a + C_e)/C_c} - \frac{\sigma_{a0}ls_{33}^E}{1 + (C_a + C_e)/C_c} = \frac{\Delta l_{\max}}{1 + (C_a + C_e)/C_c} = \Delta l_0; \quad (4)$$

$$\Delta l_{\max} = d_{33}nU_m; \Delta l_0 = \frac{\sigma_{a0}ls_{33}^E}{1 + (C_a + C_e)/C_c},$$

где Δl_0 — начальное перемещение торца составного пьезоактюатора.

Аналогично получим выражение для перемещения армированного пьезоактюатора (рис. 4) при поперечном пьезоэффекте и упругой нагрузке

$$\Delta l = \frac{d_{31}(nh/\delta)U_m}{1 + (C_a + C_e)/C_c} - \frac{\sigma_{a0}ls_{11}^E}{1 + (C_a + C_e)/C_c} = \frac{\Delta l_{\max}}{1 + (C_a + C_e)/C_c} - \Delta l_0, \quad (5)$$

$$\Delta l_{\max} = d_{31}(nh/\delta)U_m, \Delta l_0 = \frac{\sigma_{a0}ls_{11}^E}{1 + (C_a + C_e)/C_c},$$

где $C_c = S_0/(s_{11}^E l)$ — жесткость составного пьезоактюатора с управлением по напряжению при поперечном пьезоэффекте; S_0 — площадь поперечного сечения пьезоактюатора при поперечном пьезоэффекте.

Торец пьезоактюатора в зависимости от первоначального армирования получает начальное перемещение, не зависящее от подаваемого на двигатель электрического напряжения. Причем торец пьезоактюатора после первоначального армирования смещается в положение, которое в рабочем режиме является исходным положением.

Из выражений (4, 5) перемещение армированного пьезоактюатора при упругой нагрузке (см. рис. 4) после начальной юстировки записываем в виде

$$\Delta l = \frac{\Delta l_{\max}}{1 + (C_a + C_e)/C_c}, \quad (6)$$

где $C_c = S_0/(s_{33(11)}^E l)$ — жесткость составного пьезоактюатора с управлением по напряжению при продольном или поперечном пьезоэффекте; $s_{33(11)}^E$ — упругая податливость при $E = \text{const}$ и продольном или поперечном пьезоэффекте.

При $C_e = 0$ получаем перемещение (см. рис. 4) армированного пьезоактюатора

$$\Delta l = \frac{\Delta l_{\max}}{1 + C_a/C_c}.$$

Следовательно, при использовании армирующего элемента в виде шпильки, пружины, мембраны жесткостью $C_a = 0,1 C_c$ имеем $\Delta l = (1/1,1) \Delta l_{\max} = 0,91 \Delta l_{\max}$.

2. Динамические характеристики пьезоактюатора

При промышленном применении пьезоактюатора имеем упругоинерционную нагрузку в виде упругого элемента (пружины, мембраны) и приведенной инерционной массы элемента нагрузки (координатного стола, сканирующего элемента).

Для расчета динамики пьезоактюатора используется волновое уравнение [2—5], описывающее распространение волны в длинной линии с затуханием без искажений:

$$\frac{1}{(c^E)^2} \frac{\partial^2 \xi(x, t)}{\partial t^2} + \frac{2\alpha}{c^E} \frac{\partial \xi(x, t)}{\partial t} + \alpha^2 \xi(x, t) = \frac{\partial^2 \xi(x, t)}{\partial x^2}, \quad (7)$$

где $\xi(x, t)$ — смещение сечения пьезоактюатора; x — координата; t — время; c^E — скорость звука в пьезоактюаторе при $E = \text{const}$; α — коэффициент затухания.

При одном закреплённом торце пьезоактюатора, например, при $x = 0$ и упругоинерционной нагрузке на пьезоактюатор при $x = l$ имеем уравнение сил на втором торце пьезоактюатора

$$T_3(t) S_0|_{x=l} = -M \frac{\partial^2 \xi(t)}{\partial t^2} - (C_a + C_e) \xi(t),$$

где M — масса нагрузки.

Соответственно имеем преобразование Лапласа

$$\Xi(x, p) = L\{\xi(x, t)\} = \int_0^\infty \xi(x, t) e^{-pt} dt,$$

где p — оператор Лапласа.

Из уравнения обратного пьезоэффекта (1) с учетом действующих сил на торце пьезоактюатора получаем

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\Xi(x, p)}{dx} \right|_{x=l} &= \\ &= d_{33} E_3(p) - \frac{s_{33}^E M p^2 \Xi(p)}{S_0} - \frac{s_{33}^E (C_a + C_e) \Xi(p)}{S_0}, \end{aligned}$$

где $\Xi(p)$, $\Xi(x, p)$ — преобразования Лапласа перемещения торца и перемещения сечения пьезоактюатора при нулевых начальных условиях; $E_3(p)$ — преобразование Лапласа напряженности электрического поля по оси 3 при нулевых начальных условиях.

Если один торце пьезоактюатора жестко закреплён при $x = 0$, то с учетом уравнения (7) получаем выражения

$$\Xi(x, p) = \frac{\Xi(p) \text{sh}(x\gamma)}{\text{sh}(l\gamma)},$$

$$\left. \frac{d\Xi(x, p)}{dx} \right|_{x=l} = \frac{\Xi(p) \gamma}{\text{th}(l\gamma)}, \quad \gamma = \frac{p}{c^E} + \alpha.$$

Соответственно получаем выражение для структурно-параметрической модели пьезоактюатора, армированного упругим элементом и закреплённого одним торцом, при продольном пьезоэффекте и упругоинерционной нагрузке:

$$\begin{aligned} \frac{\Xi(p) \gamma}{\text{th}(l\gamma)} + \frac{\Xi(p) s_{33}^E M p^2}{S_0} + \\ + \frac{\Xi(p) s_{33}^E (C_a + C_e)}{S_0} = d_{33} E_3. \end{aligned} \quad (8)$$

Выражению (8) соответствуют параметрическая структурная схема пьезоактюатора, приведенная на рис. 5, и передаточная функция пьезоактюатора в виде

$$W(p) = \frac{\Xi(p)}{E_3(p)} = \frac{d_{33}}{\frac{s_{33}^E M p^2}{S_0} + \frac{\gamma}{\text{th}(l\gamma)} + \frac{s_{33}^E (C_a + C_e)}{S_0}}.$$

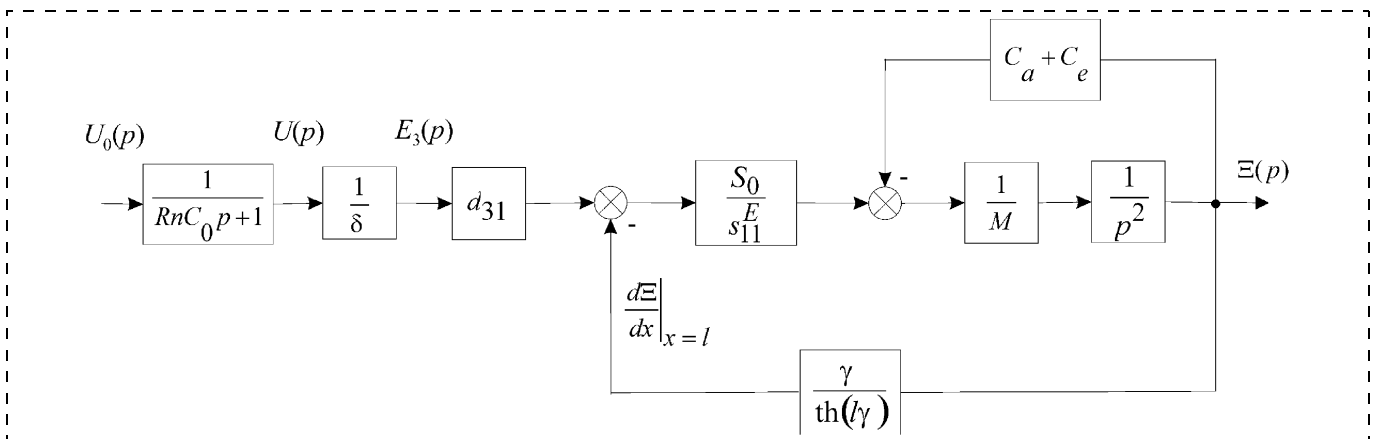


Рис. 5. Параметрическая структурная схема пьезоактюатора, армированного упругим элементом и закреплённого одним торцом, при поперечном пьезоэффекте и упругоинерционной нагрузке

С учетом обозначения $C_c = \frac{S_0}{s_{33}l} = \frac{m(c^E)^2}{l^2}$ — же-

сткость пьезоактюатора при продольном пьезоэф-
фекте, где m — масса пьезоактюатора, имеем пере-
даточную функцию пьезоактюатора, закрепленного
одним торцом, при продольном пьезоэффе-
кте и упругоинерционной нагрузке как электромеха-
нической системы с распределенными параметра-
ми в виде

$$W(p) = \frac{\Xi(p)}{U_0(p)} = \frac{nd_{33}}{(RnC_0p + 1) \left[\frac{Mp^2}{C_c} + l\gamma \operatorname{cth}(l\gamma) + \frac{(C_a + C_e)}{C_c} \right]}, \quad (9)$$

где $U_0(p)$ — преобразование Лапласа напряжения ис-
точника питания; R — сопротивление согласующих
цепей; C_0 — емкость пьезопластины в составном
пьезоактюаторе.

Следовательно, получаем при $R = 0$ частотную
передаточную функцию пьезоактюатора при про-
дольном пьезоэффе-
кте в виде

$$W(j\omega) = \frac{\Xi(j\omega)}{E_3(j\omega)} = \frac{d_{33}l}{\frac{M(j\omega)^2}{C_c} + \frac{j\omega l}{c^E} \operatorname{cth}\left(\frac{j\omega l}{c^E}\right) + \frac{(C_a + C_e)}{C_c} + \frac{(C_a + C_e)}{-cC}}, \quad (10)$$

где ω — круговая частота, j — мнимая единица.

Аналогично получаем частотную передаточную
функцию пьезоактюатора при поперечном пьезоэф-
фекте в виде

$$W(j\omega) = \frac{\Xi(j\omega)}{E_3(j\omega)} = \frac{d_{31}l}{\frac{M(j\omega)^2}{C_c} + \frac{j\omega l}{c^E} \operatorname{cth}\left(\frac{j\omega l}{c^E}\right) + \frac{C_a + C_e}{C_c}}, \quad (11)$$

где $C_c = \frac{S_0}{s_{11}l} = \frac{m(c^E)^2}{l^2}$ — жесткость пьезоактюатора

при поперечном пьезоэффе-
кте.

Найдем резонансную частоту пьезопреобразова-
теля при $\alpha = 0$. Приравнивая знаменатель выраже-
ний (10) и (11) нулю, получаем характеристическое
частотное уравнение в виде

$$-\frac{M\omega^2}{C_c} + \frac{j\omega l}{c^E j \operatorname{tg}\left(\frac{\omega l}{c^E}\right)} + \frac{C_a + C_e}{C_c} = 0.$$

После преобразований имеем уравнение

$$\frac{\omega l}{c^E} \operatorname{ctg}\left(\frac{\omega l}{c^E}\right) = \frac{M\omega^2}{C_c} - \frac{C_a + C_e}{C_c}. \quad (12)$$

Введем следующие обозначения: $k = \frac{\omega}{c^E}$ — час-

тотный коэффициент; $a = \frac{C_a + C_e}{C_c}$ — приведенная

суммарная жесткость упругого элемента нагрузки (же-
сткость элемента армирования и упругой нагрузки)

к жесткости пьезоактюатора; $b = \frac{M}{m} = \frac{M(c^E)^2}{C_c l^2}$ —

приведенная масса нагрузки к массе пьезоактюато-
ра. С учетом введенных обозначений получаем ха-
рактеристическое уравнение

$$\operatorname{ctg}kl = -\frac{a}{kl} + bkl. \quad (13)$$

При упругой нагрузке и $M = 0$ получаем $b = 0$
и характеристическое уравнение вида

$$\operatorname{ctg}kl = -\frac{a}{kl}. \quad (14)$$

При $a = 0,2$ имеем первые три корня уравнения
 $k_1l = 1,69$; $k_2l = 4,76$; $k_3l = 7,88$. Решение уравне-
ния (14) приведено на рис. 6, а. При наличии упру-
гого элемента резонансная частота пьезоактюатора
возрастает. Соответственно на рис. 6 обозначения
функций $y_1 = \operatorname{ctg}kl$, $y_2 = -\frac{a}{kl}$, $y_3 = bkl$, $y_4 = -\frac{a}{kl} + bkl$.

При инерционной нагрузке и $C_a = C_e = 0$ полу-
чаем $a = 0$ и характеристическое уравнение следую-
щего вида:

$$\operatorname{ctg}kl = bkl. \quad (15)$$

Соответственно, при $b = 0,5$ получаем корни
уравнения $k_1l = 1,08$; $k_2l = 3,64$; $k_3l = 6,58$. Решение
уравнения (15) приведено на рис. 6, б. При наличии
инерционной нагрузки резонансная частота умень-
шается.

Изменение резонансных частот при упругоинер-
ционной нагрузке с параметрами $a = 0,2$ и $b = 0,5$
приведено на рис. 6, в.

При ненагруженном пьезоактюаторе с одним
свободным торцом $C_a = C_e = 0$ и $M = 0$ получаем
 $a = 0$ и $b = 0$ и характеристическое уравнение

$$\operatorname{ctg}kl = 0, \quad (16)$$

собственные значения которого

$$k_i l = \frac{\pi(2i-1)}{2},$$

где индекс $i = 1, 2, \dots$

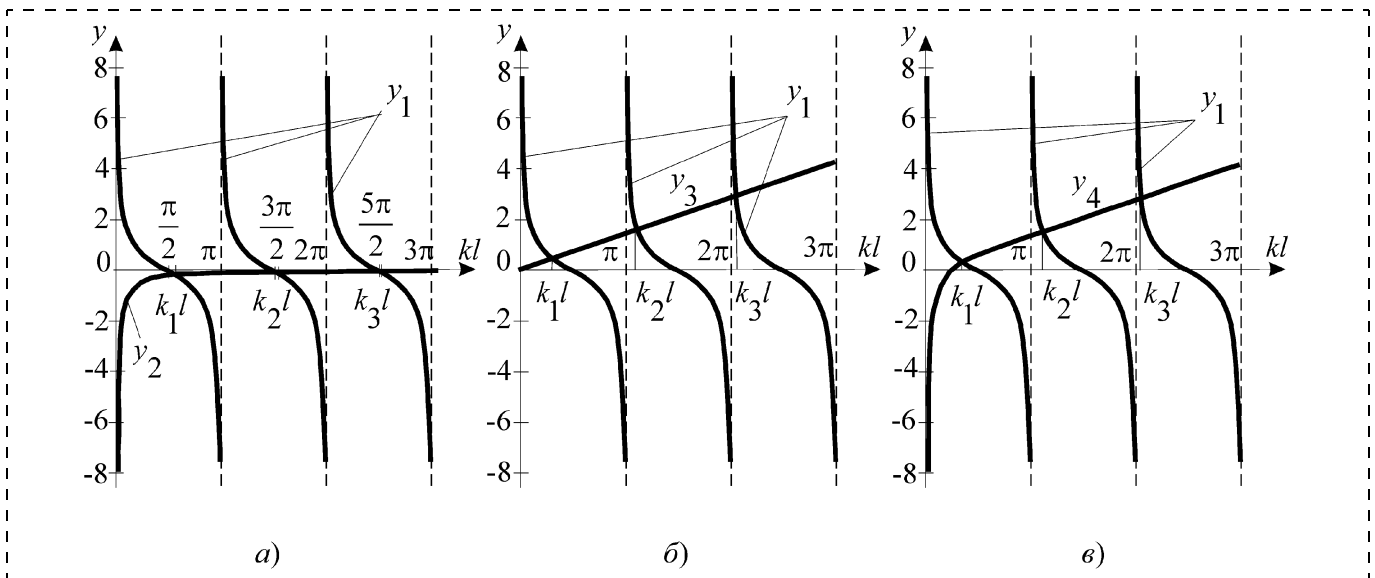


Рис. 6. Резонансные частоты пьезоактюатора:

a — при упругой нагрузке; *б* — при инерционной нагрузке; *е* — при упругоинерционной нагрузке, соответственно функции

$$y_1 = \operatorname{ctg} kl, y_2 = -\frac{a}{kl}, y_3 = bkl, y_4 = -\frac{a}{kl} + bkl$$

Соответственно, имеем первые три корня характеристического уравнения (16):

$$k_1 l = \pi/2 = 1,57; k_2 l = 3\pi/2 = 4,71; \\ k_3 l = 5\pi/2 = 7,85.$$

Решение уравнения (16) приведено на рис. 6. Первая резонансная частота f_1 пьезоактюатора с одним свободным торцом имеет вид

$$f_1 = c^E/(4l).$$

Например, при $c^E = 3 \cdot 10^3$ м/с; $l = 40$ мм имеем $f_1 = 18,75$ кГц.

Используя аппроксимацию гиперболического котангенса двумя членами степенного ряда в (8), получаем следующее выражение для передаточной функции пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте для упругоинерционной нагрузки при $M \gg m$, где M и m — масса нагрузки и пьезоактюатора, как электромеханической системы с сосредоточенными параметрами [3—7] в виде колебательного звена

$$W(p) = \frac{\Xi(p)}{U(p)} = \\ = \frac{d_{33}n}{[1 + (C_a + C_e)/C_c](T_t^2 p^2 + 2T_t \xi_t p + 1)}; \quad (17) \\ T_t = \sqrt{M/(C_a + C_e + C_c)}; \\ \xi_t = \alpha l^2 C_c / [3c^E \sqrt{M(C_a + C_e + C_c)}],$$

где $\Xi(p)$, $U(p)$ — преобразования Лапласа перемещения торца пьезоактюатора и напряжения на обкладках

пьезоактюатора при нулевых начальных условиях; T_t — постоянная времени колебательного звена для пьезоактюатора; ξ_t — коэффициент затухания колебательного звена.

Соответственно, динамическая переходная характеристика пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте для упругоинерционной нагрузки при подаче на вход пьезоактюатора ступенчатого напряжения $U_m 1(t)$ имеет вид

$$\xi(t) = \xi_m \left[1 - \frac{e^{-\frac{\xi_t t}{T_t}} \sin(\omega_t t + \varphi_t)}{\sqrt{1 - \xi_t^2}} \right], \quad (18) \\ \xi_m = \frac{d_{33}n U_m}{1 + (C_a + C_e)/C_c}, \quad \omega_t = \sqrt{1 - \xi_t^2} / T_t, \\ \varphi_t = \arctg(\sqrt{1 - \xi_t^2} / \xi_t),$$

где ξ_m — установившееся значение перемещения пьезоактюатора.

Для пьезоактюатора с передаточной функцией (17) при продольном пьезоэффекте из пьезокерамики марки ЦТС-19 при упругоинерционной нагрузке и ступенчатом входном напряжении с амплитудой $U_m = 150$ В получаем $\xi_m = 3$ мкм, $\xi_t = 0,1$, $T_t = 0,9$ мс и переходную характеристику, приведенную на рис. 7.

Экспериментальные и расчетные статические и динамические характеристики пьезоактюаторов совпадают с погрешностью 10 %.

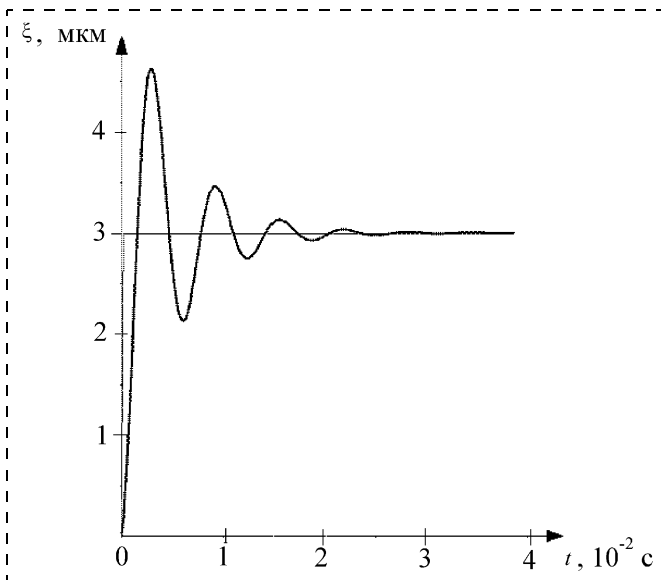


Рис. 7. Динамическая характеристика пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте для упругоинерционной нагрузки при $M \gg m$

Аналогично при поперечном пьезоэффекте находим передаточную функцию пьезоактюатора в виде

$$W(p) = \frac{\Xi(p)}{E_3(p)} = \frac{d_{31}l}{\frac{M_2 p^2}{C_c} + l\gamma \operatorname{cth}(l\gamma) + \frac{(C_a + C_e)}{C_c}}. \quad (19)$$

Из (19) получаем выражение передаточной функции пьезоактюатора при поперечном пьезоэффекте для упругоинерционной нагрузки при $M \gg m$ как электромеханической системы с сосредоточенными параметрами в виде колебательного звена

$$W(p) = \frac{\Xi(p)}{U(p)} = \frac{d_{31}(nh/\delta)}{[1 + (C_a + C_e)/C_c](T_t^2 p^2 + 2T_t \xi_t p + 1)} \quad (20)$$

соответственно имеем в выражении (18) для переходной характеристики установившееся значение перемещения пьезоактюатора

$$\xi_m = \frac{d_{31}(nh/\delta)U_m}{[1 + (C_a + C_e)/C_c]}.$$

Следовательно, в зависимости от нагрузки пьезоактюатор описывается как электромеханическая система с распределенными или сосредоточенными параметрами.

Заключение

Полученные выражения отражают как статику, так и динамику пьезоактюатора, позволяют выбирать параметры пьезоактюатора в зависимости от внешней нагрузки. Решение волнового уравнения позволяет описать динамические и статические свойства пьезоактюатора с учетом физических параметров, внешней нагрузки и электрического сопротивления согласующих цепей при работе в составе электромеханической системы нано- и микроперемещений.

Список литературы

1. Акопьян В. А., Панич А. Е., Соловьев А. Н., Шевцов С. Н. Некоторые физико-механические проблемы пьезоэлектрических актюаторов и области их применения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 10. С. 35–40.
2. Афонин С. М. Пьезопреобразователи для приводов микроперемещений // Приборы и системы управления. 1998. № 2. С. 41–42.
3. Афонин С. М. Обобщенная структурно-параметрическая модель электромагнитоупругого преобразователя для систем управления нано- и микроперемещениями. I. Решение волнового уравнения для задач управления электромагнитоупругим преобразователем // Изв. РАН. ТиСУ. 2005. № 3. С. 75–81.
4. Афонин С. М. Обобщенная структурно-параметрическая модель электромагнитоупругого преобразователя для систем управления нано- и микроперемещениями. II. Об обобщенной структурно-параметрической модели составного электромагнитоупругого преобразователя // Изв. РАН. ТиСУ. 2005. № 4. С. 108–111.
5. Физическая акустика. Т. 1. Часть А. Методы и приборы ультразвуковых исследований / Под ред. У. Мэзона. М.: Мир, 1966. 592 с.
6. Вардан В., Виной К., Джозе К. ВЧ МЭМС и их применение. М.: Техносфера, 2004. 528 с.
7. Бесекерский В. А., Попов Е. П. Теория систем автоматического регулирования. М.: Профессия, 2004. 752 с.

М. В. Астахов, д-р хим. наук,
И. В. Дутов, А. О. Родин, канд. физ.-мат. наук,
 Государственный технологический университет
 "Московский институт стали и сплавов"

ФЕРРОМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В АМОРФНОМ ФЕРРОМАГНИТНОМ МИКРОПРОВОДЕ

Создана установка, позволяющая измерять параметры ферромагнитного резонанса с помощью волновода. Разработана методика измерения параметров ферромагнитного резонанса. Результаты разработанной методики подтверждены измерениями в цилиндрическом резонаторе на частоте 10 ГГц. Получены значения параметров уравнения Киттеля для микропровода состава $\text{Co}_{65}\text{Fe}_{21}\text{Si}_{14}$ общим диаметром 22 мкм и диаметром металлической жилы 5 мкм.

Введение

Благодаря своим уникальным магнитным свойствам аморфные ферромагнитные материалы используются в различных отраслях техники [1]. Одним из таких материалов является аморфный ферромагнитный микропровод (АФМП), представляющий собой аморфную ферромагнитную металлическую жилу, покрытую стеклянной оболочкой с общим диаметром в несколько десятков микрометров [2].

