НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 11 (100) ✧ 2008

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ПРИКЛАДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

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

Журнал включен в перечень научных и научно-технических изданий ВАК России и в Российский индекс научного цитирования

Издается с 1999 г.

Главный редактор
Мальцев П. П.

Зам. гл. редактора
Лучинин В. В.

Редакционный совет:
Аристов В. В.
Асеев А. Л.
Гапонов С. В.
Каляев И. А.
Квардаков В. В.
Климов Д. М.
Ковальчук М. В.
Мокеров В. Г.
Нарайкин О. С.
Никитов С. А.
Сауров А. Н.
Сигов А. С.
Чаплыгин Ю. А.
Шевченко В. Я.

Редакционная коллегия:
Абрамов И. И.
Андриевский Р. А.
Антонов Б. И.
Арсентьева И. С.
Астахов М. В.
Быков В. А.
Волчихин В. И.
Горнев Е. С.
Градецкий В. Г.
Гурович Б. А.
Журавлев П. В.
Захаревич В. Г.
Кальнов В. А.
Карякин А. А.
Колобов Ю. Р.
Кузин А. Ю.
Мокров Е. А.
Норенков И. П.
Панич А. Е.
Панфилов Ю. В.
Петросянц К. О.
Петрунин В. Ф.
Путилов А. В.
Пятышев Е. Н.
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"

СОДЕРЖАНИЕ

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Сигов А. С., Емохонов В. Н., Вербицкий С. С., Шиляев А. А. Поглощение электромагнитного излучения металлическими наноструктурами 2

Башоров М. Т., Козлов Г. В., Овчаренко Е. Н., Микитаев А. К. Наноструктуры в полимерах: синергетика неравновесного фазового перехода "сдвиг—крейзование" 5

Зайцев Н. А. Применение углеродных нанотрубок в экстремальных областях электроники 8

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Тянгинский А. Ю., Трепов Д. А., Церулев М. В., Слепцов В. В. Электроимпульсные методы формирования нанокластерного серебра в жидкой среде . . 13

Жигалина О. М., Воротилов К. А., Хмеленин Д. Н., Сигов А. С. Структурные особенности пленок цирконата-титаната свинца, сформированных методом химического осаждения из растворов с различным содержанием свинца. . . . 17

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Тарнавский Г. А., Анищик В. С. Программные комплексы компьютерного проектирования микроэлектромеханических систем. 23

Локтев Д. В., Андреев В. М., Зиновьев Д. В., Тузовский К. А., Шишкова И. Н. Исследование теплопроводности плотных газов в микросистемах 29

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

Бабаевский П. Г., Резниченко Г. М., Жуков А. А., Жукова С. А., Гринькин Е. А. Электромеханические преобразователи сенсорных микро- и наносистем: физические основы и масштабные эффекты. Часть 1. Чувствительные механические элементы и актюаторы 32

Спирин В. Г. Исследование погрешности сопротивления тонкопленочного резистора, вызванной исключением контактных площадок перекрытия резистивного и проводящего слоев 44

Афонин С. М. Абсолютная устойчивость системы управления деформацией пьезоактюатора нано- и микроперемещений 47

ИНФОРМАЦИЯ

Солодовникова И. Е. О моделировании химических соединений с применением Atomistix Tool Kit. 53

Contents 55

Аннотации статей журнала и требования к оформлению статей доступны на сайте журнала: **http://www.microsystems.ru. http://eLIBRARY.ru**

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

Адрес для переписки:
e-mail: nmst@novtex.ru

© Издательство "Новые технологии", "Нано- и микросистемная техника", 2008.

УДК 621.3.049.77.002

А. С. Сигов, чл.-корр. РАН, ректор,
Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет),
В. Н. Емохонов, д-р физ.-мат. наук, проф., директор,
С. С. Вербицкий, канд. физ.-мат. наук, доц., вед. научн. сотр.,
А. А. Шиляев, канд. физ.-мат. наук, доц., вед. научн. сотр. ,
Институт энергетических проблем химической физики РАН

ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Экспериментально показана возможность "полного" поглощения электромагнитного излучения в широком спектральном интервале — в инфракрасном (ИК), субмиллиметровом (СММ) и СВЧ диапазоне. Наиболее интенсивно поглощение происходит в средах, состоящих из квазиодномерных металлических наноструктур.

Термин полное поглощение здесь используется в случаях, когда коэффициент отражения R близок к значению −20 дБ.

Полученные результаты согласуются с теоретическими оценками.

Ключевые слова: *чернь, тонкопленочное покрытие для поглощения излучения, малые металлические частицы, широкий диапазон длин волн, наноструктуры.*

Создание хорошо поглощающих электромагнитное излучение тонкопленочных покрытий (черни) в широком диапазоне длин волн чрезвычайно важно для практических применений. Эта проблема существует всюду, где требуется "полное" поглощение (величина R не менее $|-20|$ дБ) электромагнитной энергии, например, при разработке тепловых приемников или согласующих устройств в СВЧ технике.

В достаточно обширной литературе [1, 2] отмечается аномально большое поглощение в широком диапазоне длин волн в высокодисперсных средах, состоящих из малых (до 0,003—0,01 мкм) металлических частиц. Механизм поглощения разреженной системой малых металлических частиц хорошо известен (классическая работа Ми [1]) и связан с возникновением резонанса на собственных поверхностных модах малых частиц. Резонансная частота основной гармоники

$$\omega_p = \omega_0 \sqrt{p}, \qquad (1)$$

где ω_0 — плазменная частота металла; p — поляризационный фактор, определяемый формой частицы. Для сферической частицы $p = 1/3$.

Для удлиненных частиц эллипсоидальной формы фактор p пропорционален квадрату отношения короткой и длинной полуосей эллипсоида, т. е. для вытянутых частиц, например цилиндров, резонансная частота переходит в область больших длин волн λ. Аналогичный результат может быть получен, если частицы изготавливать из полуметаллов (доля электронов проводимости мала по сравнению с числом атомов). При падении на среду, представляющей собой набор удлиненных частиц с различными значениями параметра p, электромагнитной волны с частотой ω происходит резонансное возбуждение (поглощение) поверхностной моды на частицах, обладающих параметром p, который удовлетворяет условию $\omega_p = \omega$.

Этот механизм обусловливает поглощение в полосе частот, ширина которой определяется распределением частиц по поляризационным факторам.

Приведем здесь некоторые теоретические оценки, полученные на основании [1, 3], опустив промежуточные расчеты.

Будем предполагать, что чернь состоит из вытянутых металлических нитей (наноструктур) диаметром ~0,003—0,03 мкм. Хорошо известны черни типа сажевая — графит, платиновая, золотая и т. д. Из них наиболее технологичные платиновая — хорошо поглощает излучение вплоть до длины волны $\lambda \sim 10$ мкм, золотая — до 46 мкм [4]. Такие системы хорошо реализуются в эксперименте электролизом или напылением в низком вакууме и могут непосредственно наблюдаться в микроскопе [2]. Важно также, чтобы система нитей была достаточно рыхлой, т. е. нити должны соприкасаться только малой частью своей поверхности.

В этом случае переменное поле свободно проникает в пространстве между нитями, а взаимодействие между нитями мало. То есть здесь рассматривается только ситуация, когда электромагнитная волна взаимодействует с независимыми рассеивателями. Принято также, что толщина нити меньше толщины скин-слоя в массивном металле. Это необходимо для того, чтобы считать электрическое поле однородным по толщине нити.

Исходя из предположения, что сечение поглощения превосходит сечение рассеяния, формулу для коэффициента поглощения можно записать в виде

$$A = 1 - \exp[-h/L], \qquad (2)$$

где h — толщина слоя дисперсной среды; L — длина затухания волны (суммарная толщина всех нитей).

Для величины L в резонансном виде имеем выражение [5]

$$1/L = kn \langle \cos^2 f \rangle \int_0^1 g(p)\Delta p/\{[p - p(\omega)]^2 + [\Delta p]^2\}dp, \qquad (3)$$

которое необходимо дополнить условием возникновения резонанса на поверхностных модах для определения резонансной частоты ω_0

$$1 + p[\mathrm{Re}\varepsilon(\omega) - 1] = 0. \qquad (4)$$

Здесь $\langle \cos^2 f \rangle$ — результат усреднения по углу f между наибольшей осью нити и вектором поляризации падающей волны; $k = 2\pi/\lambda$; n — объемная доля частиц металла в слое; $g(p)$ — плотность вероятности распределения нитей; $\varepsilon(\omega)$ — эффективная диэлектрическая проницаемость нити; λ — длина волны.

Формуле (3) можно придать упрощенный вид в случае, если подынтегральный резонансный сомножитель является наиболее острым:

$$1/L \approx \pi kn \langle \cos^2 f \rangle\, g(p_r(\omega)), \qquad (5)$$

т. е. происходит резонансное возбуждение поверхностной моды в группе нитей, обладающих поляризационными факторами $p = p_r$.

Лучше всего экспериментальные результаты и предложенные теоретические оценки согласуются в ИК области спектра. Используемые в этой области спектра платиновая и золотая черни имеют размер длины нитей от нескольких до десятка микрометров.

Требуя выполнение условия резонанса (3) в полосе 1—10 мкм, для рассматриваемых размеров нитей получим, что существует возможность полного поглощения излучения при толщинах покрытия, значительно меньших длины волны.

Следует отметить, что ситуация (4), (5) не исчерпывает все возможности поглощения. Например, в случае цилиндрических нитей $p_0 \to 0$ поглощение происходит так же, как в соответствующей сплошной металлической пленке [6]. Продольная составляющая электрического поля падающей волны свободно проникает в нить, и поглощение носит нерезонансный характер. Отличие системы нитей от сплошной пленки заключается в отсутствии значительного отражения (до 25 %), связанного с существованием в пленке выделенного направления.

Для СВЧ области спектра нами экспериментально показано, что в системе нитей с толщиной ~0,03 мкм и длиной порядка сантиметра возможно полное поглощение при толщине покрытия ~0,1λ. Из теоретической оценки следует для $\mathrm{Im}\varepsilon \sim 100$ объемная доля частиц металла в слое $n \sim 0{,}1$ и зависимость $L(\lambda)$ носит монотонный характер:

$$L = [kn \langle \cos^2 f \rangle\, \mathrm{Im}(\varepsilon)]^{-1} \sim 0{,}1\lambda. \qquad (6)$$

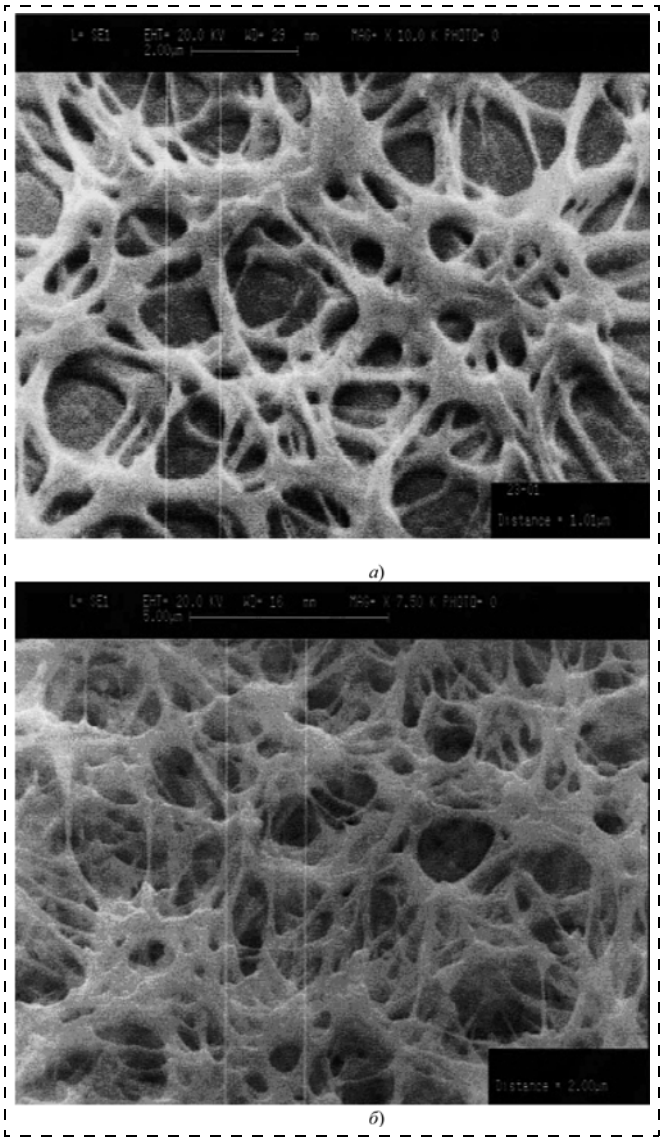

Рис. 1. Формирование первого слоя развитой поверхности на основе полимерной мембранно-волоконной структуры (*а*) и последующие циклы формирования развитой поверхности (*б*)

Экспериментальные образцы поглощающих покрытий для СВЧ области выполнялись в виде диэлектрической тонкопленочной основы, состоящей из слоев протяженно-волоконных полимерных мембранных структур со сквозной проницаемостью относительно газов и жидкостей. Именно такая "затравочная" структура дает возможность выращивать в ней металлические нити напылением в вакууме, чередуя операцию напыления с осаждением мембранной структуры. Толщина (диаметр) металлических нитей $d_i \sim 0{,}03$ мкм. В этом случае нити оказывались без разрывов и отсутствовали "плоские" участки пленок.

На рис. 1, *а* приведена фотография первого слоя волоконной мембранной структуры и последующие слои (рис. 1, *б*). На конечном этапе изготовления покрытия оно пропитывалось полимерным лаком и представляло собой достаточно прочную диэлектрическую основу, которая армирована хаотически расположенными металлическими нитями, закороченными между собой в конечном числе точек. Наличие замкнутых между со-

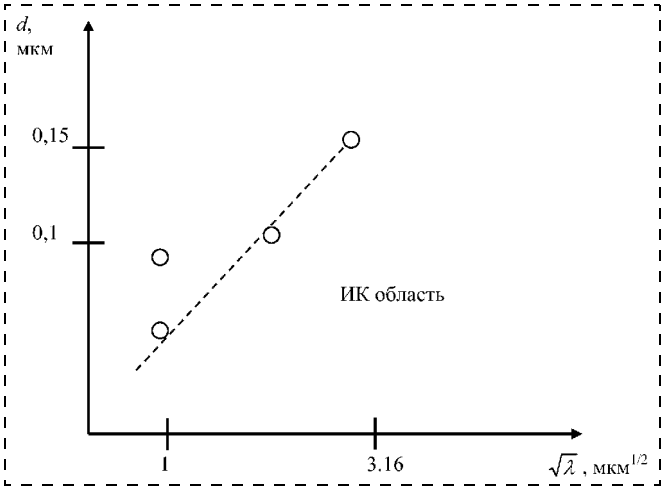

Рис. 2. Зависимости суммарной толщины слоя протяженных частиц от длины волны:
---- — теоретическая; ○ — экспериментальная

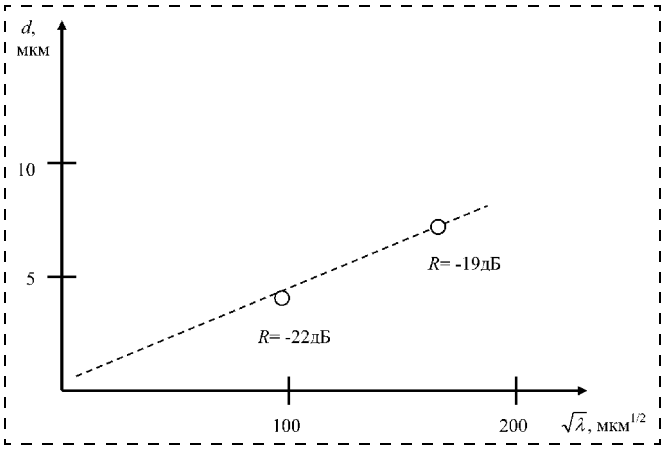

Рис. 3. Зависимости суммарной толщины слоя протяженных частиц от длины волны:
---- — теоретическая; ○ — экспериментальная

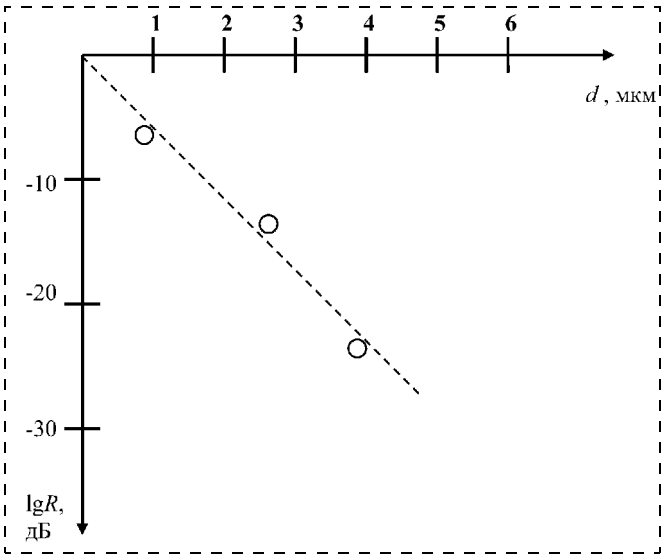

Рис. 4. Экспериментальная зависимость коэффициента отражения от суммарной толщины слоя протяженных частиц

бой в конечном числе точек металлических нитей существенно увеличивает поглощение электромагнитной энергии за счет джоулевых потерь и возникновения плазменных резонансов в широком диапазоне длин волн, так как имеется возможность располагать металлические нити плотно в диэлектрической пленке (не прореживать систему из проволочек).

Таким образом, электромагнитное излучение глубоко проникает в толщу поглотителя, возбуждает в металлических нитях замкнутые токи и поверхностные плазменные колебания, поэтому возрастает поглощение электромагнитной энергии и уменьшается доля отраженной энергии.

Экспериментальная поверка поглощающих покрытий проводилась в основном на платиновой черни в ИК области спектра и СВЧ диапазоне, где использовались металлические нити из полуметаллов. Полное поглощение излучения в диапазоне СВЧ удалось получить только в этом случае. Это, по-видимому, связано с тем, что плазменные частоты в полуметаллах значительно меньше, чем в нормальных металлах и подтверждает предположение о том, что плазменные резонансы играют значительную роль в поглощении электромагнитной энергии.

Измерение коэффициента отражения электролизной платиновой черни проводилось на спектрофотометре ИКС-14 с приставкой и "Hittachi TD". Результаты измерений зависимости $d(\lambda)$ приведены на рис. 2 ($d = \Sigma d_i$).

На рис. 3 приводится экспериментальная зависимость величины d от λ для СВЧ диапазона. Чернь изготавливается из нитей полуметалла в полимерной диэлектрической матрице.

Измерения коэффициента отражения черни, нанесенной на металлическую подложку, проводились рупорно-волноводным методом и волноводным методом, изложенным в [7].

Результаты измерений подтверждают теоретические оценки о наличии в основном двух механизмов поглощения: резонансного и за счет джоулевых потерь, возникающих в короткозамкнутых тонких проволочках, которые всегда имеются в составе черни.

Было проведено достаточно большое число экспериментов в целях увеличения поглощения чернью, но не удалось получить для коэффициента отражения R черни результат лучше, чем — (20÷23) дБ (рис. 4). По-видимому, эта величина является предельной.

Список литературы

1. **Петров Ю. И.** Физика малых частиц. М.: Наука, 1982.
2. **Optical** particle sizing: theory and practice / G. Goesbet and G. Grehan (eds.) Plenum Press, New-York. 1988.
3. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
4. **Баутин А. В., Поляков Ю. А., Сафронов В. И., Шиляев А. А.** Оптические свойства и лучевая прочность тонких платиновых пленок // Оптико-механическая промышленность. 1979. № 3. С. 29.
5. **Бланк А. Я., Касумов Ф. К., Шиляев А. А.** Полное поглощение инфракрасного излучения в тонких слоях металлической черни // Физика низких температур. 1992. Т. 18. № 9. С. 1048.
6. **Круг К. А.** Основы электротехники. Л.: Госэнергоиздат. 1946.
7. **Брандт А. А.** Исследование диэлектриков на сверхвысоких частотах. М.: ФМ, 1963. С. 200.

УДК 669.017

М. Т. Башоров[1], канд. хим. наук, ст. науч. сотр.,
Г. В. Козлов[1], ст. науч. сотр.,
Е. Н. Овчаренко[2], канд. хим. наук, ст. науч. сотр.,
А. К. Микитаев[1], д-р хим. наук, проф., зав. каф.
[1] Кабардино-Балкарский государственный университет, г. Нальчик
[2] Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, г. Москва

НАНОСТРУКТУРЫ В ПОЛИМЕРАХ: СИНЕРГЕТИКА НЕРАВНОВЕСНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА "СДВИГ—КРЕЙЗОВАНИЕ"

Переход от механизма сдвига к механизму крейзования рассмотрен в рамках синергетики как неравновесный фазовый переход. Показано, что указанный переход связан с эффектом самоорганизующейся критичности полимерных наноструктур.

Ключевые слова: *полимер, нанокластеры, сдвиг, крейзование, синергетика.*

В настоящее время хорошо известно [1, 2], что в аморфных стеклообразных полимерах двумя основными механизмами пластической деформации являются сдвиг и крейзование. Соотношение этих механизмов контролирует пластичность полимера — как правило, усиление тенденции к крейзованию означает повышение хрупкости полимера, а усиление тенденции к сдвигу повышает его пластичность [3, 4]. Признание этого факта определило появление большого числа работ, посвященных исследованию указанных механизмов, их конкуренции и, в частности, зависимости их интенсивности от температуры испытаний.