Благодаря своим свойствам АФМП нашел широкое применение в различных датчиках, таких как датчики смещения и положения, микродатчики электрического и магнитного поля, датчики напряжения и считывающие головки для жестких магнитных дисков. Одним из многообещающих свойств микропровода является его взаимодействие с СВЧ излучением за счет явления ферромагнитного резонанса (ФМР), наблюдаемого в гигагерцовом диапазоне частот [3, 4], что позволяет изготавливать радиопоглощающие материалы с высокими магнитными потерями. Обычно ФМР наблюдается с помощью объемного резонатора, при этом регистрируется сигнал, выходящий из резонатора, как функция от внешнего магнитного поля. Однако для определения параметров ФМР необходимо провести измерения на других частотах. Для этого требуется наличие целого набора резонаторов или использование перестраиваемо-

го резонатора. В данной статье рассматривается альтернативный способ исследования ФМР.

Экспериментальная часть

Разработанный способ дает возможность исследования резонансных характеристик в широком диапазоне частот с использованием волновода прямоугольного сечения, в котором с помощью короткозамыкающего поршня создается стоячая электромагнитная волна. В один из максимумов электрической составляющей помещается образец, а в минимум электрической составляющей — детектор измерительной линии. Далее при изменении внешнего магнитного поля измеряется интенсивность сигнала в минимуме. Однако было замечено, что при изменении внешнего магнитного поля происходит изменение фазы электромагнитной волны, т. е. происходит сдвиг минимума электромагнитной волны, и детектируемый сигнал не соответствует сигналу в минимуме электрической составляющей. Для точного определения интенсивности сигнала в минимуме необходимо для каждого значения магнитного поля осуществлять поиск минимума, что приводит к заметному увеличению времени измерения и уменьшению точности. Для устранения указанных недостатков, а также для автоматизации измерений была создана установка на базе стандартных блоков, входящих в состав панорамного измерителя коэффициента стоячей волны по напряжению (КСВН) типа Р2. Основными частями установки (рис. 1) являются генераторный блок, волноводная часть и ЭВМ. Основу волноводной части составляет волновод прямоугольного сечения, соединяющий измерительную линию, короткозамыкающий поршень и секцию, в которой находится образец.

Наличие короткозамыкающего поршня позволяет не только создавать стоячую волну внутри волновода, но и дает возможность сдвигать ее вдоль волновода. Измерительная линия представляет собой СВЧ детектор с механизмом для его передвижения вдоль волновода. Для обеспечения автоматизации

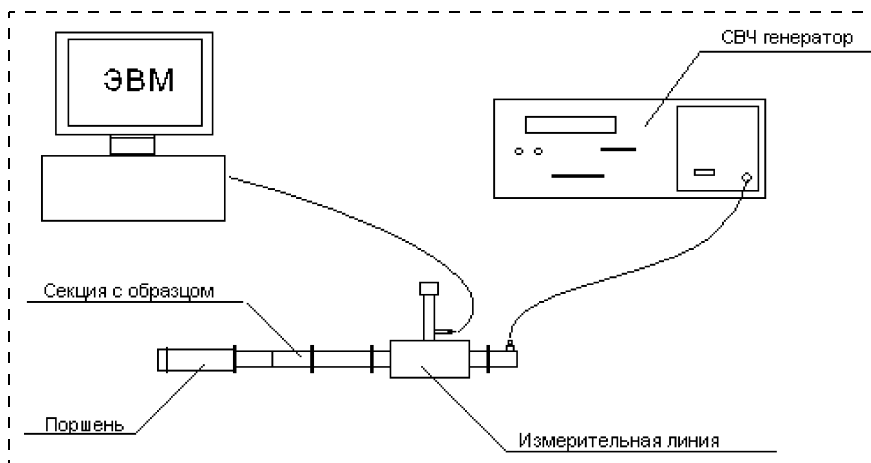


Рис. 1. Схема установки

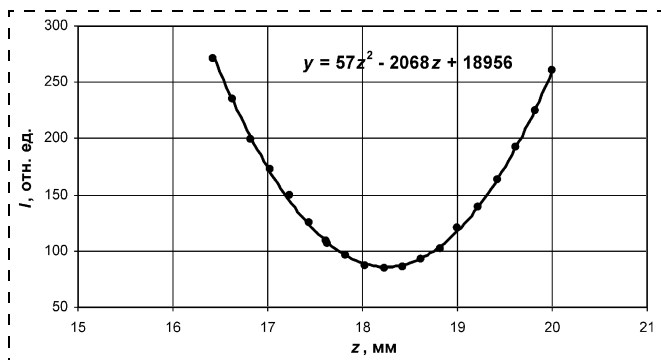


Рис. 2. Интенсивность сигнала СВЧ детектора в области минимума

измерений на измерительную линию был установлен шаговый электродвигатель, позволяющий осуществлять передвижение детектора с точностью до 30 мкм. Сигнал с СВЧ детектора поступает на компьютер, который обеспечивает измерение сигнала и управление движением измерительной головки с помощью разработанного программного обеспечения, которое позволяет находить положение минимума, сканировать область минимума и определять КСВН, сдвиг фазы и интенсивность сигнала в минимуме. График интенсивности сигнала в области минимума представлен на рис. 2.

Для определения параметров минимума (интенсивности сигнала и положения) полученные точки (рис. 2) аппроксимировали квадратичной функцией. КСВН определялся по уравнению [5]

$$\text{КСВН} = \sqrt{\frac{m^2 - 1}{\sin^2 \frac{2\pi \Delta z}{\lambda_B}}} + 1, \quad (1)$$

где Δz — ширина узла минимума; $m = \frac{U}{U_{\min}}$; U — напряжение на краю узла; $U_{\min}$ — напряжение в минимуме; λ_B — длина волны в волноводе.

Результаты

С помощью описанной выше установки были проведены исследования ФМР в аморфном микропроводе. Измеряли микропровод состава $\text{Co}_{65}\text{Fe}_{21}\text{Si}_{14}$ диаметром жилы и оболочки 5 и 22 мкм соответственно. Фотография микропровода представлена на рис. 3.

Измерения проводились на частоте 10 ГГц. Графики зависимостей параметров электромагнитного поля от внешнего магнитного поля приведены на рис. 4–6.

Из приведенных графиков видно, что зависимость КСВН носит резонансный характер. Наличие пика на кривой обусловлено ФМР с резонансным магнитным полем $59,5 \pm 1,2$ кА/м. Для проверки результатов измерений, выполненных на данной установке, были проведены дополнитель-

ные измерения АФМП по стандартной методике с помощью объемного резонатора, которые дали значения резонансного поля 58,7 кА/м, что хорошо согласуется с полученными результатами (рис. 7).

Изменение частоты электромагнитного излучения приводит к изменению резонансного магнитного поля. Результаты измерений на других частотах в волноводе приведены на рис. 7.

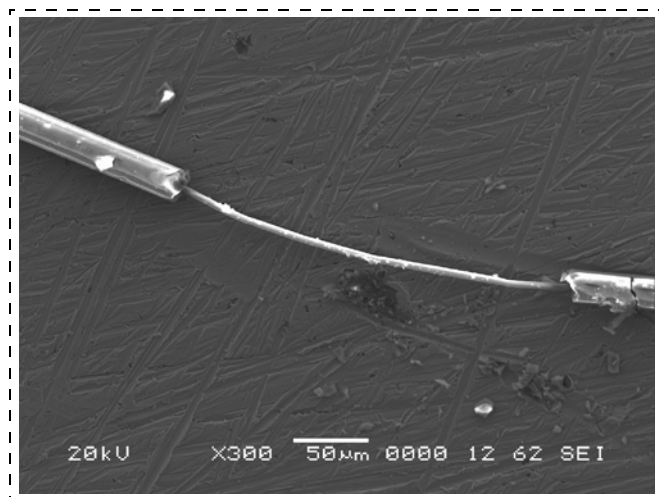


Рис. 3. Фотография микропровода с разрушенной стеклянной оболочкой (РЭМ)

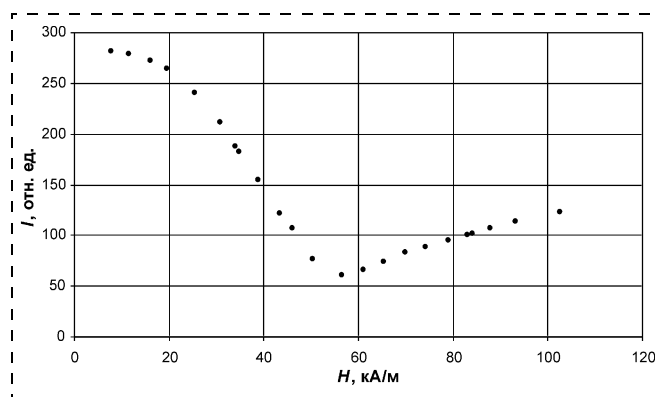


Рис. 4. Зависимость интенсивности сигнала в минимуме от напряженности внешнего магнитного поля

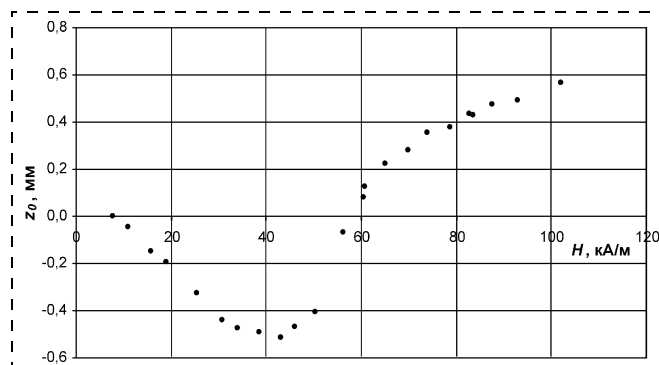


Рис. 5. Зависимость положения минимума от напряженности внешнего магнитного поля

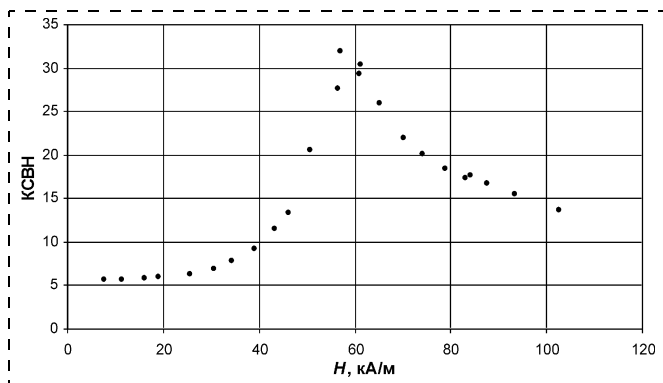


Рис. 6. Зависимость КСВН от напряженности внешнего магнитного поля

Полученные результаты позволили рассчитать параметры полевой зависимости резонансной частоты, определяемой формулой Киттеля (2)

$$f^2 = \gamma^2 [H + H_a][H + H_a + 4\pi M], \quad (2)$$

где γ — гиромагнитное отношение; H — напряженность внешнего магнитного поля; H_a — эффективное значение напряженности поля магнитной анизотропии; M — намагниченность материала.

Отметим, что в уравнении (2) параметр γ очень чувствителен к ошибке измерения. Ранее опубликованные данные показывают, что γ слабо зависит от состава и геометрических параметров микропроводов, следовательно, его можно принять постоянным. Напротив, параметры H_a и $4\pi M$ сильно зависят от состава и геометрических параметров, и определение их представляет большой интерес с точки зрения описания свойств микропровода [4]. Аппроксимируя полученные точки формулой (2) с $\gamma = 3,9 \cdot 10^{-2}$ (ГГц · м)/кА, можно получить следующие значения: $H_a = 27$ кА/м, $4\pi M = 671$ кА/м, $\nu_{H=0} = 5,3$ ГГц. Как видно, эти результаты хорошо согласуются с результатами, полученными с помощью других методов [4, 5].

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

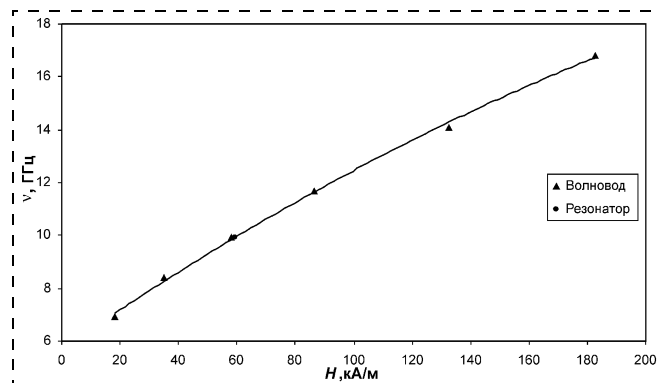


Рис. 7. Результаты измерений ФМР на различных частотах

- разработана новая методика определения параметров ФМР;
- проведена модернизация установки, позволяющая определять параметры ФМР с помощью волновода;
- определены параметры ФМР в АФМП состава $\text{Co}_{65}\text{Fe}_{21}\text{Si}_{14}$ общим диаметром 22 мкм и диаметром металлической жилы 5 мкм ($H_a = 27$ кА/м, $4\pi M = 671$ кА/м, $\nu_{H=0} = 5,3$ ГГц).

Список литературы

1. Хандрих К., Кобе С. Аморфные ферро- и ферримагнетики. М.: Металлургия, 1990.
2. Астахов М. В., Курапов Д. И. Радиопоглощающие материалы на основе аморфного микропровода // III Международный конф. "Физико-технические проблемы электротехнических материалов и компонентов". М., Клязьма. М.: Институт электротехники МЭИ (ТУ), 1999. С. 231—232.
3. Tulin V. A., Astahov M. V., Rodin A. O. Amorphous ferromagnetic microwire in the microwave cavity Ferromagnetic resonance and absorption // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2003. P. 258—259.
4. Yidiza F., Rameev B. Z., Tarapova S. I., Tagirova L. R., Akta B. High-frequency magnetoresonance absorption in amorphous magnetic microwires // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2002. 247. P. 222—229.
5. Лебедев И. В. Техника и СВЧ приборы. М.: Высшая школа, 1970.

УДК 541.64:542.938:547.245

Г. В. Козлов, З. Х. Афашагова, А. И. Буря,
Кабардино-Балкарский государственный
университет, Днепропетровский государственный
аграрный университет

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЭФФЕКТА НАНОАДГЕЗИИ В ДИСПЕРСНО-НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ: ФРАКТАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ

В рамках фрактального анализа исследованы факторы, влияющие на эффект наноадгезии в дисперсно-наполненных полимерных нанокompозитах. Как и следовало ожидать, наибольшее влияние на указанный эффект оказывают размерные факторы. Кроме того, определенную роль играют структура поверхности частиц нанонаполнителя и уровень физического и/или химического взаимодействия полимер—нанонаполнитель.

В работе [1] был описан эффект наноадгезии для дисперсно-наполненных полимерных нанокompозитов на основе фенилона, который заключается в резком увеличении уровня межфазной адгезии для указанного класса полимерных материалов по сравнению с традиционными полимерными композитами. Количественно этот эффект можно охарактеризовать с помощью параметра b , который определяется согласно уравнению [2]

$$\alpha_{\text{нк}} = \alpha_{\text{нк}}^{\text{см}} - b(\alpha_{\text{нк}}^{\text{см}} - \alpha_{\text{нк}}^{\text{Т}}), \quad (1)$$

где $\alpha_{\text{нк}}$, $\alpha_{\text{нк}}^{\text{см}}$ и $\alpha_{\text{нк}}^{\text{Т}}$ — линейные коэффициенты теплового расширения нанокompозитов, определенные экспериментально и рассчитанные согласно правилу смесей и уравнению Тернера соответственно.

Чем больше значение b , тем выше уровень межфазной адгезии. Для достаточно большого числа полимерных композитов с разными матрицами и наполнителями значение b варьируется от $-0,19$ до $1,39$ [2]. Расчет по уравнению (1) показал, что в случае нанокompозитов на основе фенилона значение b может быть на порядок больше и достигать $\sim 13,5$ [1]. Этот эффект по аналогии с работой [3] был назван *наноадгезией*. Эффект наноадгезии имеет чисто размерное происхождение и поэтому является истинным наноэффектом [4].

Целью настоящей работы является исследование факторов, которые определяют существование эффекта наноадгезии в дисперсно-наполненных полимерных нанокompозитах и влияют на уровень его интенсивности.

Исследовали полимерные нанокompозиты на основе термостойкого ароматического полиамида фенилон С-2. В качестве нанонаполнителя использовали ультрадисперсные частицы аэросила и оксинитрида кремний-иттрия (ОКИ), имеющие следующие характеристики: удельная поверхность $S_u = 170$ и $43 \text{ м}^2/\text{г}$, диаметр частиц 25 и 64 нм, плотность $\rho = 2360$ и 2200 кг/м^3 , соответственно. Содержание аэросила составляло 1,0 масс. %, оксинитрида кремний-иттрия — 0,2—10 масс. %.

Введение нанонаполнителя в полимерную матрицу осуществляли во вращающемся электромагнитном поле с помощью неравноосных ферромагнитных частиц с отношением длины к диаметру 4—5; объем ферромагнитных частиц, загружаемых в реактор аппарата, был в пределах 0,04—0,05 от объема действия электромагнитного поля. Электромагнитная индукция этого поля была в пределах 0,08—0,12 Тл. При указанных параметрах экспериментально обнаружено, что оптимальное время обработки нанокompозитов в электромагнитном поле составляет 270—300 с. Получение образцов композиций осуществляли методом компрессионного прессования при температуре 537—616 К, давлении 40—100 МПа и выдержке при указанных параметрах из расчета 1 мин/мм толщины изделия.

Обработка порошкообразных композиций фенилон/нанонаполнитель во вращающемся электромагнитном поле позволяет подавить (или уменьшить) агрегацию частиц нанонаполнителя. Для проверки реализации этого эффекта были изготовлены образцы нанокompозитов фенилон/аэросил простым механическим смешиванием.

Линейный коэффициент теплового расширения нанокompозитов определяли на dilatометре DKV-SAM, предназначенном для автоматической регистрации dilatометрических кривых разных твердых тел в интервале температур 298—498 К. Для испытаний использовали призматические ($6 \times 4 \text{ мм}$) образцы длиной $50 \pm 3 \text{ мм}$. Непараллельность шлифованных торцов образца составляла не более $\pm 0,02 \text{ мм}$. Число образцов для испытаний для каждого нанокompозита было не менее трех.

Как известно [5], взаимодействие полимер—наполнитель в полимерных композитах (нанокompозитах) определяется двумя группами факторов: фи-

зическими и/или химическими и структурными. Поверхность дисперсных частиц нанонаполнителя, с которой взаимодействует полимерная матрица, является фрактальным объектом [6]. Это означает, что число мест контакта N_u зависит от размерности доступной для такого контакта (неэкранированной) поверхности частицы d_u и определяется следующим образом [7]:

$$N_u \sim r_{\text{нк}}^{d_u}, \quad (2)$$

где $r_{\text{нк}}$ — радиус частицы нанонаполнителя.

В свою очередь, размерность d_u связана с фрактальной размерностью поверхности частицы нанонаполнителя d_n и определяется согласно уравнению [7]

$$d_u = (d_n - 1) + \frac{(d - d_n)}{d_w}, \quad (3)$$

где d — размерность евклидова пространства, в котором рассматривается фрактал (очевидно, в нашем случае $d = 3$); d_w — размерность случайного блуждания на фрактале, которую можно оценить согласно правилу Аарони—Штауффера [7]:

$$d_w = d_n + 1. \quad (4)$$

Как показано в работе [8], размерность d_n может быть оценена с помощью уравнения

$$S_u = 410 r_{\text{нк}}^{d_n - d}, \quad (5)$$

где S_u дается в м²/г, а $r_{\text{нк}}$ — в нм.

Суммарное число мест контакта полимерная матрица—нанонаполнитель

$$N_u^{\text{сум}} = N_u N_{\text{нк}}, \quad (6)$$

где $N_{\text{нк}}$ — число частиц нанонаполнителя на единицу объема нанокompозита, определяемое из простого соотношения:

$$N_{\text{нк}} = \frac{\varphi_{\text{нк}}}{V_{\text{нк}}}, \quad (7)$$

где $\varphi_{\text{нк}}$ — объемное содержание нанонаполнителя; $V_{\text{нк}}$ — объем частицы нанонаполнителя.

Полагая для дисперсно-наполненных нанокompозитов сферическую форму частиц нанонаполнителя и при условии $\varphi_{\text{нк}} = \text{const}$, получим окончательное соотношение для расчета $N_u^{\text{сум}}$:

$$N_u^{\text{сум}} = \frac{c_{\text{фх}}}{r_{\text{нк}}^{3-d_u}}, \quad (8)$$

где константа $c_{\text{фх}}$ введена из-за наличия знака пропорциональности в соотношении (2) и по своему смыслу является показателем уровня физических и/или химических взаимодействий полимерная матрица—нанонаполнитель [5]. Очевидно, что эта кон-

станта может быть различной для разных сочетаний полимер—нанонаполнитель. В дальнейшем величина $c_{\text{фх}}$ выбиралась постоянной для фиксированной пары полимер—нанонаполнитель, но таким образом, чтобы соблюдалось примерное условие $b = N_u^{\text{сум}}$, поскольку последний параметр дается в относительных единицах в силу методики его расчета.

Как показали расчеты согласно уравнению (8), при указанном способе выбора константы $c_{\text{фх}}$ между параметрами b и $N_u^{\text{сум}}$ наблюдается примерное равенство для обеих серий исследуемых нанокompозитов, но для получения общего линейного соотношения $b(N_u^{\text{сум}})$ в уравнении (8) требуются разные константы $c_{\text{фх}}$ для нанокompозитов фенилон/аэросил и фенилон/ОКИ, а именно, 317 и 882 соответственно. Это указывает, что уровень физических и/или химических взаимодействий фенилон/ОКИ в 3 раза выше, чем для пары фенилон/аэросил. На рис. 1 приведена зависимость $b(N_u^{\text{сум}})$ для исследуемых нанокompозитов, которая оказалась линейной и проходящей через начало координат. Последнее условие необходимо для корректности указанной корреляции: очевидно, что при отсутствии мест контакта полимерная матрица—нанонаполнитель или при $N_u^{\text{сум}} = 0$ межфазная адгезия, как явление, также не может быть реализована ($b = 0$).

Важно отметить, что согласно данным рис. 1, уровень межфазной адгезии для пары фенилон/аэросил существенно выше, чем для пары фенилон/ОКИ несмотря на значительно более высокую величину $c_{\text{фх}}$ для последней. Это обстоятельство указывает на важность структурных факторов в определении уровня межфазной адгезии (наноадгезии) в полимерных ком-

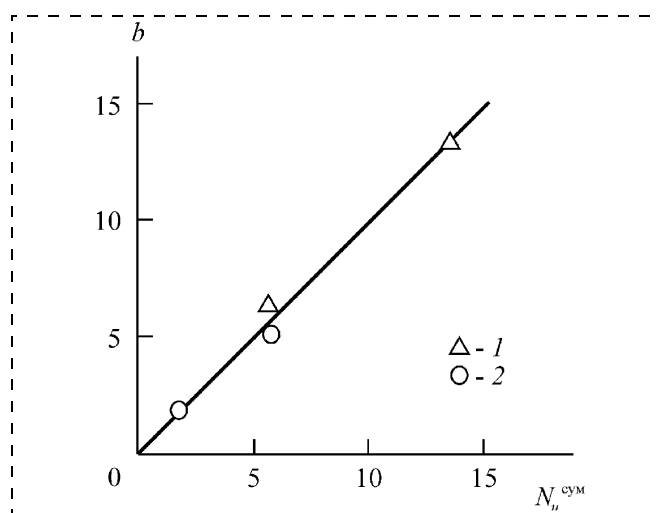


Рис. 1. Зависимость параметра b от числа неэкранированных мест поверхности частиц нанонаполнителя $N_u^{\text{сум}}$ для нанокompозитов фенилон/аэросил (1) и фенилон/ОКИ (2)

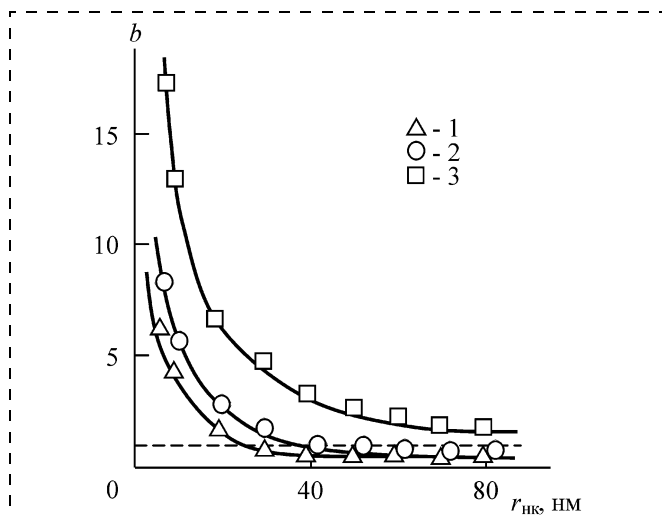


Рис. 2. Зависимости параметра b от радиуса частиц нанонаполнителя $r_{нк}$ при размерности поверхности этих частиц $d_n = 2,0$ (1), 2,5 (2) и 3,0 (3); горизонтальная штриховая линия указывает уровень совершенной микроадгезии ($b = 1$)

позитах. Такое соотношение $c_{фх}$ и структурных факторов следует из уравнения (8): если b прямо пропорционален $c_{фх}$, то зависимость этого параметра от r_n и d_n имеет степенную, т. е. более сильную, форму. К структурным параметрам следует отнести следующие: размер частиц нанонаполнителя, характеризуемый их радиусом $r_{нк}$, структуру поверхности частиц нанонаполнителя, характеризуемую размерностью d_n , и степень агрегации частиц нанонаполнителя, характеризуемую радиусом агрегатов этих частиц $R_{нк}$. Рассмотрим влияние указанных структурных факторов.