Авторы работы [5] исследовали механизмы пластической деформации для ряда полимеров в широком интервале температур. Они показали, что для поликарбоната (ПК) и полифениленоксида (ПФО) наблюдается переход от сдвига к крейзованию по мере приближения температуры испытаний T к температуре стеклования T_c этих полимеров. Указанный переход наблюдался при температурах 373...393 К для ПК и ~413 К для ПФО [5]. А. Дональд и Е. Крамер [6] предложили микромеханическую модель крейзования в аморфных полимерах, где вероятность реализации того или иного механизма определяется структурным фактором — плотностью $\nu_з$ сетки макромолекулярных зацеплений (сетки "захлестов"). В рамках этой модели было продемонстрировано, что увеличение $\nu_з$ приводит к интенсификации механизма сдвига и соответствующему подавлению механизма крейзования. Авторы работы [7] показали, что нанокластерная модель структуры аморфного состояния полимеров допускает альтернативную трактовку изменений механизмов пластической деформации и контролирующих их параметров при варьировании температуры для аморфных стеклообразных полимеров. Цель настоящей работы — рассмотрение перехода "сдвиг — крейзование" как неравновесного фазового перехода и получение его универсального критерия в рамках синергетики деформируемого твердого тела [8, 9].

Использованы приведенные в различных публикациях значения основных молекулярных характеристик (характеристического отношения C_∞ и площади поперечного сечения S макромолекулы), а также температур стеклования T_c для полистирола (ПС), ПК и ПФО [5, 10, 11]. Аналогичные характеристики для эпоксиполимеров (ЭП) на основе диглицидилового эфира бисфенола А (ЭД-22) приняты по данным работы [12]. Отверждение проводили изометилтетрагидрофталевым ангидридом в присутствии ускорителя трисдиметиламинометилфенола (ИМТГФА, ЭП-1) или 3,3′-дихлор-4,4′-диаминодифенилметаном (ДХ, ЭП-2). Варьирование топологической структуры ЭП осуществляли путем изменения отношения отвердитель/олигомер в молях (эквивалентах) $K_{ст}$ от 0,50 до 1,50 [12].

Для анализа перехода "сдвиг — крейзование" на основе принципов синергетики деформируемого тела рассмотрим взаимосвязь критических показателей адаптивности структуры к деформированию и управляющего параметра на основе данных [13] по изменению плотности нанокластерной сетки зацеплений до и после процесса текучести для исследуемых ЭП. В качестве управляющего параметра примем отношение $K_{ст}$, а в качестве параметра порядка — критическое значение плотности нанокластерной сетки $\nu_{кл}$. Данные [13] показали, что в недеформированном состоянии тип отвердителя влияет на вид связи между $K_{ст}$ и $\nu_{кл}$: переход от ДХ к ИМТГФА приводит к увеличению критического значения управляющего параметра $K^*_{ст}$ от 1,0 до $K^*_{ст}$ = 1,25 (см. таблицу). После достижения точки текучести значение $\nu_{кл}$ не зависит от $K_{ст}$. Кроме того, между деформацией текучести $\varepsilon_т$ и разностью значений $\nu_{кл}$ до и после текучести наблюдается линейная корреляция и в пределах погрешности эксперимента тип отвердителя не влияет на вид этой корреляции [13]. Отношение адаптивности A_m к деформированию при $K_{ст} = K^*_{ст}$ рассчитано как отношение критических плотностей нанокластерной сетки $(\nu^*_{кл})_{исх}$ до и $(\nu^*_{кл})_{деф}$ после деформации [9]:

$$A_m = \frac{\left(\nu^*_{кл}\right)_{деф}}{\left(\nu^*_{кл}\right)_{исх}} = \Delta_i^{1/m}, \qquad (1)$$

где Δ_i — мера устойчивости структуры; m — число возможных перестроек.

Критические показатели адаптивности структуры эпоксиполимеров с разными отвердителями до и после текучести

Параметр	Отвердитель			
	ИМТГФА		ДХ	
	Исходное состояние	После текучести	Исходное состояние	После текучести
$K^*_{ст}$	1,25	—	1,0	—
$\nu^*_{кл}$	3,0	0,90	2,85	0,90
$(\nu^*_{кл})_{деф}/(\nu^*_{кл})_{исх}$	—	0,30	—	0,32
$A^*_m = A_m$	—	0,29	—	0,32
m	—	1,00	—	1,00
Δ_i	—	0,285	—	0,324

Из данных таблицы следует, что использование в качестве отвердителя ИМТГФА снижает адаптивность полимера к деформированию по сравнению с ДХ от $A^*_m = 0{,}324$ до $A^*_m = 0{,}285$, но в обоих случаях адаптивность контролируется устойчивостью кластерной сетки зацеплений. Значение $m = 1$ указывает на линейную обратную связь между параметрами A_m и Δ_i [9].

Таким образом, анализ данных [13] в рамках синергетики показал, что параметром порядка при переходе от сдвига к крейзованию является отношение $(\nu^*_{кл})_{деф}/(\nu^*_{кл})_{исх}$, характеризующее потерю устойчивости нанокластерной структурой при деформировании. Значение этого отношения близко к значению коэффициента Пуассона ν_* среды при неравновесных фазовых переходах ($\nu_* = 0{,}33$). Известно [8], что коэффициент Пуассона является одной из важнейших характеристик различных сред, в том числе и полимеров [14]. Величина $\varepsilon_т$ может быть определена следующим образом [14]:

$$\varepsilon_т = \frac{3\sigma_т}{E}, \qquad (2)$$

где $\sigma_т$ — предел текучести; E — модуль упругости, а критическая деформация сдвига γ_*, отвечающая потере устойчивости твердым полимером, равна [14]

$$\gamma_* = \frac{\sigma_т}{E}. \qquad (3)$$

Из уравнений (2) и (3) следует условие потери устойчивости нанокластерной структурой:

$$\frac{\gamma_*}{\varepsilon_т} = 0{,}33. \qquad (4)$$

Критерий (4) показывает, что процесс текучести аморфных стеклообразных полимеров контролируется потерей устойчивости нанокластерной структуры, а условием перехода от сдвига к крейзованию является

$$\frac{\left(\nu^*_{кл}\right)_{деф}}{\left(\nu^*_{кл}\right)_{исх}} = 0{,}33 = \nu_*, \qquad (5)$$

где ν_* — инвариантное значение коэффициента Пуассона для среды при неравновесных фазовых переходах.

Рассмотрим экспериментальное подтверждение корректности критерия (5). Относительную долю наноструктур $\varphi_{кл}$, которая является параметром порядка структуры полимеров в строгом физическом смысле этого термина [15], можно рассчитать из уравнения [14]

$$\varphi_{кл} = 0{,}03(T_с - T)^{0{,}55}. \qquad (6)$$

Затем определяли фрактальную размерность структуры d_f согласно формуле [14]

$$d_f = 3 - 6\left(\frac{\varphi_{кл}}{SC_\infty}\right). \qquad (7)$$

И, наконец, коэффициент Пуассона ν определяли с помощью уравнения [8]

$$d_f = (d - 1)(1 + \nu), \qquad (8)$$

где d — размерность евклидова пространства, в котором рассматривается фрактал (очевидно, в нашем случае $d = 3$).

На рис. 1 приведены зависимости $\nu(T)$ для трех аморфных стеклообразных полимеров, а штриховой горизонтальной линией указано значение ν_*. Как следует из данных этого рисунка, для ПС при используемых T величина ν всегда больше ν_*, т. е. основным механизмом пластической деформации для

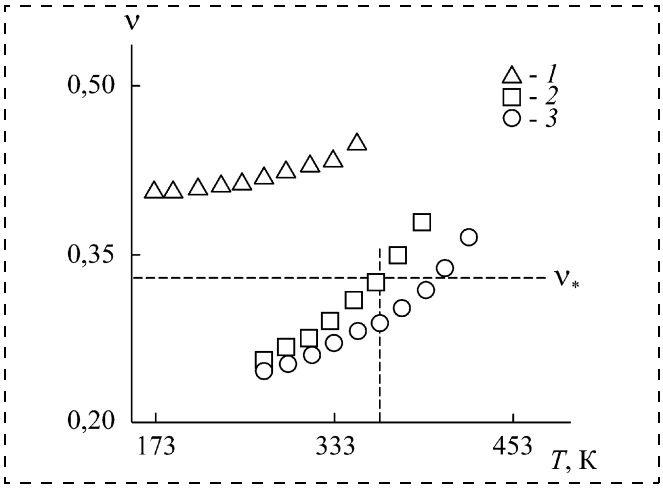

Рис. 1. Зависимости коэффициента Пуассона ν от температуры испытаний T для ПС (*1*), ПК (*2*) и ПФО (*3*). Горизонтальная штриховая линия показывает величину ν_*

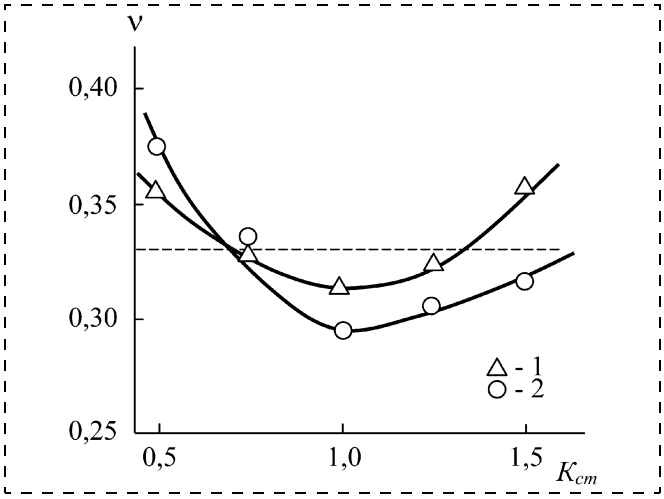

Рис. 2. Зависимости коэффициента Пуассона ν от величины $K_{ст}$ для ЭП-1 (*1*) и ЭП-2 (*2*). Горизонтальная штриховая линия показывает значение ν*

ПС всегда является крейзование. Это наблюдение подтверждается экспериментально [1, 16] и указанный факт объясняет высокую хрупкость образцов ПС [16]. Для пластичных ПК и ПФО переход от сдвига к крейзованию реализуется при температурах перехода $T_{ск}$ = 373 и 423 K, соответственно, что превосходно согласуется с экспериментальными результатами работы [5] ($T_{ск}$ = 373...393 K для ПК и 413 K для ПФО). Отметим, что указанные температуры $T_{ск}$ также хорошо соответствуют температуре стеклования рыхлоупакованной матрицы ПК и ПФО, которая примерно на 50 K ниже макроскопической T_c. Это предполагает, что процесс крейзования при высоких температурах для ПК и ПФО обусловлен легкостью вытяжки расстеклованного полимера (в котором отсутствуют наноструктуры, ограничивающие этот процесс) в фибриллы крейза. Уравнения (6)—(8) однозначно указывают причину склонности ПС к крейзованию — большие значения S и C_∞ (69,8 Å^2 [11] и 10 Å^2 [10], соответственно), что определяет высокие значения d_f и, следовательно, ν.

На рис. 2 приведены зависимости ν($K_{ст}$) для исследуемых ЭП, где штриховой горизонтальной линией вновь указано значение ν_*. Как можно видеть, крейзование возможно только для образцов ЭП с $K_{ст}$ = 0,50 и 1,5, т. е. имеющих наименьшие значения как $\nu_{кл}$, так и плотности узлов химической сшивки ν_c [12], что полностью согласуется с концепциями работ [6] и [7]. Именно эти эпоксиполимеры в испытаниях на сжатие разрушаются хрупко (до предела текучести), что экспериментально подтверждает корректность графиков рис. 2.

Таким образом, приведенный выше синергетический анализ неравновесного фазового перехода "сдвиг—крейзование" с использованием экспериментальных и теоретических данных для стеклообразных линейных и сшитых аморфных полимеров при различных температурах позволил установить, что:

1) параметром порядка, контролирующим устойчивость структуры аморфных полимеров к деформированию, является критическая плотность нанокластерной сетки $\nu^*_{кл}$, отвечающая критическому значению управляющего параметра;

2) неравновесный фазовый переход "сдвиг—крейзование" связан с эффектом самоорганизующейся критичности, отвечающему универсальному параметру порядка, равному коэффициенту Пуассона ν_* = 0,33 для сред с самоорганизующейся критичностью.

Список литературы

1. **Бакнелл К. Б.** Ударопрочные пластики. Л.: Химия, 1981. 328 с.
2. **Козлов Г. В., Белоусов В. Н., Микитаев А. К.** Оценка вкладов механизмов пластической деформации в ударную прочность полимеров // Докл. АН СССР. 1984. Т. 274. № 2. С. 338—342.
3. **Jang B. Z., Uhlmann D. R., Van der Sande J. B.** Ductile-brittle transition in polymers // J. Appl. Polymer Sci. 1984. V. 29. № 11. P. 3409—3420.
4. **Козлов Г. В., Шетов Р. А., Микитаев А. К.** Хрупко-вязкий переход в линейных гомополимерах // Высокомолек. соединения. А. 1986. Т. 28. № 9. С. 1848—1852.
5. **Wellinghoff S. T., Baer E.** Microstructure and its relationship to deformation processes in amorphous polymer glasses // J. Appl. Polymer Sci. 1978. V. 22. № 7. P. 2025—2045.
6. **Donald A. M., Kramer E. J.** Effect of molecular entanglements of craze microstructure in glassy polymers // J. Polymer Sci.: Polymer Phys., Ed. 1982. V. 20. № 4. P. 899—909.
7. **Kozlov G. V., Beloshenko V. A., Lipatov Yu. S.** Temperature dependence of the mechanisms of crazing and shear in amorphous glassy polymers: a current review and a new approach // J. Polymeric Mater. 1998. V. 39. № 2. P. 201—212.
8. **Баланкин А. С.** Синергетика деформируемого тела. М.: Изд-во Министерства Обороны СССР, 1991. 404 с.
9. **Иванова В. С., Кузеев И. Р., Закиричная М. М.** Синергетика и фракталы. Универсальность механического поведения материалов. Уфа: Изд-во УГНТУ, 1998. 366 с.
10. **Aharoni S. M.** On entanglements of flexible and rodlike polymers // Macromolecules. 1983. V. 16. № 9. P. 1722—1728.
11. **Aharoni S. M.** Correlations between chain parameters and failure characteristics of polymers below their glass transition temperature // Macromolecules. 1985. V. 18. № 12. P. 2624—2630.
12. **Козлов Г. В., Белошенко В. А., Кузнецов Э. Н., Липатов Ю. С.** Изменение молекулярных параметров эпоксиполимеров в процессе их сшивания // Докл. НАН Украины. 1994. № 12. С. 126—128.
13. **Козлов Г. В., Белошенко В. А., Варюхин В. Н.** Эволюция диссипативных структур в процессе текучести сетчатых полимеров // Прикладная механика и техническая физика. 1996. Т. 37. № 3. С. 115—119.
14. **Kozlov G. V., Zaikov G. E.** Structure of the Polymer Amorphous State. Utrecht-Boston: Brill Academic Publishers, 2004. 465 p.
15. **Козлов Г. В., Газаев М. А., Новиков В. У., Микитаев А. К.** Моделирование структуры аморфных полимеров как перколяционного кластера // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. № 16. С. 31—38.
16. **Kozlov G. V., Beloshenko V. A., Mikitaev A. K.** The kinetics of crazing in polystyrene at impact testing // J. Mater Sci. Technology. 1999. V. 7. № 1. P. 3—10.

УДК 621.38

Н. А. Зайцев, д-р техн. наук, проф.,
ОАО "НИИМЭ" и завод "Микрон"

ПРИМЕНЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ОБЛАСТЯХ ЭЛЕКТРОНИКИ

Рассматривается применение углеродных нанотрубок в различных областях электроники, в том числе и в экстремальных. Дан сравнительный анализ автокатодов на основе нанотрубок.

Ключевые слова: *углеродные нанотрубки, эмиссия электронов, холодный катод, микровакуумный триод.*

Введение

В последнее время наноструктурные материалы и поверхности благодаря своим экстраординарным свойствам привлекают внимание множества исследовательских групп [1]. Одним из первых применений углеродных нанотрубок (УНТ) было использование их в качестве полевых (автоэмиссионных) эмиттеров. Большой интерес к холодным катодам вызван, например, стремлением создать плоские экраны, которые бы полностью заменили громоздкие дисплеи на электронно-лучевых трубках (ЭЛТ) в потребительской и профессиональной сфере. У экранов на холодных катодах нет необходимости в сканировании пучком электронов, они также могут быть тонкими и с большой площадью (как и жидкокристаллические мониторы), однако с лучшей яркостью, контрастностью и разрешением (как дисплеи на ЭЛТ). Преимущество холодных катодов над термокатодами заключается в более простой технологии изготовления и более надежной сборке [2], низкой инерционности и более широком диапазоне цветности, в высокой долговечности. Вообще говоря, человеческое зрение чрезвычайно чувствительно: даже когда один пиксель на дисплее не работает, ошибка незамедлительно распознается человеческим глазом и мозгом, вызывая чувство дискомфорта. Поэтому время жизни каждого пикселя должно составлять несколько лет.

Потребность в новых средствах отображения информации постоянно возрастает. В последние годы многими коллективами разработчиков [3, 4] проводятся исследования, направленные на создание таких дисплеев. Фрагмент одного из прототипов [4] таких дисплеев показан на рис. 1, *а*. На рис. 1, *б* продемонстрирована заглавная буква "N", изображенная на таком экране.

В этом устройстве в качестве источников эмиссии электронов для пикселей применяются вертикально расположенные массивы УНТ, выращенные на матрице электродов в вакуумных условиях. Противоположным электродом является стеклянная пластинка с нанесенным слоем фосфора. Между катодом из нанотрубок и стеклянной пластинкой прикладывается разность потенциалов в несколько киловольт для получения автоэмиссионных электронов и генерации света через возбуждение соответствующих частей фосфора. Изображение может быть получено путем выборки различных позиций матрицы.

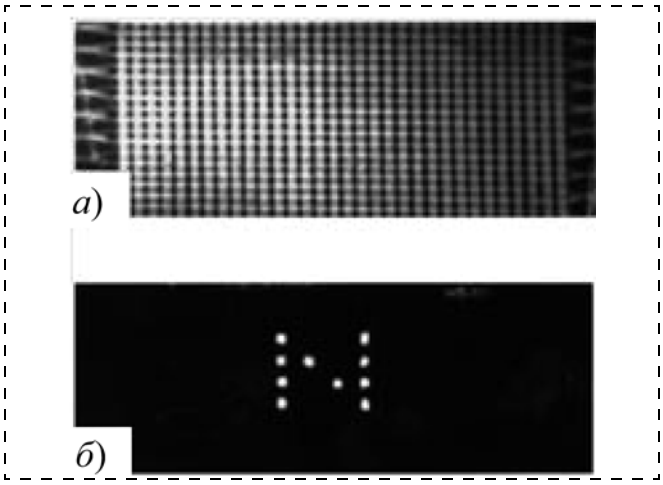

Рис. 1. Фотографии прототипа дисплея на основе УНТ (1998 г.):
а — часть матрицы пикселей; *б* — буква "N", показанная на дисплее

На рис. 2, *а* показан прототип дисплея в цветном режиме, созданный специалистами института компании *Samsung* [4] в 1999 г. Диагональ изображения этого устройства составляют 4,5 дюйма. Для создания катодолюминесцентных пикселей использовались очищенные однослойные УНТ, смешанные с нитроцеллюлозой и размещенные на подложке из натрий-кальций-силикатного стекла. В 2002 г. компанией *Samsung* создан более продвинутый прототип дисплея такого типа, показанный на рис. 2, *б*.

Структура пикселя в данном прототипе отличается наличием дополнительного управляющего электрода — сетки, позволяющей контролировать эмиссию с помощью напряжения сетка — катод. Это позволяет управлять переключением с помощью на-

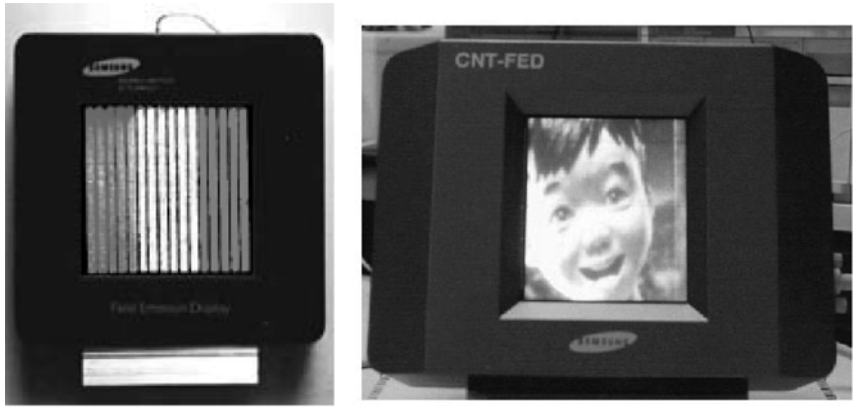

Рис. 2. Прототипы дисплеев на основе УНТ:
а — 1999 г.; *б* — 2002 г.

пряжения в десятки вместо тысяч вольт и ускорять электроны до своей конечной энергии постоянным напряжением сетка — анод. Кроме того, введение сетки позволяет добиваться лучшего схождения пучка электронов только на своем люминофоре, так как в идеале каждый испускающий электрод должен работать только на один пиксель.

Некоторые исследователи [5] предлагают использовать катоды на основе массивов нанотрубок для создания портативных аналогов более сложных и специфичных приборов — наноклистронов.

Возможным также представляется разработка элементов памяти на основе УНТ и применение их в приборах военного назначения благодаря высокой радиационной стойкости, быстродействию и слабой чувствительности к температуре.

Привлекательной с коммерческой точки зрения областью применения может быть беспроводная связь [6]. Использование микровакуумных устройств для создания генераторов и усилителей в базовых станциях сотовой связи позволит существенно уменьшить их размеры. Применение холодных катодов на основе УНТ для космических нужд позволит минимизировать не только размеры и потребляемую мощность устройств с их использованием, но и требуемое для их удовлетворительной работы напряжение.

Микротриоды с холодным катодом

Развитие микроэлектронной технологии предоставляет возможность создания микровакуумных приборов с холодным катодом в интегральном исполнении. Это позволяет создать интегрированные микро- и наносистемы, объединяющие положительные свойства микроламп и транзисторов. Применение холодных катодов в разрабатываемой элементной базе обеспечит высокое быстродействие таких приборов (электроны в вакууме движутся на несколько порядков быстрее, чем в твердом теле), а также из-за того, что холодные катоды "включаются" мгновенно, без времени разогрева. Из-за отсутствия температурной деформации от горячего катода сетка может быть помещена близко к катоду (<10 мкм), благодаря чему возможна работа на сверхвысоких частотах (>10 ГГц) и низком управляющем напряжении (50—100 В) [6].

В результате проведенного анализа источников информации было установлено, что в настоящее время существует два основных подхода к реализации микротриодов с холодным катодом на основе УНТ с применением микроэлектронных технологий.

Один подход [6] заключается в создании микровакуумного триода на основе принципов микроэлектромеханических систем (МЕМС/MEMS). При этом перенос электронов происходит параллельно подложке, на которой создается прибор. На рис. 3 представлено изображение части полностью собранного триода, полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа.

Такое устройство создается с помощью технологий микрообработки кремния. Микротриод создается на подложке с нитридным покрытием. При температуре 750 °С плазмохимическим осаждением из газовой фазы в среде аммиака или ацетилена на катоде селективно выращиваются массивы нанотрубок. При росте УНТ в качестве металла-катализатора используется пленка железа толщиной 5,0 нм. Массивы нанотрубок на катоде обычно создаются над отверстиями сетки для минимизации сеточных токов. Далее электроды с помощью сканирующего микрозонда поднимаются в вертикальное положение и фиксируются специальными механизмами блокировки.

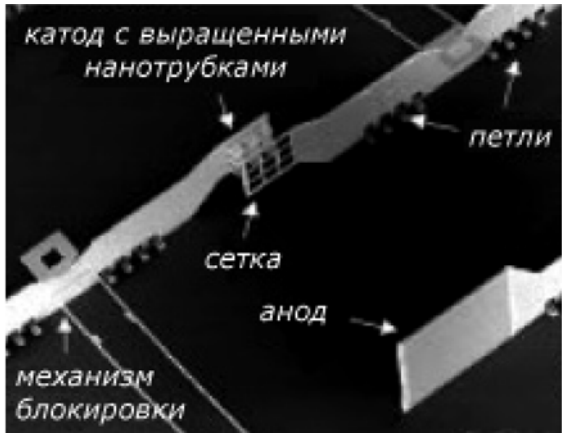

Рис. 3. Микромеханический вариант [6] реализации микровакуумного триода

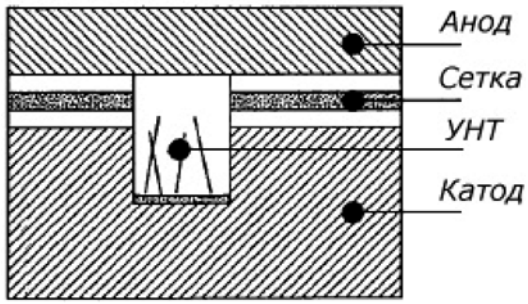

Рис. 4. Конструкция микротриода с вертикальной ориентацией УНТ

Другой подход [7, 8, 9] заключается в создании прибора, в котором перенос электронов происходит вертикально перпендикулярно подложке. Принципиальная конструкция такого микротриода показана на рис. 4.

При этом в основном применяются стандартные технологии микроэлектроники. При таком варианте реализации прибора на кремниевой подложке с помощью нескольких операций литографии/травления создаются углубления, на боковых стенках которых оказываются контакты сетки, предварительно сформированной из металла или поликремния. От других электродов сетка отделяется слоями диэлектриков, чаще всего для этого применяют оксид кремния. На донной части полученных углублений выращиваются массивы УНТ, служащие полевыми эмиттерами. Анод изготовляется из пленки проводящего вещества другой подложки, спекаемой с первой.

Сравнивать приведенные подходы можно по многим критериям, приведем лишь некоторые из них.

Во-первых, из-за особенностей конструкции сеточные токи, скорее всего, больше будут в первом варианте, что при больших плотностях эмиссионного тока может оказаться критическим аспектом. На настоящий момент не удалось найти количественных оценок, получаемых для обоих вариантов сеточных токов, что ограничивает анализ по этому конструкционному аспекту.

Во-вторых, практическая значимость полученных образцов зависит от технологичности изготовления подобных приборов в будущем. Очевидно, что второй подход обладает большим сродством к традиционным микроэлектронным технологиям и, следовательно, с большей вероятностью будет реализован в случае массового применения. В нем применяются обычные методики самосовмещения для упрощения маршрута изготовления. Однако, по нашему мнению, для этого подхода существует аспект "ноу-хау" с формированием анода — спекание подложек может быть слишком узким местом в маршруте. Возможно, есть смысл поиска более удачного решения для формирования анода. У микромеханического же варианта реализации гораздо больше сомнительных сторон по технологичности. Необходимо создавать большое число вспомогательных конструкций: петли крепления к подложке, механизмы блокировки в рабочем состоянии, подъемные механизмы и др. Для промышленного варианта воплощения этого подхода, видимо, придется предусматривать устройства самосборки, что еще больше ухудшит компоновку таких приборов.

В-третьих, эти два подхода сильно различаются по способу обеспечения соответствующего вакуума в окружении устройства. При первом варианте реализации видимо необходимы какие-то внешние макроскопические структуры для поддержания необходимого давления. Второй вариант характеризуется более низкими требованиями по вакууму в приборе из-за миниатюризации трасс носителей в свободном пространстве. Кроме того, возможно, технологического вакуума при изготовлении окажется достаточно для работы прибора.

Из анализа приведенных критериев сравнения можно сделать вывод о выборе в пользу вертикальной реализации микровакуумного триода как более реалистичной для массового изготовления. При любом подходе к реализации микровакуумных триодов для различных применений решающее влияние на характеристики прибора целиком оказывает процесс переноса электронов от автокатода. Поэтому считаем важной задачу точного описания этого процесса в условиях влияния на модель многих реальных факторов.

Сравнительный анализ автокатодов

Для экспериментального наблюдения автоэлектронной эмиссии с поверхности вещества необходимо создать вблизи поверхности автокатода сильное электрическое поле с напряженностью порядка 10^7 В/см. Получить однородное электрическое поле с таким гигантским значением напряженности в плоскопараллельной системе анод-катод практически невозможно ввиду необходимости приложения слишком большой разности потенциалов анод-катод. Помимо этого, даже в очень сильном вакууме будет происходить электрический пробой. Поэтому для изучения и применения на практике автоэлектронной эмиссии используют холодные катоды с неоднородным полем по эмиссионной поверхности. Эмиссия происходит с небольших по площади участков поверхности эмиттера, расположенных регулярным образом. Полевой катод при этом целиком представляет собой массив из таких выступов. Наиболее часто используемые формы таких эмитирующих неровностей показаны на рис. 5:

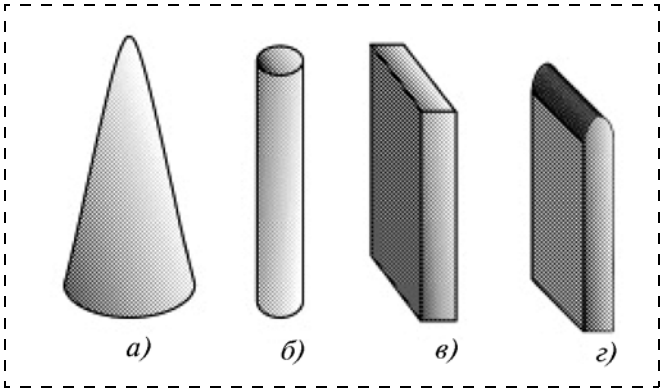

Рис. 5. Формы выступов поверхности автокатодов

- острийный — вершину можно аппроксимировать полусферой, лучшее приближение — параболоид вращения (*а*);
- коаксиальный — приближенно цилиндрически-симметричный (*б*);
- пленочный — эмиссия идет с торца пленки (*в*);
- лезвийный — поперечное сечение у торца — приближенно парабола (*г*).

Выбор углеродных нанотрубок в качестве эмиттеров обусловлен несколькими факторами. Во-первых, благодаря их большому аспектному соотношению (до ~ 1000), напряженность электрического поля в окрестности вершины нанотрубки в сотни раз превышает соответствующую среднюю по объему напряженность поля, создаваемую внешним источником. Во-вторых, нанотрубки имеют необычайную механическую прочность. Из-за этого и благодаря своим необычным физико-химическим свойствам появляется возможность получения аномально высоких значений тока холодной электронной эмиссии при сравнительно низком напряжении, приложенном к УНТ [6].

Для анализа модели нанотрубки как индивидуального полевого эмиттера в форме цилиндра или отдельных УНТ в массиве обоснованным можно считать вариант (*б*). Связь между напряженностью электрического поля E на вершине цилиндра и приложенной разностью потенциалов катод-анод V для этого варианта выражается формулой

$$E = \gamma V,\ \gamma = \frac{1}{r\ln(R/r)}, \qquad (1)$$

где γ — коэффициент пропорциональности; r — радиус эмиттера (радиус УНТ); R — расстояние между вершиной (эмитирующей плоскостью) и анодом.

Особенности математической модели автоэмиттера

Ток эмиссии холодного катода напрямую зависит от локального поля у испускающей поверхности и может быть достаточно просто описан с помощью закона Фаулера—Нордгейма (Ф—Н), которая включает в себя туннелирование электронов через эмиссионный барьер. По многочисленным исследованиям ток эмиссии с УНТ достаточно хорошо описывается законом Ф—Н. Закон Ф—Н для плотности тока полевой эмиссии j с поверхности (металла) с работой выхода φ и напряженностью электрического поля E вблизи эмитирующей поверхности описывается следующей формулой:

$$j = \frac{e^3}{8\pi h}\frac{E^2}{\varphi t(E,\varphi)}\exp\left[-\frac{8\pi\sqrt{2m}\varphi^{3/2}}{8he}\frac{}{E}\theta(E,\varphi)\right], \qquad (2)$$

где $\theta(E, \varphi)$ и $t(E, \varphi)$ — получившиеся при расчете специальные функции, которые учитывают влияние на значение тока автоэлектронной эмиссии степени понижения треугольного потенциального барьера за счет сил зеркального изображения. Обе эти функции могут быть представлены как функции одного параметра

$$y = \frac{e\sqrt{eE}}{\varphi}, \qquad (3)$$

который имеет смысл отношения понижения потенциального барьера к работе выхода φ. При $y = 1$ происходит полное снятие барьера для электронов, находящихся на уровне Ферми.

Для большинства практических целей, без заметных погрешностей, значение функции $t(y)$ принимают равным единице. Значения $\theta(y)$ (функция Нордгейма) обычно лежат в диапазоне 0,7...0,9. При $y = 1$ функция $\theta(y)$ обращается в ноль. Однако для решения большинства прикладных задач значение этой функции также полагают равным единице. При данных приближениях формула Фаулера—Нордгейма принимает более простой вид:

$$j = A\frac{E^2}{\varphi}\exp\left(-\frac{B\varphi^{3/2}}{E}\right)\ [\text{А/м}^2]. \qquad (4)$$

где $A = 1{,}54 \cdot 10^{-10}$; $B = 6{,}73 \cdot 10^9$.

Однако в реальных экспериментах измеряют не плотность тока автоэмиссии j, которая, как и площадь эмитирующей поверхности S не поддается непосредственному измерению, а силу тока

$$I = jS. \qquad (5)$$

Подставляя (1), (4) в (5), получим формулу, удобную для обработки экспериментальных данных:

$$\ln\frac{I}{V^2} = \ln\left(\frac{AS\gamma^2}{\varphi}\right) = \frac{B\varphi^{3/2}}{\gamma}\frac{1}{V}. \qquad (6)$$

Видно, что данная зависимость является линейной при построении ее в осях $\ln(I/V^2)$ и $(1/V)$. Пример экспериментальной кривой [8] показан на рис. 6.

Важным является то, что из значения наклона прямой и ее точки пересечения с осью ординат можно определить неизмеряемые на опыте значения S и γ.

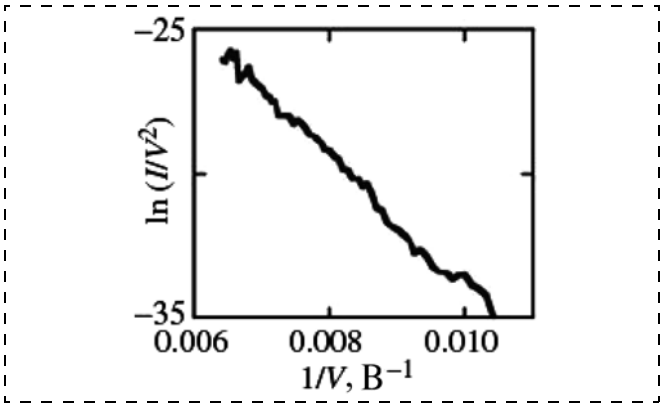

Рис. 6. Экспериментальная "прямая Ф—Н" [8]

Знание этих величин позволяет судить о характере реальной эмиссионной поверхности.

Значимым является тот факт, что даже малые вариации геометрии эмиттера и поверхностных состояний могут иметь заметное влияние на эмиссионный ток. Выравнивание высоты нанотрубок, степень загрязненности их поверхности, тип окончания (открытые или закрытые), плотность и расстояние между нанотрубками являются основными факторами, влияющими на результирующий ток электронной эмиссии [1].

В настоящее время несколькими научными коллективами [9—11] проводятся исследования, призванные получить практические и теоретические решения задачи оптимизации конструкции массива УНТ для получения наилучших эмиссионных характеристик. При анализе рабочих характеристик катодов на основе УНТ необходимо учитывать, что эмиссионный ток массива, содержащего большое число УНТ, не является просто суммой токов индивидуальных нанотрубок. Между ВАХ индивидуальной УНТ и большого их массива в холодном катоде существуют различия. Они обусловливаются в большой степени эффектом экранирования. Степень увеличения электрического поля вблизи вершины нанотрубки характеризуют коэффициентом усиления электрического поля

$$\beta = E_{max}/E, \qquad (7)$$

где E_{max} — максимальное значение напряженности электрического поля вблизи вершины УНТ; E — среднее значение напряженности.

Эффект экранирования заключается в снижении коэффициента усиления эмиттера при уменьшении расстояния между выращенными в массиве УНТ. Очевидно, что данный эффект не будет наблюдаться в случае изолированной нанотрубки или в случае, когда расстояние между индивидуальными нанотрубками в массиве велико. При этом коэффициент усиления электрического поля будет определяться геометрией индивидуальной нанотрубки и достигать своего максимального значения. При проектировании холодного катода одной из важнейших его характеристик является значение эмиссионного тока. Для обеспечения приемлемого уровня тока автоэмиссии разработчики вынуждены создавать боль-

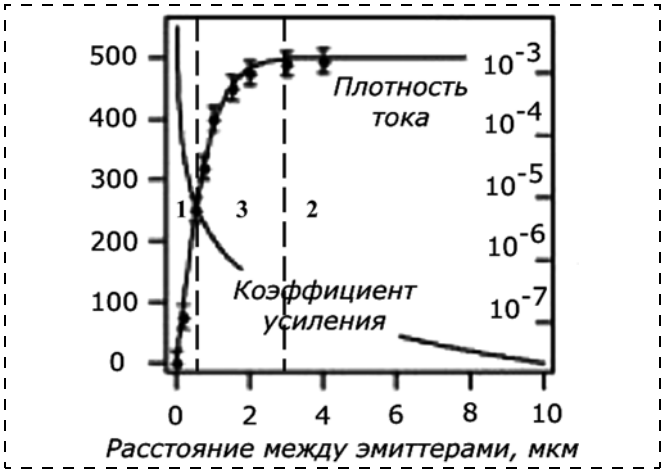

Рис. 7. Зависимость коэффициента усиления поля и плотности эмиссионного тока от расстояния между эмиттерами [10]

шее число близкорасположенных нанотрубок. При уплотнении соседних нанотрубок коэффициент усиления электрического поля образцов снижается [10], и при переходе массива нанотрубок в плоскую поверхность с нулевым расстоянием между УНТ β приближается к единице. Таким образом, в силу эффекта экранирования при анализе эмиттеров на основе УНТ возникает необходимость поиска компромисса между высоким фактором усиления электрического поля, который достигается при больших расстояниях между индивидуальными эмиттерами, и большой плотностью тока эмиссии, которая может быть достигнута только при достаточно плотном расположении УНТ в массиве [11].

Таким образом, имеет место задача оптимизации конструкции автоэмиттера для достижения максимального тока полевой эмиссии при достаточном значении коэффициента усиления электрического поля. На рис.7 показаны зависимости плотности тока автоэмиссии и коэффициента усиления массива УНТ от расстояния между отдельными нанотрубками.

После подстановки выражения для β (7) в формулу Ф—Н была получена [10] зависимость плотности тока АЭЭ и коэффициента усиления электрического поля эмиттера от расстояния между отдельными УНТ в его составе.

На полученном графике можно выделить три области с различным характером эмиссионных свойств массива:

- область "1" — эмиссия с УНТ низкой плотности "бедна" — слишком мало число источников, плотность тока автоэмиссии недостаточна при хорошем значении коэффициента усиления;
- в области "2" происходит эмиссия с сильно запакованных УНТ, которая обладает недостаточным значением коэффициента усиления электрического поля из-за сильного влияния эффекта экранирования, хотя плотность тока достигает максимального значения;
- область "3" является кандидатом на оптимальный вариант по совокупности свойств эмиттера. Нам кажется, что в этой области целесообразно выбирать начальное приближение для решения задачи оптимизации конструкции автокатода.

На данный момент однозначного мнения по оптимальному расстоянию L между нанотрубками высоты h не найдено ни в теоретических, ни в практических исследованиях. Получаемые решения колеблются от $L = 0{,}3h$ до $L = 2h$. Разница в получаемых теоретически результатах объясняется неодинаковыми подходами к описанию структуры нанотрубки. Разброс результатов практических исследований одних и тех же структур вызван, как считают авторы [10] тем, что применяются неодинаковые методики оценки коэффициента усиления β, эмиссионного тока и плотности эмиттеров. Однако большинство исследователей сходятся во мнении, что эффект экранирования УНТ, входящих в состав полевого эмиссионного катода, существенно снижает коэффициент усиления электрического поля при расстоянии между нанотрубками, соизмеримом с их высотой. Это приводит к возникновению максимума в зависимости плотности эмиссионного тока от среднего расстояния между индивидуальными эмиттерами, наличие которого необходимо учитывать при оптимизации параметров катода на основе нанотрубок.

Таким образом, можно сделать вывод о различиях в конструкторских подходах к реализации холодных катодов для решения различных задач:

- для применения в усилительных приборах (в качестве замены вакуумных ламп) можно применять автокатоды на основе разреженных массивов УНТ, имеющих большой коэффициент усиления поля;
- для создания пикселей дисплеев, сложных приборов (клистронов), бесконтактных электрических сцепок, где решающее значение имеет плотность эмиссионного тока, следует использовать катоды из плотноупакованных массивов.

Список литературы

1. **Hsu D. S. Y.** Appl. Phys. Lett. 2002. V. 80. P. 2988—2990.
2. **TM-Services Ltd.,** Minsk, 2007 CARBON NANOMATERIALS AND SYNTHESYS AND THEIR COMMERCIAL USE PERSPECTIVES.
3. **Choi W. B., Chung D. S.** et al. // Appl. Phys. Lett. 1999. 75. 3129.
4. **Wang Q. H., Setlur A. A., Lauerhaas J. M., Dai J. Y., Seelig E. W., Changa R. P. H.** // Appl. Phys. Lett. 1998. 72. 2912.
5. **Manohara H., Dang W. L., Siegel P. H., Hoenk M., Husain A. A.** Scherer Field emission testing of carbon nanotubes for THz frequency vacuum microtube sources // Proc. of SPIE. 2004. 5343. 227.
6. **Sungho Jin.** A Micromachined Vacuum Triode Using a Carbon Nanotube Cold Catode // IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES. 2002. 49 (8). P. 1478—1483.
7. **Zvi Yaniv, Lee Fink.** Nanotriode utilizing nanotubes and fibers: United States Patent No.: US 2005. 6. 979. 947 B2.
8. **Jonge N., Bonard J. M.** Carbon nanotube electron sources and applications // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 2004.
9. **Зайцев Н. А., Горнев Е. С., Дайнеко А. В., Пастухова Ю. М.** Исследование и разработка микровакуумного триода на основе полевой эмиссии // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 5. С. 59—63.
10. **Nilsson L., Groening O., Emmenegger C., Kuettel O., Schaller E., Schlapbach L., Kind H., Bonard J.-M., Kern K.** Scanning field emission from patterned carbon nanotube films. // Appl. Phys. Lett. 2000. Vol. 76. N 15. P. 2071—2073.
11. **Бочаров Г. С., Елецкий А. В.** Влияние экранировки на эмиссионные характеристики холодных полевых катодов на основе углеродных нанотрубок // Журнал технической физики. 2003. Т. 7. Вып. 7. С. 126—130.