На рис. 2 приведены зависимости параметра b от радиуса частиц нанонаполнителя $r_{нк}$ в интервале $r_{нк} = 7,5 \div 80$ нм при трех фиксированных размерностях d_n : 2,0 (евклидова поверхность), 2,5 и 3,0, рассчитанные согласно уравнению (8) с учетом условия $b \approx N_u^{сум}$. Как и ожидалось [1], реализация эффекта наноадгезии ($b > 1$) возможна только в интервале $r_{нк} = 7,5 \div 40$ нм, хотя для частиц с очень шероховатой поверхностью ($d_n = 3,0$) этот интервал несколько расширяется, но при относительно небольших значениях b в интервале 2–3.

На рис. 3 приведены рассчитанные аналогичным способом зависимости $b(d_n)$ при двух фиксированных значениях $r_{нк} = 20$ и 40 нм, которые по существу подтверждают выводы, сделанные из графиков рис. 2: существенный рост b по мере увеличения d_n наблюдается для небольших частиц нанонаполнителя с радиусом $r_{нк} = 20$ нм, а для предельного значения $r_{нк} = 40$ нм реализация достаточно слабого эффекта наноадгезии возможна только при больших d_n ($d_n > 2,7$).

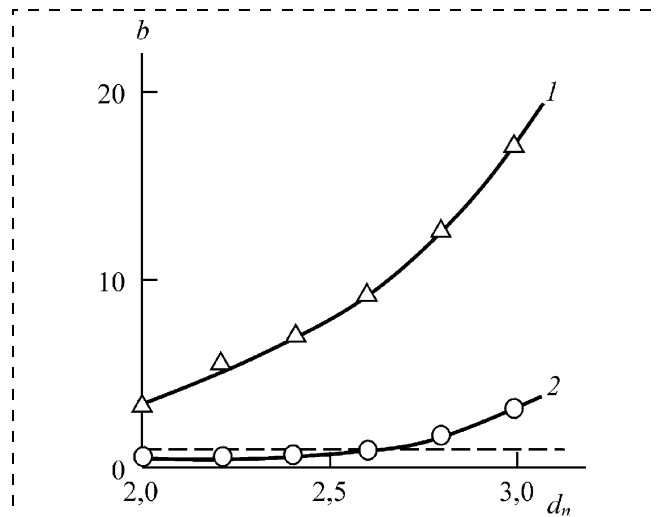


Рис. 3. Зависимости параметра b от размерности поверхности частиц нанонаполнителя d_n при радиусе этих частиц $r_{нк} = 20$ (1) и 40 (2); горизонтальная штриховая линия указывает уровень совершенной микроадгезии ($b = 1$)

В работе [1] на примере нанокмозитов фенилон/ОКИ было продемонстрировано сильное влияние процесса агрегации частиц ОКИ по мере увеличения содержания нанонаполнителя $\phi_{нк}$ на величину b , а именно, ее существенное снижение по мере роста $\phi_{нк}$. Для полимерных композитов полигидроксиэфир/графит было показано, что агрегация частиц наполнителя подчиняется следующему правилу [9]:

$$R_{аг} \sim \phi_n^{1/2}, \quad (9)$$

где $R_{аг}$ и ϕ_n — радиус агрегатов частиц графита и его объемное содержание соответственно.

Если предположить, что соотношение (9) корректно и для описания процесса агрегации частиц ОКИ и определить константу пропорциональности в этом соотношении из условия $R_{нк} = 32$ нм при $\phi_{нк} = 0,0009$, т. е. в предположении, что при наименьшем значении $\phi_{нк}$ агрегации не происходит, то

можно рассчитать величину $b \approx N_u^{сум}$ согласно уравнению (8) при $c_{фх} = 882$ и сравнить с экспериментальными данными, приведенными в работе [1]. Это сравнение показано на рис. 4, из которого следует хорошее соответствие экспериментальных данных и расчета согласно рассмотренной выше методике. Отметим сильное влияние процесса агрегации на величину b : увеличение содержания ОКИ в 50 раз, приводящее к повышению $R_{нк}$ по сравнению с $r_{нк}$ примерно в 7 раз, дает снижение величины b или уровня межфазной адгезии приблизительно в 14 раз.

Таким образом, полученные в настоящей работе результаты, использующие представления фрактального анализа, показали, что на уровень межфазной адгезии (наноадгезии) в полимерных дисперсно-наполненных нанокмозитах влияют три фактора, а именно, размеры частиц нанонаполнителя, степень их агрегации и

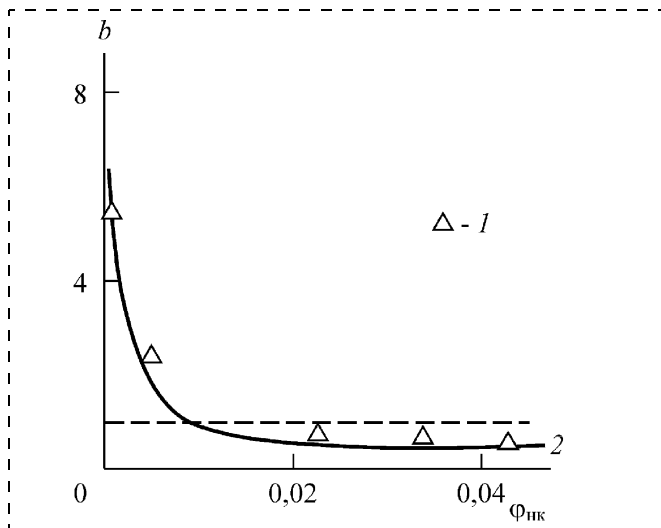


Рис. 4. Сравнение экспериментальной (1) и рассчитанной согласно уравнениям (8) и (9) (2) зависимостей параметра b от объемного содержания нанонаполнителя $\phi_{нк}$ для нанокompозитов фенилон/ОКИ; горизонтальная штриховая линия указывает уровень совершенной микроадгезии ($b = 1$)

структура поверхности. Как и следовало ожидать, наиболее сильное влияние на реализацию эффекта наноадгезии оказывают первые два фактора, поскольку указанный эффект имеет размерное происхождение. Кроме того, для разных пар полимер—нанонаполнитель определенное влияние на параметр b

оказывает уровень их физического и/или химического взаимодействия.

Список литературы

1. Козлов Г. В., Бура А. И., Липатов Ю. С. Эффект наноадгезии в полимерных нанокompозитах // Композитные материалы, 2007. Т. 1. № 1. С. 3—7.
2. Холлидей Л., Робинсон Дж. Тепловое расширение полимерных композиционных материалов // Промышленные полимерные композиционные материалы / Под ред. М. Ричардсон. М.: Химия, 1980. С. 241—283.
3. Tanaka K., Nagamura T. Polymer nano-adhesion promoted by enhanced surface mobility // Mater. Intern. Conf. on Polymer and Advanced Materials. POLYMEX-2006. Huatulco, Mexico, November 5—9, 2006. Session 1. P. 51.
4. Андриевский Р. А. Наноматериалы: концепция и современные проблемы // Российский химический журнал. 2002. Т. 46. № 5. С. 50—56.
5. Kozlov G. V., Lipatov Yu. S. Fractal and structural aspects of adhesion in particulate-filled polymer composites // Composite Interfaces. 2002. V. 9. № 6. P. 509—527.
6. Avnir P., Farin P., Pfeifer P. Molecular fractal surfaces // Nature. 1984. V. 308. № 5959. P. 261—263.
7. Стенли Х. Фрактальные поверхности и модель "термита" для двухкомпонентных случайных материалов // Фракталы в физике / Под. ред. Л. Пьетронеро, Э. Тозатти. М.: Мир, 1988. С. 463—477.
8. Козлов Г. В., Шустов Г. Б. Структурный анализ реакционной способности саж // Химическая технология. 2006. № 1. С. 24—26.
9. Козлов Г. В., Новиков В. У., Липатов Ю. С. Моделирование агрегации частиц наполнителя в полимерных композитах: механизм кластер—кластер // Материаловедение. 2000. № 8. С. 21—24.

УДК 538.97:621.375.826

М. С. Комленок,
С. М. Пименов, канд. физ.-мат. наук,
В. В. Кононенко, канд. физ.-мат. наук,
В. И. Конов, д-р физ.-мат. наук, чл.-кор. РАН,
Центр естественно-научных исследований,
Институт общей физики им. А. М. Прохорова
РАН, г. Москва,
Х.-Й. Шайбе, д-р,
Фраунгоферовский институт материаловедения
и лучевых технологий, г. Дрезден, Германия

ЛАЗЕРНОЕ МИКРОСТРУКТУРИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ СВЕРХТВЕРДЫХ АМОРФНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК

Экспериментально исследованы процессы локальной структурной модификации поверхности: графитизации и абляции сверхтвердых аморфных углеродных пленок под действием наносекундных импульсов эксимерного KrF-лазера. Показано, что скорость и механизмы абляции строго зависят от плотности энергии в импульсе. В целях улучшения трещиностойкости пленок созданы периодические микроструктуры с контролируемыми размерами и периодом в условиях импульсного лазерного воздействия.

Введение

Алмазоподобные (АП) углеродные пленки благодаря высоким показателям твердости, адгезии и износостойкости широко применяются в технике для улучшения трибологических свойств подшипников, передаточных механизмов и шестерен [1].

АП пленки с доминирующим количеством sp^3 -связей называются пленками тетраэдрически координированного аморфного углерода (ta-C). В таких пленках содержание sp^3 -связей может достигать 80 %, а твердость — 8000 HV (80 ГПа) [2, 3]. По сравнению с водородсодержащими аморфными углеродными (a-C:H)-пленками износостойкость ta-C-пленок значительно выше благодаря высокой твердости и плотности [4], что и обуславливает их широкое применение в качестве защитных, износостойких и низкофрикционных покрытий в различных областях науки и техники.

В последнее время метод лазерного микроструктурирования поверхности твердых материалов и покрытий в целях последующей модификации/улучшения их трибологических характеристик привлекает все большее внимание исследователей [5—8]. Специальные углубления на тупеющей поверхности пленки могут быть использованы как для сбора час-

тиц износа, так и для удержания твердой [5] или жидкой смазки [6, 7].

Для углеродных пленок — как ta-C, так и a-C:H — существует характерная особенность, связанная со структурной модификацией (графитизацией) поверхностного слоя [9–11], что предполагает возможность создания различных лазерно-индуцированных микроструктур на поверхности (микровыступов или углублений) с пространственной селективностью структурных и механических свойств (микротвердости, коэффициента трения и т. д.) поверхности.

Цель этой работы заключалась в изучении особенности взаимодействия импульсного лазерного излучения с ta-C-пленками и анализе возможности контролируемого лазерного микроструктурирования поверхности ta-C-пленок. В эксперименте были исследованы лазерно-индуцированные изменения поверхности ta-C-пленок толщиной 1, 2 и 5 мкм при воздействии наносекундных импульсов эксимерного KrF-лазера ($\lambda = 248$ нм, $\tau = 15$ нс). Процессы графитизации и абляции были описаны и классифицированы при различных условиях облучения. Используя полученные данные о процессах лазерной графитизации и абляции, были созданы различные микроструктуры на поверхности сверхтвердых ta-C-пленок в целях улучшения их трибологических свойств.

Эксперимент

ta-C-пленки осаждались на стальные подложки с помощью лазерно-дугового метода, разработанного во Фраунгоферовском институте материаловедения и лучевых технологий (Дрезден, Германия) [2, 3]. Значения модуля упругости пленок различной толщины варьировались в пределах от 370 до 520 ГПа и были получены методом поверхностных акустических волн [12]. Такие пленки, имеющие торговую марку Diamor® (= diamond+amorphous), успешно прошли тестирование в качестве защитного покрытия с низким коэффициентом трения при высокой механической нагрузке [3].

Полученные пленки облучались на воздухе с помощью эксимерного KrF-лазера с длиной волны 248 нм и длительностью импульса 15 нс. Плотность энергии варьировалась при этом в пределах от 0,05 до 12,5 Дж/см². Процессы поверхностной графитизации и абляции исследовались как для одноимпульсного, так и для многоимпульсного режимов облучения. Морфология поверхности ta-C-пленок анализировалась с помощью оптической, интерференционной и атомно-силовой микроскопии.

Результаты и обсуждение

Отличительной особенностью лазерного воздействия на АП-пленку является локальная графитизация поверхности в пятне облучения. Хорошо известно, что графитизация поверхностного слоя пленки имеет пороговое значение интенсивности лазерного излучения и приводит к изменению свойств облучаемого материала [10]. Одно из них — это уменьшение плотности пленки, которое проявляется в подъеме поверхности в пятне облучения. Характерное изменение рельефа поверхности в режиме одноимпульсного лазерного облучения представлено на рис. 1.

Такая отличительная особенность лазерного воздействия на ta-C-пленку, как локальная графитизация поверхности, позволяет использовать графитизованный слой в качестве твердой смазки в необходимых зонах контакта деталей. Зависимость высоты подъема модифицированного (графитизованного) слоя пленки от плотности энергии показана на рис. 2. На рисунке видно, что пленка толщиной 2 мкм не претерпевает заметных изменений вплоть до значения плотности энергии 0,2 Дж/см² — порогового значения графитизации. Высота подъема поверхности растет с увеличением энергии импульса и достигает своего максимального значения 400 нм для плотности энергии 0,8 Дж/см². При дальнейшем увеличении энергии импульса высота подъема уменьшается вплоть до нулевого значения при плотности энергии 11 Дж/см².

Это связано с тем, что модификация поверхности включает в себя два конкурирующих процесса: графитизацию и испарение. При плотностях энергии ниже 0,8 Дж/см² доминирует процесс графитизации, а выше — испарение графитизованного слоя. При плотности энергии свыше 11 Дж/см² удаленный слой за один импульс становится настолько большим, что кратер образуется уже в течение пер-

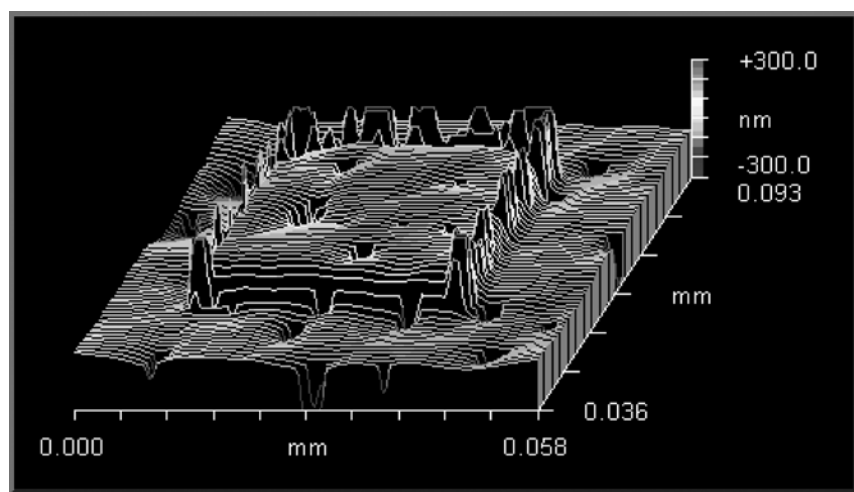


Рис. 1. Трехмерное изображение пятна, сформированного на поверхности ta-C-пленки в результате воздействия одного лазерного импульса с плотностью энергии 0,4 Дж/см²

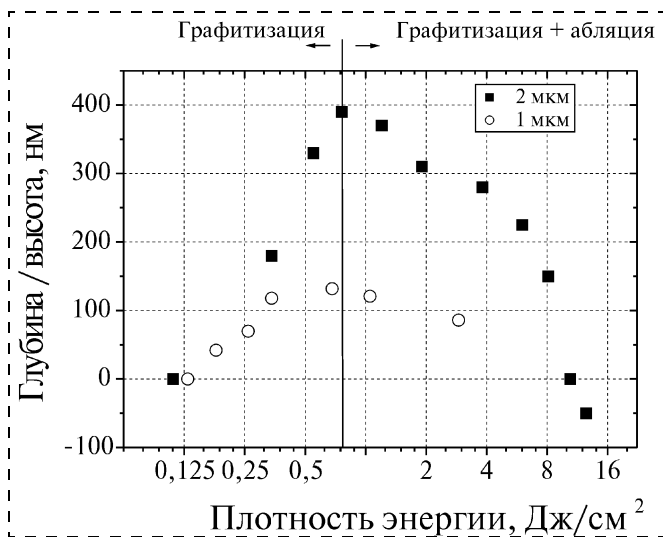


Рис. 2. Зависимость глубины кратера/высоты подъема графитизованного слоя от плотности энергии при одноимпульсном облучении ta-C-пленок толщиной 1 и 2 мкм

вого импульса. Характер зависимости высоты подъема от плотности энергии для пленки толщиной 2 мкм сохраняется и для пленки толщиной 1 мкм, но значение максимума для последней уменьшается и составляет 140 нм. На рис. 3 изображен характерный профиль графитизованной поверхности после воздействия одного лазерного импульса. Сплошная линия соответствует профилю поверхности после воздействия одного лазерного импульса с $E = 0,4 \text{ Дж/см}^2$. Прерывистая линия соответствует рассчитанной границе исходной пленки и графитизованного слоя, толщина которого удовлетворяет следующему соотношению, полученному из закона сохранения масс:

$$d_{\text{гр}} = \frac{\rho_{\text{пл}}}{\rho_{\text{пл}} - \rho_{\text{гр}}} h_{\text{п}},$$

где $\rho_{\text{пл}}$ — плотность ta-C-пленки; $\rho_{\text{гр}}$ — плотность графита; $d_{\text{гр}}$ — толщина графитизованного слоя; $h_{\text{п}}$ — высота подъема графитизованной области относительно первоначального уровня поверхности пленки. Значение плотности пленки $\rho_{\text{пл}}$ для такого типа покрытий составляет $2,9 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$, значение плотности графита $\rho_{\text{гр}} = 2,2 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$ [1]. Таким образом, из измеренных значений высоты подъема графитизованной области может быть получена толщина графитизованного слоя. А так как высота подъема зависит от плотности энергии, то изменение энергии в импульсе позволяет управлять толщиной графитизованного слоя в пятне облучения. Согласно указанной выше формуле, максималь-

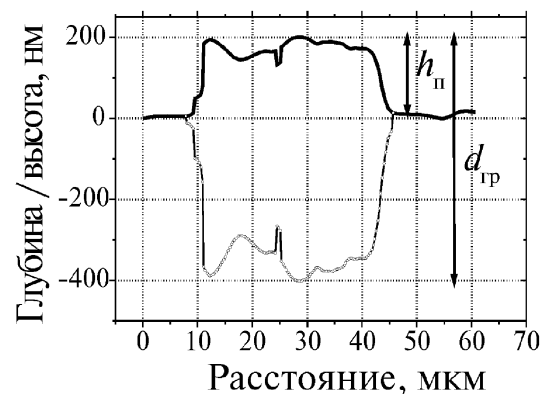


Рис. 3. Профиль графитизованного пятна, сформированного на поверхности ta-C-пленки в результате воздействия одного лазерного импульса с плотностью энергии $0,4 \text{ Дж/см}^2$ ($d_{\text{гр}}$ — толщина графитизованного слоя, $h_{\text{п}}$ — высота подъема графитизованной области). Сплошная линия соответствует профилю поверхности после воздействия лазерного импульса, прерывистая линия — рассчитанной границе исходной пленки и графитизованного слоя

ная толщина графитизованного слоя составляет 580 нм и 1660 нм для пленок толщиной 1 мкм и 2 мкм соответственно.

Профили поверхности после воздействия лазерного излучения с плотностью энергии $3,8 \text{ Дж/см}^2$ и различным числом импульсов представлены на рис. 4. Как и в случае одноимпульсного облучения, наблюдался подъем поверхности после лазерного воздействия как следствие графитизации пленки. Формирование графитизованного слоя после первого импульса представлено на верхней части рис. 4. Последующие импульсы вызвали испарение модифицированного слоя поверхности и одновременно продвижение фронта графитизации в глубь пленки, что приводило к появлению кратера (нижняя часть рис. 4).

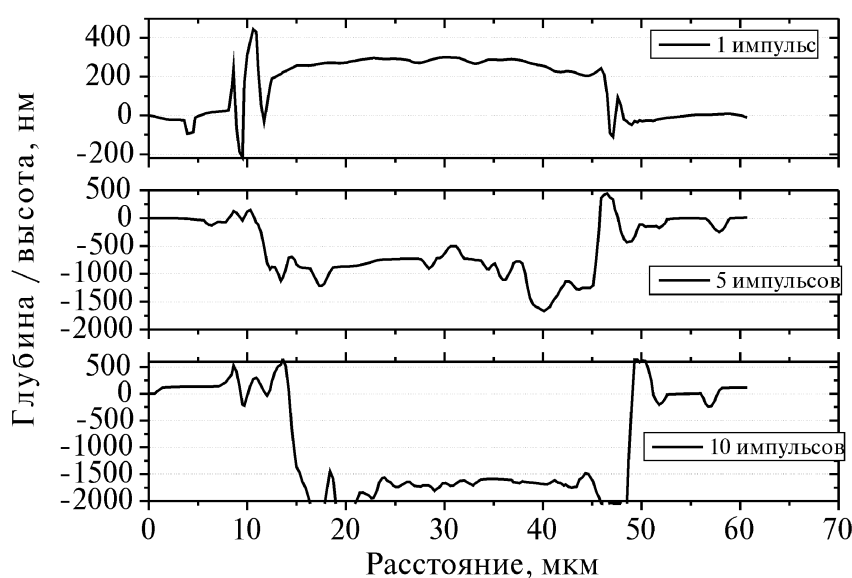


Рис. 4. Профили поверхности в пятне облучения пленки толщиной 2 мкм после лазерного воздействия с плотностью энергии $3,8 \text{ Дж/см}^2$ и различным числом импульсов

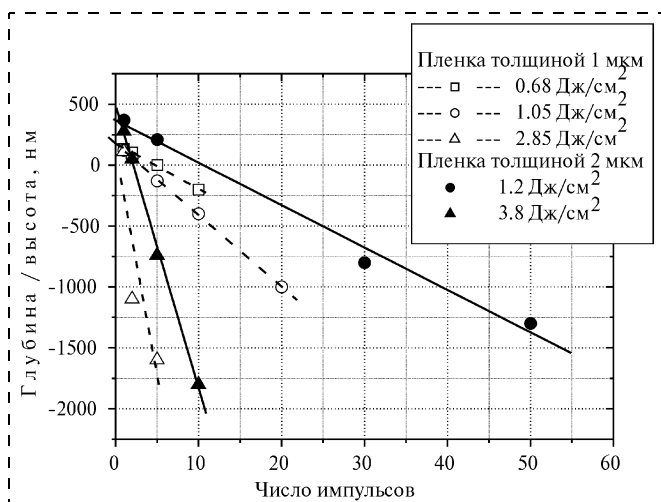


Рис. 5. Зависимость глубины кратера/высоты подъема графитизованного слоя от числа импульсов при различных плотностях энергии излучения

Глубина кратера, сформированного в результате лазерной абляции на поверхности пленки, растет с увеличением числа импульсов, как показано на рис. 5. Экспериментальные зависимости были аппроксимированы линейными функциями во всем диапазоне плотностей энергий свыше $0,8 \text{ Дж/см}^2$. Скорость удаления материала рассчитывалась из зависимости глубины кратера от числа импульсов при постоянной плотности энергии. Воздействие лазерного излучения на АП-пленки в этом диапазоне плотностей энергии достаточно хорошо изучено. Процесс удаления материала состоит из двух фаз, включающих графитизацию облучаемой поверхности и испарение графитизованного слоя. В этом случае доминирующим является испарительный механизм абляции; скорость абляции и толщина графитизованного слоя определяются параметрами лазерного излучения и свойствами пленки [9, 13, 14].

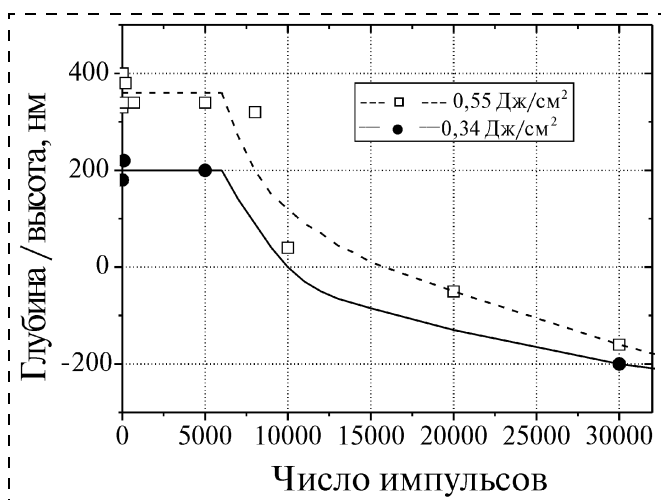


Рис. 6. Зависимость глубины кратера/высоты подъема графитизованного слоя от числа импульсов при различных плотностях энергии излучения

Рассмотрим результаты экспериментов, соответствующие диапазону плотностей энергии от $0,2$ до $0,8 \text{ Дж/см}^2$. На рис. 6 показана зависимость высоты подъема уровня поверхности и глубины кратера от числа импульсов. На рисунке видно, что высота подъема графитизованного в первом импульсе слоя не меняется в течение первых 5000 импульсов, а после 10 000 импульсов значительно уменьшается. Такое поведение зависимости мы связываем с изменениями шероховатости поверхности в пятне облучения, среднеквадратичное значение которой составляет около 190 нм в течение первых 5000 импульсов и увеличивается до 350 нм при 10 000 импульсов. Средняя скорость удаления материала оказалась на 3 порядка ниже, чем в рассмотренном ранее диапазоне плотностей энергии, и составила примерно $0,02 \text{ нм/импульс}$. В этом случае можно предположить, что доминирует окислительный механизм абляции графитизованного слоя, который был обнаружен ранее при лазерном травлении пленок аморфного гидрогенизированного углерода ($a\text{-C:H}$) [13, 14]. В целях проверки нашего предположения был проведен эксперимент в вакуумной камере ($P = 10 \text{ мм рт. ст.}$). Как показано на рис. 7, в условиях форвакуума не происходит никаких изменений с графитизованным слоем в течение 30 000 импульсов с плотностью энергии $0,4 \text{ Дж/см}^2$, в то время как при облучении в воздушной атмосфере образуется кратер глубиной 300 нм . Таким образом, можно утверждать, что причиной абляции в указанном диапазоне плотностей энергии является процесс окисления графитизованного поверхностного слоя.

При плотностях энергии ниже порога графитизации $E < E_{\text{гр}} = 0,2 \text{ Дж/см}^2$ после воздействия 10^5 импульсов наблюдалось образование кратера глубиной 10 нм в пятне облучения. Особенностью этого процесса является сверхнизкая скорость абляции по-

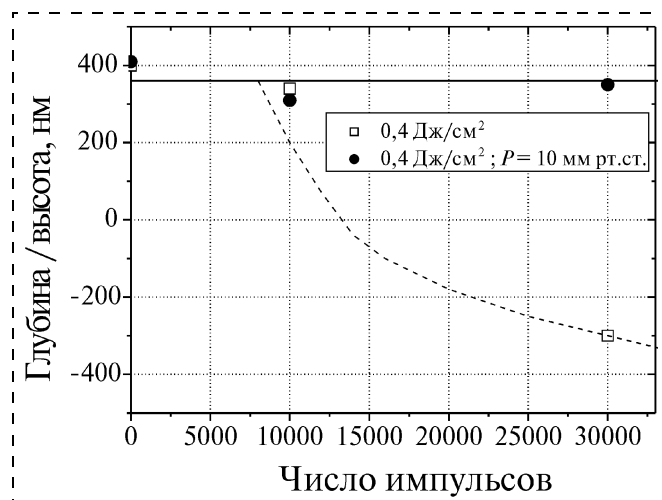


Рис. 7. Зависимость глубины кратера/высоты подъема графитизованного слоя от числа импульсов при облучении в вакууме ($P = 10 \text{ мм рт. ст.}$) и на воздухе с плотностью энергии $0,4 \text{ Дж/см}^2$

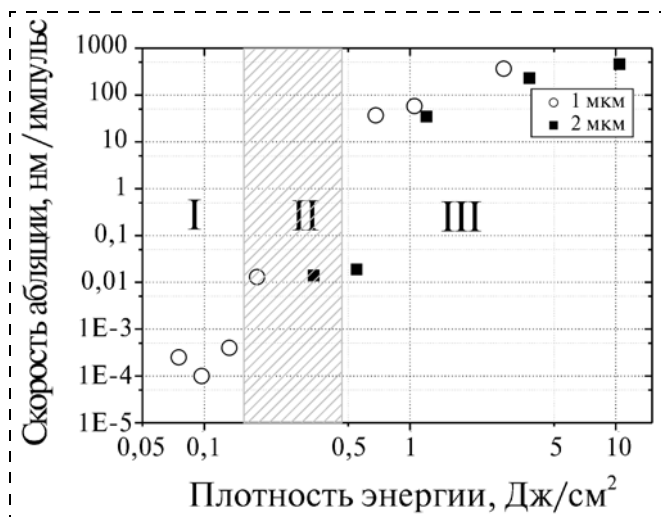


Рис. 8. Зависимость скорости лазерной абляции та-С-пленок от плотности энергии в импульсе. Режимы I, II и III соответствуют различным механизмам абляции: I — фотохимический, II — окислительный, III — испарительный

верхности (10^{-4} нм/импульс) в отсутствие "видимой" графитизации поверхности та-С-пленки. Ранее при лазерном облучении алмаза был обнаружен

аналогичный режим безграфитизационного травления с характерной скоростью менее 10^{-3} нм/импульс [15, 16]. Данный процесс, названный "наноабляцией", описывается фотохимическим механизмом удаления материала [17]. Этот же механизм удаления представляется наиболее вероятным и в случае лазерного облучения та-С-пленок. При указанных выше плотностях энергии лазерно-индуцированное фотовозбуждение электронной системы ослабляет межатомные связи в решетке и тем самым приводит к возрастанию скорости окисления поверхности в зоне лазерного облучения.

Суммируя экспериментальные данные для многоимпульсного облучения, можно выделить три диапазона плотностей энергии, при которых скорости абляции различаются на несколько порядков. Соответствующая зависимость скорости абляции от плотности энергии показана на рис. 8; области I, II и III соответствуют различным механизмам абляции.

Практической целью проведенных экспериментов было подобрать режим абляции и графитизации для эффективного структурирования поверхности пленок в целях улучшения их трибологических свойств.

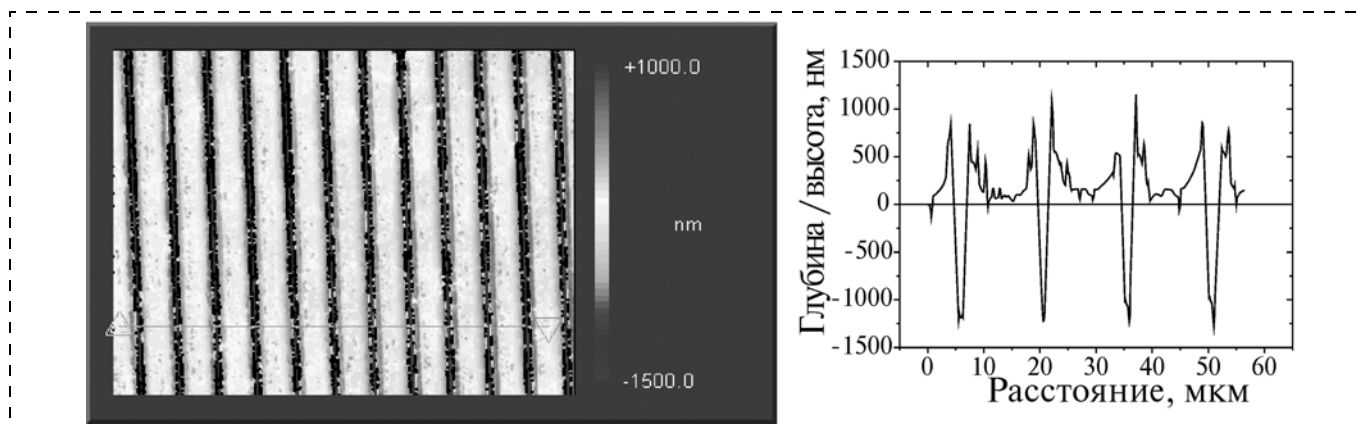


Рис. 9. Периодическая структура на поверхности пленки, состоящая из каналов, образованных в результате лазерной абляции

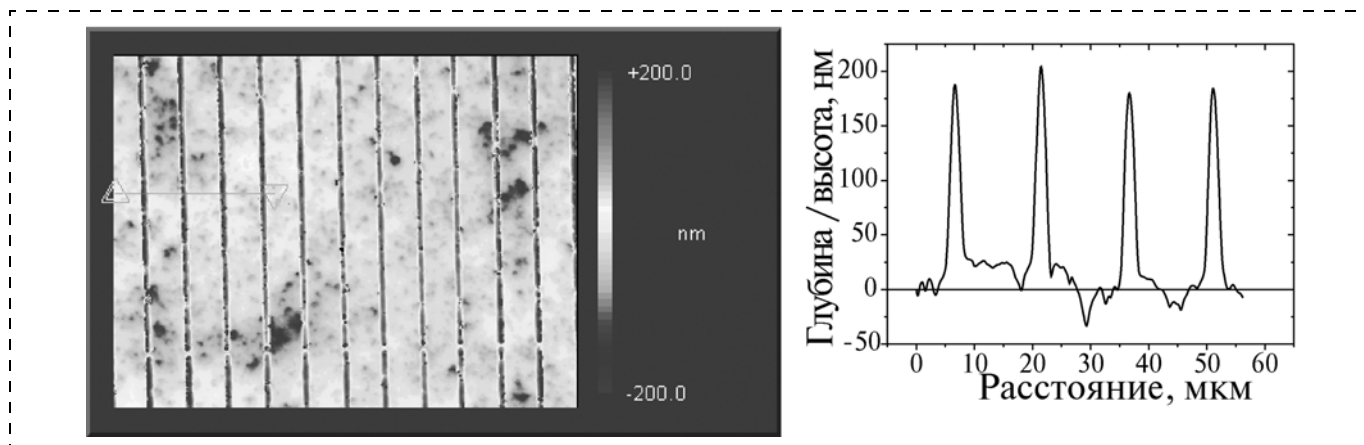


Рис. 10. Периодическая структура на поверхности пленки, состоящая из графитизованных возвышенностей

Проведенное параметрическое исследование абляции образцов позволило обеспечить хорошо контролируемый процесс микроструктурирования поверхности пленки. В экспериментах по структурированию поверхности АП-пленки использовалось пятно облучения размером 3×130 мкм для получения одномерных структур с периодом 15 мкм. Размеры области структурирования на поверхности образцов составляли 3×5 мм. В результате было создано два типа структур: первый представляет собой последовательность периодических каналов (3 мкм ширина и 1 мкм глубина, рис. 9); другой состоит из периодических графитизованных возвышенностей (3 мкм ширина и 200 нм высота, рис. 10).

Предварительные исследования трибологических свойств обработанной поверхности, проведенные с помощью метода латеральных сил [18] на атомно-силовом микроскопе (АСМ), показали, что сила трения между зондом и поверхностью в графитизованных областях меньше силы трения на исходной та-С-пленке.

Заключение

В результате проведенных экспериментов было выделено три диапазона плотностей энергии, в которых различаются механизмы и скорости абляции: при плотности энергии свыше $0,8$ Дж/см² доминирует испарительный механизм удаления со скоростью выше 10 нм/импульс; при плотности энергии от $0,2$ до $0,8$ Дж/см² доминирует окислительный механизм удаления с характерной скоростью около 10^{-2} нм/импульс; при плотности энергии ниже $0,2$ Дж/см² (порога графитизации) обнаружен новый режим абляции АП-пленок — наноабляция, вызванная, предположительно, фотохимическим механизмом удаления материала с характерной скоростью примерно 10^{-4} нм/импульс.

Проведенные исследования позволили выделить основные закономерности развития графитизованного слоя на поверхности АП-пленок. Продemonстрировано, что изменение плотности энергии предоставляет возможность управлять толщиной графитизованного слоя в пятне облучения. Установлено, что максимальная толщина графитизованного слоя составляет 580 и 1660 нм для пленок толщиной 1 и 2 мкм соответственно. Предварительные исследования показали уменьшение силы трения в зонах лазерно-индуцированной графитизации по сравнению с исходной та-С-пленкой.

Данная работа была поддержана программой РАН "Фемтосекундная оптика и новые оптические материалы". Авторы признательны Чуприк А. А. за проведенные исследования на АСМ.

Список литературы

1. Lifshitz Y. Diamond-like carbon — present status // Diamond and Related Materials. 1999. **8**. P. 1659—1676.
2. Schulz H., Scheibe H.-J., Siemroth P., Schultrich B. Pulsed arc deposition of super-hard amorphous carbon films // Applied Physics A. 2004. **78**. P. 675—679.
3. Beyer E., Scheibe H.-J., Schultrich B., Weihnacht V. Deposition technology, tribological properties and applications of superhard amorphous (ta-C) carbon films // Proc. 4th International Conference "The Coatings" in Manufacturing Engineering. 2004. P. 79—92.
4. Pekko P. Tetrahedral amorphous carbon deposited with the pulsed plasma arcdischarge method as a protective coating against solid impingement erosion // Diamond and Related Materials. 2000. **9**. P. 1524—1528.
5. Voevodin A. A., Bultman J. E., Zabinski J. S. Investigation into a 3-dimensional processing of tribological coatings // Surface & Coatings Technology. 1998. **107**. P. 12—19.
6. Blatter A., Maillat M., Pimenov S. M. et al. Lubricated friction of laser micro-patterned sapphire flats // Tribology Letters. 1998. **4**. P. 237—241.
7. Kononenko T. V., Garnov S. V., Pimenov S. M. et al. Laser ablation and micropatterning of thin TiN coatings // Applied Physics A. 2000. **71**. P. 627—631.
8. Dumitru G., Romano V., Weber H. P. et al. Laser treatment of tribological DLC films // Diamond and Related Materials. 2003. **12**. P. 1034—1040.
9. Rothschild M., Arnone C., Ehrlich D. J. Excimer-laser etching of diamond and hard carbon films by direct writing and optical projection // Vacuum Science Technology. 1986. **B4**. P. 310—314.
10. Kononenko T. V., Pimenov S. M., Kononenko V. V. et al. Laser-induced spallation in diamond-like carbon films // Applied Physics A. 2004. **79**. P. 543—549.
11. Kononenko T. V., Kononenko V. V., Pimenov S. M. et al. Effects of pulse duration in laser processing of diamond-like carbon films // Diamond and Related Materials. 2005. **14**. P. 1368—1376.
12. Schneider D., Schultrich B. Elastic modulus: a suitable quantity for characterization of thin films // Surface & Coatings Technology. 1998. **98**. P. 962.
13. Конов В. И., Кононенко Т. В., Пименов С. М. и др. Импульсно-периодическое лазерное травление алмазоподобных углеродных покрытий // Квантовая электроника. 1991. № 18, **10**. С. 1226—1228.
14. Кононенко Т. В. Исследование механизмов импульсной лазерной микрообработки аморфных углеродных пленок. Канд. дисс., Москва, 1996.
15. Strekalov V. N., Konov V. I., Kononenko V. V., Pimenov S. M. Early stages of laser graphitization of diamond // Applied Physics A. 2003. **76**. P. 603—607.
16. Pimenov S. M., Kononenko V. V., Kononenko T. V. et al. Excimer laser annealing of diamonds implanted with light ions // New Diamond and Frontier Carbon Technology. 2004. **14**, **1**. P. 21—33.
17. Кононенко В. В., Комленок М. С., Пименов С. М., Конов В. И. Фотоиндуцированное лазерное травление алмазной поверхности // Квантовая электроника. 2007. **37**. № 11. С. 1043—1046.
18. Bshushan B. Handbook of Micro/Nanotribology. 2nd edition. Boca Raton, CRC press. 1999. 859 p.

П. А. Александров, д-р физ.-мат. наук,
К. Д. Демаков, канд. техн. наук,
С. Г. Шемардов, Ю. Ю. Кузнецов,
 Российский научный центр "Курчатовский
 институт",
 Институт информационных технологий

ПРИМЕНЕНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ КИСЛОРОДА И ПРОЦЕССА ТВЕРДОФАЗНОЙ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ НА САПФИРЕ

Показано, что применение процесса твердофазной рекристаллизации после имплантации ионов кислорода энергией 120 кэВ при 130 К приводит к улучшению кристаллического качества кремниевого слоя структуры кремния на сапфире (ширина рентгеновской кривой качания уменьшается на 45 %).

Введение

Структуры кремния на сапфире (КНС) обладают рядом преимуществ при использовании их в качестве подложек в современной микроэлектронике: повышенной стойкостью к радиационным воздействиям, термостойкостью, быстродействием. Кроме того, при их использовании появляется возможность делать приборы с полной диэлектрической изоляцией. Они привлекательны для создания высокочастотных и силовых приборов вследствие малых паразитных емкостей и высокой теплопроводности сапфира. Однако качество приборов, созданных на КНС-структурах, резко ухудшается при уменьшении толщины кремниевого слоя. Островковый рост, возникающий на начальной стадии эпитаксиального осаждения кремния на сапфировую подложку, несоответствие параметров решеток и разница в коэффициентах линейного расширения кремния и сапфира приводят к высокой концентрации дислокаций, микродвойников и других кристаллических несовершенств вблизи границы раздела [1].

Использование процесса направленной твердофазной рекристаллизации значительно уменьшает число дефектов в кремниевом слое [2–10]. В этом случае при имплантации ионов аморфизуется большая часть кремниевого слоя, прилегающая к границе раздела кремний–сапфир, а оставшийся на поверхности кристаллический кремний является затравкой для твердофазной рекристаллизации при последующем отжиге. Рекристаллизованная область структурно более совершенна, чем затравочный ма-

териал. При проведении рекристаллизации в окислительной атмосфере можно получить высококачественные пленки кремния толщиной до 100 нм, что принципиально невозможно при эпитаксиальном осаждении из газовой фазы [11, 12].

В подавляющем большинстве аморфизация осуществляется имплантацией ионов кремния [2–12], хотя значительное улучшение кремниевого слоя возможно и при использовании ионов кислорода [13–15]. Эта технология имеет ряд преимуществ. Газообразные соединения кремния чрезвычайно ядовиты и взрывоопасны, а использование в качестве рабочего вещества в ионных источниках чистого кремния требует нагрева до высоких температур (~1500 °С) и довольно частой перезагрузки. При аморфизации кремниевого слоя толщиной ~300 нм необходимая энергия имплантации уменьшается от 190 кэВ (при использовании Si^+) до 120 кэВ (при использовании O^+). Кроме того, преципитаты SiO_2 препятствуют диффузии алюминия из подложки в рабочую область при высокотемпературных технологических операциях [16]. Поскольку мы и авторы работ [13–15] для оценки качества эпитаксиально-осажденного слоя использовали методы, в основе которых лежат разные физические принципы (рентгеновская дифракция в нашем случае и обратное резерфордовское рассеяние в [13–15]), и КНС-структуры с разной толщиной кремниевого слоя (300 нм в нашей работе, 700 нм в [13] и 200 нм в [14, 15]), то возможно только качественное сравнение результатов.

Несмотря на физическую прозрачность идеи рекристаллизационного улучшения структуры сам процесс имеет много стадий, соответственно много параметров надо варьировать для получения оптимального результата. Рассчитать теоретически, и то при идеальных условиях, можно только первый этап — число смещений на атом при имплантации частиц разной энергии и массы. Это дает качественную информацию о дозах имплантации и дальнейшем направлении действий. Надо признать, что поставленная задача решается в основном экспериментальным путем.

Экспериментальные результаты

Облучение проводилось на установке ИЛУ-100, созданной на базе ИЛУ-3 [17]. Коренной реконструкции подверглись все основные узлы ускорителя: высоковольтный блок, ионные источники, вакуумная система, приемные устройства, система сканирования. Максимальное рабочее ускоряющее напряжение 80 кВ. Горизонтальное сканирование пучка ионов — электромагнитное. Рабочий вакуум в приемной камере $1 \cdot 10^{-4}$ Па. Откачка осуществляется турбомолекулярными насосами. Сконструированные приемные устройства позволяют проводить об-

лучение образцов диаметром 100—150 мм в диапазоне температур 130—1300 К.

В данной работе использовалось приемное устройство с вертикально перемещающимся держателем образца, который охлаждался жидким азотом. Рекристаллизованные образцы исследовались методом рентгеновской дифракции на установке ДРОН-3М. В качестве методики измерений была выбрана схема двухкristальной брэгговской дифракции. Ширина рентгеновской кривой качания (ШКК) характеризовала кристаллографическое совершенство кремниевого слоя КНС-структуры. В нашем случае толщина слоя кремния много меньше длины экстинкции для выбранной характеристической линии $\text{CuK}\alpha$ и, значит, ШКК пропорциональна среднему по толщине слоя числу дефектов. Измерение толщины слоя SiO_2 , образующегося во время отжига в окислительной атмосфере, проводилось на эллипсометре ЛЭФ-3М.

Кремниевые пленки с ориентацией (100), эпитаксиально осажденные на плоскость (1 $\bar{1}$ 02) сапфировой подложки, аморфизировались ионами кислорода при температуре 130 К дозами $(8\text{--}12,5) \cdot 10^{14} \text{ O}^+/\text{см}^2$. Толщина кремниевого слоя ~ 300 нм. Ширина кривой качания эпитаксиального слоя исходных КНС-структур $\sim 1500''$. Энергия имплантации (120 кэВ) выбиралась из условия совпадения концентрационного максимума с границей раздела кремний—сапфир. Для достижения необходимой энергии облучение проводилось двухзарядными ионами кислорода. Скорость набора дозы ($\sim 1,6 \cdot 10^{12} \text{ O}^+/\text{см}^2 \cdot \text{с}$) выбиралась из условия предотвращения нагрева образца. После имплантации образцы размером 20×20 мм, вырезанные из пластины КНС диаметром 100 мм, подвергались двухстадийному отжигу ($550^\circ\text{C} - 30' + 1000^\circ\text{C} - 1 \text{ ч}$) во влажном кислороде. Скорость нагрева $\sim 10^\circ\text{C}/\text{мин}$. При тем-

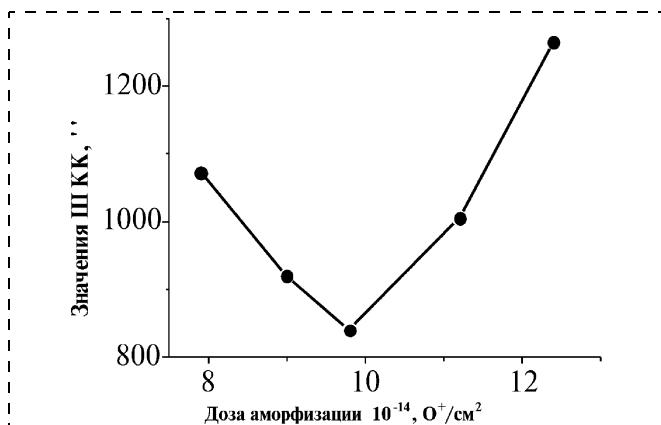


Рис. 1. Зависимость ширины кривой качания от дозы аморфизации при имплантации ионов кислорода с энергией 120 кэВ. Отжиг в окислительной атмосфере: $550^\circ\text{C} - 30' + 1000^\circ\text{C} - 1 \text{ ч}$

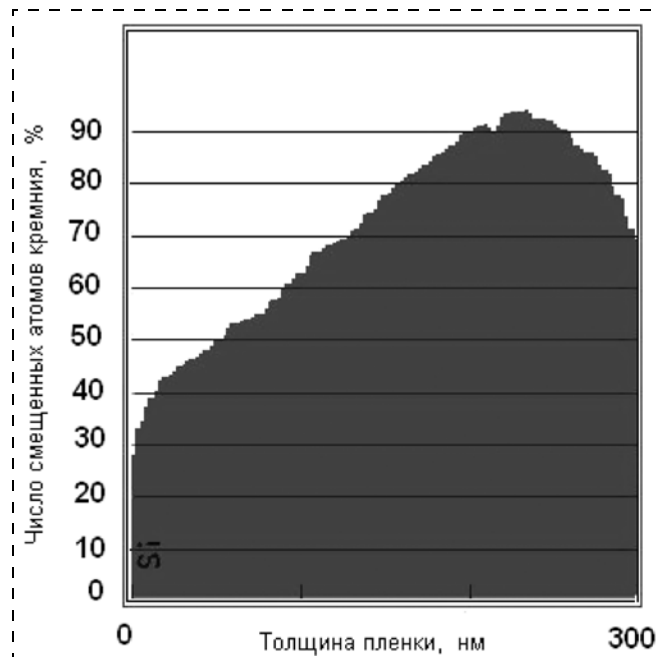


Рис. 2. Распределение смещенных атомов кремния при имплантации ионов кислорода, в процентах, (энергия — 120 кэВ, доза — $9,8 \cdot 10^{14} \text{ O}^+/\text{см}^2$)

пературе 550°C происходила рекристаллизация облученных образцов со стороны оставшегося приповерхностного монокристаллического кремния. На второй стадии термического отжига (1000°C) удалялись оставшиеся дефекты. Для образцов, отжигавшихся в окислительной атмосфере, образовавшийся поверхностный слой SiO_2 составил 435 ± 10 нм, что соответствует удаленному кремниевому слою около 190 нм.