УДК 621.9.044

А. Ю. Тянгинский, канд. техн. наук, доц.,
Д. А. Трепов, аспирант,
М. В. Церулев, аспирант,
В. В. Слепцов, д-р техн. наук, проф.,
зав. кафедрой,
"МАТИ"-РГТУ им. К. Э. Циолковского

ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНЫЕ МЕТОДЫ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКЛАСТЕРНОГО СЕРЕБРА В ЖИДКОЙ СРЕДЕ

Показана связь между параметрами электроразрядного импульса в жидкости и размерами получаемых нанокластеров серебра в жидкой среде. Установлен тип импульсного разряда в жидкости. Определены соотношения между вкладываемой энергией и концентрацией получаемых коллоидных растворов.

Описана разработка и реализация устройства, позволяющего получать нанокластеры серебра в жидкой среде заданных размеров и автоматически поддерживать межэлектродный зазор в процессе работы импульсного разрядника.

Ключевые слова: *импульсный электроразряд в жидкости, нанокластеры серебра, коллоидные растворы, обработка технологических пространств с повышенными требованиями к чистоте, стерилизация изделий медицинской техники, дезинфекционная обработка жидкости, создание средств индивидуальной защиты.*

Среди многообразных методов получения наночастиц металлов физические методы выделяются определенными положительными свойствами и, прежде всего, большей чистотой получаемого продукта, а также большой номенклатурой комбинаций жидкость—вещество [1]. К физическим методам синтеза наночастиц металлов относятся и методы, использующие низкотемпературную плазму, в том числе дуговые разряды в жидкости. Получаемые при этом продукты эрозии электродов содержат частицы широкого спектра размеров (от десятков микрометров до единиц нанометров). Одной из задач исследования электродугового метода получения наночастиц металлов является установление связи между параметрами ввода энергии и параметрами получаемого продукта и, прежде всего, размерами частиц металла. Известно, что нанометровый масштаб размеров частиц металлов определяет новые свойства веществ. Меняются основные константы, параметры кристаллической решетки, электропроводность, химический потенциал поверхности и т. д. [2].

Установка для исследования процессов получения наночастиц металлов электроимпульсными разрядами в жидкости состоит из трех основных частей: блока питания *1*, разрядного устройства с токоподводами *2* и кювета с жидкостью *3* (рис. 1).

Контроль электрических параметров импульсов (тока, напряжения и временных характеристик) осуществлялся с помощью осциллографа Agilent *5* с максимальным временным разрешением 20 нс. Датчиком тока служил пояс Роговского *4*. Параметры коллоидных растворов контролировались оптическими методами (измерение затухания оптического луча и опалесценция). Размеры частиц контролировались с помощью оптического и электронного микроскопов.

Разрядное устройство представляет собой токоподводы коаксиального типа со сменными электродами. Расстояние между электродами можно регулировать в пределах 0,1—1,0 мм (рис. 2).

Пробивное напряжение при таких зазорах составляло для дистиллированной воды 3—15 кВ. Вследствие малых размеров пробивного промежутка обмен жидкости в районе разряда затруднен, возможны высокие градиенты концентрации образующегося коллоидного раствора и, как одно из последствий, снижение пробивного напряжения, т. е. нестабильность режимов технологического процесса. Для устранения этого явления в одном из электродов выполнено отверстие, через которое в зону разряда подавалась рабочая жидкость через насос *6* (см. рис. 2). В качестве рабочей жидкости использовалась дистиллированная вода и этиловый спирт.

На рис. 3. представлен график зависимости тока одного разрядного импульса от времени. При дости-

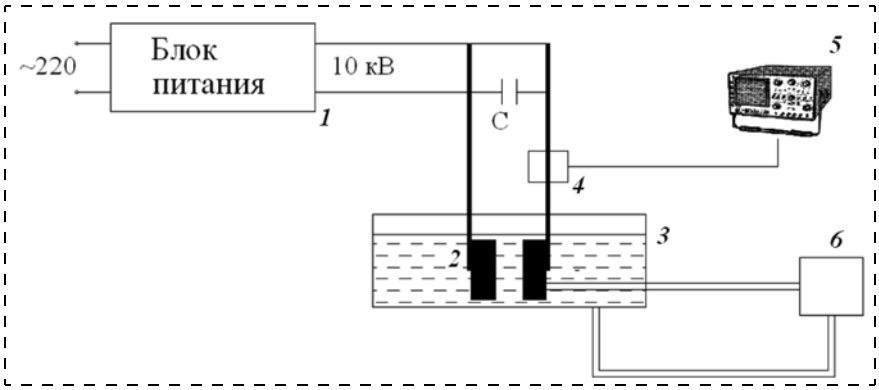

Рис. 1. Схема установки

жении напряжения на разрядном конденсаторе C (см. рис. 2) значения $U_{проб}$ происходит разряд емкости C через токопроводящие провода, электроды и разрядный промежуток. Если активное сопротивление разрядной цепи $R_а$ меньше критического $R_к$, т. е. $R_а < R_к = 2\sqrt{(L/C)}$, то в разрядном контуре возникают затухающие колебания (рис. 3) с частотой, определяемой индуктивностью подводящих проводов L и емкостью разрядного конденсатора C. Очевидно, что каждые полпериода ($T/2$) происходит переполюсовка электродов разрядного устройства. Следовательно, каждый полпериод затухающего колебания разрядного тока можно рассматривать как отдельный импульс тока со своими определенными параметрами: крутизной нарастания, максимальной амплитудой и длительностью. Для данного случая собственная резонансная частота $F_р$ = 3,2 МГц.

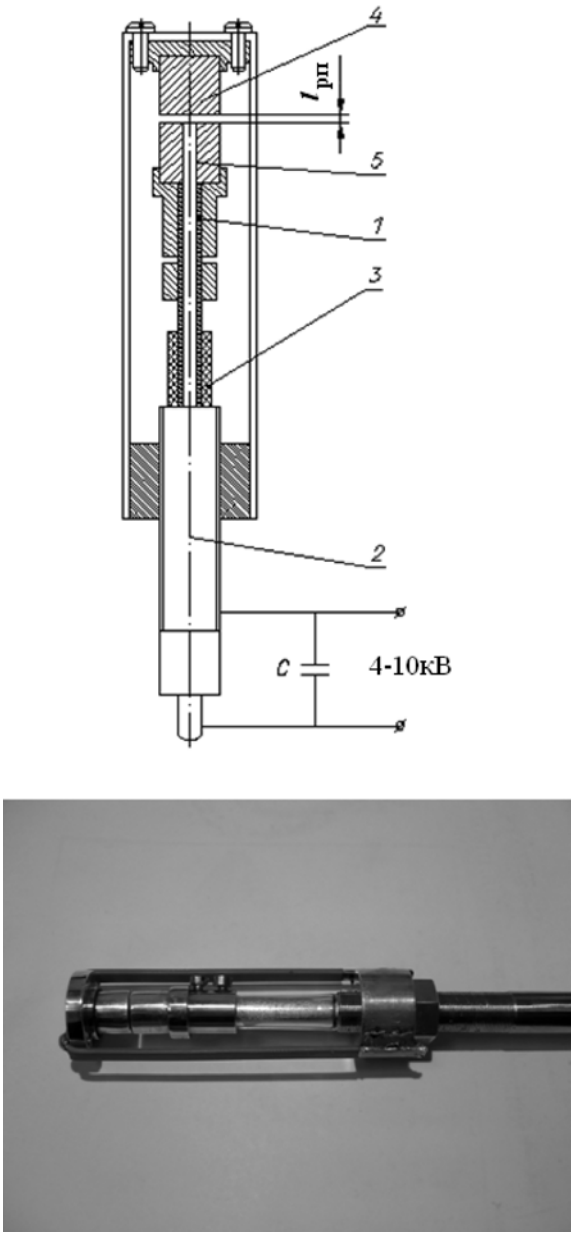

Рис. 2. Разрядное устройство электронной системы:
1, *2* — токоподводы; *3* — диэлектрик; *4*, *5* — электроды; $l_{рп}$ — длина разрядного промежутка

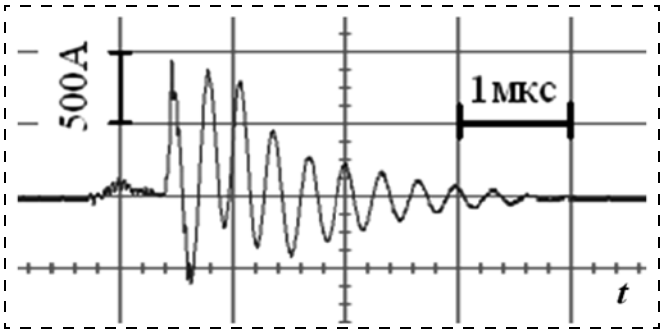

Рис. 3. График зависимости тока одного импульса от времени

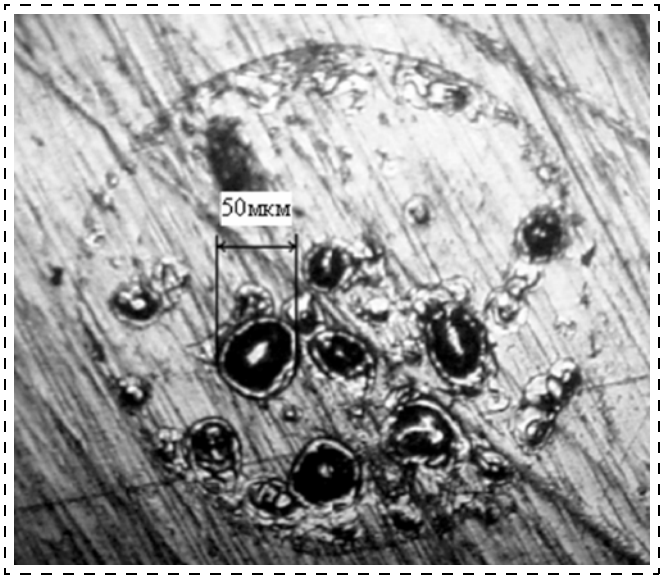

Рис. 4. Вид эрозии электрода

Вследствие переполюсовки контракция разрядного тока происходит попеременно то на одном, то на другом электроде. Этому соответствует попеременная эрозия электродов (рис. 4). Снимок был сделан после прохождения одного разрядного импульса (одной серии затухающих импульсов) через серебряные электроды. Этому импульсу соответствует токовая кривая (см. рис. 3). Видно, что размеры и число эрозионных кратеров соответствует числу и амплитуде положительных токовых импульсов. Диаметр наибольшего кратера 50 мкм, глубина 5 мкм.

В течение одного полупериода происходит нагрев и охлаждение точки контракции тока до температур плавления — испарения — кипения и охлаждение до комнатной температуры. Скорость нарастания температуры зависит от скорости нарастания тока и увеличения тепловых параметров металла электродов. Возможный ход кривой изменения T точки (площади) контракции представлен на рис. 5.

Видно, что размер зоны разогреваемой до $T_{кип}$ зависит от размаха амплитуды тока разряда I_{max} и длительности импульса $\tau_{имп} = T/2$. Очевидно, что

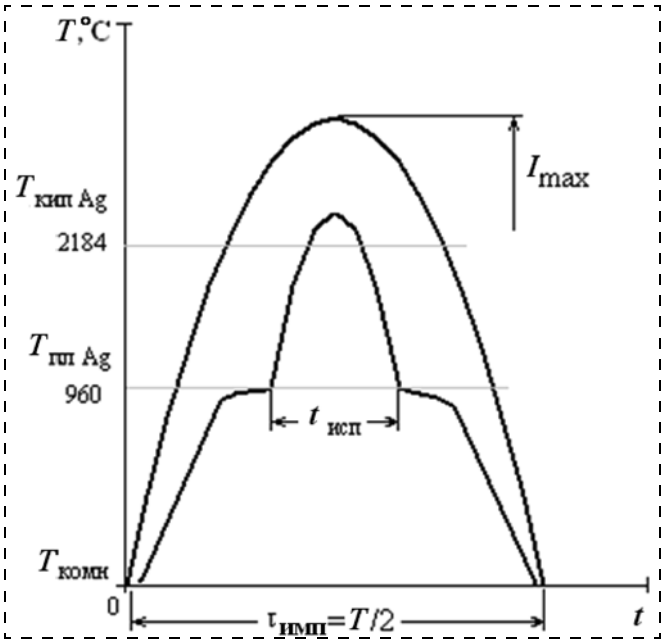

Рис. 5. График изменения температуры точки (площади) контракции от времени

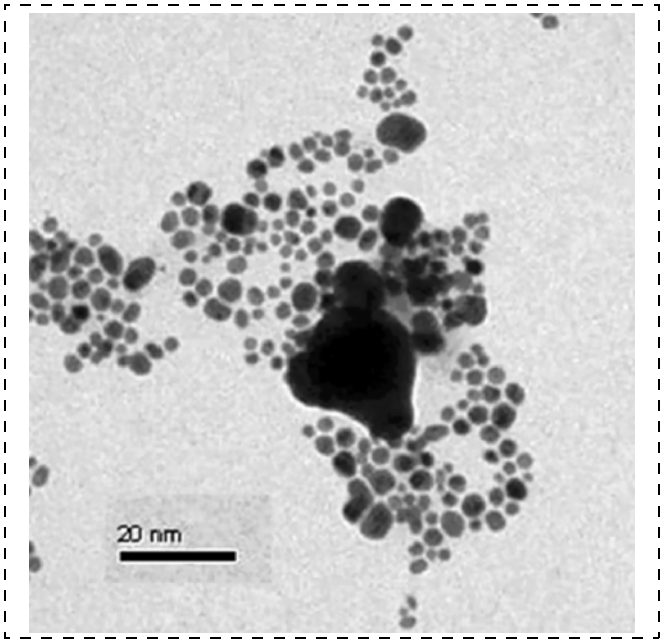

Рис. 6. Фото наночастиц серебра

при некоторой длительности импульса $\tau_{имп}$ размер зоны кипения может быть равен 0.

Процесс кипения металла электрода нежелателен, так как он сопровождается выбросом капельной фазы, что уменьшает степень диспергирования получаемого коллоидного раствора [3].

В то же время паровая фаза металла электродов конденсируется в наночастицы размером 5—50 нм (рис. 6).

Основываясь на данных измерений (см. рис. 3, 4) были проведены ориентировочные расчеты соответствия массы эрозии электродов и количества вложенной энергии.

Посчитав площадь первой полуволны и объем самого большого "кратера", мы сможем сопоставить количество электричества с массой вещества, выделяющейся с электрода.

Подсчитаем площадь первой полуволны, аппроксимировав ее форму до треугольной. Площадь треугольника

$$S = \frac{1}{2} a h_a,$$

где a — сторона треугольника; h_a — высота, проведенная к этой стороне.

Так как заряд $Q = It$, то площадь треугольника будет равна заряду первой полуволны. За сторону треугольника принимаем время полуволны $\tau_{имп}$, за высоту — значение тока I_{max}. Получаем:

$$S = Q = \frac{1}{2} 900 \cdot 0{,}2 \cdot 10^{-6} = 9 \cdot 10^{-5} \text{ Кл} = 90 \text{ мкКл}.$$

Теперь вычислим объем металла, который выделился с электрода за время первой токовой полуволны. Диаметр кратера $D = 2R = 50$ мкм, глубину определяли по профилометру — профилографу, она равна $H = 5 \div 6$ мкм. Тогда объем выброшенного металла

$$V = \frac{1}{3} S_{осн} H = \frac{1}{3} \pi R^2 H = \frac{1}{3} 3{,}14 (25 \cdot 10^{-6})^2 \times$$
$$\times 5 \cdot 10^{-6} = 3{,}2 \cdot 10^{-15} \text{ м}^3,$$

где $S_{осн}$ — площадь основания конуса, образующегося в электроде при выходе металла.

Подставим объем V в формулу вычисления массы. Масса серебра будет определяться выражением

$$m = \rho V = 10\ 500 \cdot 3{,}2 \cdot 10^{-15} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ г} = 0{,}03 \text{ мкг},$$

где ρ — плотность серебра.

Следовательно, теперь можно подсчитать массу вещества, выделившегося при прохождении 1 Кл количества электричества. Назовем этот параметр постоянной испарения импульсного микроразряда $K_{ир}$:

$$K_{ир} = \frac{m}{Q} = 3{,}3 \cdot 10^{-4} \text{ г/Кл} = 330 \text{ мкг/Кл}.$$

Если подсчитать таким же образом суммарную площадь всех импульсов, то мы получим количество электричества, выделяемое за одну серию затухающих импульсов (для $C = 0{,}0022$ мкФ и $U = 8$ кВ):

$$Q = 560 \text{ мкКл}.$$

Масса выделившегося металла за одну серию импульсов, будет определяться выражением

$$m = K_{ир} Q = 0{,}18 \text{ мкг/имп}.$$

Если теперь сопоставить эту массу с энергией системы $W = \frac{CU^2}{2} = 0{,}064$ Дж, то получим энергопотребляемость системы — 2,8 мкг/Дж. Однако этот параметр имеет смысл только при конкретных C и U.

По мере следования разрядных импульсов концентрация коллоидного раствора увеличивается, его цвет меняется от желтого до коричневого. Как видно на спектральных характеристиках поглощения (рис. 7), максимум поглощения находится в районе 400 нм. Измерения проводились для системы с $C = 0{,}02$ мкФ и $U = 4$ кВ.

В то же время было отмечено выпадение коллоидного раствора Ag в осадок на (3—5)-й день его хранения. Это соответствует классическим представлениям о коагуляции наночастиц в кластеры и затем выпадением их в осадок. Особенно контрастно это явление имеет место для растворов Ag высокой концентрации (10—20 мг/л), полученных в электроимпульсных разрядах большой длительности (большая разрядная емкость $C > 0{,}1$ мкФ и более длинные соединительные провода $F_{рез} < 100$ кГц). При этом, как отмечалось выше, диапазон размеров наночастиц простирается до единиц микрометров. Крупные частицы начинают выпадать в осадок, далее процесс идет самопроизвольно до полного осветления коллоидного раствора.

Увеличение дисперсности коллоидных растворов металлов возможно путем укорочения разрядных импульсов или, что то же самое, повышения резонансной частоты разрядного контура $F_{рез}$ путем уменьшения $C_р$ и длины L подводящих проводов. Здесь, однако, имеются ограничения. Разрядная емкость $C_р$ определяет количество энергии, вкладываемой в разряд $Q = \frac{CU^2}{2}$ и, следовательно, количество электричества, определяющее массу металла, переводимую в раствор за одну серию затухающих импульсов. Однако производительность процесса можно регулировать частотой следования импульсов [4].

Длина подводящих проводов, определяющая индуктивную составляющую контура, ограничена конструктивными соображениями. В наших экспериментах при $C_р = 0{,}002$ мкФ резонансную частоту удалось повысить до $F_{рез} = 4$ МГц, что соответствовало длительности разрядного импульса $\tau_{имп} = T_{рез}/2 = 125$ нс. При этом коллоидный раствор Ag, полученный в таком режиме работы разрядника, содержал наночастицы серебра с размерами в пределах 10 нм (рис. 8). Стабильность коллоидного раствора (концентрация 10 мг/л) составляла более 60 суток (неизменность коэффициента поглощения света).

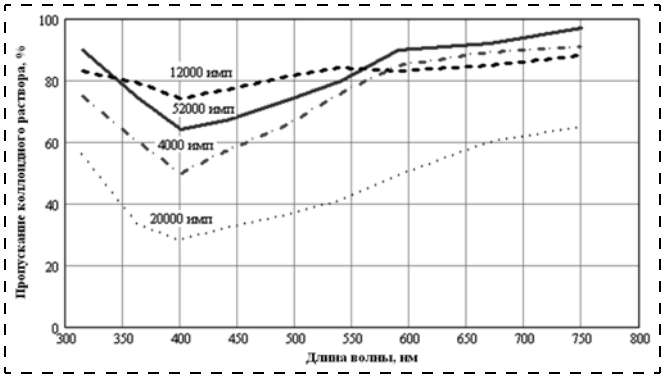

Рис. 7. Зависимость пропускания от плотности коллоидного раствора Ag

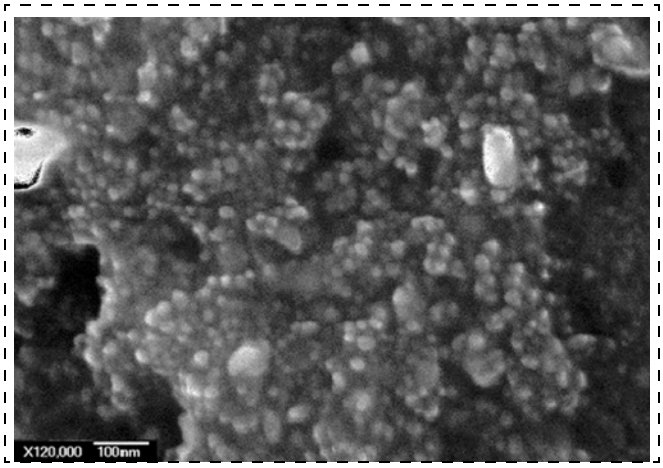

Рис. 8. Фотография наночастиц серебра, полученная с помощью атомного микроскопа

Одной из проблем работы разрядных систем для производства коллоидных растворов является изменение размеров эродирующих электродов, увеличение разрядного промежутка и прекращение работы разрядного устройства. Далее требуется остановка технологического процесса, разборка и регулировка разрядника квалифицированным техническим персоналом.