На рис. 1 представлены экспериментальные результаты по твердофазной рекристаллизации аморфизированных ионами кислорода образцов после отжига во влажном кислороде в течение 1 ч. Зависимость ШКК от дозы аморфизации имеет ярко выраженный минимум в районе $\sim 1 \cdot 10^{15} \text{ O}^+/\text{см}^2$. При этой дозе образцы имеют наилучшее кристаллографическое совершенство (ШКК $\sim 820''$). Ход левой ветви представленной зависимости довольно очевиден: увеличение степени аморфизации и ширины аморфного слоя должны приводить к созданию кристаллически более совершенной структуры после твердофазной рекристаллизации.

На рис. 2 представлен результат расчета числа смещенных атомов кремния по глубине образца при имплантации ионов кислорода энергией 120 кэВ дозой $9,8 \cdot 10^{14} \text{ O}^+/\text{см}^2$. Расчет проводился с использованием программы SRIM-2006. При дозе аморфизации $9,8 \cdot 10^{14} \text{ O}^+/\text{см}^2$ на расстоянии 30—100 нм от границы раздела кремний—сапфир возникает область, где число смещенных атомов кремния составляет $\sim 90\%$. Таким образом, достигается высо-

кая степень аморфизации в наиболее дефектной части исходной эпитаксиально выращенной пленки кремния. В то же время, как видно из этого же рисунка, процесс рекристаллизации при дозе $9,8 \cdot 10^{14} \text{ O}^+/\text{см}^2$ начинается от более удаленного от границы раздела кремний—сапфир слоя (и соответственно, более совершенного), чем при меньших дозах.

Механизм ухудшения кристаллического качества рекристаллизованных образцов при дозах аморфизации, больших $1 \cdot 10^{15} \text{ O}^+/\text{см}^2$, не вполне ясен. Причиной этого явления может быть как ухудшение затравочного слоя при приближении к поверхности, так и процессы на границе раздела (освобождение кислорода и алюминия, препятствующих протеканию процесса рекристаллизации). Максимальное улучшение эпитаксиального слоя достигается в узком интервале доз аморфизации, что предъявляет довольно жесткие требования как к технологическим этапам процесса твердофазной рекристаллизации (погрешности дозы облучения, соблюдению температурных режимов отжига), так и к качеству исходной КНС-структуры (однородности толщины кремниевого слоя, структурному совершенству границы раздела кремний—сапфир). Однако предварительные эксперименты, проведенные на отечественных КНС-структурах диаметром 100 мм, дают разброс значений ШКК по площади образца от 800'' до 840'', что следует признать довольно приемлемым результатом на данном этапе.

Заключение

Показано, что применение процесса твердофазной рекристаллизации позволяет получать значительно более совершенные структуры кремния на сапфире (ШКК уменьшается на 45 %) с толщиной кремниевого слоя ~100 нм.

Список литературы

1. Козлов Ю. Ф., Зотов В. В. Структуры кремния на сапфире: технология, свойства, методы контроля, применение. М.: МИЭТ, 2004.

2. Inoue T., Yoshii T. Crystalline disorder reduction and defect-type change in silicon on sapphire films by silicon implantation and subsequent thermal annealing // *Appl. Phys. Lett.* 1980. Vol. 36. № 1. P. 64—65.

3. Inoue T., Yoshii T. Crystalline quality improvement of SOS films by Si implantation and subsequent annealing // *Nucl. Instrum. Methods.* 1981. Vol. 182/183. P. 683—690.

4. Amano J., Carey K. W. Low-defect-density silicon on sapphire // *J. Cryst. Growth.* 1982. Vol. 56. P. 296—303.

5. Golecki I., Maddox R. L., Stika K. M. Neutralization of electrically active aluminum in recrystallized silicon-on-sapphire films // *J. Electronic Materials.* 1984. Vol. 13. P. 373—399.

6. Golecki I. Method of eliminating p-type electrical activity and increasing channel mobility of Si-implanted and recrystallized SOS films // *United States Patent.* 1986. N 4, 588, 447.

7. Yamamoto Y., Kobayashi Y., Takahashi T. Influence of implantation induced damage in sapphire upon improvement of crystalline quality of silicon on sapphire // *Appl. Phys. Lett.* 1985. Vol. 47. № 12. P. 1315—1317.

8. Reedy R. E., Sigmon T. W., Christel L. A. Suppressing Al out diffusion in implantation amorphized and recrystallized silicon on sapphire films // *Appl. Phys. Lett.* 1983. Vol. 42. № 8. P. 707—709.

9. Parker M. A., Sinclair R., Sigmon T. W. Lattice images of defect-free silicon on sapphire prepared by ion implantation // *Appl. Phys. Lett.* 1985. Vol. 47. № 6. P. 626—627.

10. Peterstrom S. Double solid phase epitaxy of germanium-implanted silicon on sapphire // *Appl. Phys. Lett.* 1991. Vol. 58. № 25. P. 2927—2929.

11. Burgener M. L., Reedy R. E. Minimum charge FET fabricated on an ultrathin silicon on sapphire wafer // *United States Patent.* 1995. N 5, 416, 043.

12. Nakamura T., Nagatomo Y. Silicon on sapphire device technology // *Oki Technical Review.* 2004. Vol. 74. № 4. P. 66—69.

13. Yamamoto Y., Wilson I. H., Itoh T. Gettering effect by oxygen implantation in SOS // *Appl. Phys. Lett.* 1979. Vol. 34. № 6. P. 403—405.

14. Yamamoto Y., Sugiyama T., Hara A., Inada T. Crystalline quality improvement of silicon on sapphire film by oxygen implantation and subsequent thermal annealing // *J. Appl. Phys.* 1982. Vol. 53. № 1. P. 793—796.

15. Yamamoto Y., Kobayashi H., Takahashi T., Inada T. Electrical and crystallographic evaluation of SOS implanted with silicon and/or oxygen // *Nucl. Instrum. Methods.* 1985. Vol. B 7/8. P. 273—277.

16. La Ferla A., Galvagno G., Rinaudo S. et al. Ion implantation and diffusion of Al in a SiO_2/Si system // *Nucl. Instrum. Methods.* 1996. Vol. B116. P. 378—381.

17. Гусев В. М., Бушаров Н. П., Демаков К. Д., Козлов Ю. Г. Влияние каналирования на распределение электрически активных атомов бора и фосфора, внедренных в монокристаллы кремния // *Докл. АН СССР. Физика.* 1971. Т. 197. № 2. С. 319—322.

Г. А. Тарнавский, д-р физ.-мат. наук,
В. С. Анищик,
 Институт вычислительной математики
 и математической геофизики СО РАН,
 г. Новосибирск,
А. Г. Тарнавский,
 Новосибирский государственный университет

ВЛИЯНИЕ ЗАЩИТНЫХ МАСОК ПРИ ОТЖИГЕ КРЕМНИЕВОЙ ПЛАСТИНЫ НА ФОРМИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР ЛЕГИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ ФОСФОРА

На основе компьютерного моделирования физико-химических процессов термического окисления кристаллического кремния Si и сегрегации легирующих примесей фосфора P, имплантированных в базовую подложку, на фронте волны окисления SiO₂/Si, проведены исследования формирования узко локализованных наноструктур высокой концентрации P в Si, существенно превосходящие начальную равномерную концентрацию. Это обеспечивает создание в кремнии зон повышенной проводимости n-типа и используется в современных МОП- и КНИ-нанотехнологиях для получения полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами.

Введение

Кремниевый транзистор, созданный на основе МОП-технологии ("металл — оксид — полупроводник"), является основным элементом современных микропроцессоров и схем памяти (см., например, [1, 2]). Наряду с МОП-технологиями широкое распространение получают КНИ-технологии ("кремний-на-изоляторе") изготовления полупроводниковых систем, основанные на использовании трехслойной подложки со структурой "кремний — оксид кремния — кремний". Подложка, выполненная по КНИ-технологии, представляет собой трехслойный пакет, который состоит из монокристаллической кремниевой пластины, диэлектрика и размещенного на нем тонкого поверхностного слоя кремния. В настоящее время наиболее распространены КНИ-подложки, где в качестве диэлектрика-изолятора выступает диоксид кремния SiO₂ (гораздо реже — сапфир; в этом случае технология называется "кремний-на-сапфире", или КНС). Подложки могут быть получены несколькими различными способами. Один из них, термическое окисление, — отжиг пластины Si при высокой температуре. КНИ-технология подразумевает образование изолирующего слоя SiO₂

достаточно большой толщины, который при необходимости может быть частично стравлен. В следующем сегменте производственного цикла на слой оксида наращивается тонкий слой Si, например, по эпитаксиальной технологии.

Одно из преимуществ использования КНИ-подложек состоит в возможности формирования транзисторов с латеральными затворами, когда и канал, и затворы создаются из одного и того же слоя кремния. Увеличение пропускной способности канала может быть достигнуто предварительным легированием пластины Si, например фосфором P, для увеличения проводимости. При отжиге пластины Si вследствие физико-химического процесса сегрегации (выталкивания фронтом волны окисления SiO₂/Si примесей фосфора в глубь материала Si) может быть сформирован высокопроводящий слой — канал транзистора. При этом образуются узко локализованные зоны повышенной концентрации P в Si — исток транзистора. Важной особенностью транзисторов на КНИ-структурах является их работоспособность в более широком температурном диапазоне и радиационная стойкость (подробнее см. [3]).

Однако сложность КНИ-технологий обуславливает высокую цену подложек, изготовленных по этой технологии, а большая плотность дефектов в рабочих слоях является серьезным препятствием при массовом производстве полупроводниковых материалов и приборов.

В связи с этим математическое моделирование и компьютерные эксперименты (существенно менее затратные, чем физические, и значительно более мобильные) по исследованию физико-химических процессов конструирования полупроводниковых материалов с требуемыми свойствами, а также изучение отдельных элементов этих процессов представляется весьма важным направлением научной деятельности в данной области знания.

Настоящая работа является продолжением работ [4, 5] и посвящена анализу влияния защитных нитридных масок, применяющихся в сегменте "отжиг" технологического процесса развития пленки оксида и формирования наноструктур легирующих примесей фосфора в базовой подложке кремния.

Математическая формулировка задачи и параметры компьютерного моделирования физического процесса

Компьютерное моделирование применяется к исследованию физико-химических процессов одной из технологических стадий, часто используемых в производственном цикле. В базовую подложку кристаллического кремния имплантиро-

ваны легирующие примеси акцепторного типа (фосфора Р). На поверхности кремния отфрезерована (например, получена способом травления) прямоугольная выемка типа "траншея" ("trench"). Ее назначение может быть многофункциональным и использоваться для достижения различных целей, среди которых наиболее распространены две:

- создать электрическую емкость, соединенную запирающимся каналом;
- разделить подложку на два участка, слева и справа от "траншеи", каждый из которых предназначается для подложки индивидуального транзистора или группы транзисторов в интегральной микросхеме.

На рис. 1 (см. третью сторону обложки) представлена конфигурация и размеры области в начальный момент времени.

Расчетная область разделена на две подобласти — подобласть материала Si и подобласть окислителя — кислорода O_2 . Граница между подобластями представлена сплошной линией и состоит из пяти участков: левая и правая горизонтальные поверхности, левая и правая вертикальные разновысокие стенки "траншеи" и ее дно. Часть поверхности материала закрыта двумя (рис. 1, а) или тремя (рис. 1, б) нитридными масками Si_3N_4 , непроницаемыми для O_2 и защищающими соответствующие поверхности Si от непосредственного прямого окисления (имеет место лишь окисление вследствие проникновения O_2 через материал под маски). Конкретные координаты поверхности и защитных масок также указаны на рис. 1 (размеры приведены в микрометрах).

Рассматриваются процессы окисления Si (с определением конфигурации и динамики границ SiO_2/Si и SiO_2/O_2) и сегрегации примеси Р на фронте SiO_2 . Размеры области исследования: $x_{max} = 4$ мкм и $y_{max} = 2$ мкм. Число узлов расчетной сетки — 1000 по каждому координатному направлению. Начальная толщина пленки оксида SiO_2 , всегда существующая в реальных условиях и необходимая для старта вычислительного алгоритма, принималась равной 4 нм (два интервала расчетной сетки). Начальное распределение легирующих примесей Р в Si являлось равномерным, концентрация примесей составляла 10^{15} см^{-3} соответственно. Циклы компьютерного моделирования проводились при вариации температуры процесса T от 900 до 1250 °С и давления p кислорода O_2 от $0,9 \cdot 10^5$ до $1,2 \cdot 10^5$ Па (от 0,9 до 1,2 атм). Значение шага по времени τ выбиралось из соображений компромисса между точностью моделирования

(волна окисления за один интервал времени должна проходить не более двух координатных интервалов) и приемлемым временем счета одного варианта (не более 10 мин для Pentium-4, процессор 2,8 ГГц, шина 800 МГц). Конкретное значение τ существенно зависит от параметров p и T , определяющих быстрое или медленное окисление. Процесс решения заканчивался или по истечении заданного времени, или при достижении заданной максимальной глубины проникновения оксида в базовый материал по вертикальной координате y при заданном значении $\Delta y = 0,3$ мкм. Очевидно, что достижение фронтом оксида SiO_2/Si заданной глубины зависит от наличия защитной маски на дне "траншеи". Для адекватности сравнения результатов решения обеих задач (см. рис. 1, а и 1, б) для варианта "а" расчет завершался при достижении глубины проникновения оксида на 0,3 мкм в подложку под центром дна "траншеи". Это соответствовало общему протеканию процесса в течение 50 мин., и это значение времени принималось финальным для окончания расчета задачи "б". Ниже представляются результаты моделирования при $T = 1100$ °С и $p = 10^5$ Па (1 атм), полученные при использовании программного комплекса NanoТес, отработанного на широком спектре задач (см. [6—9]).

Физико-математическая формулировка и вычислительный алгоритм решения задачи окисления

Физико-математическая задача о процессе окисления базового материала сводится к двум основным подзадачам: задаче о динамике границ "оксид/окислитель" и "оксид/материал" и задаче о росте слоя оксида с увеличением и деформацией его объема.

Общая область исследуемого физического процесса (см. рис. 1) состоит из трех подобластей: подобласти материала Si, подобласти оксида SiO_2 и подобласти окислителя O_2 . Пусть эти подобласти отделены друг от друга границами G_1 и G_2 соответственно:

$$G_1: y = y_1(x, t), SiO_2/Si; \quad (1)$$

$$G_2: y = y_2(x, t), SiO_2/O_2. \quad (2)$$

Граница G_1 движется в глубь Si, а G_2 — в подобласть O_2 , при этом на их перемещение дополнительно к законам движения фронтов (см. ниже) налагается условие

$$\Delta_1 = \alpha \Delta_2, \quad (3)$$

называемое "законом наработки объема" и связывающее объем прореагировавшего вещества Δ_1

с объемом Δ_2 возникшего из него окисла, α — коэффициент, в частности, для превращения кристаллического кремния Si в диоксид кремния $\alpha = 0,44$. Подчеркнем, что в некоторых технологических процессах часть границы G_1 может быть закрыта защитной маской, препятствующей окислению. Вопрос моделирования состоит в том, чтобы определить эволюцию границ G_1 и G_2 с их возможным самопересечением и образованием многосвязных областей.

Используемая для расчетов приближенная модель основана на замене сложного физико-химического описания процесса его существенно осредненным аналогом — процессом диффузии окислителя через оксид к материалу с использованием достаточно эмпирической модели взаимодействия на границах. Ставится следующая эволюционно-краевая задача: в подобласти SiO_2 отыскивается решение уравнения диффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla F = 0, \quad (4)$$

где диффузионный поток F связан с коэффициентом диффузии D и градиентом концентрации окислителя C соотношением

$$F = -D(x, y, C) \nabla C. \quad (5)$$

Краевые условия определяются равенством диффузионного потока (5) с потоком окислителя через границы в SiO_2 :

$$\text{на } G_1 \Rightarrow F = k_s C n_1; \quad (6)$$

$$\text{на } G_2 \Rightarrow F = h(C^* - C) n_2. \quad (7)$$

Здесь k_s , h , C^* — физические константы задачи (см., например, [10]), а n_1 и n_2 — нормали к G_1 и G_2 соответственно. Система (4)–(7) замыкается на границах $x = 0$ и $x = x_{\max}$ условием для данной конкретной задачи непроницаемости (зеркальной симметрии), выражающим то обстоятельство, что указанная на рис. 1 область является всего лишь одним участком протяженной кремниевой пластины:

$$F = 0. \quad (8)$$

Скорость движения V_1 каждой точки границы G_1 определяется скоростью проникновения окислителя в материал:

$$V_1 = \frac{F}{N_1}, \quad (9)$$

где N_1 — число молекул окислителя, необходимых для формирования единицы объема оксида. По (9) можно однозначно определить эволюцию границы G_1 . Эволюция границы G_2 связана с эволюцией границы G_1 только опосредовано через условие (3), что является необходимым, но не достаточным для однозначного определения формы и динамики G_2 . Эта проблема в данной задаче наиболее трудна и требует специального моделирования.

Компьютерное моделирование такого сложного комплексного процесса наталкивается на значительные трудности и в настоящее время в основном сводится к решению одномерных задач или 2D-моделированию в квазиодномерной постановке, когда по одному из координатных направлений проводится прямое численное моделирование, а влияние второго координатного направления учитывается некоторыми эмпирически сконструированными аналитическими зависимостями. Наибольшее распространение из этого эмпирического подхода имеет модель "птичьего клюва" [10] и ее многочисленные вариации (см., например, [11]).

Для моделирования процесса роста пленки оксида достаточно широкое распространение получили: "сжимаемая" модель, или модель "давления"; "вязкая" модель; "вязко-эластичная" модель (см., например, [12]). Сущность всех перечисленных моделей заключается в представлении физического процесса образования оксида некоторым аналогом из области гидродинамики, при этом оксид рассматривается как жидкость: в одних (простых) моделях — как несжимаемая и идеальная (без вязкости и теплопроводности), в других — как сжимаемая и идеальная, в третьих — как сжимаемая и вязкая, в четвертых, наиболее продвинутых, для описания процесса как гидродинамического добавляются еще некоторые понятия из теории упругости (эластичность) и пластичности. Однако вопрос о точности этого пути моделирования по-прежнему остается весьма и весьма дискуссионным.

В данных моделях имеют место существенно искусственные элементы, такие, например, как способы построения "вязкого тензора напряжений", определение коэффициентов переноса, а также замыкание гидродинамической части системы уравнений некоторым аналогом уравнения состояния, устанавливающим связи между "давлением", "плотностью" и "температурой". Эти модели ориентированы на решение вариантов конкретных задач и фактически не могут быть расширены за их рамки. Об этом свидетельствует сам факт появления усложняющихся в гидродинамическом описании моделей: несжимаемая — сжимаемая невязкая — сжимаемая вязкая — сжимаемая вязкоэластичная.

В настоящей работе для моделирования динамики развития слоя оксида применялся специально разработанный вычислительный метод "когерентных (попарно сопряженных) точек", в методологическом плане опирающийся (в некотором смысле) на идеологию теории струн. Главная позиция этого метода заключается в следующем. Каждая точка границы SiO_2/Si связана с одной и только одной точкой границы SiO_2/O_2 некоторым "виртуальным каналом" — 1D-линией (направлением). Вдоль этой линии предполагается проникновение O_2 к Si через SiO_2 и в обратном направлении — "переброска" части вновь наработанного объема SiO_2 . Перемещение когерентной точки на границе SiO_2/Si происходит перпендикулярно ее фронту на расстояние $d_1 = V_1\tau$ на каждом шаге τ вычислительного алгоритма, а скорость V_1 определяется физикой процесса — скоростью проникновения (9) окислителя в материал.

Рост слоя оксида с противоположной стороны происходит перемещением когерентной точки на другом конце "виртуального канала" на границе SiO_2/O_2 перпендикулярно ее фронту в область O_2 на расстояние d_2 на каждом временном шаге вычислительного алгоритма. Это перемещение также определяется физикой процесса — законом (3) наработки объема оксида из материала $d_2 = d_1/\alpha$.

Подчеркнем, что "виртуальные каналы" не пересекаются друг с другом, что исключает нефизическую возможность перекрестного движения среды и окислителя в оксиде.

В алгоритме разработана специальная методика определения когерентности точек участков границ SiO_2/Si и SiO_2/O_2 , находящихся под защитными масками, а также методика организации вычислений в случае образования многосвязных подобластей Si в SiO_2 . Подробное описание вычислительного метода, алгоритма, некоторых особенностей его компьютерной реализации и результатов вычислительных экспериментов приведено в [6].

Физико-математическая формулировка и вычислительный алгоритм решения задачи сегрегации легирующих примесей

Основной элемент этого технологического этапа, называемого "отжигом базовой подложки", опирается на особый физический эффект, который заключается в том, что на фронте волны окисления SiO_2/Si происходит сегрегация легирующих примесей Р. Сегрегация — сложный физико-химический процесс, в котором проявляются особые свойства воздействия фронта волны окисления ма-

териала IV группы элементов таблицы Менделеева на имплантированные в этот материал акцепторные и донорные легирующие примеси элементов III группы и V(a) подгруппы (типа В и Р соответственно). Примеси типа Р выталкиваются из оксида в материал, а примеси В, наоборот, втягиваются из материала в оксид, с последующей диффузией в Si и SiO_2 и конвективным переносом в SiO_2 .

Моделирование явления сегрегации на высоком уровне (квантовая механика, статистическая физика) требует слишком больших ресурсов вычислительной техники, поэтому применяются существенно усредненные подходы. Сущность приближенной модели заключается в следующем. Волна "оксид/материал", которая рассматривается как бесконечно тонкий разрыв, двигаясь в глубь материала, устанавливает в каждой точке своего фронта (по нормали к нему) соотношение, называемое законом сегрегации:

$$m = \frac{C_+}{C_-}, \quad (10)$$

где C_+ и C_- есть концентрации примеси в базовом материале перед фронтом и в оксиде за фронтом скачка соответственно. Величина m , называемая коэффициентом сегрегации, приближенно зависит от ряда факторов:

$$m = m_0 e^{-W_s/kT}, \quad (11)$$

где m_0 — предэкспоненциальный множитель; W_s — потенциал сегрегации; k — постоянная Больцмана; T — температура подложки. Значения m_0 и W_s существенно различны для разных химических элементов и определяются конкретным типом примеси во взаимодействии с конкретным типом волны. Соотношение (11), вообще говоря, справедливо для равновесных процессов, однако в данную гипотезу бесконечно тонкого скачка (10) может быть введена поправка на неравновесность, которая учитывается введением эффективного коэффициента сегрегации m^* :

$$m^* = \frac{1}{\eta(1-B) + B/m}, \quad (12)$$

где m — равновесный коэффициент сегрегации ($m = 200$ для фосфора); η — коэффициент отношения объема исходного материала к объему его оксида ($\eta = 0,44$ для фосфора), $B = \lambda/(\lambda + V_1)$, λ — константа скорости реакции сегрегации (для Р в Si, например, $\lambda = 7,5 \cdot 10^5 \exp(-2 \text{ эВ}/kT)$ мкм/мин),

V_1 — скорость окисления (9), зависящая от типа окислителя и его давления и температуры.

Решение задачи (10)–(12), в 1D-постановке не вызывает особых затруднений. Однако расширение подхода (10) на 2D- и тем более на 3D-задачи наталкивается на значительные трудности, в том числе связанные с переходом от непрерывной дифференциальной задачи к дискретной, в особенности при комплексном моделировании всей проблемы в целом (окисление материала, сегрегация примесей, эволюция слоя оксида, диффузия примесей в оксиде и материале и т. д.).

Корректная декомпозиция полной задачи и последовательный расчет ее отдельных сегментов, на наш взгляд, позволяет наиболее эффективно моделировать сложные физические процессы. В [7] приведено детальное описание разработанного эффективного вычислительного алгоритма решения задачи о сегрегации легирующих примесей различных типов (акцепторных и/или донорных) на фронте волны окисления, а также приведена библиография по данному вопросу. Подробно изложены ключевые аспекты этого алгоритма: триангуляция расчетной области; определение направлений выталкивания или втягивания примесей; вычисление массы, выталкиваемой из ячейки-донора; вычисление масс, получаемых ячейками-перцепиентами; контроль за сохранением массы примесей. Результаты вычислительных экспериментов по сегрегационным процессам приведены в [8, 9].

Разработанный теоретический метод и вычислительный алгоритм расчета сегрегационных задач показал высокую точность и безотказность функционирования в широком диапазоне определяющих параметров и является одним из ключевых аспектов компьютерного конструирования полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами.

Финальная конфигурация пленки оксида

После завершения процесса отжига исходные конфигурации кремниевой подложки, показанные на рис. 1 (см. третью сторону обложки), существенно трансформируются. Финальные конфигурации представлены на рис. 2 (см. третью сторону обложки). Области оксида, отсутствующие в начальный момент, составляют значительную часть системы "оксид — материал". Анализируя топологию области оксида на рис. 2, можно не только качественно, но и количественно определить влияние масок на скорость окисления и проследить развитие исходно плоской пленки оксида в конфигурацию типа "птичьего клюва" [10] с сильным сжатием пленки оксида под масками. В отличие от [10],

представляемый результат получен непосредственно в результате прямого численного моделирования без использования характерных для модели "птичьего клюва" "подгоночных параметров": "толщины и крутизны клюва", "сдвига" края маски и т. п. (как, например, в [11]). В представляемой модели [6] в таких параметрах нет необходимости, а сдвиги краев масок и их изгибы определяются в расчете точно из принципа "сохранения длины маски при ее изгибе" интегрированием расстояния вдоль поверхностей масок. Более того, разработанная модель позволяет проводить изучение ситуаций, когда области влияния масок смыкаются и на границах SiO_2/Si и SiO_2/O_2 вообще нет плоских участков; эти ситуации недоступны для моделирования с использованием аналитики [10]. Отметим также, что интегральный контроль за процедурой расчета динамики границ с существенным подъемом системы масок растущей пленкой оксида, определяемый законом "наработки объемов" (объем оксида равен 2,27 объема материала), показывает хорошую точность моделирования процесса.

Укажем на важную особенность (рис. 2, а) формы наработанного диоксида кремния, которую невозможно получить при использовании аналитических моделей [10, 11], а также моделей, основанных на представлении оксида "вязкостно-пластичными" средами с большим числом констант с недостаточно ясным смыслом (управляющие параметры в программных комплексах [13, 14]), индивидуальным для каждой задачи.

Подчеркнем, что важные вопросы применения комплексов коммерческих компьютерных программ в научных исследованиях подробно рассматриваются в [15].

Обратим внимание на прямые углы границы Si/O_2 , вершины которых в начальный момент времени (см. рис. 1) имели координаты (1.5, 1) и (2.5, 1.5). Эволюция этих углов во времени при "расщеплении" границы Si/O_2 происходит по-разному для границы "оксид/окислитель" SiO_2/O_2 (верхняя граница оксида) и границы "оксид/материал" SiO_2/Si (нижняя граница). Для границы SiO_2/O_2 эти углы существенно деформируются, а для границы SiO_2/Si углы сохраняют практически прямоугольную форму для двухмасочного варианта (рис. 2, а) отжига и не сохраняются для трехмасочного варианта (рис. 2, б), где донная маска перераспределяет потоки O_2 в SiO_2 к Si , что существенно влияет на форму границы SiO_2/Si , в том числе на прямоугольность формы участка. Заметим, что различная эволюция прямых углов границ "оксид/окислитель" и "оксид/материал" определяется

существенно различными механическими свойствами Si (кристаллическая решетка, твердость материала) и SiO₂ (аморфность, вязко-пластичные свойства).

Другая по характеру эволюция имеет место для остальных углов "траншеи" с координатами (1.5, 0.5) и (2.5, 0.5) в начальный момент времени (см. рис. 1). Эти углы являются внешними ("тупыми") для материала (прямые углы равны 270°), в отличие от рассмотренных выше, где прямые углы для материала являлись внутренними ("острыми"), с прямыми углами 90°. При "расщеплении" границы Si/O₂ прямоугольность сохраняется для границы SiO₂/O₂, а на границе SiO₂/Si углы существенно трансформируются. Маска, закрывающая часть дна траншеи, влияет на прямолинейность левой стенки больше, чем правой, вследствие их разной высоты. Заметим также, что к концу процесса (рис. 2, б) левая стенка границы SiO₂/O₂ потеряла плоскую форму, а правая — сохраняет плоскую поверхность на большом участке.

Форма границы SiO₂/Si (в меньшей степени SiO₂/O₂) кардинально влияет на итоговое распределение концентраций примесей и формирование их особых наноструктур.

Формирование наноструктур легирующих примесей

При проведении компьютерных экспериментов, представляемых в настоящей работе, по изучению влияния технологических защитных масок, закрывающих часть поверхности кремниевой пластины специальной формы при ее отжиге и равномерно (по всему объему) легированной фосфором, ставились следующие цели.

Главная из них — исследовать процесс перераспределения P в Si и определить финальную картину распределения концентраций фосфора $C_P(x, y)$ по всему объему пластины. При этом особое внимание необходимо уделить узколокализованным наноразмерным гетероструктурам.

В целом априори предполагалось образование слоев повышенных значений C_P , ориентированных в направлении вдоль вертикальных боковых границ "траншеи", под областью еще более высоких значений C_P , образуемых вытеснением фос-

фора фронтом волны SiO₂/Si, продвигающейся от верхней поверхности пластины. В этих под областях возможна организация истока транзистора (справа и слева от "траншеи").

Горизонтальный фронт волны SiO₂/Si, продвигающейся от дна "траншеи" "вниз" (двухмасочный отжиг, без маски на дне "траншеи"), формирует горизонтально ориентированный слой высокого легирования, т. е. повышенной проводимости *n*-типа. Этот слой может служить каналом транзистора, если в области самой "траншеи" создать затвор транзистора (например, эпитаксиальным методом). При этом подзатворный слой диэлектрика — диоксид кремния — уже здесь организован.

Наличие третьей защитной маски (вариант "б") препятствует движению фронта волны SiO₂/Si "вниз" от дна "траншеи". Соответственно, концентрация C_P в этом варианте отжига здесь ожидается ниже, чем в варианте "а". В этом случае проводимость также ниже, и управление транзистором (закрытие или открытие канала) будет другим. Однако эта проблема принадлежит к вопросам конструирования интегральных микросхем.

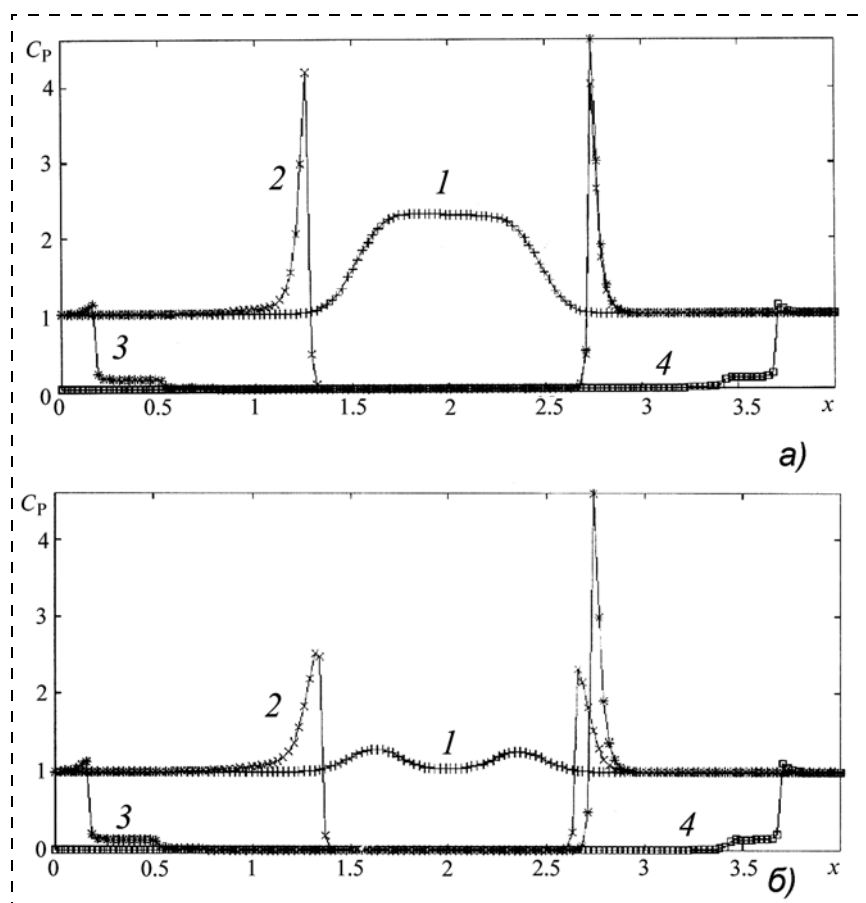


Рис. 3. Распределение концентраций фосфора $C_P(x, y)$ в кремнии и диоксиде кремния вдоль x при различных значениях $y = 0,20$ (кривая 1), $0,61$ (кривая 2), $1,0$ (кривая 3) и $1,47$ (кривая 4) для двухмасочной (а) и трехмасочной (б) технологии отжига

Рассмотрим результаты компьютерного моделирования и проанализируем влияние наличия или отсутствия третьей защитной маски, т. е. проведем сравнение результатов двух- и трехмасочной технологии отжига.

На рис. 3 представлены распределения концентраций фосфора $C_p(x, y)$ в кремнии и диоксиде кремния вдоль x при различных значениях $y = 0,20$ (кривая 1), 0,61 (кривая 2), 1,0 (кривая 3) и 1,47 (кривая 4) соответственно для двух- и трехмасочной технологий. Эти координаты являются весьма характерными горизонтальными уровнями задачи.

Уровень $y = 0,20$ — это горизонт, достигнутый волной оксида в центральной части, двигавшейся вниз от дна "траншеи" (см. рис. 2). Справа и слева — подложка неокисленного материала. Соответственно здесь $C_p(x, 0,20) = 1$. Напомним, что значения концентраций нормированы к их начальным значениям. Но на этом горизонте под дном "траншеи" в подобласти ($1,5 < x < 2,5$) кривые концентраций C_p весьма различаются для разных технологий производства. Так, при двух масках, т. е. при отсутствии маски, защищающей часть дна "траншеи" (рис. 3, а), в центре образуется зона высокой концентрации с максимумом C_p около 2,2, а при наличии третьей маски распределение C_p имеет синусоподобный волнообразный характер (с минимумом в центре). Такая конфигурация C_p усиливает проводниковые свойства с возможностью организации здесь переключателя направления тока в канале.

Уровень $y = 0,61$ является горизонтом внутри области Si слева и справа от "траншеи", пересекающим область максимального образования оксида в "траншее". На этом уровне эволюция движения SiO_2/Si приводит к существенному перераспределению концентраций вдоль x -направления. Для обоих вариантов (кривые 2 на рис. 3, а, б) имеем следующее (слева направо). Начальные распределения $C_p = 1$ сохраняются до $x \approx 1,2$. Затем перед фронтом SiO_2/Si ($x \approx 1,35$) происходит исключительно резкий рост C_p (до значений 2,2 для варианта "б" и до 4,1 для варианта "а") и еще более резкое падение за фронтом, практически до нуля в области оксида SiO_2 (эффект "бульдозера" с выталкиванием примесей фосфора почти полностью, см. также [9]). Далее, после довольно протяженной области SiO_2 с почти нулевой концентрацией фосфора имеет место еще более резкий всплеск C_p от 0 до значения 4,5 для обоих вариантов на фронте SiO_2/Si справа от "траншеи", при $x \approx 2,7$ с последующим падением в подобла-

сти $x > 2,8$ (в Si) до начальных значений $C_p = 1$. Подчеркнем, что эти всплески весьма узко локализованы, ширина зоны около 60—80 нм.

Уровень $y = 1$ является горизонтом левой поверхности пластины кремния в начальный момент времени, где доминирующим направлением процесса окисления является вертикальное и, дополнительно от левой стенки "траншеи", — горизонтальное. Этот уровень пересекает правую границу "траншеи", где доминирующим направлением процесса окисления является только горизонтальное направление. Результаты перераспределения примесей Р представляют на этом уровне кривые 3 (рис. 3, а и б соответственно). Зависимость $C_p(x, 1)$ имеет простой вид, который определяется интерференцией процессов, подробно проанализированных выше, для уровней 0,20 и 0,61. Отметим, что фосфор почти весь вытолкнут из области оксида. Напомним во избежание неверного анализа, что на этом уровне (см. рис. 1 и 2) существует пять подобластей: Si (частично под маской), SiO_2 , O_2 , SiO_2 , Si (перечисление слева направо вдоль x). Естественно, в области O_2 концентрации примесей нулевые.

Четвертый уровень, $y = 1,47$, приведен на рис. 3 для анализа двух почти независимых процессов: процесса движения вертикального фронта SiO_2/Si в горизонтальном направлении от правой стенки "траншеи" и процесса движения горизонтального фронта SiO_2/Si в вертикальном направлении (с проникновением под горизонтально расположенную маску). Движение фронтов SiO_2/O_2 происходит, соответственно, в обратных направлениях.

Проведенный выше анализ должен быть дополнен анализом распределения концентраций примесей фосфора, полученных к концу процесса отжига, в y -направлении, поперечном к поверхности пластины Si.

На рис. 4, а и б соответственно для двух- и трехмасочного отжига приведены распределения концентраций фосфора $C_p(x, y)$ в кремнии и диоксиде кремния вдоль y при различных значениях $x = 0,75$ (кривая 1), 2,00 (кривая 2) и 2,90 (кривая 3). Эти вертикальные линии проходят в наиболее характерных зонах. Первая линия проходит области материала Si, пересекает фронты SiO_2/Si и SiO_2/O_2 (между которыми располагается подобласть SiO_2) и выходит в область O_2 . Вторая линия — центральная линия задачи: начинается в области Si, пересекает (в варианте "б") маску, лежащую на дне "траншеи", вокруг которой сформировался доста-

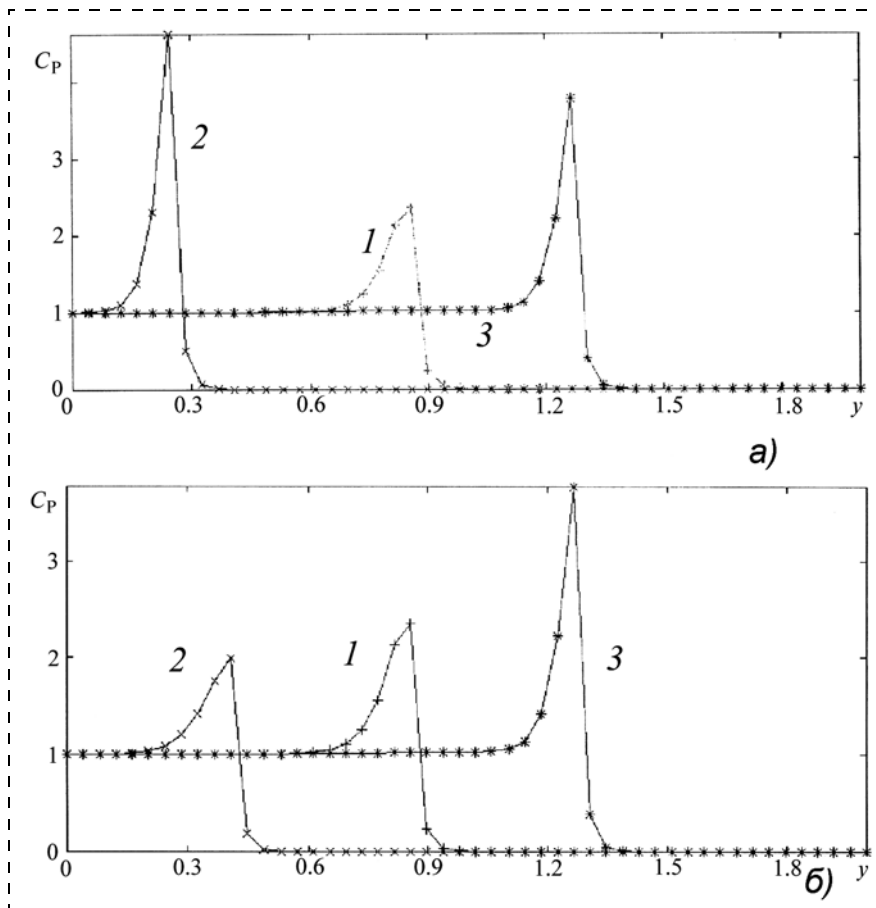


Рис. 4. Распределение концентраций фосфора $C_P(x, y)$ в кремнии и диоксиде кремния вдоль y при различных значениях $x = 0,75$ (кривая 1), $2,00$ (кривая 2) и $2,90$ (кривая 3) для двухмасочной (а) и трехмасочной (б) технологии отжига

точно толстый слой SiO_2 , и выходит в область O_2 . Третья линия адекватна первой, с тем лишь отличием, что она проходит в более высоком слое Si (справа от "траншеи").

Проанализируем результирующее распределение примеси фосфора на центральной линии задачи (кривая 2). Естественно, результаты существенно зависят от наличия здесь защитной маски. При свободной, открытой поверхности (рис. 4, а) фронт оксида, достаточно плоский на середине "траншеи", выталкивает значительную часть фосфора при своем движении в глубь материала. К концу процесса концентрация фосфора перед фронтом вчетверо ($C_P \approx 4,1$) превосходит исходную равномерную. Вследствие этого здесь образуется узколокализованный гетерослой высокого легирования и, соответственно, высокой проводимости, в котором оптимально организовать канал транзистора.

Иное распределение C_P формируется при наличии на дне "траншеи" защитной маски. Если бы маска занимала все дно "траншеи", то распределение $C_P(2, y)$ сохранялось бы до конца процесса равным 1 под маской (в Si) и равным 0 в O_2 . В данном

производственном цикле, когда маска вдвое короче ширины "траншеи", процесс окисления (фронт SiO_2/Si) продвигается и под маску. При этом фронт "толкает" перед собой фосфор. Поскольку фронты волн окисления, идущие под центр маски с левого и правого ее краев, сомкнулись на уровне $y \approx 0,4$ (см. рис. 2, б), то следует ожидать здесь максимума, что и имеет место: $C_P(2, 0,4) \approx 2$. Далее при увеличении $y > 0,5$ располагается область над маской (при $t = 0$ здесь $C_P = 0$). В момент завершения процесса над маской образуется область оксида SiO_2 до $y \approx 0,6$. Теперь здесь концентрация C_P очень незначительна, но все-таки не нулевая (остаточное "недовыталкивание" P в SiO_2). Дислокация оксида над маской определяется законом "наработки" объема SiO_2 из Si и продвижением SiO_2 поверх маски из-под нее и от стенок "траншеи".

Аналогично в принципе для обоих вариантов "а" и "б" распределение фосфора и на других линиях (кривые 1 и 3 рис. 4). Формируется максимум C_P вблизи фронта

SiO_2/Si с плавным изменением в область Si и крутым падением в область SiO_2 и далее — до нулевых значений в области O_2 .

Таким образом, в процессе распространения волн окисления в базовом материале равномерные в начальный момент распределения примесей фосфора и бора, вследствие процесса их сегрегации на фронте SiO_2/Si , стали существенно неравномерными вдоль каждого из координатных направлений, и эта неравномерность существенно зависит от технологии (двух- или трехмасочной) отжига.

Заключение

На основе компьютерного моделирования физико-химических процессов термического окисления кристаллического кремния Si и сегрегации легирующих примесей фосфора P, имплантированных в базовую подложку, на фронте волны окисления SiO_2/Si проведены исследования формирования узколокализованных наноструктур высокой концентрации P в Si, существенно превосходящие начальную равномерную концентра-

цию. Это формирование обеспечивает создание в кремнии зон повышенной проводимости *n*-типа и используется в одном из сегментов (отжиге базового материала) производственного цикла в современных МОП- и КНИ-нанотехнологиях получения полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами.

Теоретические и экспериментальные исследования, развитие вычислительной техники и переход к многоядерным архитектурам микропроцессоров приводят к непрерывному уменьшению размеров эффективных транзисторов от 0,28 к 0,25 мкм, затем к 0,18 и 0,13 мкм. В последнее пятилетие осуществился переход от микро- к нанoeлектронике, что нашло отражение даже в маркетинге фирм-изготовителей процессорной техники (Intel, AMD), с изменением обозначений технологических размеров от микрометров к нанометрам с их последовательным уменьшением: 130 нм-, 90 нм-, 65 нм-, 45 нм-технологии. Корпорация Intel уже анонсировала выпуск в массовое потребление процессоров, изготовленных по 32 нм-технологии. Если закон Мура продолжит выполняться и далее, то в ближайшем будущем возможно достижение теоретического 1,5 нм-предела кремниевой электроники.

Компьютерные эксперименты, являясь по сравнению с физическими более мобильными, с возможностью перебора сотен и даже тысяч вариантов, с быстрым и эффективным анализом их результатов, а также со способностью наращивания уровней используемых физико-математических моделей, играют все более и более возрастающую роль в дизайне новых полупроводниковых материалов.

В заключение авторы считают приятным долгом выразить благодарность проф. С. Н. Коробейникову за полезные обсуждения работы и проф. Г. С. Хакимзянову за ценные дискуссии в области современных нанотехнологий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 06—08—00384).

Список литературы

1. Алферов Ж. И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32. № 1. С. 3—18.

2. Асеев А. Л. Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой электроники // Российские нанотехнологии. 2006. № 1. С. 97—110.

3. Асеев А. Л., Попов В. П., Володин В. П., Марютин В. Н. Перспективы применения структур "кремний-на-изоляторе" в микро-, нанoeлектронике и микросистемной технике // Микросистемная техника. 2002. № 9. С. 3—17.

4. Тарнавский Г. А., Алиев А. В., Тарнавский А. Г. Создание специальных наноструктур донорных и акцепторных примесей в базовой подложке кремния для конструирования новых полупроводниковых материалов // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 9. С. 2—7.

5. Тарнавский Г. А., Алиев А. В., Тарнавский А. Г. Математическое моделирование процессов формирования наноструктур легирующих примесей в базовом материале (нанотехнологии для микroeлектроники) // Сибирский журнал вычислительной математики. 2007. Т. 10. № 4. С. 401—416.

6. Александров А. Л., Тарнавский Г. А., Шпак С. И., Гулидов А. С., Обрехт М. С. Численное моделирование задачи динамики роста пленки окисла в полупроводниковых подложках на основе геометрического подхода и метода Дила—Гроува // Вычислительные методы и программирование. 2001. Т. 2. № 1. С. 92—111.

7. Тарнавский Г. А., Шпак С. И., Обрехт М. С. Численное моделирование и компьютерный алгоритм процесса сегрегации легирующих примесей на границе волны окисления в полупроводниковых подложках // Вычислительные методы и программирование. 2001. Т. 2. № 1. С. 12—26.

8. Тарнавский Г. А., Шпак С. И., Обрехт М. С. Сегрегация бора, имплантированного в кремний, на угловых конфигурациях волны окисления кремний/двуокись кремния // Письма в Журн. экспериментальной и теоретической физики. 2001. Т. 73. № 9—10. С. 536—541.

9. Тарнавский Г. А., Шпак С. И., Обрехт М. С. Особенности сегрегации легирующих примесей элементов V(a)-подгруппы на угловых конфигурациях границы окисления "кремний/двуокись кремния" // Инженерно-физический журн. 2002. Т. 75. № 1. С. 142—147.

10. Deal B. E., Grove A. S. General relationship for the thermal oxidation of silicon // Appl. Phys. 1965. V. 36. P. 37—70.

11. Кольдяев В. И., Мороз В. А., Назаров С. А. Двумерное моделирование легирования и окисления // Автометрия. 1988. № 3. С. 46—55.

12. Senez V., Fereiza P., Baccus A. Two-dimensional simulation of local oxidation of silicon: calibrated viscoelastic flow analysis // IEEE Trans. Elec. Dev. 1996. V. 43. N 5. P. 720—731.

13. Приборно-технологическое моделирование. Система автоматического проектирования ISE TCAD Sentaurus // Интернет-сайт <http://www.synopsys.com/products/tcad.html> (рус.: <http://www.isen.ru/ise/prod.html>).

14. MicroTec: Software Package for Two-Dimensional Process and Device Simulation // Интернет-сайт <http://www.siborg.ca>.

15. Тарнавский Г. А., Алиев А. В. Математическое моделирование: основные сегменты, их особенности и проблемы // Вычислительные методы и программирование. 2007. Т. 8. С. 297—310. Интернет-журнал: <http://www.srcc.msu.ru/num-meth>.

Спонтанный наномagnetизм островков графена

Ученым из Испании удалось установить, что островки графена нанометровых размеров могут быть магнитными. Это удивительно потому, что на атомарном уровне графен не проявляет магнитных свойств, а графеновые кластеры, напротив, этими свойствами обладают.