Поэтому было разработано разрядное устройство, в котором межэлектродный зазор регулируется автоматически в процессе работы разрядника. Принцип работы автоматического регулятора основан на выделении пропущенных вследствие невозможности пробить разрядный промежуток импульсов из последовательности, формировании из них командных импульсов, которые приводят в действие шаговый мотор, механически связанный с одним из электродов. Таким образом, работа разрядника продолжается в заданном режиме необходимое время.

Практическое применение

Использование низкотемпературной плазмы импульсных разрядов для воздействия на жидкие среды основано на возможности варьирования ее свойств в широком диапазоне. При этом ее наиболее привлекательным преимуществом может быть низкая температура рабочей среды и совместимость с электронно-вакуумной гигиеной "чистых комнат". Поэтому одно из основных применений такой технологии в радиоэлектронной промышленности — это обработка технологических пространств с повышенными требованиями к чистоте.

Среди других возможных применений можно выделить следующие: стерилизация изделий медицинской техники; дезинфекционная обработка жидкости; создание средств индивидуальной защиты.

Выводы

Показана связь между параметрами электроразрядного импульса в жидкости и размерами получаемых наночастиц в коллоидном растворе. Установлено, что импульсный разряд в жидкости является ВЧ дуговым разрядом. Определены соотношения между вкладываемой энергией концентрацией получаемого коллоидного раствора.

Разработано и реализовано устройство, позволяющее автоматически поддерживать межэлектродный зазор в процессе работы импульсного разрядника.

Список литературы

1. **Гулый Г. А., Малюшевский П. П.** Высоковольтный электрический разряд в силовых импульсных системах. К.: Наукова думка, 1977.
2. **Вашков В. И.** Антимикробные средства и методы дезинфекции при инфекционных заболеваниях. М.: Медицина, 1977. 296 с.
3. **Комельков В. С., Скворцов Ю. В.** Расширение канала мощной искры в жидкости // ДАН СССР. 1956. Т. 129. № 6. С. 1273—1276.
4. **Коптов В. А., Курочкин В. Е., Панина Л. К., Рутберг А. Ф., Рутберг Ф. Г., Снегов В. Н., Стогов А. Ю.** Пролонгированная микробная устойчивость воды, обработанной импульсными электрическими разрядами // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 2. С. 118.

УДК 621.38.049.77:627.793.3

О. М. Жигалина[1], канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр.,
К. А. Воротилов[2]*, д-р техн. наук, проф., зам. декана,
Д. Н. Хмеленин[1], аспирант,
А. С. Сигов[2], чл.-корр. РАН, ректор
[1] Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, г. Москва
[2] Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет)
*E-mail: vorotilov@mirea.ru

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПЛЕНОК ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА, СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ РАСТВОРОВ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ СВИНЦА

Проведены электронно-микроскопические исследования сегнетоэлектрических пленок цирконата-титаната свинца, полученных методом химического осаждения из растворов на подложках $Si—SiO_2—Ti—Pt$. Исследования проводились с помощью просвечивающей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа. Микроструктура пленок исследована в зависимости от избыточного содержания количества свинца в исходном пленкообразующем растворе (5, 10, 30, 50 мол. %), установлена корреляция микроструктуры и фазового состава с электрофизическими свойствами пленок.

Ключевые слова: *сегнетоэлектрические пленки, электронная микроскопия, микроструктура, фазовый состав, электрофизические свойства.*

Введение

Сегнетоэлектрические тонкие пленки цирконата-титаната свинца (ЦТС) являются основным материалом, используемым для создания сегнетоэлектрических запоминающих устройств (СЗУ) и МЭМС [1—6]. Наиболее часто для формирования подобных многокомпонентных оксидных соединений используется метод химического осаждения из растворов [7]. Данный метод предполагает формирование из растворов металлорганических соединений аморфного слоя, кристаллизация которого осуществляется в ходе высокотемпературной термообработки при температуре 600...700 °С. Летучесть паров PbO при отжиге в ходе кристаллизации пленок усложняет проблему получения пленок с нужным составом и свойствами, определяя кристаллическую структуру, характер электрически активных дефектов и, в конечном счете, электрофизические свойства пленок [8, 9]. Для компенсации потерь свинца в ходе отжига в исходный раствор добавляют некоторое избыточное относительно стехиометрического количество свинца. Задачам оптимизации содержания свинца в исходном растворе посвящено множество исследований [8—11]. Как правило, в данных работах устанавливается корреляция содержания свинца с основными структурными и электрофизическими свойствами для используемых авторами методов формирования слоев. В наших предыдущих работах мы попытались установить общие закономерности влияния избыточного свинца на процессы кристаллизации пленок ЦТС [8—11]. Основной целью мы ставили, прежде всего, исследования особенностей микроструктуры пленок при изменении содержания свинца в широком диапазоне [12—15], после чего устанавливали корреляцию структурных особенностей пленок с их электрофизическими свойствами [8, 16, 17]. Наиболее существенная информация о тонкой микроструктуре пленок была получена в наших предыдущих работах методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [13—15].

В данной работе мы ставили целью дополнить полученные в предыдущих работах результаты: в отличие от предыдущих исследований изучались пленки, прошедшие термообработку при 650 °С (600 °С в работах [13—15]), в которых более высокие температуры отжига приводят к менее радикальной зависимости свойств от содержания свинца. Помимо этого, данное исследование выполнено с применением более совершенных методов исследований.

Образцы и методика эксперимента

Пленки $Pb(Zr_{0,47}Ti_{0,53})O_3$ были получены методом химического нанесения из растворов по методике работы [8]. Избыточное содержание свинца в растворе составляло 5, 10, 30, 50 мол. %. В качестве подложек использовали структуры Si—SiO_2—Ti—Pt. Окончательный отжиг проводили при 650 °С в течение 20 мин.

Исследования структуры пленок проводили методами ПЭМ высокого разрешения с помощью электронного микроскопа Philips EM430 ST при ускоряющем напряжении 200 кВ, и рентгеноструктурного анализа с помощью дифрактометра Rigaku на монохроматизированном излучении Co и CuK_α, симметрично, на отражение.

Результаты и обсуждение структурных исследований

На рис. 1 представлено светлопольное изображение поперечного сечения многослойной структуры Si—SiO_2—Ti—Pt — ЦТС (x = 5 мол. %). Наряду с указанными слоями на рисунке виден промежуточный слой TiO_2—Pt—TiO_2, образованный в результате интенсивной диффузии при формировании металлизационной системы и последующем отжиге пленки, как было показано в ходе предыдущих исследований [13—15].

Пленка имеет поликристаллическую структуру, при этом столбчатые зерна прорастают на всю толщину пленки от слоя платины, это подтверждается темнопольным изображением с соответствующей дифракционной картиной с осью зоны [$\bar{1}$12], где высвечивается зерно, проросшее на всю толщину пленки и имеющее ширину ~120 нм (рис. 2). Таким образом, платиновый слой играет роль подложки, на которой зарождаются зерна ЦТС. В отличие от наблюдаемых нами в предыдущих работах пленок, сформированных без избытка свинца в исходном растворе [13], даже при небольшом избытке свинца в исходном растворе x = 5 мол. % механизм гетерогенного зарождения зерен на платиновой подложке становится преобладающим, обеспечивая образование столбчатой структуры.

На рис. 3 представлено светлопольное изображение зереной структуры пленки ЦТС "в плане", из которого видно, что кристаллиты имеют достаточно равноосную форму.

По серии аналогичных светлопольных изображений "в плане", снятых с различных участков образца, методом секущих был проведен статистический анализ и расчет среднего размера зерна, который составил 300 нм.

Расчет дифракционных картин и сопоставление значений межплоскостных состояний, полученных

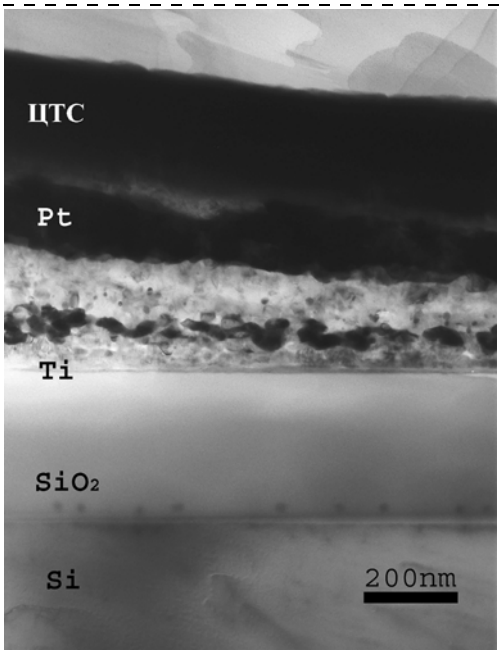

Рис. 1. Изображение поперечного сечения многослойной структуры с пленкой ЦТС, полученной с 5 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе

по электронограммам, с теоретическими показал, что зерна — это кристаллиты перовскитной сегнетоэлектрической фазы, с тетрагональной решеткой и периодами a = 0,4036 нм, c = 0,4146 нм.

Внутри зерен наблюдается характерный контраст, свидетельствующий о наличии внутренних напряжений или дефектов кристаллической структуры. Зерна при более детальном рассмотрении, т. е. при большем увеличении, часто представляли собой конгломераты кристаллитов близкой ориентировки. Контраст на изображении зерен и кольцо на дифракционной картине свидетельствуют о неоднофазной структуре пленок. Более детальные исследования с высоким разрешением показали наличие сферических частиц пирохлора (Py) с периодом решетки 0,1048 нм размером 2...10 нм в теле зерен перовскита, а также в межзеренных пространствах (рис. 4). На вставке приведено изображение с высоким разрешением, где полосчатый контраст от атомных плоскостей {222} с расстоянием 0,302 нм выявляет мелкие кристаллы.

На рис. 5 представлено светлопольное изображение поперечного среза многослойной гетероструктуры

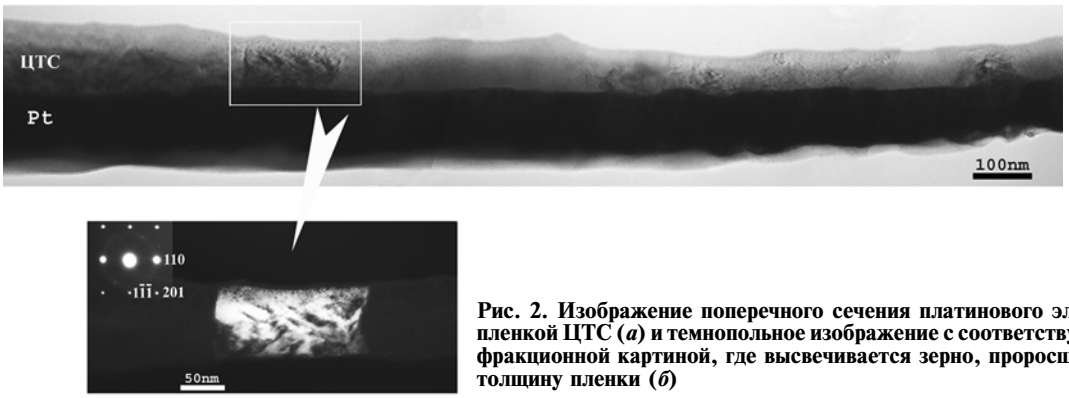

Рис. 2. Изображение поперечного сечения платинового электрода с пленкой ЦТС (*а*) и темнопольное изображение с соответствующей дифракционной картиной, где высвечивается зерно, проросшее на всю толщину пленки (*б*)

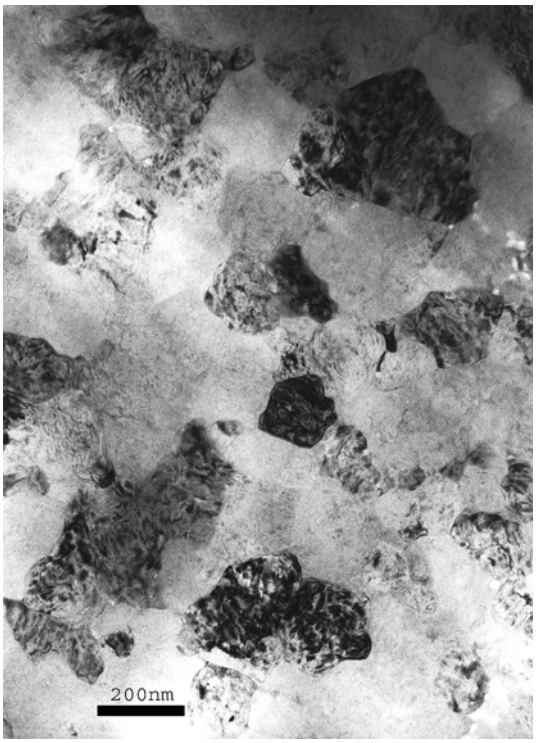

Рис. 3. Светлопольное изображение "в плане" зереной структуры пленки ЦТС с 5 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе

ры с пленкой ЦТС x = 10 мол. %. Толщина пленки ЦТС составляет ~ 200 нм, платинового электрода 100... 120 нм, первый подслой TiO_2 ~ 100 нм, подслой Pt ~ 50 нм. Нижняя граница платинового слоя размыта, имеет значительные колебания по толщине, зерна столбчатые 20—100 нм с большим числом пор и мелких включений (возможно TiO_2) (рис. 6).

Как и в первом случае, зерна имеют столбчатую форму, прорастают, как правило, на всю толщину пленки от платинового слоя. Промежуточных слоев на границе раздела пленка ЦТС — платиновый электрод не обнаружено. По результатам статистического анализа светлопольных изображений средней размер зерен пленки уменьшился по сравнению с пленками с x = 5 мол. % в 2 раза и составил 148 нм. Размер зерен в данном случае несколько меньше, чем в аналогичных пленках, прошедших кристаллизацию при T = 600 °С (190—220 нм), наблюдаемых нами ранее [13].

Кроме того, в отличие от слоев, исследованных в работах [13—15], в пленках с x = 10 мол. % было зарегистрировано наличие сферических частиц пирохлора размером 5...15 нм. На рис. 7 представлено светлопольное изображение частиц пирохлора, снятое с высоким разрешением, где виден полосчатый контраст от плоскостей {222}, с межплоскостным расстоянием 0,302 нм. Видно, что более мелкие частицы имеют форму, близкую к сферической, более крупные объединяются в конгломераты и могут иметь произвольную неправильную форму и различную ориентировку.

На рис. 8 представлено светлопольное изображение поперечного среза многослойной гетероструктуры с пленкой ЦТС (x = 30 мол. %). Толщина пленки ЦТС ~200 нм, платинового электрода ~100...130 нм. Общая

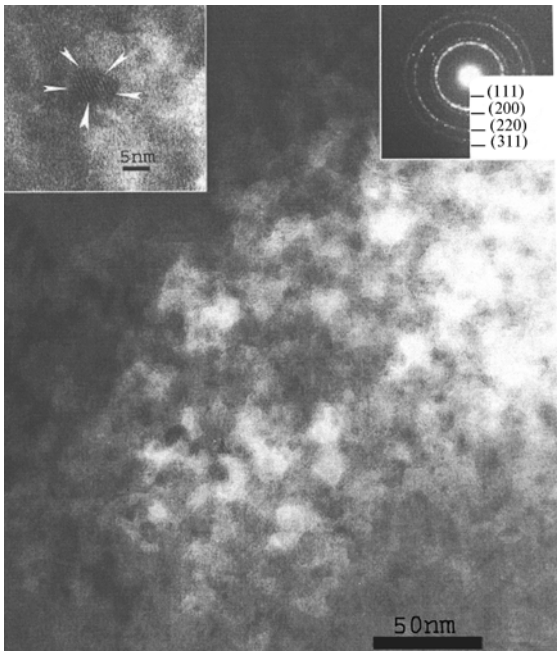

Рис. 4. Сферические частицы пирохлора в теле зерен перовскита (x = 5 мол. %)

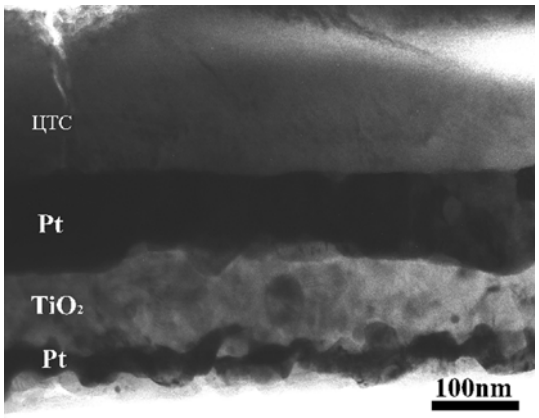

Рис. 5. Светлопольное изображение поперечного среза многослойной гетероструктуры с пленкой ЦТС, полученной с 10 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе

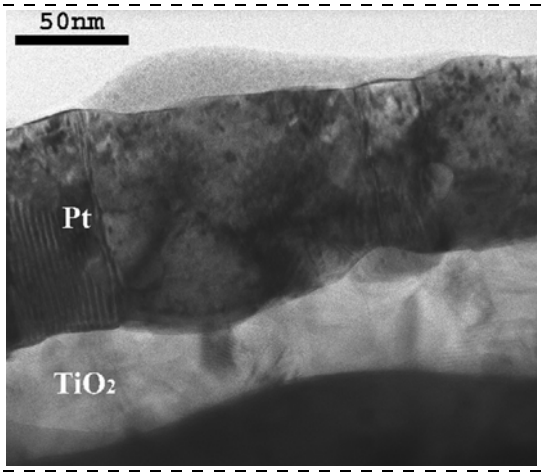

Рис. 6. Светлопольное изображение поперечного среза платинового электрода и рутила (TiO_2)

толщина промежуточного подслоя TiO_2—Pt—TiO_2, образовавшегося в результате диффузии при отжиге, ~150...200 нм. Толщина столбчатых зерен ЦТС ~120...200 нм. В межзеренных пространствах, на границе зерен видны поры, декорирующие границу.

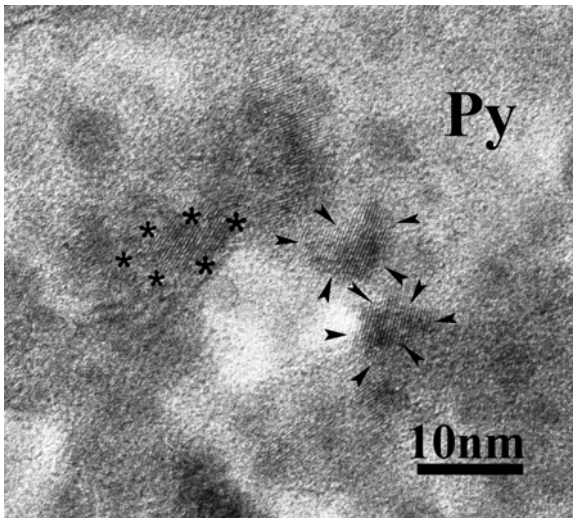

Рис. 7. Светлопольное изображение частиц пирохлора, снятое с высоким разрешением (x = 10 мол. %)

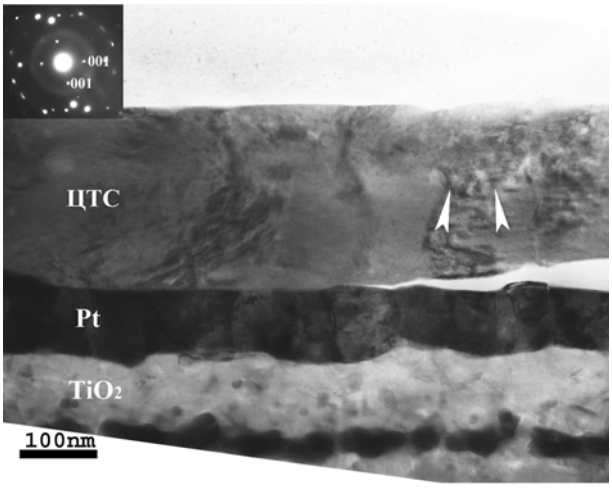

Рис. 8. Светлопольное изображение поперечного среза пленки ЦТС (x = 30 мол. %), платинового электрода и слоя рутила (TiO_2)

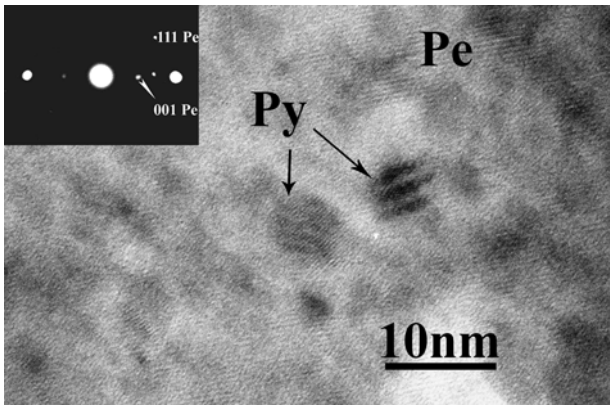

Рис. 9. Светлопольное изображение зерен перовскита, с высоким разрешением, и сферических частиц пирохлора (при x = 30 мол. %)

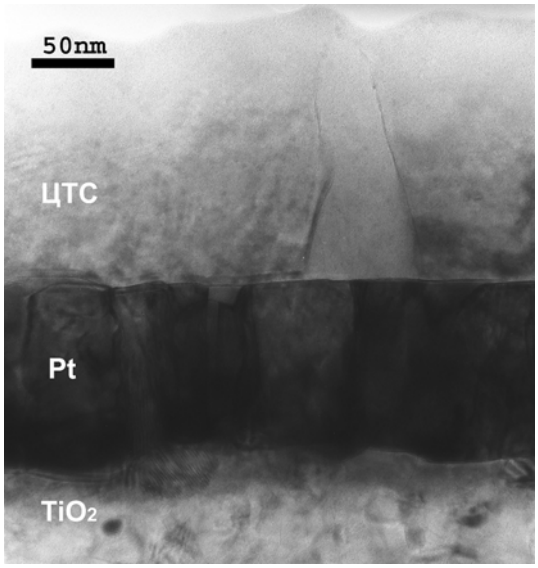

Рис. 10. Светлопольное изображение поперечного среза многослойной гетероструктуры ЦТС (x = 50 мол. %) — Pt—TiO_2

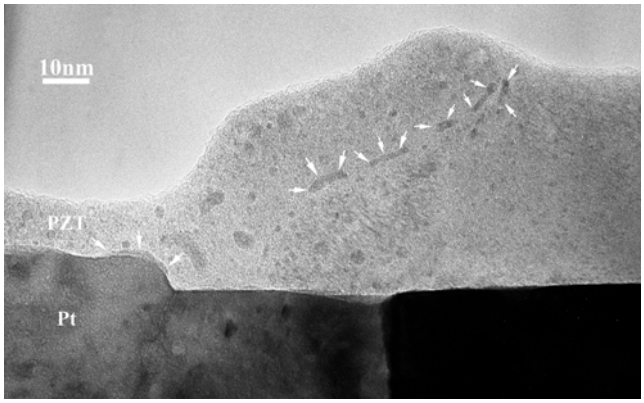

Рис. 11. Включения PbO вытянутой формы декорируют границы зерна перовскита, а также располагаются на поверхности платинового электрода

В отличие от рассмотренного ранее случая не все зерна прорастают на всю толщину пленки. В теле зерен можно наблюдать контраст, свидетельствующий о наличии включений другой фазы. Статистический анализ показал лишь незначительное уменьшение среднего размера кристаллитов по сравнению с x = 10 мол. %, который составил 141 нм. В наблюдаемых нами ранее пленках, сформированных при меньшей температуре T = 600 °С, размер зерен составлял 180 нм [15].

На границе и в теле зерен видны поры, их размер может достигать ~40 нм. Наиболее крупные располагаются по границам зерен и особенно в межзеренных пространствах.

На рис. 9 представлено светлопольное изображение зерен перовскита с высоким разрешением, а также сферических частиц пирохлора. Необходимо отметить, что несегнетоэлектрической фазы Py в данном случае стало значительно меньше.

На рис. 10 представлено светлопольное изображение поперечного среза многослойной гетероструктуры ЦТС (x = 50 мол. %), на котором видны столбчатые зерна с преимущественной ориентацией {001},

растущие от платиновой подложки. Статистический анализ размеров зерен показал, что тенденция к уменьшению их среднего размера сохраняется (средний размер зерен в пленке 102 нм).

На рис. 11 представлено изображение поперечного среза пленки, полученное с высоким разрешением. Можно видеть, что в теле зерен перовскита (Ре) наблюдается контраст от частиц PbO, имеющих в основном округлую форму и размер ~2 нм. Контраст от частиц этой фазы можно обнаружить на межфазной границе Pt — ЦТС. Они тонким слоем или скоплениями, размером до 9 нм, располагаются на поверхности платинового электрода. Включениями PbO вытянутой формы декорированы также границы зерен перовскита (отмечены стрелками). Зерна перовскитной фазы при этом не прорастают на всю толщину пленки.

Расшифровка кольцевой дифракционной картины показала также присутствие пирохлорной фазы (Ру).

Результаты и обсуждение рентгеноструктурных исследований

В табл. 1 представлены результаты анализа дифрактограмм пленок ЦТС с различным избыточным содержанием свинца в исходном пленкообразующем растворе.

На всех дифрактограммах наблюдалась сильная текстура платинового слоя в направлении {111}. В связи с тем, что межплоскостные расстояния $d_{111}^{\text{Pe}} = 0{,}234$ нм на 4 % отличаются от d_{111}^{Pt}, преимущество эпитаксиального роста на платиновом подслое в данном направлении очевидно. При увеличении x с 5 мол. % до 10 мол. % ориентировка в направлении {111} значительно увеличивается.

Дифрактограмма, снятая от образца с $x = 30$ мол. %, отличается от описанных выше. Во-первых, сравнительный анализ интенсивностей пиков от перовскитной фазы показал наличие второй компоненты текстуры {100}. При этом интенсивность пика {100} увеличивается в 4,3 раза по сравнению с эталонной (без текстуры) интенсивностью. Кроме перовскитной фазы и платины на дифрактограмме присутствуют пики от TiO_2 и соединений Pt—Si, которые располагаются в нижних слоях гетероструктуры [13, 15]. Анализ разориентировки зерен показал, что интенсивность пиков

Таблица 1

Результаты сравнительного анализа интенсивности пиков по дифрактограммам образцов пленок ЦТС, полученных при избыточном различном содержании свинца (x) в исходном пленкообразующем растворе

x, мол. %	I_{100}, %	I_{110}, %	I_{111}, %	I_{200}, %	I_{102}, %	I_{112}, %
5	67	100	953	160	33	37
10	67	100	15 133	52	63	20
30	432	100	9750	221	—	37
50	480	100	500	360	—	80
Теория	12	100	15	16	5	12

{100} и {111} резко падает при наклоне образца на 10°. Таким образом, угол разориентировки зерен перовскитной фазы составляет ±10°.

Дифрактограмма, снятая от образца с $x = 50$ мол. %, свидетельствует о том, что компонента {111} почти окончательно исчезает, в то время как компонента {100} сохраняется.

Результаты и обсуждение электрофизических исследований

В табл. 2 представлены основные результаты структурных исследований пленок ЦТС и их основные электрофизические свойства: значение остаточной поляризации и коэрцитивное напряжение (P_R и U_C соответственно), удельная емкость $C_{\text{уд}}$, тангенс угла диэлектрических потерь tgδ и электрическая прочность $U_{\text{пр}}$.

При $x = 5$ мол. % (температура отжига 650 °С) в пленках наблюдаются достаточно высокие значения остаточной поляризации, однако петли диэлектрического гистерезиса не имели четко выраженного насыщения и были несимметричны. Высокие значения остаточной поляризации связаны с преимущественной {111} ориентацией пленок и наибольшим в данной серии размером зерна Ре, однако в пленках наблюдается достаточно высокое содержание фазы пирохлора. Тем не менее, ее содержание значительно меньше, чем в исследованных нами ранее аналогичных пленках, прошедших кристаллизацию при 600 °С [7, 8].

При $x = 10$ мол. % наблюдается оптимальное в данной серии структурное состояние: пленки сильно текстурированы в направлении {111}, включений частиц Ру становится значительно меньше. Пленки, сформированные в данных условиях, имеют насы-

Таблица 2

Результаты структурных и электрофизических исследований пленок ЦТС, полученных при избыточном различном содержании свинца (x) в исходном пленкообразующем растворе

x, мол. %	5	10	30	50
Средний размер зерна Ре, нм	300	148	140	100
Структура зерен Ре	Столбчатая	Столбчатая	Столбчатая, не все кристаллиты прорастают на всю толщину пленки	Столбчатая, не все кристаллиты прорастают на всю толщину пленки
I_{111}, %	953	15 133	9750	500
I_{100}, %	67	67	432	480
Примесная фаза Ру	Сферические частицы 2...10 нм в теле зерен и на границах (много)	Сферические частицы 5...15 нм в теле зерен и на границах (мало)	Сферические частицы 2...10 нм в теле зерен и на границах (очень мало)	Сферические частицы 2...10 нм в теле зерен и на границах (очень мало)
Примесная фаза PbO	Нет	Нет	Нет	Округлые частицы 2...10 нм на границах зерен и на границе с подложкой
P_R, мкКл/см^2	53 (асимметрия)	27	15,4	12
U_C, В	1,5	0,95	1,1	1,0
$C_{\text{уд}}$, фФ/мкм^2	46,3	58,1	33,4	28,1
tgδ	0,08	0,07	0,03	0,1
$U_{\text{пр}}$, В	17	15	12,7	8,1

щенные симметричные петли диэлектрического гистерезиса, минимальные значения коэрцитивного напряжения и максимальные значения удельной емкости. В отличие от предыдущего случая, температура отжига пленок уже не оказывает столь существенного влияния на свойства пленок [7, 8].

Увеличение избытка свинца в растворе до 30 мол. % сопровождается переориентацией текстуры пленок в направлении {100}. Кристаллы PbO по мнению ряда авторов стимулируют образование текстуры {100} благодаря хорошему соответствию параметров кристаллических решеток (например [18]). Несмотря на высокое избыточное содержание свинца, включения пирохлора все еще присутствуют. Изменение текстуры приводит к некоторому уменьшению остаточной поляризации и увеличению коэрцитивного напряжения, а также снижению электрической прочности пленок и их удельной емкости.

Наконец, при $x = 50$ мол. % избыток свинца не удаляется из пленок в ходе высокотемпературного отжига, формируя включения частиц PbO и текстуру {100} с размером зерна 100 нм. Это приводит к дальнейшему уменьшению поляризации, снижению электрической прочности и возрастанию потерь.

Заключение

Методами просвечивающей электронной микроскопии, микродифракции, электронной микроскопии высокого разрешения и рентгеноструктурного анализа изучена структура, фазовый состав, текстура и электрофизические свойства пленок титаната-цирконата свинца $(Pb_{0,53}Zr_{0,47})TiO_3$, полученных методом химического осаждения из растворов с различным избыточным содержанием свинца в исходном растворе, осажденных на подложки $Si—SiO_2—Ti—Pt$ и отожженных при температуре $T = 650$ °C в течение 20 мин.

Показано, что в сегнетоэлектрических пленках при изменении концентрации Pb в исходном пленкообразующем растворе от 5 до 50 мол. % происходят следующие изменения структуры:

1. Фазовый состав пленок, полученных при 5, 10, 30 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе, характеризуется наличием двух фаз: сегнетоэлектрической фазы перовскита (Pe) с тетрагональной решеткой и несегнетоэлектрической фазы пирохлора (Py) с кубической решеткой. Количество пирохлора значительно снижается при увеличении избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе. Размер частиц пирохлора 2...10 нм. При 50 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе, кроме перовскитной фазы обнаружены включения PbO размером 10 нм, располагающиеся в теле и по границам зерен перовскита, а также на границе раздела ЦТС—Pt.

2. Увеличение избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе от 5 до 50 мол. % приводит к постепенному уменьшению доли текстуры {111} и увеличению текстуры {100}. При 5 и 10 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе обнаружена текстура {111}, в пленках с 30 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе присутствуют две компоненты текстуры {111} и {100}, при 50 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе остается только компонента {100}. Текстура пленок {111} обеспечивает оптимальные электрофизические свойства пленок.

3. Средний размер зерна перовскита (Pe) снижается от 300 нм (при 5 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе) до 100 нм (при 50 мол. % избытка свинца в исходном пленкообразующем растворе).

Работа выполнена при поддержке гранта аналитической ведомственной целевой программы "Развитие научного потенциала высшей школы (2006—2008 годы)", подраздел: № 2.1.2 и гранта РФФИ 07-02-12259-офи.

Список литературы

1. **Scott J. F.** New developments on FRAMs: 3D structures and all-perovskite FETs // Mat. Science and Eng. B. 2005. V. 120. P. 6—12.

2. **Celii F., Thakre M., Gay M., Summerfelt S., Aggarwal S., J. Scott Martin, Hall L., Udayakumar K., Moise T.** Plasma Etch Processes for Embedded FRAM Integration. // Integrated Ferroelectrics. 2003. V. 53. P. 269—277.

3. **Kim K., Song Y.** Current and Future High Density FRAM Technology // Integrated Ferroelectrics. 2004. V. 61. P. 3—15.

4. **Fujii E., Uchiyama K.** First 0.18 μm SBT-Based Embedded FeRAM Technology with Hydrogen Damage Free Stacked Cell Structure // Integrated Ferroelectrics. 2003. V. 53. P. 317—323.

5. **Lee S., Noh K., Kang H., Hong S., Yeom S., Park Y.** Characterization of Hynix 16M Feram Adopted Novel Sensing Scheme // Integrated Ferroelectrics. 2003. V. 53. P. 343—351.

6. **Semiconductor** Industrial Association. The International Technology Roadmap For Semiconductors. // SEMATECH. 2005. http://www.itrs.net/Links/2005ITRS/Home2005.htm.

7. **Vorotilov K. A., Yanovskaya M. I., Turevskaya E. P., Sigov A. S.** Sol-gel derived ferroelectric thin films: avenues for control of microstructural and electric properties // J. Sol-Gel Science and Technology. 1999. V. 16. P. 109—118.

8. **Yanovskaya M. I., Obvintseva I. E., Solovyova L. I., Kovsman E. P., Vorotilov K. A., Vasilyev V. A.** Alkoxy-derived ferroelectric PZT films: the effect of lead acetate dehydration techniques and lead content in the electrochemically prepared solutions on the properties of the films // Integrated Ferroelectrics. 1998. V. 19. P. 193—209.

9. **Klee M., De Veirman A., Taylor D. J., Larsen P. K.** Structure property relations in polycrystalline titanate thin films // Integrated Ferroelectrics. 1994. V. 4. N 2. P. 263—285.

10. **Schneller T., Waser R.** Chemical modifications of $Pb(Zr_{0,3}Ti_{0,7})O_3$ precursor solutions and their influence on the morphological and electrical properties of the resulting thin films // J. Sol-Gel Science and Technology. 2007. V. 42. P. 337—352.

11. **Wang L., Yu J., Wang Y., Gao J., Tang M.** The optimization of excess Pb content in sol-gel deposited sandwich structure $PbTiO_3/PbZr_{0,3}Ti_{0,7}O_3/PbTiO_3$ thin films // Integrated Ferroelectrics. 2007. V. 94. P. 47—55.

12. **Коханчик Л. С., Воротилов К. А., Сигов А. С.** РЭМ исследование сегнетоэлектрических пленок цирконата-титаната свинца, полученных методом химического осаждения из растворов // Известия РАН. Сер. Физическая. 2001. Т. 65. № 9. С. 1276—1279.

13. **Жигалина О. М., Бурмистрова П. В., Васильев А. Л., Роддатис В. В., Воротилов К. А.** Микроструктура многослойных композиций $Si/SiO_2/Ti/Pt/PZT$ // Известия РАН. Сер. Физическая. 2001. Т. 65. № 9. С. 1272—1275.

14. **Burmistrova P. V., Sigov A. S., Vasiliev A. L., Vorotilov K. A., Zhigalina O. M.** Effect of lead content on the microstructure and electrical properties of sol-gel PZT thin films // Ferroelectrics. 2002. V. 271. P. 51—56.

15. **Zhigalina O. M., Burmistrova P. V., Vasiliev A. L., Roddatis V. V., Sigov A. S., Vorotilov K. A.** Microstructure of PZT Capacitor Structures // Ferroelectrics. 2003. V. 286. P. 311—320.

16. **Shil'nikov A. V., Burkhanov A. I., Laletin R. A., Nesterov V. N., Sigov A. S., Vorotilov K. A.** Effect of lead content on dielectric properties Ni/PZT/Pt films on low and infralow frequencies // Ferroelectrics. 2001. V. 257. N 1—4. Part 2. P. 277—284 (569—576).

17. **Шильников А. В., Лалетин Р. А., Бурханов А. И., Сигов А. С., Воротилов К. А.** Особенности низко- и инфранизкочастотной релаксации поляризации в тонких сегнетоэлектрических пленках ЦТС // Микросистемная техника. 2002. № 4. С. 16—19.

18. **Chen S.-Y., Chen I. W.** Temperature-Time Texture Transition of $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ Thin Films: I, Role of Pb-rich Intermediate Phases // Am. Ceram. Soc., 1994. V. 77. N 9. P. 2332—2336.

УДК 621.049.77:001.891.57

Г. А. Тарнавский, д-р физ.-мат. наук, вед. науч. сотр.,
В. С. Анищик, аспирант,
Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск

ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Приводится (с указанием Интернет-адресов) и анализируется ряд программных комплексов компьютерной поддержки научных исследований и прикладного проектирования микроэлектромеханических систем в кремниевой электронике.

Ключевые слова: *кремниевая электроника, полупроводниковые материалы, микроэлектромеханические системы, компьютерное проектирование, программные комплексы.*

Введение

Микроэлектромеханические системы (МЭМС), содержащие разнообразные полупроводниковые гетероструктуры [1], являются в настоящее время основой нано- и микроэлектроники. Сфера их применения в различных областях науки и техники исключительно велика [2]. Вследствие этого весьма важным представляется обмен информацией о МЭМС-технологиях, используемых при конструировании и производстве МЭМС-устройств в одних сегментах электроники, для приложений в других.

Информационный портал "All about MEMS" содержит сведения о производителях МЭМС-приборов в широком спектре их применения [3] от аппаратуры и систем для космической и автомобильной техники до струйных принтеров и медицинской аппаратуры.

В небольшом обзоре [4], который представляется весьма полезным, делается экскурс в этот портал с целью краткого описания содержащейся там информации с указанием областей деятельности (и производимой продукции) ряда ведущих мировых фирм.

В настоящей работе приводится обзор распространяемых через Интернет некоторых программных комплексов (*software*) для компьютерного проектирования как различных МЭМС-устройств в целом, так и моделирования отдельных сегментов технологического цикла их промышленного производства. Производство полупроводниковых материалов, включающих в себя МЭМС, опирается на современные КМОП-("кремний—металл—оксид—полупроводник") и КНИ-("кремний на изоляторе") технологии (см., например, [5, 6]). Эти технологии используют сложные электрофизические, термохимические и механические процессы. В связи с их большим количеством и разнообразием (например, производство микропроцессоров Intel и AMD имеет около 300 стадий технологического цикла, [7]) представляются **только** комплексы, содержащие программы компьютерного моделирования травления, оксидирования и отжига кремниевой подложки с имплантированными в нее легирующими примесями донорного (фосфор, сурьма, мышьяк) и акцепторного (бор, галлий) типов для формирования особых гетероструктур — зон повышенной *n*- и *p*-проводимости для организации диодов, транзисторов (рис. 1), конденсаторов, резисторов и других элементарных МЭМС-устройств, составляющих большие, сверхбольшие и ультрабольшие интегральные схемы (БИС, СБИС и УБИС) электронных приборов.

Одним из наиболее сложных для моделирования и важным в КНИ-технологиях является процесс оксидирования. Физико-математические модели роста пленки оксида пока недостаточно проработаны. Эти модели основаны на классической модели "птичьего клюва" [8] и ее последующих модификаций. В настоящее время разрабатываются более современные модели, в частности, метод СТВН (сопряженных точек и виртуальных направлений) [9, 10]. При селекции программных комплексов для данной статьи преимущество отдавалось тем из них, которые содержат в своем инструментарии вычислительные средства расчета оксидирования кремния и роста пленки диоксида кремния.

Рис. 1. Принципиальная схема элементарного полупроводникового транзистора, составляющего основу больших интегральных схем (несколько миллионов элементарных транзисторов на кристалле)

Однако следует иметь в виду существование, кроме подобных программ, также и "смежных" программных комплексов типа [11] (обзор этих комплексов не вошел в данную статью), которые могут быть использованы в проектировании и исследовании характеристик МЭМС-приборов. Заметим, в работе [7] совершенно справедливо указывается, что "в настоящее время отсутствуют публикации, в которых отмечались бы особенности использования программных систем для моделирования процессов в микро- и наномеханических элементах". Настоящая работа заполняет этот пробел.

Ниже рассматриваются предлагаемые фирмами-разработчиками к коммерческому использованию программные комплексы TCAD Sentaurus, IntelliSuite, CoventorWare, MEMS Pro Suite (MEMSCAP), Tsuprem, MicroTec ([12—17]), информация о которых имеется в Интернете.

Инструментарий TCAD Sentaurus

Программный комплекс TCAD Sentaurus [12] разработан фирмой *Synopsys* (США) при участии фирмы *ISE* (Швейцария) и является, на наш взгляд, самым мощным и наиболее распространенным в настоящее время (по крайней мере, в России) пользовательским инструментарием. Автоматизированная система приборно-технологического проектирования TCAD позволяет использовать компьютерное моделирование в качестве средства оптимизации технологических процессов полупроводникового производства и анализа работы полупроводниковых приборов.

Использование TCAD снижает стоимость производства не менее, чем на 50 % за счет уменьшения числа экспериментов и сокращения затраченного времени.

Инструментарий TCAD Sentaurus — это платформа нового поколения, интегрированная из программных комплексов TCAD Synopsys и ISE TCAD Tool Suite. Инструментарий позволяет пользователю решать широкий спектр задач — от создания глубокосубмикронной логики, памяти и цифроаналоговых приборов до сенсоров, оптоэлектроники и высокочастотной техники.

В состав Sentaurus входят программные разделы Sentaurus Process, Sentaurus Device, Sentaurus Structure Editor, Sentaurus Workbench, Sentaurus TCAD for Manufacturing.