Фернандес Россье (*Fernandez Rossier*), один из исследователей из университета Аликанте (*Alicante University*), считает, что графеновая наноэлектроника намного перспективней современной кремниевой. Это связано с тем, что электроны в "двумерном" графене ведут себя как безмассовые фермионы Дирака, а процессы, происходящие с ними, описываются уже квантовой механикой. Благодаря краевым и поверхностным эффектам электронные свойства графеновой пленки существенно отличаются от "объемного графена".

Россье и его коллеги обнаружили еще одно интересное свойство графеновых кластеров небольшого размера — спонтанную поляризацию спина, связанную с формой и размерами немагнитного ранее нанокластера (рис. 1, см. четвертую сторону обложки).

Интересно то, что магнетизм проявляется только тогда, когда нанокластер формирует треугольник или же любую гексагональную структуру. А это уникально для структуры графеновых наноматериалов, говорит Россье.

Как считают ученые, их исследование открывает новый тип магнетизма, возникающий от изменения спектра кластера, поэтому немагнитные материалы и становятся магнитными. А это, в свою очередь, может вызвать новые изыскания в области наноэлектроники и наномagnetизма.

Источник: Nanotechweb: Graphene nanoislands go magnetic (<http://nanotechweb.org/cws/article/tech/32241.jsessionid=63DE66DF7EFF154CABA31AFE002D3ECC>)

Пористый наносенсор сможет детектировать отдельные вирусы

Ученые из Нью-Йорка создали наносенсор, способный детектировать отдельные вирусы. В будущем подобные наносенсоры смогут распознавать различные вирусы: гриппа, SARS, птичьего гриппа и др.

Как говорит один из ученых университета Рочестера (*University of Rochester, New York*), Филипп Фачет (*Philippe Fauchet*), наносенсор представляет собой пластину из кремния с наноразмерными порами диаметром около 240 нм (рис. 2).

Поры были образованы на кремниевой пластине с помощью электронно-лучевой литографии. Полная площадь наносенсора — 40 мкм². Как говорят ученые, это один из самых миниатюрных наносенсоров подобного типа.

Принцип действия наносенсора достаточно прост: спектр луча лазера, отраженного от сенсора, изменяется, если в полость попало какое-либо тело. Детектором можно уловить эти изменения в спектре и на их основании сделать выводы о размерах частиц, попавших в полость сенсора. Так, к примеру, вирус гриппа А имеет диаметр около 100 нм, а гепатита — 50 нм.

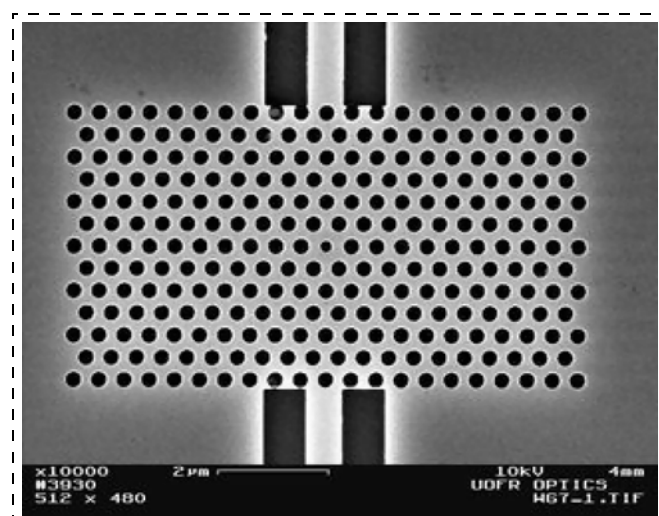


Рис. 2. Наносенсор (микрофотография)

Ученые говорят, что этот наносенсор представляет собой двумерный фотонный кристалл.

Пока работоспособность устройства проверялась на "тестовых" латексных сферах разного диаметра, однако Филипп и его коллеги уверены в дальнейшем развитии наносенсора и будущем появлении в медицине устройств на его основе.

Источник: PhysOrg: Nanocavity Sensor Detects Virus-Sized Particles (<http://www.physorg.com/news117374843.html>)

Новый тип нанопамяти создан учеными из Тайваня

Ученые из Тайваня создали компьютерную энергонезависимую память на основе органических наночастиц.

Отличие от ряда подобных проектов нанопамяти состоит в том, что полученный модуль выполнен на гибком полимерном субстрате (рис. 3, см. четвертую сторону обложки). Это удалось сделать ученым из национального университета Тайваня Чанг Синг (*National Chung Hsing University of Taiwan*).

Устройство состоит из полимера РСм с наночастицами, расположенного между двух алюминиевых электродов. Опытный образец может хранить всего 16 байт информации.

Хотя устройство и называется энергонезависимым, но реальное время хранения информации в чипе-прототипе составляет 10 дней. Это связано с тем, что в "отключенном" состоянии модуля между наночастицами протекает очень слабый, "виртуальный", как его назвали исследователи, ток. Но как только на устройство подают рабочее напряжение 2 В, ток усиливается почти в 10 000 раз.

Гибкие микрочипы и электроника на их основе — основные кандидаты для RFID-меток, смарт-карт, гибких дисплеев для мобильных телефонов и "умного текстиля".

Несмотря на малое время автономной работы ученые собираются увеличить его втрое уже во время изготовления следующего прототипа.

Новое устройство было представлено на международной встрече в США 2007 IEEE *International Electron Devices Meeting* в Вашингтоне. Оно будет показано на международном симпозиуме по гибкой электронике и дисплеям, который пройдет 17–18 декабря в Тайване (*International Symposium for Flexible Electronics and Displays*).

Интересно, что в марте 2007 г. США выделили 9,1 млн долл. на разработку гибкой электроники.

Источник: PhysOrg: Taiwan Scientists Discover Gold Nanoparticles Stabilize Organic Memory (<http://www.physorg.com/news116683215.html>)

Гибкая пластиковая наноэлектроника на основе углеродных однослойных нанотрубок

Ученые из университета Сеула Ханьян (*Seoul Hanyang University*) смогли создать тонкую пленку из сети однослойных углеродных нанотрубок (SWNT), являющуюся матрицей транзисторов (рис. 4).

Как показывают последние исследования, не только фуллерены могут стать основой гибкой и прозрачной электроники на пластиковых субстратах. Нанотрубки достаточно давно используются в качестве основы для нанотранзисторов, поэтому

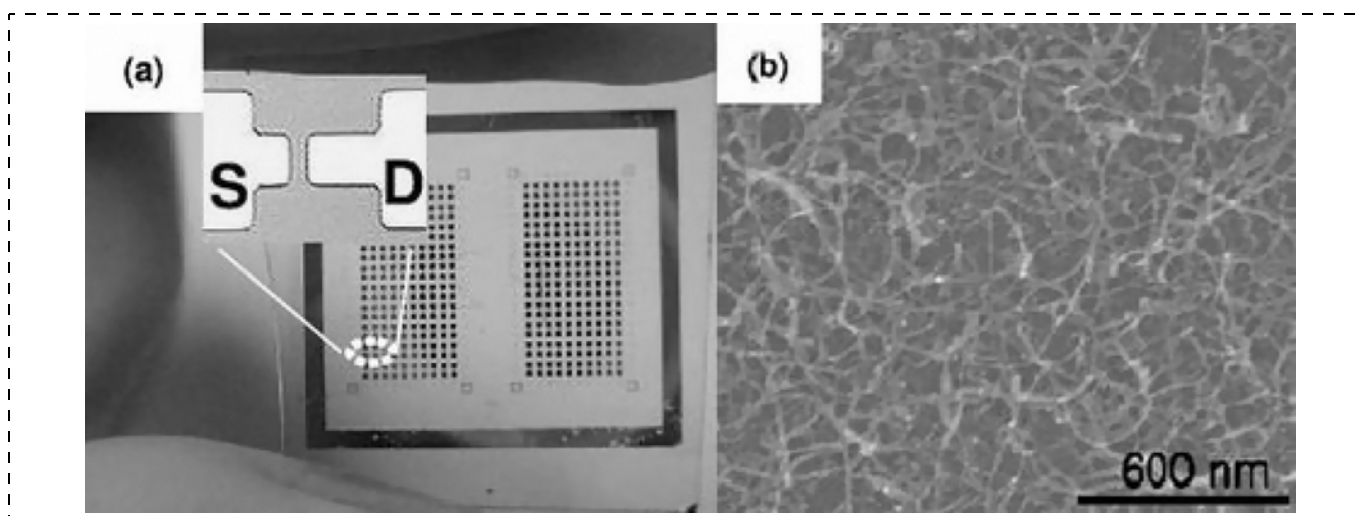


Рис. 4. Матрица SWNT-нанотранзисторов

логично было использовать их и в гибкой наноэлектронике.

На сегодняшний день в OLED- и LCD-дисплеях используют матрицы металлических нанонитей, которые формируют транзисторы. Однако этот тип нанoeлектронных устройств нельзя собрать на гибкой основе.

С устройствами на основе SWNT дело обстоит иначе. Как говорит один из исследователей Ванджун Парк (*Wanjun Park*), их можно интегрировать в устройства на прозрачной пластиковой или даже стеклянной основе.

Ключевая особенность нового техпроцесса заключается в том, что ученым не нужно контролировать расположение каждой нанотрубки.

Как считают ученые, на основе пластиковой SWNT-наноэлектроники в будущем может появиться ряд новых оптоэлектронных устройств и гибких дисплеев. Но до этих пор Парк и его коллеги хотят модернизировать технологию, повысив подвижность электронов в получившихся нанотранзисторах.

Источник: PhysOrg: New Flexible, Transparent Transistors made of Nanotubes (<http://www.phvsorg.com/news115382102.html>)

Органическая электроника: как фуллерены C60 в транзисторы попали

Исследователи из Технологического института Джорджии (*Georgia Institute of Technology*) сконструировали матрицу быстродействующих полевых транзисторов на основе фуллеренов C60.

Новые нанотранзисторы характеризуются большей подвижностью зарядов, чем в аморфном кремнии, а их производство может проходить при комнатных температурах.

Профессор Бернард Киппелен (*Bernard Kippelen*) говорит, что органические полупроводники — достаточно новый и перспективный материал в наноэлектронике. На основе гибких органических пленок можно будет производить целый ряд полупроводниковых устройств, которые тоже можно будет изгибать без нарушения их работоспособности.

Области применения органической наноэлектроники не ограничены: от дисплеев и огромных активных электронных бигбордов до RFID-меток и гибких компьютеров.

На сегодняшний день Киппелен и его коллеги смогли получить одиночные полевые транзисторы на основе органических листов, содержащих

фуллерены C60 (рис 5, см. четвертую сторону обложки). Как говорят ученые, подвижность электронов в них достаточно велика и составляет около $6 \text{ см}^2/(\text{В/с})$.

Но пока не стоит рисовать фантастические картины о новой наноэлектронной — C60 эре. Для получения реальных работающих продуктов еще следует найти способы, как преодолеть существенные недостатки фуллереновой электроники.

Во-первых, рекордный показатель подвижности зарядов был достигнут при использовании горячей эпитаксии при температуре 250 °С, что делает невозможным производство гибкой электроники. А те образцы, которые производятся при комнатной температуре, имеют показатель подвижности электронов от 2,7 до $5 \text{ см}^2/(\text{В/с})$.

Кроме этого, нанотранзисторы не могут работать в кислородной атмосфере. Прототипы Киппелена требуют азот в качестве окружения. Однако профессор уверен, что ему удастся преодолеть это препятствие, используя другие виды фуллеренов, в частности, с различными добавками.

Несмотря на все изложенные проблемы в получении C60-электроники, у нее есть одно ощутимое достоинство — низкая стоимость производства. Не важно, что работоспособный чип на основе C60 будет менее быстрым, чем его CMOS-аналог, зато он будет достаточно дешевым. В таких областях, как воспроизведение видео, не требуется высокоскоростных дорогих CMOS-транзисторов, если будут достаточно дешевые C60-аналоги, тем более, что готовый дисплей будет еще и гибким.

Поэтому Киппелен и его коллеги достаточно оптимистично смотрят на будущее органической электроники и считают, что при должном развитии технология может использоваться во многих коммерческих устройствах.

Ученые из Джорджии работают с фуллеренами и электроникой на их основе уже десять лет, поэтому имеет смысл следить за их дальнейшими разработками.

Источник: PhysOrg: Researchers produce high performance field-effect transistors with thin films of Carbon 60 (<http://www.physorg.com/news115305894.html>)

Ученые смогли увидеть "рождение" фуллерена

Рождение фуллерена впервые зафиксировано учеными из Sandia National Laboratories (SNL) и из университета Райса, США.

Ученые из университета Райса (*Rice University*) смогли впервые проследить за формированием

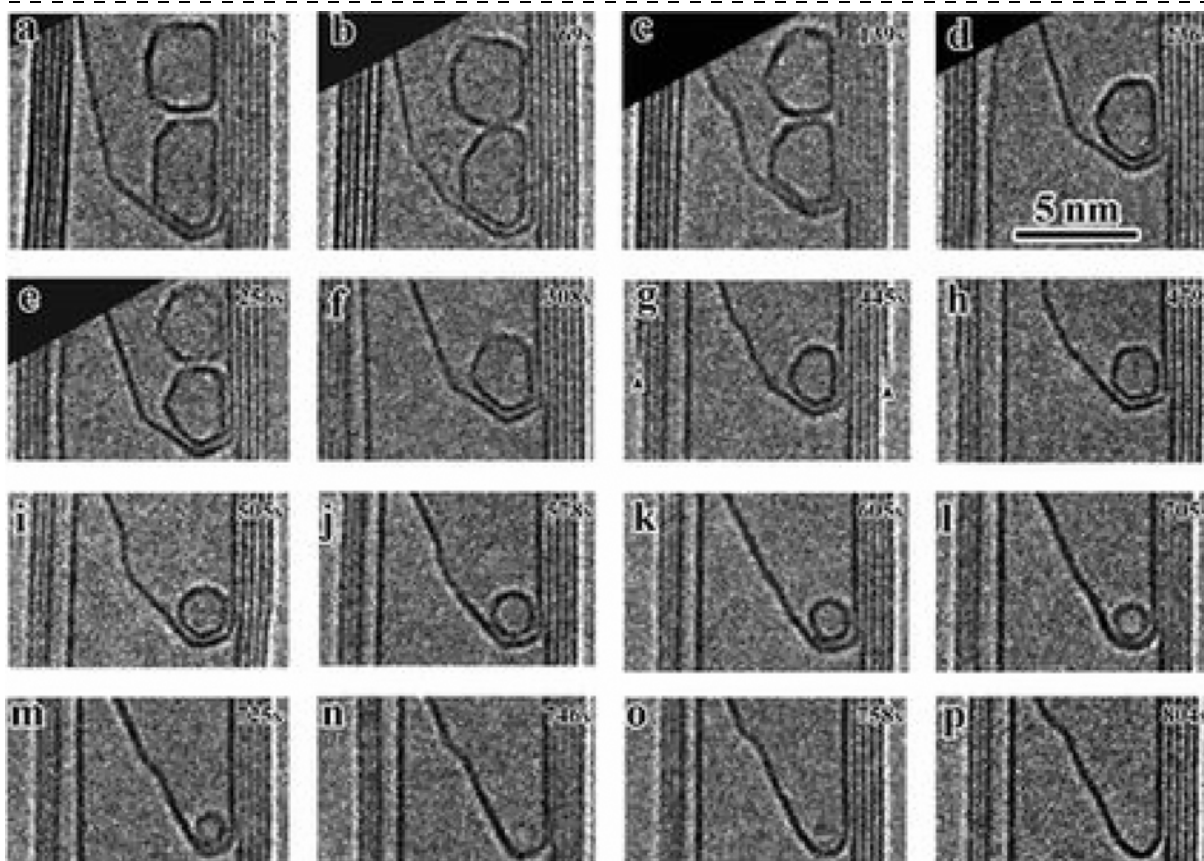


Рис. 6. Формирование фуллера внутри нанотрубки

фуллера внутри углеродной однослойной нанотрубки.

Как известно, фуллерены формируются при температуре около 2000 °С, причем процесс этот не был детально изучен до сегодняшнего времени.

Ученым удалось зафиксировать весь процесс образования молекул C60 с помощью трансмиссионной электронной микроскопии (ТЕМ — *Transmission Electron Microscopy*) (рис. 6). Благодаря исследованию стал известен ряд деталей. Так, механизм формирования фуллеренов до сих пор не ясен. Одной из наиболее распространенных теорий является теория "горячего гиганта", согласно которой при нагревании графита атомы углерода сначала упорядочиваются в крупных формах, до 1000 единиц.

С повышением температуры крупные формы постепенно распадаются на меньшие, все более стабильные, и так до тех пор, пока не появятся идеально упорядоченные фуллерены C60, способные выдержать жесткие нагрузки.

Исследование специалистов из университета Райса косвенно подтверждает это предположение: на видео замкнутая цепь постепенно сокращается, превращаясь в окружность.

Чтобы процесс можно было наблюдать и записывать с помощью ТЕМ-микроскопа, ученые получили фуллерены внутри 10-нанометровых углеродных однослойных нанотрубок.

Ученые также сумели оценить новый метод исследований фуллеренов — ТЕМ-микроскопию, и они возлагают надежды на ее дальнейшее использование при изучении наноструктур.

Источник: PhysOrg: Buckyball birth observed by Sandia nanotech researcher (<http://www.physorg.com/news14879032.html>)

Новый биогибрид для топливных элементов

Ученые из Колорадо сообщили о первом успешном "нанизывании" энзима гидрогеназы на углеродную нанотрубку с сохранением стабильного электрического контакта между ними (рис. 7, см. четвертую сторону обложки). Как говорят исследователи, этот белок, возможно, сыграет большую роль в энергетике, основанной на топливных элементах.

Исследователям известно давно, что энзим гидрогеназа — будущая "звезда" водородной энергетики. Он играет важную роль в окислении водорода в топливных ячейках. Правда, для его успешного использования в катализе, энзим нужно "приручить".

Руководители проекта, исследователи Майкл Хебен (*Michael J. Heben*) и Пол Кинг (*Paul W. King*) из Национальной лаборатории возобновимой энергии (*National Renewable Energy Laboratory*), рассказывают, что им удалось добиться успешного присоединения энзима к поверхности углеродной нанотрубки.

Топливные элементы, в которых будет использоваться бактериальный энзим гидрогеназа, примечательны еще и тем, что в них происходит окисление водорода с образованием электричества, практически без возникновения вредных веществ, вызывающих загрязнение.

Но до сих пор ученым не удавалось присоединить энзим таким образом, чтобы между ним и его "носителем" сохранялся стабильный электрический контакт. Это удалось установить, используя фотолюминесцентную спектроскопию. До сих пор роль катализатора в топливных элементах выполняет дорогостоящие платиновые элементы.

Как надеются Пол и Майкл, новый "биогибрид" сможет заменить дорогостоящую платину в топливных элементах, сделав их, таким образом, дешевле и доступней.

Источник: PhysOrg: Wiring up enzymes for producing hydrogen in fuel cells (<http://www.physorg.com/news/14703218.html>)

*Составил Ю. Г. Свиденко,
главный аналитик компании
Nanotechnology New Network*

ИНФОРМАЦИЯ

НаноТехЭкспо—2007

Л. С. Раткин, канд. техн. наук

Проходившая на территории ВВЦ с 23 по 26 октября 2007 г. Всероссийская промышленная ярмарка объединила одиннадцать выставок, в экспозиции которых были представлены последние достижения в сфере атомной энергетики и энерготехники, метрологического оборудования и приборов управления конвейерным производством, услуг в области аутсорсинга и консалтинга, субконтрактинга и аудита.

По направлению "нано" была организована выставка "НаноТехЭкспо", на которой демонстрировались новейшие российские и зарубежные нанотехнологические разработки и впервые проведена научно-практическая конференция "Системная нанотехнология".

На открытии конференции с приветствием к участникам и гостям "НаноТехЭкспо" от имени финской делегации обратилась аналитик компании "SPINVERSE Capital & Consulting" М. Папина. Кратко охарактеризовав возможные направления сотрудничества России и Финляндии в нано-

технологической сфере, г-жа Папина пригласила российские компании принять участие в одном из крупнейших мировых наноиндустриальных форумов "НаноТех — Северная Европа", который состоится в сентябре 2008 г. в Копенгагене.

Доклад д-ра техн. наук, проф. Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета, директора Центра микротехнологии и диагностики В. Лучинина был посвящен эволюции микросистем и включал в себя примеры совершенствования микросистемной техники с информационно-коммуникационными и сенсорно-моторными функциями, интегрирующими диагностические и технологические процедуры на поверхности твердого тела. Наблюдаемая в последние десятилетия эволюция принципов построения и степени интеграции микросистем, их материаловедческого базиса позволяет рассчитывать на появление в 2010—2020 гг. интегрированных микросистем на базе наномолекулярных кластерных комплексов с конвергенцией объектов живой и неживой природы.

Среди основных направлений инвестирования были отмечены сенсорные и медико-биологические чипы для локальной и глобальной навигации, паспортно-визовых документов, радиокommunikации и биометрии.

Наиболее актуальными микронанотехнологическими проектами, по мнению докладчика, на ближайшую перспективу являются индивидуальные автономные средства контроля физиологического состояния и навигации, портативные приборы для оперативного обнаружения отравляющих и взрывчатых веществ и идентификации личности, микробиоробототехнические системы, сенсорные сети для охраны потенциально опасных и стратегически важных объектов, миниатюрные индивидуальные средства прицеливания и наведения, новое поколение микровзрывателей и интеллектуальных автономных самонаводящихся головок.

Темой выступления руководителя Наноцентра МЭИ д-ра техн. наук, проф. А. Алексенко были беспроводные наносистемы. Высокая степень интеграции (10^8 – 10^9) компонентов на чипе позволяет заменять радиочастотными связями проводные коммуникации и применять беспроводные интеллектуальные сенсоры для решения широкого спектра задач. Обеспечение межсетевого взаимодействия, например, наносенсоров и однокристальных RFID, допустимо при использовании наноантенн из однослойных углеродных нанотрубок.

Рост числа проводимых в мире исследований, результаты которых представлены на страницах ведущих научных журналов и в электронных СМИ, позволяет рассматривать нанотехнологии в качестве платформы для конвергенции науки и производства и развития промышленности в XXI веке, а также базиса новых межличностных и социальных отношений, а сами нанотехнологии — как системообразующую меж- и наддисциплинарную основу третьей научно-технической революции.

В отдельном выступлении проф. А. Алексенко представил инновационную нанопroduкцию — нанобетоны, применение которых способно существенно снизить расход цемента и улучшить экологическую ситуацию в России. В частности, применение легкого нанобетона при строительстве моста через Волгу (г. Кимры) позволило уменьшить нагрузки на несущие конструкции, сократить массу и число слоев бетона, а также применить новые конструкторско-технологические решения для гидроизоляции.

Вопросы применения наносистем на РЖД и в структурах МЧС были рассмотрены в докладе М. Руфицкого (ОАО "Автоприбор", г. Владимир). Выпускаемые на предприятии системы охраны и сигнализации (СОС) предназначены, в частности, для расчета координат по Galileo, GPS и Глонас при определении местонахождения людей, ценных грузов, локомотивов и вагонов, контроле автоматики, напряжения электросети, состояния электронных пломб на объектах. Использование нанотехнологий в СОС позволяет проводить более точную обработку сигнала с выделением и фильтрацией шумов (при выходной мощности передатчика в 20 мВт в зоне не прямой видимости достигается перекрытие сигнала на расстоянии до 85 км). Другое применение продукции наноиндустрии в маломощных передатчиках — система мониторинга движения контейнеров для таможенных терминалов, включающая функции определения местоположения контейнера по высоте, задействие радиоканала при передаче данных по сигналу ридера и датчика ускорений с контейнера в базу данных, а также совмещения RFID с эксплуатировавшимися ранее системами мониторинга.

Системы мониторинга движения поездов с применением инновационной нанотехнологической разработки — "интеллектуальной шпалы" — благодаря интеграции функций передатчика и ретранслятора с дальностью действия до 2 км в едином объекте, монтируемом в бетонные шпалы вместе с пьезопреобразователем и подзаряжаемым при надавливании на шпалу при прохождении поезда, дают возможность передавать данные со стационарных объектов на подвижной состав и обратно. Такая схема обеспечивает высокую надежность внутripоездной и междупоездной связи и большой объем передаваемой и принимаемой информации в разрешенном нелицензируемом диапазоне частот. С применением нанотехнологий начато создание специальных изделий — болтов, вкручивающихся в буксы и передающих информацию об их перегреве. Передача данных осуществляется с вагонов через локомотив на стационарные объекты (например, при проезде станции), питание датчика возможно за счет теплоты, отводимой от нагреваемой буксы. Принцип коммуникации объектов, предложенный ОАО "Автоприбор", может быть применим и в других областях, в частности, при создании адаптивных модемов со встроенной криптозащитой, самонастраивающихся на тип канала, скорость передачи данных, рабочие частоты и выходную мощность.