Раздел ***Sentaurus Process*** содержит комплекс программ моделирования процессов производства кремниевых и сложных (составленных из слоев различных материалов) полупроводников. Главными из этих процессов являются: ионная имплантация, диффузия, оксидирование, травление, отжиг и эпитаксия. Раздел обеспечивает полное 3D-моделирование маршрута технологии КМОП с возможностью вариации сегментов маршрутного плана, как с добавлением одних, так и с исключением других сегментов, с целью создания наиболее функционально эффективных МЭМС и наиболее оптимального плана их производства.

Стремительное развитие новых технологий требует от инженеров понимания физических явлений, происходящих внутри структур МЭМС для улучшения характеристик приборов. В частности, точность расчета механических напряжений (стресса) в области канала транзистора влияет на точность расчета тока в этом канале и, далее, на точность расчета интегральных характеристик транзистора и, следовательно, на точность логики БИС, СБИС или УБИС и в результате на получаемые параметры всего прибора.

Наличие в ***Sentaurus Process*** специализированной библиотеки MGOALS значительно упрощает построение физических 3D-моделей и существенно сокращает затраты как машинного времени расчета задачи с перебором многочисленных вариантов, так и астрономического времени работы и интеллектуальных усилий пользователя. Например, один из сегментов MGOALS генерирует высококачественную расчетную 3D-сетку с возможностью ослабления критерия Делоне вблизи границ разделов разных сред, что способствует уменьшению требуемого числа узлов и существенно снижает затраты компьютерного времени без ущерба для качества расчета.

Это позволяет использовать 3D-модели оксидирования (вязкоэластичные, вязкожидкостные), основанные на современных и эффективных методах.

Для иллюстрации возможностей инструментария и самих принципов организации работы представим схему компьютерного моделирования одного (в инструментарии их значительно больше) физического процесса — механического стресса и его влияния на электропроводные свойства полупроводника.

В ***Sentaurus Process*** существенно расширены возможности для моделирования механического стресса – включена модель рассогласования параметров кристаллической решетки, которая позволяет контролировать продольные и сдвиговые напряжения, возникающие в канале SiGe транзистора и влияющие на ток. Модель учитывает также особенности структур на других, чем Si, подложках (SiC, GaN, AlGaN) с постоянным расширением их номенклатуры.

Для расчета упругих свойств кремния в зависимости от кристаллографического направления атомной решетки введена модель анизотропной упругости. Раздел позволяет моделировать изгиб пластин, а также картину напряжений в пластинах, покрытых слоем тонких пленок.

Раздел ***Sentaurus Process*** предлагает ряд моделей, позволяющих точно описать воздействие стресса на подвижность носителей электрических зарядов. В библиотеке имеются как простые феноменологические модели, основанные на тензорезистивности, так и физические, более сложные модели. Одна из них учитывает индуцированные стрессом изменения верхнего края валентной зоны, что позволяет менять уровень механического напряжения в области канала до 1,5 ГПа. Для моделирования стресса до этого напряжения КМОП-транзисторов с SiGe истоком и стоком имеющихся в инструментарии средств обычно (к настоящему времени) вполне достаточно.

Следует кратко представить и другие разделы инструментария.

Раздел ***Sentaurus Device*** является комплексом программ нового поколения и ориентирован на моделирование электрических, термических и оптических характеристик кремниевых и сложных полупроводниковых приборов, включая транзисторы (как наноразмерные, так и крупные), датчики изображения, флеш-память, фотоизлучающие диоды, лазеры. Кроме того, раздел предоставляет возможность анализа предпосылок и пути устранения электростатического разряда, единичного случайного сбоя и кратковременной ошибки в схеме.

Функциональное разнообразие решаемых задач опирается на возможность выбора 1D-, 2D- или 3D-постановок и наличие широкого спектра транспортных моделей: диффузионного дрейфа, термодинамики и гидродинамики. В библиотеке раздела имеются также квантовая модель туннелирования для расчета затворных утечек и модель инжекции горячих носителей.

Комплекс имеет набор различных режимов компьютерного контроля спроектированной схемы: постоянный ток, переходный процесс, переменный ток, гармонический баланс, смешанная волна (рис. 2).

Алгоритмика ***Sentaurus Device*** включает в себя надежные вычислительные методы и реализующие их программные коды. В частности, решатель MOCA (Monte-Carlo) обеспечивает интегрирование методом Монте-Карло уравнений Шредингера, что позволяет учесть, например, такой квантовый эффект, как "отодвигание" электронов от границы раздела "кремний—оксид кремния", приводящие к снижению емкости затвора и тока транзистора.

Раздел инструментария ***Sentaurus Stucture Editor*** предназначен для редактирования спроектированных 2D- и 3D-структур и 3D-эмуляции процессов.

В режиме эмулятора комплекс переводит шаги технологических операций, таких как травление, эпитаксия, оксидирование, фотолитография, полировка, в геометрические действия и наоборот. Например, на стенке геометрически сгенерированной щели может быть осажден тонкий слой оксида. Специальные алгоритмы позволяют, в частности, моделировать направленное травление, которое используется при изготовлении ячейки флеш-памяти, и качество этого травления (наклон боковых стенок вытравленной щели) сильно сказывается на характеристиках прибора.

Раздел инструментария ***Sentaurus Workbench*** осуществляет взаимосвязь нескольких приложений, последовательно запущенных пользователем. Задав набор входных параметров (так называемое дерево экспериментов DoE), например, различное время отжига пластины, или дозу ионной имплантации, на выходе можно получить различные электрофизические характеристики прибора, а также оптимизировать их.

Специально разработанный формат записи TDR предназначен для рационального накопления, чтения и записи большого количества научных данных. В раздел включено мощное графическое средство для просмотра и редактирования таких файлов. Визуализатор TecPlot TV в составе раздела позволяет строить 1D- и 2D-разрезы любой 3D-структуры.

Раздел инструментария ***Sentaurus TCAD for Manufacturing*** предназначен для связи между миром моделирования процессов и отдельных компонентов схем и миром проектирования схем и их верификации.

Результаты моделирования технологий и физики прибора представляются в виде набора аналитических функций, который является входным для дальнейшего схемотехнического моделирования. Быстрое упрощенное моделирование "процесс — прибор — схема" позволяет проанализировать факторы, которые могут приводить к потерям в производстве.

Раздел представляет собой новую концепцию снижения потерь, позволяющую эффективно контролировать всю линию процессов в полупроводниковом производстве и повышать выход годных изделий.

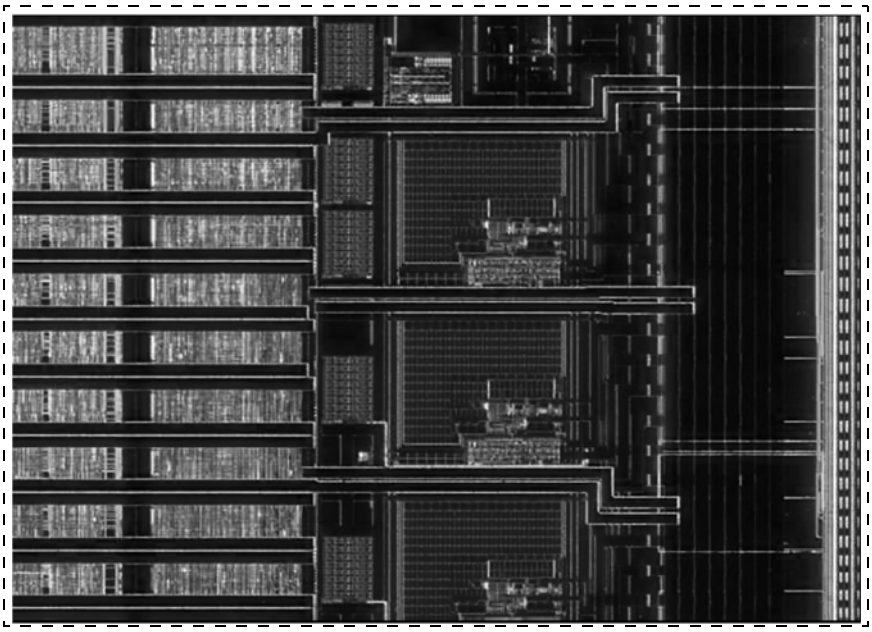

Рис. 2. Один из сегментов СБИС полупроводникового прибора. Программный инструментарий TCAD Sentaurus

Инструментарий IntelliSuite

Программный комплекс IntelliSuite [13] разработан фирмой *IntelliSense Software* (США). Сфера приложения инструментария — проектирование МЭМС от создания моделей процессов, применяемых на некоторых стадиях промышленного производства, до разработки технологического маршрута с вариацией его сегментов различного назначения. Пакет программ имеет несколько разделов: IntelliFab, AnisE, MEMaterial, IntelliMask.

В частности, решатель ***AnisE*** предназначен для моделирования анизотропного травления (*Anisotropic Etching*).

Комплекс *IntelliSuite* был одним из первых софт-разработок для проектирования МЭМС широкого назначения. IntelliSuite являлся пионером МЭМС-индустрии 90-х годов прошлого века: первые программные продукты

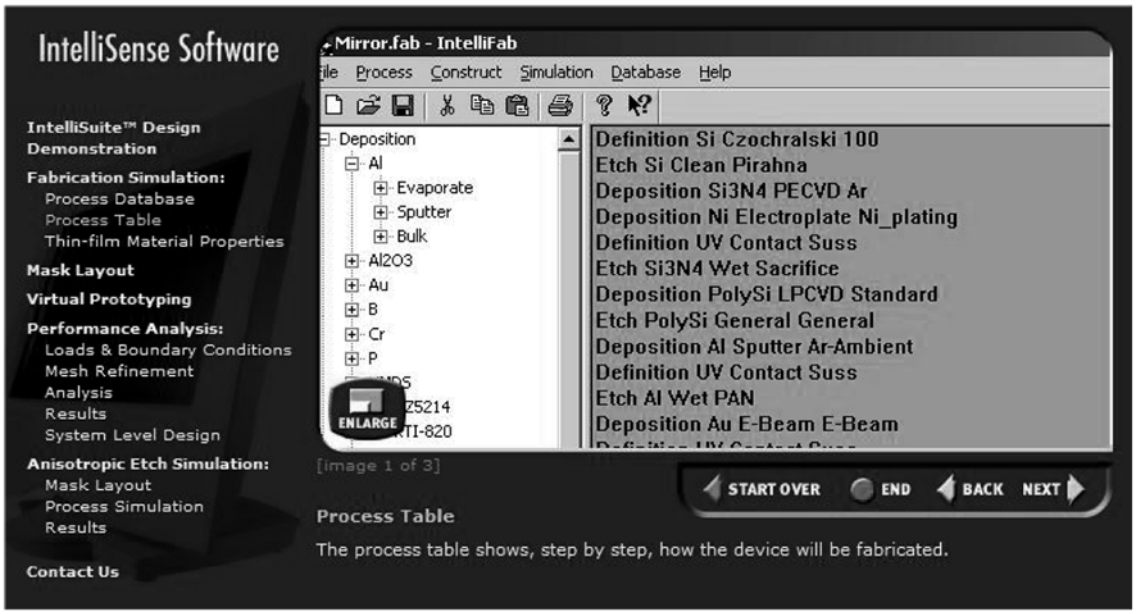

Рис. 3. Пользовательский интерфейс раздела IntelliFab программного инструментария IntelliSuite

для МЭМС (1993 г.), первый инструментарий САПР (1995 г.), первые программы расчета анизотропного травления (1997 г.), первый инструментарий MFMS (*Micro Fluidic Molecular Systems*) для моделирования операций с жидкостями на микроуровне со встроенной в микроканал автономной системой управления потоком (1999 г.).

Комплекс IntelliSuite является стандартным инструментарием разработки МЭМС широкого назначения, с дружественным и ясным пользовательским интерфейсом (рис. 3). Он может быть использован для проектирования термомеханических систем, пьезодатчиков, электромагнитных и рентгеновских преобразователей, биоМЭМС и микроканальных устройств.

Однако следует отметить, что материалы на сайте фактически не обновлялись с 2005 г.

Инструментарий CoventorWare

Программный инструментарий ***Coventor Ware*** [14] разработан фирмой ***Coventor*** (США) и ориентирован на поддержку разработок МЭМС-структур и приборов (рис. 4) с "высоким качеством и низкими затратами проектирования, с хорошим пониманием процессов и возможностью их модификации".

На рис. 4 (см. третью сторону обложки) дан пример использования программного инструментария. Спроектированные на компьютере и изготовленные на производстве микроплаты СБИС восьмиугольной формы обладают отклонениями от идеальности. Параметры этих плат фиксируются и заносятся в базу данных. Специальные компьютерные программы проверяют, насколько (и какие именно) восьмиугольники "подходят" друг к другу, чтобы между ними был бы минимальный зазор, удовлетворяющий ТУ.

Инструментарий включает в себя несколько программных комплексов, из которых интересам данной статьи соответствует комплекс MEMCAD (а также, частично, FlumeCAD). Этот комплекс, наряду с другими функциями, обеспечивает моделирования физико-химических процессов (в том числе травления, оксидирования, отжига) на основе метода конечных элементов для предсказания поведения компонентов МЭМС, включая электромеханические, электротермические и термомеханические эффекты.

Комплекс обеспечивает конструирование МЭМС, используя планировщик SEMulator3D (*SEMiconductor simulator*), общую платформу для разработки приложений, имеющую параметризированную библиотеку сложных процессов, с дружественным пользовательским интерфейсом.

Функция "Редактор процессов" позволяет пользователю определять свой собственный план проекта и последовательность шагов (процессов) его осуществления. Специальный 3D-визуализатор позволяет пользователю анализировать получаемые результаты в интерактивном режиме и изменять план с возможностью перестановки его разделов для улучшения модели МЭМС. Планировщик SEMulator3D подразделен на сегменты FAB и LAB. Конструкторский сегмент FAB содержит подразделы "Документирование процесса", "Оптимизация планирования", "Интегрирование (сборка процессов)" с соответствующими функциями.

Исследовательский сегмент LAB содержит подразделы "Анализ неисправностей", проектировщик "CAD / NAV link", "Редактор схемы" (с возможностью движения как вперед по плану, так и возврата назад), также с многочисленными функциями. (Заметим, что, на наш взгляд, здесь комплекс уступает софт-разработкам других фирм).

Инструментарий MEMS Pro Suite (MEMSCAP)

Программный комплекс MEMS Pro Suite (версия V4 [15]) создан фирмой MEMSCAP (США), которая является ведущим разработчиком технологий MUMPs (Multi-User MEMS Process, многопользовательский МЭМС-процесс) и САПР (систем автоматизированного проектирования), и производителем МЭМС широкого назначения. Отметим, что вари-

ант этой технологии, технология поверхностной микрообработки PolyMUMPs стала стандартом и используется на 150—200 предприятиях. Ее конструкторский раздел SOIMUMPs представляет собой эффективный метод проектирования и производства МЭМС на основе КНИ-технологий.

Технология MUMPs является одной из разновидностей технологического процесса изготовления МЭМС-изделий методами и приемами поверхностной микрообработки с использованием трех слоев поликристаллического кремния. Эта технология, хотя и имеет обычные характеристики стандартного микромашинного цикла (легирование, осаждение, травление, оксидирование, отжиг, эпитаксия, металлизация и др.), но является более эффективной, рентабельной и проверенной временем технологией. Однако она предъявляет повышенные требования к качеству предварительного компьютерного проектирования.

Все проектировщики МЭМС, которые пользуются программным комплексом Pro V4, должны придерживаться и следовать определенным правилам проектирования. Эти правила ограничивают конструкторов в разработке более сложных микроустройств, но оставляют возможность вариации различных проектов чипов в стандартизированном производственном цикле. Такая стандартизация снижает стоимость производства чипов и позволяет более широкому кругу разработчиков (даже со средней квалификацией) реализовывать свои проекты.

MUMPs-процесс (вначале компьютерное проектирование, затем практическая реализация) начинается с создания кремниевой подложки, высоко легированной фосфором. Далее на пластину осаждается слой нитрида кремния Si_3N_4, затем — поликремния Poly0 (начальный слой). Рисунок Poly0 формируется с помощью фотолитографии (нанесение фоторезиста, экспонирование через маску-шаблон, обработка экспонированного фоторезиста и создание рисунка как нового шаблона для последующего травления с целью переноса изображения на нижележащий слой).

После травления проводится отжиг пластины и создается слой FO (*First Oxide*) первого оксида. На слой FO с применением специальных фотошаблонов наносится рисунок, по которому на этот слой осаждается новый слой поликремния Polyl, с его последующим травлением, отжигом и оксидированием для получения слоя второго оксида SO (*Second Oxide*).

На слой SO с помощью новых фотошаблонов наносятся рисунки, которые используются как защитные маски для травления во втором оксиде окон к слою Poly1. Затем осаждается второй слой поликремния Poly2.

Слои Poly0, Poly1 и Poly2 являются механическими структурными слоями полупроводникового материала (рис. 5), и их гетероструктуры (элементы БИС и СБИС) получены травлением первого и второго оксидов.

Далее проводятся завершающие стадии MUMPs-процесса (металлизация, организация электросвязи между слоями, шлифование поверхности и т. д.; анализ этих стадий лежит вне рамок данной работы).

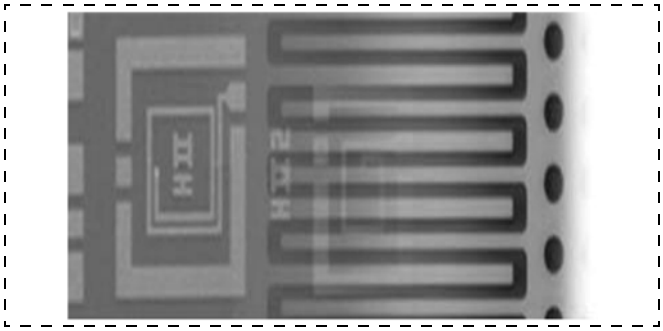

Рис. 5. Структурные слои полупроводникового материала (элементы технологии MUMPs). Программный инструментарий MEMS Pro Suite

Описание MUMPs-технологии проведено специально достаточно подробно (хотя и с некоторым оттенком конспективности) для того, чтобы подчеркнуть доминирующую роль процессов травления и оксидирования в технологическом цикле промышленного производства МЭМС-устройств, которые опираются на эту технологию. Соответственно важна роль компьютерного моделирования этих процессов, с возможностью для конструкторов проводить многовариантные расчеты с высокой точностью за приемлемое время. Это налагает повышенные требования к качеству вычислительного инструментария, моделирующего физико-химические процессы в полупроводниках.

Предлагаемый фирмой компьютерный комплекс MEMS Pro V4 (4-я версия) содержит шесть программных сегментов САПР различного назначения: Xplorer (среда UNIX), Pro (среда Windows), Master, MEMS Modeler, SYMBA, MUMPStart. Комплекс предоставляет большие возможности компьютерного моделирования различных физико-химических процессов, в частности, применяющихся для формирования тонких пленок SiO_2, Si_3N_4, polySi, которые используются в КНИ-технологиях.

Расчет оксидирования кремния для получения слоя диоксида кремния обеспечивается решателем, в котором используется вычислительный алгоритм на основе частично модернизированного классического метода Дила—Гроува [8].

Специализированные решатели проводят 3D-расчеты изотропного и анизотропного травления слоев различных материалов и их отжига.

Инструментарий Tsuprem-4

Программный комплекс Tsuprem-4 разработан фирмой *Avant! Corporation* (США) и предназначен для проектирования элементарных МЭМС, широко применяемых в полупроводниковой индустрии.

Основным направлением комплекса является моделирование физических, химических, термических и механических процессов, использующихся в производстве кремниевых полупроводниковых приборов. Наиболее применяемыми и одновременно наиболее сложными для компьютерных расчетов представляются: ионная имплантация легирующих примесей в кремниевую подложку; травление пластины для формирования нужного микрорельефа поверхности; ок-

сидирование кремния для получения тонких или толстых оксидных слоев; эпитаксия различных материалов с наращиванием пленок нужной толщины; низкотемпературный депозит; отжиг составной пластины для снятия внутренних механических напряжений; диффузия примесей в кремнии, их сегрегация (выталкивание или втягивание, в зависимости от типа примеси) на фронте волны оксидирования.

Комплекс содержит специализированные программы (решатели) для моделирования цикла этих процессов (рис. 6, см. третью сторону обложки) с последовательностью шагов, определяемых проектировочным планом пользователя.

Инструментарий предоставляет пользователю средства визуализации полученной цифровой информации с широким спектром возможностей: 1D-, 2D- и 3D-изображения, различные разрезы, сечения, выборки и т. п.

В настоящее время программный комплекс Tsuprem-4 интегрирован в инструментарий TCAD Sentaurus [12].

Инструментарий MicroTec

Программный комплекс MicroTec [17] разработан фирмой *Siborg Electronics* (Канада) и ориентирован в основном на компьютерную поддержку моделирования электрофизических, электрохимических и термомеханических процессов, использующихся в технологиях КМОП и КНИ промышленного производства МЭМС. Главными объектами комплекса являются процессы имплантации легирующих примесей донорного и акцепторного типов в базовый материал, эпитаксия различных материалов для создания поверхностных пленок (слоев) с вариацией их толщины, травление материала в целях получения нужного микрорельефа поверхности, оксидирование кремниевой пластины для создания пленок оксида требуемой конфигурации и толщины, диффузия примесей в структурных слоях и процесс их сегрегации на фронте волны оксидирования и образование зон повышенной концентрации примесей и, соответственно, областей повышенной проводимости *p*- и *n*-типа, необходимых для организации электрических каналов, и далее создание элементов БИС, СБИС и УБИС (резисторов, конденсаторов, транзисторов, схем памяти и т. п.).