В числе проектов, реализация которых запланирована в ближайшем будущем, — кластерная нанофабрика для серийного выпуска компонентов продукции для РЖД и МЧС.

Опыту схемотехнического и топологического проектирования систем на кристалле было посвящено выступление сотрудника МИФИ Э. Аткина. Маршрут проектирования и выбор технологии для создания наноиндустриальной продукции в МИФИ включает в себя: использование методологий и технологических решений со временем жизни до 2015 г.; постоянное обновление средств проектирования; поведенческое и структурное моделирование, предполагающее проектирование структурно-функциональных блоков (СФБ) для нанотехнологических устройств на транзисторном уровне; создание хранилищ и архивов СФБ для экспресс-проектирования наноустройств на основе библиотечных решений. Высокая концентрация оборудования с современным программным обеспечением позволяет рассчитывать на развитие научно-образовательного центра МИФИ на 40 мест по проектированию СБИС для физических экспериментов, и уже в начале 2008 г. выпуск 20 специалистов по проектированию субмикрометровых СБИС для предприятий Роспрома и Росатома, расширение лицензионных соглашений для проведения новых научных исследований с компаниями "Mentor Graphics" и "Cadence".

Новые контрольно-измерительные и нанотехнологические разработки получили освещение в докладе В. Быкова (группа предприятий "НТ—МДТ", Москва—Зеленоград). Сканирующий зондовый микроскоп для образовательных проектов не требует применения дорогостоящих устройств, поскольку комплектуется оборудованием для самостоятельного изготовления зондов, а варианты NanoEducation-2 имеют улучшенные технические характеристики. Кантилеверы для атомных силовых микроскопов делаются с использованием технологии селективного травления; для магнитных измерений используются зонды с ферромагнитным покрытием. При исследованиях в режимах низкочастотного оптического микроскопа используются остро заточенные световоды с радиусом кривизны на острие от 30 до 100 нм. Для калибровки измерительного оборудования применяются тестовые решетки, при этом для работ с повышенной точностью применяются естественные стандарты, например, реальные характеристики зонда вычисляются при измерении заранее известных параметров ДНК. Для разработки и мелкосерийного производства приборов нанозлек-

троники и микро- и наномеханики используются нанофабы, имеющие кластерную конфигурацию и технологическую специализацию модулей, объединяющие технологии локальной и групповой обработки и обеспечивающие их многомодульные конфигурации.

Представитель Технологического института Южного федерального университета (ЮФУ) в Таганроге О. Агеев представил гостям и участникам конференции научно-образовательный центр "Нанотехнологии" ЮФУ. Среди проводимых Центром работ — создание технологии формирования каталитических центров для выращивания углеродных нанотрубок (УНТ), технологии изготовления элементов металлической нанозлектроники, исследование режимов травления фокусированными ионными пучками, технологические процессы подготовки подложек для нанозлектроники методом электронно-лучевой обработки, изготовление зондов для сканирующей туннельной микроскопии, исследование методов получения УНТ, проектирование и разработка технологии изготовления газочувствительных датчиков на основе УНТ.

Докладчик отметил, что совершенствование инфраструктуры Центра ЮФУ будет способствовать укреплению научного потенциала Юга России, развитию отечественной наноиндустрии и повышению конкурентоспособности российских товаров на рынке.

Заместитель директора предприятия "Микротестмашины" (Беларусь) С. Сыроежкин коснулся в своем выступлении вопросов, связанных с работой нанолaborатории на базе многофункционального сканирующего зондового микроскопа NT-206.

Ряд аспектов промышленной одностадийной технологии создания конструкционных наноматериалов затронул в своем докладе Г. Волков (МГТУ "МАМИ"). В отличие от традиционной технологии нанокompозитов, являющейся как минимум двухстадийной вследствие разделения во времени и пространстве процессов получения и консолидации наночастиц, предлагаемая технология позволяет параллельно формировать матрицу и наночастицы в едином химическом реакторе. Технология отработана на натурных образцах с толщиной стенки до 10 мм и габаритными размерами до 200 мм. Перспективой применения промышленной одностадийной технологии углеродного нанокompозита является создание наноматериалов на основе углерода или другого химического состава. Изготовленный по новой техно-

логии углеродный нанокompозит применяется в антифрикционных вкладышах газодинамических подшипников и высокотемпературных торцевых уплотнениях для агрессивных сред, перспективен для использования в термоядерном реакторе и в искусственном клапане сердца. Он тромборезистентен и радиационно стоек, биологически и химически инертен и газонепроницаем. Превосходит полученные традиционным способом углеродные материалы по окислительной стойкости до 300 раз, коэффициенту катодного распыления в 15 раз, коэффициенту трения в жидких средах в 4 раза.

Разработку авторского коллектива из Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН и Института ядерной физики (ИЯФ) им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск) по проблеме получения и применения нанопорошков и наночастиц представил С. Бардаханов. Нагрев пучком электронов исходного вещества в ректоре испарения (РИ) позволяет отделить наночастицы от проходящего через РИ газа и собрать их в улавливающем устройстве в виде нанодисперсного порошка. С помощью созданных установок получены нанопорошки не только тугоплавких, но и плохо испаряемых металлов — алюминия, меди, молибдена, никеля, серебра, тантала, ряда их оксидов. Маломощные установки позволяют получать десятки граммов материала в час при 15 % от номинальной мощности, РИ "среднего" масштаба — сотни граммов в час при 20 % от номинальной мощности. Маркетинговые исследования подтверждают наличие в РФ потенциального рынка сбыта для нанодисперсного диоксида кремния в объеме до 15 тыс. тонн в год. При этом платежеспособный спрос превышает 2 тыс. тонн в год. Подготовлен бизнес-план организации производства, в рамках которого при финансовой поддержке инвесторов в ИЯФ СО РАН проходят испытания опытно-промышленной установки с исследованием технологических процессов отделения наночастиц от несущего газового потока, получение наночастиц с заданными свойствами поверхности, образование наночастиц из высокотемпературного пара и формирование их агломератов.

Сообщение канд. техн. наук Н. Долгополова из предприятия "Элерон" (Москва) о системах обеспечения безопасности ЖКХ в контексте нанотехнологических исследований превратилось в доклад по проблемам интеграции информационно-технологических систем на базе мультисервисной сети жилищного фонда. Представ-

ленная двухуровневая телевизионная система "СОВА-Интеллект" может быть интегрирована в волоконно-оптические сети и включает в себя продукцию с применением нанотехнологий и наноматериалов — портативные видеокамеры, приемопередающие устройства, цифровые многоканальные видеоконцентраторы, миниатюрные пульты оперативного вызова, приборы учета расходования воды и энергоресурсов. Примером успешного внедрения систем данного класса является столичный район Жулебино, где оптическое волокно подведено практически к каждому дому, что позволило создать устойчивые к сбоям многопараметрические комплексы, узловые элементы которых объединили ключевые функции, свойственные технологиям "интеллектуального дома".

Представитель Института металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН Г. Фолманис рассказал о применении наночастиц в агропромышленном комплексе (АПК). Более подробно были рассмотрены водородные технологии получения наночастиц, изменение химического состава вещества в процессе восстановления, распределение по размерам наночастиц железа, лазерные технологии получения наноразмерных суспензий, обработка семян растений нанопрепаратами, производственные испытания нанокристаллических биопрепаратов с указанием географии испытаний. Среди основных областей применения наноразмерных металлов — животноводство и звероводство, рыбоводство, птицеводство, растениеводство, производство кормов.

Выступление проф. Л. Патрикеева (МЭИ) было посвящено сразу двум сферам научной деятельности — вопросам практического использования разработок nanoиндустрии для выявления основных видов наркотических и взрывчатых веществ (НВВ) и перспективам повышения уровня высшего образования в сфере нанотехнологий.

В качестве прибора, успешно решающего задачи детектирования НВВ, был представлен "нанос" — изделие на базе уникального ноу-хау, позволяющее распознавать НВВ в концентрациях, гораздо более низких, чем определяемые специально обученными собаками.

При обсуждении проблем высшего образования были затронуты вопросы нанотехнологического бакалавриата. Согласно экспертным оценкам, потребность РФ в специалистах-нанотехнологах в ближайшие 5—7 лет составит 50—70 тыс. человек. Поскольку число специалистов в дан-

ной области, ежегодно выпускаемых ведущими российскими вузами (МГУ, МГТУ, МИСиС, МИФИ, МФТИ), существенно ниже, необходимо принятие комплекса мер, кардинально меняющего сложившуюся ситуацию. В частности, целесообразно значительное увеличение капиталовложений в развитие и модернизацию вузовской научно-исследовательской базы, создание сети национальных биомедицинских, материаловедческих и электронных нанотехнологических предприятий.

Применение наночастиц металлов в качестве биологически активных препаратов в АПК и медицине было рассмотрено в докладе проф. Московского государственного открытого универси-

тета д-ра физ.-мат. наук И. Арсентьевой. В частности, были продемонстрированы результаты, свидетельствующие об увеличении скорости заживления у животных ран, обработанных препаратом с содержанием наночастиц железа в вазелиновом масле.

В завершение конференции прозвучало выступление заведующего кафедрой энерготехнологий Черкасского государственного технологического университета, д-ра техн. наук, проф. С. Полякова об актуальных проблемах современной науки и перспективах сотрудничества российских и украинских образовательных учреждений.

КОНГРЕСС США ВЫДЕЛИЛ 110 МИЛЛИОНОВ ДОЛЛАРОВ НА ВОЕННЫЕ НАНОТЕХНОЛОГИИ

09.11.2007

Оборонный бюджет на 2008 год в размере 459,3 млрд долл., утвержденный поздно вечером 8 ноября 2007 года конгрессом США, включает ассигнования в размере более 110 млн долл. на научно-исследовательские разработки в области нанотехнологий, которые могут иметь военное применение.

Бюджет, направленный на подпись президенту США Джорджу Бушу, предусматривает, в частности, выделение Пентагону 1,2 млн долл. на "технологическую инициативу по оружейным микробоеприпасам на основе усовершенствованных нанотрубок" (*Advanced Nanotubes Micro-Munition Weapon Technology Initiative*) и 3,6 млн долл. на "нанотехнологический микропроцессорный взрыватель" (*Nanotechnological Fuze-on-a Chip*). При этом 1,6 млн долл. выделяется на работы по "броневой защите на основе углеродных нанотрубок" (*Carbon Nanotube Armor Protection System*) и 900 тыс. долл. на исследования по "прозрачной нанокомпозитной броне" (*Transparent Nanocomposite Armor*) для использования вместо пуленепробиваемого стекла в военной технике.

В бюджет заложены также:

- 8 млн долл. на работы по наноструктурному титану;

- 4,8 млн долл. на создание "компьютерных устройств на основе композитных углеродных нанотрубок для применения в космосе";
- 1,6 млн долл. на работы по "нанокристаллическому взрывоустойчивому цементу";
- 12,1 млн долл. выделено на несколько параллельных программ по созданию "интегрированных наносенсоров для обнаружения ядерной, биологической и химической угрозы";
- 6,4 млн долл. на две программы по наноспутникам, включая разработку ракеты-носителя для наноспутников.

Конгресс разрешил министерству обороны США предоставить грант в размере 2,4 млн долл. "Институту по нанонаукам и нанотехнологиям" при университете штата Айова и грант в размере 4 млн долл. "Альянсу по наноздоровью" (*Alliance for NanoHealth*), который является крупнейшим в мире исследовательским проектом по применению нанотехнологий в медицине и здравоохранении, участниками которого являются более 40 лабораторий из семи ведущих университетов США.

В комитете по науке и технологии палаты представителей конгресса США 7 ноября прошли слушания по нанотехнологиям, на которых выступил сопредседатель Совета по науке и технике при президенте США (*President's Council of Advisors on Science and Technology*) Флойд Квамме.

"США сейчас являются лидером в исследованиях и инновациях по нанотехнологиям", — сообщил Квамме, по словам которого "федеральные инвестиции в наноразмерные науки и инженерные исследования являются хорошо вложенными средствами".

"Технологии солнечных батарей, улучшенные материалы, сохранение энергии и медицина являются только одними из направлений, по которым, несомненно, будут получены выгоды — экономические и общественные — от продвижения в нанотехнологиях", — подчеркнул советник Буша.

На слушаниях были обнародованы также данные, согласно которым годовой бюджет, осуществляемый группой федеральных министерств и ведомств США "Национальной нанотехнологической инициативы" (NNI — *National Nanotechnology Initiative*) в 2007 г. составил 1 млрд 350 млн долл., а в 2008 г. увеличится до 1 млрд 450 млн долл.

В настоящее время на мировом рынке есть уже более 300 единиц продукции, в производстве которой используются нанотехнологии и доходы от реализации которых оцениваются на уровне 32 млрд.

К 2014 г. мировой рынок продукции на основе нанотехнологий может достигнуть 2,6 трлн долл., говорится в материалах слушаний.

ВАШИНГТОН, 9 ноября РИА Новости
Аркадий Орлов

Источник: РИА Новости. Ссылка на сайт <http://www.rian.ru/world/america/20071109/87288522.html>
http://www.bochvar.ru/nanocentre/nanonews/nano_news/nanonews09112007/

СВОДНЫЙ ПЛАН участия Минобрнауки России и находящихся в его ведении федеральных агентств в выставочно-ярмарочных мероприятиях, проводимых на территории Российской Федерации и за рубежом в 2008 году

I. Выставочно-ярмарочные мероприятия, проводимые за рубежом

1. Выставочно-ярмарочные мероприятия, проводимые в соответствии с распоряжением Правительства Российской Федерации от 02 октября 2007 г. № 1329-р, с частичным финансированием за счет средств федерального бюджета, в которых ответственным за подготовку российских экспозиций является Минобрнауки России

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель	Федеральное агентство — соисполнитель
1	Международный салон изобретений, новой техники и технологий	г. Женева, Швейцария, апрель	Роснаука	Рос-образование
2	52-я Международная выставка "Техника"	г. Белград, Сербия, май	Роснаука	Рос-образование
3	Международная ярмарка высоких технологий	г. Шеньчжень, Китай, октябрь	Роснаука	Рос-образование
4	Международная выставка образовательных материалов, профессиональной подготовки и электронного обучения "Уорлд Дидак-2008"	г. Базель, Швейцария, октябрь	Рособразование	
5	Международная выставка информатики, мультимедиа и телекоммуникаций	г. Мадрид, Испания, ноябрь	Роснаука	Рос-образование

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель	Федеральное агентство — соисполнитель
6	Международная выставка "Идеи, изобретения, инновации"	г. Нюрнберг, Германия, ноябрь	Роснаука	Рособразование
7	Международная ярмарка изобретений	г. Сеул, Республика Корея, декабрь	Роснаука	Рособразование

2. Выставочно-ярмарочные мероприятия, проводимые в соответствии с распоряжением Правительства Российской Федерации от 02 октября 2007 г. № 1329-р, с частичным финансированием за счет средств федерального бюджета, в которых Минобрнауки России и находящиеся в его ведении федеральные агентства принимают участие в подготовке российских экспозиций

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель	Федеральное агентство — соисполнитель	Примечание (организатор российской экспозиции)
8	Всемирная специализированная выставка "ЭКСПО-2008"	г. Сарагоса, Испания, январь—сентябрь	Роснаука		Минэкономразвития России
9	Выставка информационных технологий "ЦеБИТ-2008"	г. Ганновер, Германия, март	Роснаука	Рособразование	Мининформсвязи России
10	Российская национальная выставка	г. Ашхабад, Туркменистан, май—июнь	Роснаука	Рособразование	Минэкономразвития России
11	Российская национальная выставка	г. София, Болгария, сентябрь—октябрь	Роснаука		Минэкономразвития России
12	Российская национальная выставка	г. Дели, Индия, октябрь—ноябрь	Роснаука	Рособразование	Минэкономразвития России

3. Выставочно-ярмарочные мероприятия, в которых подготовка и организация российских экспозиций осуществляется с частичным бюджетным финансированием из средств федеральных агентств

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель
13	Российско-Израильский венчурный форум и российская выставка передовых технологий	г. Тель-Авив, Израиль, март	Роснаука
14	Европейский инвестиционный форум INTRO	г. Хельсинки, Финляндия, июнь	Роснаука
15	Передовые технологии из России	г. Бангкок, Таиланд, август	Роснаука

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполни- тель
16	Китайская выставка изобретений	г. Пекин, КНР, сентябрь	Роснаука
17	4-й Международный салон изобретений и новых технологий "Новое время"	г. Севастополь, Украина, сентябрь	Роснаука
18	Международная выставка "Нанотех Северная Европа"	г. Копенгаген, Дания, сентябрь	Роснаука
19	Выставка-семинар "Передовые российские тех- нологии"	г. Сантьяго, Чили, октябрь	Роснаука
20	Выставка-семинар "Новейшие разработки рос- сийских организаций в области нанотехнологии и наноматериалов" в рамках Дней России в Болгарии	г. София, Болгария, сентябрь—октябрь	Роснаука
21	Индийско-Российский семинар-выставка "Физи- ка высоких плотностей энергий для инновацион- ных технологий и промышленных приложений"	г. Пуна, Индия, ноябрь	Роснаука
22	Российско-американская технологическая инве- стиционная конференция SVOD (Silicon Valley Open Door)	США, ноябрь	Роснаука

4. Выставочно-ярмарочные мероприятия, в которых подготовка и организация российских экспозиций осуществляется при организационной поддержке федеральных агентств

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполни- тель
23	Нанотех 2008, международная нанотехнологиче- ская выставка и конференция	г. Токио, Япония, февраль	Роснаука
24	Международная промышленная ярмарка "Ганно- вер Мессе-2008"	г. Ганновер, Германия, апрель	Роснаука
25	Международная выставка изобретений, иннова- ций, промышленного дизайна и технологий	г. Куала-Лумпур, Малайзия, май	Роснаука
26	7-я Международная выставка биотехнологий — Био Экспо Джапан 2008	г. Токио, Япония, июнь	Роснаука
27	Выставка-семинар "Передовые российские тех- нологии"	г. Кейптаун, ЮАР, июнь	Роснаука
28	Международный Салон изобретений "Конкурс Лепин"	г. Страсбург, Франция, сентябрь	Роснаука

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель
29	Международная выставка-ярмарка "Биотехника-2008"	г. Ганновер, Германия, октябрь	Роснаука
30	Всемирный салон инноваций, научных исследований и новых технологий "Брюссель-Эврика"	г. Брюссель, Бельгия, ноябрь	Роснаука
31	15-й Международный салон инноваций Иноваци року 2008	г. Прага, Чехия, декабрь	Роснаука

II. Выставочно-ярмарочные мероприятия, проводимые на территории Российской Федерации

1. Выставочно-ярмарочные мероприятия, в которых организация и подготовка российских экспозиций осуществляется с частичным бюджетным финансированием из средств федеральных агентств

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель
32	VII Московский международный салон инноваций и инвестиций	г. Москва, 3—6 марта	Роснаука
33	Выставка "Водородные и альтернативные технологии для производства энергии"	г. Москва, 10—20 апреля	Роснаука
34	V Международная конференция "Интеграция информационных систем в образовании" "ИТО-Псков-2008"	г. Псков, март—апрель	Рособразование
35	Международная конференция и Международная выставка достижений в области водородных технологий в рамках заседания Управляющего комитета Международного партнерства по водородной экономике	г. Москва, апрель	Роснаука
36	Международный конгресс-выставка "Global education" — образование без границ	г. Москва, 18—20 апреля	Рособразование
37	Ярмарка бизнес-ангелов и инноваторов "Российским инновациям — российский капитал"	г. Уфа, апрель	Роснаука
38	V Всероссийская научно-практическая конференция "Применение информационно-коммуникационных технологий в образовании" "ИТО-Марий Эл-2008"	г. Йошкар-Ола, май	Рособразование
39	XIX Международная конференция "Применение новых технологий в образовании" "ИТО-Троицк-2008"	г. Троицк, Московская обл., июнь	Рособразование
40	Выставка высоких технологий в рамках Петербургского международного экономического форума	г. Санкт-Петербург, июнь	Роснаука

п/п	Название мероприятия	Место и сроки проведения	Федеральное агентство — ответственный исполнитель
41	Международный конгресс и выставка "Вода: экология и технология" ЭКВАТЕК-2008"	г. Москва, июнь	Роснаука
42	Всероссийская выставка научно-технического творчества молодежи (НТГМ)-2008	г. Москва, 25—29 июня	Рособразование
43	Казанская венчурная ярмарка	г. Казань, июль	Роснаука
44	Выставка "Окружающая среда и здоровье человека" в рамках Второго Санкт-Петербургского международного экологического форума (Экофорум-2008)	г. Санкт-Петербург, июль	Роснаука
45	II Международная научно-практическая конференция "Информационные технологии в образовании" "ИТО-Сибирь-2008"	г. Томск, сентябрь	Рособразование
46	Всероссийский форум "Образовательная среда-2008", включающие 3 тематические выставки: 10 Всероссийская выставка "Современная образовательная среда", 6-я Всероссийская выставка "Материально-техническое оснащение образовательных учреждений" и 4-я Всероссийская выставка "Учебная и развивающая литература XXI века"	г. Москва, 30 сентября—3 октября	Рособразование
47	Международная выставка и конгресс "Перспективные технологии 21 века"	г. Москва, сентябрь	Роснаука
48	Четвертый Российский венчурный форум и Десятая Российская венчурная ярмарка	г. Санкт-Петербург, октябрь	Роснаука
49	Международная выставка "БИОЭНЕРГЕТИКА-2008"	г. Москва, октябрь	Роснаука
50	Биотехнологическая выставка-ярмарка "РосБио-Тех-2008"	г. Москва, ноябрь	Роснаука
51	XVIII Международная конференция-выставка "Информационные технологии в образовании" "ИТО-2008"	г. Москва, ноябрь	Рособразование
52	"ИНДУСТРИЯ ОБРАЗОВАНИЯ"	г. Москва, ноябрь	Рособразование
53	II Международная научно-практическая конференция "Информационные технологии в образовании" "ИТО-Черноземье-2008"	г. Курск, декабрь	Рособразование
54	Первый Тихоокеанский инновационный форум	г. Владивосток, VI квартал	Роснаука
55	Национальный форум-слет бизнес-ангелов России	В течение года	Роснаука
56	XII Российский образовательный форум	г. Москва, апрель	Рособразование

<http://www.fasi.gov.ru/news/action/2008/exhibit.doc>

CONTENTS

Glukhova O. E., Meschanov V. P., Saliy I. N., Terentev O. A. <i>Irregular Carbon Nanotubes as Rectilinear Oriented Rods</i>	2
Potapov A. A. <i>Principles of Nanosystems Designing</i>	5
Panfilov Yu. V. <i>Practical Results of Use of Nano-Structured Materials</i>	13
Tyagunov O. A. <i>Programmed Complex for Simulation and Research of Dynamic Characteristics of Micro- and Nanomechanical Elements and Systems</i>	19
Khorunzhii I. A., Domanevsky D. S., Bobuchenko D. S. <i>Computer Verification of Computer Model of Heat Sink for Cooling of Powerful Semiconductor Device</i>	25
Belozubov E. M., Belozubova N. E. <i>Unsteady Temperature Influence on MEMS of the Thin-Film Resistive-Strain Pressure Sensors Ways of Its Minimization</i>	28
Afonin S. M. <i>Research and Calculation Static and Dynamic Characteristics of Piezoactuator for Nano- and Micrometric Movement</i>	34
Astahov M. V., Dutov I. V., Rodin A. O. <i>Ferromagnetic Resonance of Amorphous Ferromagnetic Microwire</i>	42
Kozlov G. V., Aphashagova Z. Kh., Burya A. I. <i>The Theoretical Description of Nanoadhesion Effect in Particulate-Filled Polymer Nanocomposites: the Fractal Model</i>	45
Komlenok M. S., Pimenov S. M., Kononenko V. V., Konov V. I., Scheibe H.-J. <i>Laser Surface Microstructuring of Super Hard Amorphous Carbon Films</i>	48
Aleksandrov P. A., Demakov K. D., Shemardov S. G., Kuznetsov Yu. Yu. <i>Crystalline Quality Improvement of Silicon on Sapphire Film by Oxygen Implantation and Subsequent Solid Phase Recrystallization</i>	54
Tarnavsky G. A., Anishchik V. S., Tarnavsky A. G. <i>Effect of Protective Masks at Tempering of Silicon Plate on Formation of Nano-Scale Heterostructures of Doping of Phosphorus</i>	57

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: it@novtex.ru; http://www.microsystems.ru

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

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства

в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.

Дизайнер Т. Н. Погорелова. Технический редактор Е. М. Патрушева. Корректор Е. В. Комиссарова

Сдано в набор 21.01.2008. Подписано в печать 19.02.2008. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 9,8. Уч.-изд. л. 11,40. Заказ 161. Цена договорная

Отпечатано в ООО "Подольская Периодика", 142110, Московская обл., г. Подольск, ул. Кирова, 15