Комплекс содержит ряд вычислительных разделов, выполняющих различные функции как исследования процессов, так и проектирования МЭМС.

В частности, решатель SibLin обеспечивает интегрирование 2D- и 3D-систем дифференциальных уравнений в частных производных, таких как уравнение Пуассона, нестационарные уравнения Лапласа для теплопереноса и диффузии с переменными коэффициентами, зависящими от температуры и концентрации. Вычислительные алгоритмы решателя, основанные на известном методе Ван-дер-Ворста, обеспечивают эффективное интегрирование систем уравнений как с симметричной, так и несимметричной матрицей.

Одним из разделов комплекса является решатель ETCH (*Etching*), который обеспечивает расчет процесса травления материалов различных типов (пластин моно- и поликристаллического кремния Si, пленки оксида SiO_2, защитных нитридных масок Si_3N_4 и др.) для получения разнообразных видов профилей микрорельефа поверхности. Возможно, по заказу пользователя, применение различных моделей (технологий) травления: "сухое фрезерование" (ионное, ионно-плазменное, электронно-лучевое и др.) или "мокрое вытравливание" (газофазное или жидкостное, с вариацией типа химического травителя).

Очень важным разделом комплекса является решатель LOCOS (*Local Oxidation of Silicon*), ориентированный на решение задач оксидирования поверхности, некоторые участки которой закрыты защитными масками, в постановках для технологий КМОП и КНИ. По заказу пользователя возможна вариация оксидантов ("сухой" кислород O_2, кислород O_2 и/или пары воды H_2O и др.), с вариацией параметров процесса — температуры и давления.

Инструкции к решателям написаны исключительно ясным языком и содержат как краткое изложение физических принципов, на которых основан алгоритм решателя (аналогичный современным алгоритмам, используемым в работах [9, 10]), так и практические сведения, необходимые пользователю (смысл управляющих параметров, диапазоны их допустимой вариации, конкретные значения параметров режима "по умолчанию").

Указаны даже стандартные затраты на проведение "среднего" расчета: требуемый ресурс памяти (около 8 Мбайт для сетки в 1000 узлов), время выполнения задания (около минуты). Хотя такая информация быстро устаревает в связи с прогрессом вычислительной техники, подобный подход к пользователю достаточно приятен.

Исходные коды представлены в версиях для различных компиляторов (C, C++, Fortran, Pascal), что делает возможным их использование в процессах обучения студентов и аспирантов, например, для иллюстрации влияния вариации алгоритма (или его элементов) на получаемое решение.

Представленная на сайте демоверсия (рис. 7, см. третью сторону обложки) наглядна, информативна и характеризуется дружественным пользовательским интерфейсом.

Заключение

Современные КМОП- и КНИ-технологии с их возможностью увеличения производительности полупроводниковых приборов и одновременным снижением потребляемой мощности являются доминирующими для изготовления БИС, СБИС и УБИС. Происходит непрерывное уменьшение размеров интегральных схем, а это, в свою очередь, определяет процесс миниатюризации МЭМС-устройств и их элементов. Так, в 1997 г. минимальный технологический размер транзистора составлял около 250 нм, а толщина его подзатворного диэлектрика — около 5 нм. В 2006 г. размер транзистора уменьшился до 100 нм, а толщина его подзатворного диэлектрика — до 2 нм. К 2012 году прогнозируется дальнейшее уменьшение размера транзистора до 50 нм, а толщина его подзатворного диэлектрика станет меньше 1 нм, с приближением к квантовомеханическому пределу (подробнее см. работу [18]).

В свою очередь, миниатюризация элементов МЭМС приводит к существенному уменьшению размеров УБИС, делая возможным проектирование, производство и эффективное практическое применение совершенно новых наноэлектронных приборов [19, 20].

Компьютерное моделирование электрофизических, термохимических и механических процессов является важным средством развития как самих нанотехнологий, так и наноиндустрии в целом.

Роль компьютерного моделирования будет непрерывно повышаться с расширением применения суперЭВМ и современных высокопроизводительных вычислений параллельного счета.

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. **All about MEMS**. Интернет-сайт http://allabout-mems.com/
4. **Яшин К. Д., Осипович В. С., Божко Т. Г.** Разработка МЭМС // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 1. С. 28—34.
5. **Асеев А. Л., Попов В. П., Володин В. П., Марютин В. Н.** Перспективы применения структур "кремний-на-изоляторе" в микро-, наноэлектронике и микросистемной технике // Микросистемная техника. 2002. № 9. С. 3—17.
6. **Адамов Д. Ю., Матвеенко О. С.** Усовершенствование структур МОП-транзисторов в нанометровых технологиях // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 2. С. 53—63.
7. **Пахомов С. А.** Производство микропроцессоров Intel // Компьютер Пресс. 2002. № 4. С. 33—35.
8. **Deal B. E., Grove A. S.** General relationship for the thermal oxidation of silicon // Appl. Phys. 1965. V. 36. P. 37—70.
9. **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.
10. **Тарнавский Г. А., Аннщнк В. С., Тарнавский А. Г.** Влияние защитных масок при отжиге кремниевой пластины на формирование наноразмерных гетероструктур легирующих примесей фосфора // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 3. С. 58—65.
11. **Тягунов О. А.** Программный комплекс для моделирования и исследования динамических характеристик микро- и наномеханических элементов и систем // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 3. С. 19—25.
12. **Sentaurus.** Приборно-технологическое моделирование. Система автоматического проектирования ISE TCAD Sentaurus // Интернет-сайт http://www.svnopsys.com/products/tcad.html (рус: http://www.isen.ru/ise/prod.html).
13. **IntelliSuite:** Industry leading MEMS design tools. Интернет-сайт http://www.intellisuite.com/
14. **CoventorWare:** The leader in 3D MEMS & semiconductor software. Интернет-сайты http://www.coventor.com/ и http://www.cmf.rl.ac.uk/cad/memcad.html
15. **MEMS Pro Suite (MEMSCAP)**: The power of a small world. Интернет-сайт http://www.memscap.com/
16. **Tsuprem-4:** Semiconductor process simulation software. Интернет-сайт http://www.syopsys.com/products/tcad/taurus tsuprem4_ds.html
17. **MicroTec:** Software Package for Two-Dimensional Process and Device Simulation. Интернет-сайт http://www.siborg.ca/
18. **Мустафаев Ар. Г., Мустафаев Аб. Г.** Проблемы масштабирования затворного диэлектрика для МОП-технологий // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 4. С. 17—22.
19. **Телец В., Алфимов С., Иванов А., Митин Ю., Борисов А., Истомин Е.** Прикладные аспекты нанотехнологии // Наноиндустрия. 2007. № 4. С. 4—11.
20. **Ковальчук М. В.** Нанотехнологии — фундамент новой наукоемкой экономики 21 века // Российские нанотехнологии. 2007. № 1—2. С. 6—11.

УДК 536.5

Д. В. Локтев, аспирант,
В. М. Андреев, д-р техн. наук., проф.,
Д. В. Зиновьев, канд. техн. наук, доц.,
К. А. Тузовский, канд. техн. наук, доц.,
Московский государственный институт электронной техники,
И. Н. Шишкова, канд. техн. наук, ст. науч. сотр.,
Московский энергетический институт

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПЛОТНЫХ ГАЗОВ В МИКРОСИСТЕМАХ

Рассмотрены и выявлены границы применимости уравнений теплоотдачи, используемых для расчета при проектировании тепловых МЭМС.

Анализ решения молекулярно-кинетического уравнения Больцмана обнаруживает частичное структурирование газового потока в высокоградиентном температурном пограничном слое.

Предложен новый механизм теплоотдачи микрообъектами.

Ключевые слова: *микронагреватель, терморезистор, МЭМС, молекулярно-кинетическое уравнение Больцмана.*

В связи с расширением применения МЭМС, в том числе основанных на тепловых свойствах газообразных сред, возникла проблема миниатюризации источников и приемников теплоты — терморезисторов. Промышленные варианты традиционных проволочных конструкций усовершенствованы настолько, что потенциал их технических характеристик (миниатюрность, быстродействие, чувствительность и т. д.) близок к исчерпанию; на смену им приходят точечные конструкции, размеры которых не превышают сотни микрометров, т. е. в несколько раз меньше типографской точки.

В настоящее время при расчетах МЭМС необходимые тепловые характеристики выбираются из существующих представлений. Скудная и неполная информация, а зачастую ее отсутствие, исключает возможность использования в качестве методической базы теории подобия. Аналитические методы не в состоянии учесть вероятность размерных эффектов, часто сопутствующих миниатюризации.

В настоящей работе проведены исследования процесса теплоотдачи в микросистемах с использованием оригинального монокристаллического кремниевого терморезистора. Последний отличается от известных тонкопленочных конструкций тем, что тепловыделение сосредоточено в теле радиусом около 50 мкм и содержит внутренний температурный "репер", позволяющий точно определить температуру с точностью ± 0,1 °С в диапазоне 150...330 °С, в зависимости от марки кремния [1, 2]. Мощность, рассеиваемая при известной температуре, также легко выявляема по вольт-амперной характеристике, что позволяет вычислить коэффициент теплоотдачи α из закона охлаждения Ньютона—Рихмана в зависимости от размеров микронагревателя (рис. 1, кривая *2*).

Значительный его рост при переходе к субмиллиметровым размерам в неподвижной воздушной среде следовало прежде всего отнести к чисто геометрическим причинам. Решение уравнения Лапласа в сферических координатах приводит к гиперболическому снижению температуры по толщине шаровой стенки [3]:

$$T = T_1 - (T_1 - T_2) - \frac{1/R_1 - 1/R}{1/R_1 - 1/R_2},$$

где R_1 и T_1 — радиус и температура внутренней поверхности; R_2 и T_2 — то же с внешней стороны поверхности.

Применительно к полой сфере уравнение решается точно. Что же касается микронагревателя, находящегося в свободном пространстве, определение R_2 оказывается непростой задачей. В частности, трудно согласиться с представлением $R_2 \to \infty$, как это сделано в работе [3], поэтому нами было выполнено экспериментальное определение $T(R)$.

Датчики были установлены в герметичной камере со смотровым окном для контроля их местоположения с помощью длиннофокусного микроскопа.

Согласно схеме (рис. 2) один из терморезисторов служит микронагревателем (фиксированным в пространстве), другой, перемещающийся с помощью микровинта, — термометром сопротивления.

Измерение температуры выполнялось с шагом 10 мкм. Вид экспериментальной кривой падения температуры соответствует гиперболической зависимости от расстояния при условии, что теплопроводность газа в тепловом пограничном слое увеличивается до 0,17 Вт/м · К.

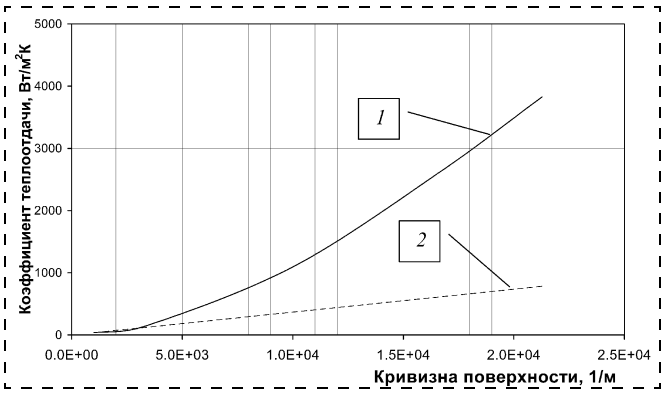

Рис. 1. Зависимость коэффициента теплоотдачи от размеров микронагревателя:
1 — экспериментальная; *2* — расчетная

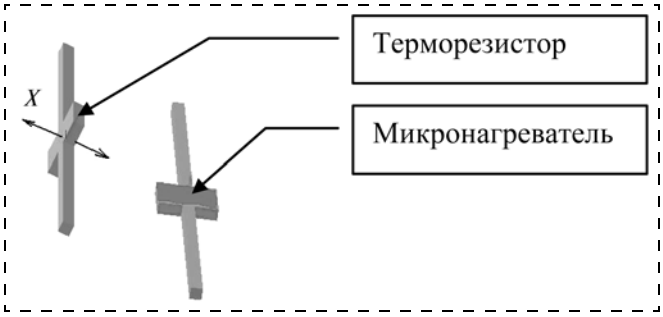

Рис. 2. Схема определения толщины теплового пограничного слоя

Из рис. 3 можно определить, что 90 %-ное падение температуры происходит на расстоянии не более 10 R_1, что дает основание оценить двояко с ошибкой менее 10 % мощность P [3]:

$$P = 4\pi R_1 \lambda (T_1 - T_2) = 4\pi R_1^2 \alpha (T_1 - T_2),$$

откуда значение коэффициента теплоотдачи $\alpha = \lambda/R$, идентично определенному из предположения $R_2 \to \infty$, но получено на основании эксперимента.

Возвращаясь к обсужденному (см. рис. 1), получаем, что $\alpha = 0{,}03/5 \cdot 10^{-4} = 600$ Вт · м$^{-2}$ · К в 6 раз меньше, чем полученная в эксперименте. Чтобы исключить сомнение в этом результате был проведен эксперимент, позволяющий определить α иным, независимым методом.

Известно, что постоянная времени будет $\tau = \dfrac{C_v v}{\alpha S}$ и равна времени, в течение которого температура падает в e раз. Определение τ было выполнено путем регистрации на осциллографе сопротивления сразу после отключения питания.

Результат, представленный на рис. 4, показывает, что относительное падение температуры, пересчитанной с $R(T)$, на 63 % происходит за 2 мс, что близко к расчетному $\tau = \dfrac{700 \cdot 2{,}3 \cdot 10^3 \cdot 1{,}4 \cdot 10^{-13}}{3600 \cdot 2{,}8 \cdot 10^{-8}} = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ с.

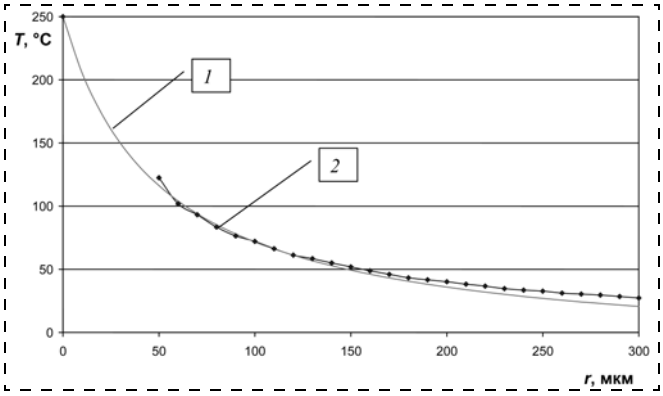

Рис. 3. Тепловое поле микронагревателя:
1 — решение уравнения Лапласа; *2* — экспериментальные данные

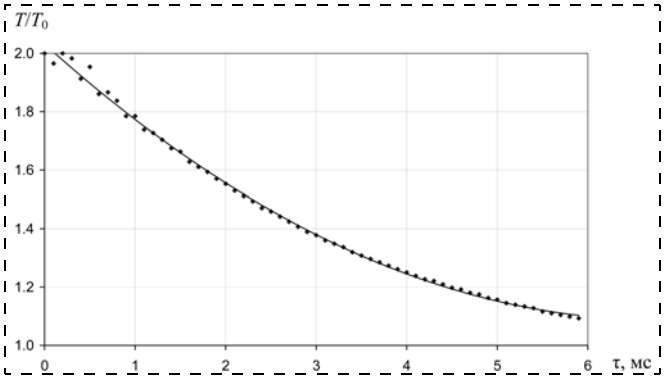

Рис. 4. Процесс охлаждения микронагревателя

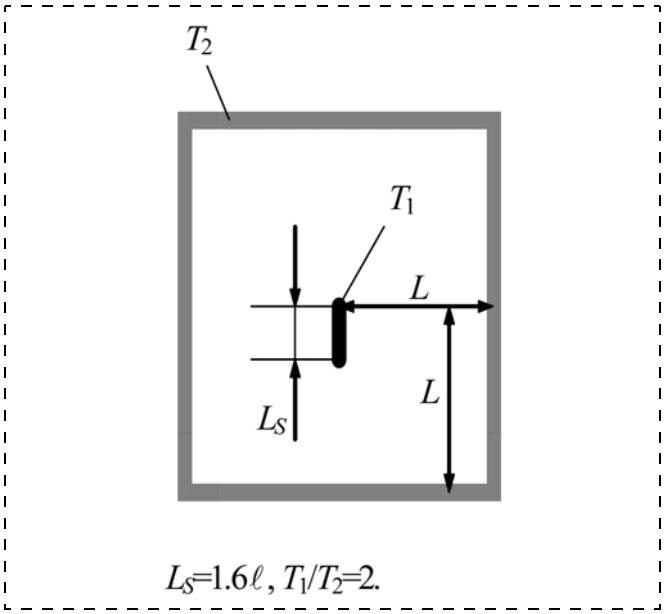

Рис. 5. Схема модели для расчета теплового поля микронагревателя: T_1 — температура нагревателя (пластинки); T_2 — температура стенки; l — средняя длина свободного пробега молекул азота при атмосферном давлении и температуре 300 К

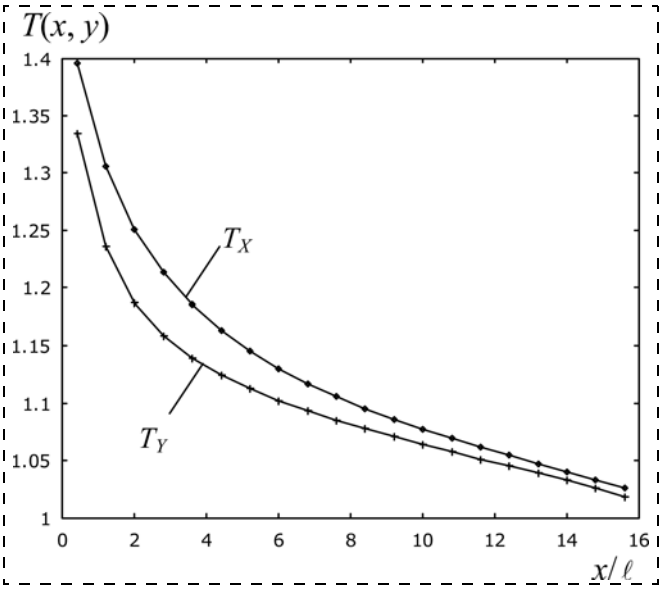

Рис. 6. Зависимость компонентов температуры T_x и T_y от x при $y = 0$

Таким образом, необходимо заключить, что уменьшение размеров приводит к смене механизма теплоотдачи, причиной которой служит очень высокий градиент температуры, достигающий 10^6 К/м. В этих условиях эффективная теплопроводность воздуха растет с 0,03 до 0,17 Вт/м · К, вследствие, как можно предположить, частичного упорядочения движения молекул, аналогично тому, как это происходит в разреженном газе. Предположение о том, что и в *плотном* газе возможна частичная замена хаотического движения на свободно-молекулярное можно подтвердить решением молекулярно-кинетического уравнения Больцмана[1] [4]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial r} = J,$$

где J — интеграл столкновений; f — функция распределения; t — время; $r(x, y, z)$ — координаты молекул; $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ — скорость молекул в той же системе.

Схема модели двумерной задачи приведена на рис. 5. Пластинка, нагретая до температуры T_1, расположена в центре камеры прямоугольного сечения. Длина пластинки и камеры предполагаются бесконечными в направлении, перпендикулярном плоскости рисунка.

Для упрощенной модели (рис. 5) показана разность скорости падения температуры по осям X и Y, свидетельствующая о некотором структурировании газовой среды (рис. 6).

Следовательно, микронагреватель создает частично упорядоченную газовую среду, что служит новым примером синергетики, который в отличие от известной неустойчивости Бенара имеет большое практическое значение в измерительной технике.

Заключение

Впервые выполнен ряд тепловых экспериментов с использованием точечного микронагревателя и термометра сопротивления.

Показано, что увеличение кривизны до значений $1/R = 10^4$ м$^{-1}$ сопровождается размерным эффектом, заключающимся в частичном упорядочении движения молекул, которое оно приобретает под действием огромного температурного градиента.

В этом состоит главная особенность микротеплотехники, как нового направления прикладной науки.

Список литературы

1. **Зиновьев Д. В., Тузовский К. А., Андреев В. М., Бочкарев Э. П., Павленко Е. Ю.** Эффект гигантской теплоотдачи телами субмиллиметровых размеров // Доклады академии наук. 1999. Т. 366. № 2. С. 178—180.
2. **Зиновьев Д. В., Андреев В. М.** Быстродействующий терморезистор-микронагреватель. Межотраслевой научно-технический сборник // Оборонный комплекс — научно-техническому прогрессу России. 2001. № 3. С. 23—26.
3. **Луканин В. Н.** и др. Теплотехника: 2-е изд. М.: Высш. школа, 2000. 671 с.
4. **Zinoviev D. V., Andreev V. M., Tuzovsky K. A., Loktev D. V.** Investigation of microobjects heat transfer // Proc. of Second International Conference on Transport Phenomena in Micro and Nanodevices. Barga, Italy. 11—15 June 2006.

[1] Решение проводилось совместно с Кафедрой криогенной физики МЭИ и ВЦ РАН.

УДК 531.76

П. Г. Бабаевский*, д-р техн. наук, проф., зав. каф.,
Г. М. Резниченко*, канд. техн. наук, доц.,
А. А. Жуков*, д-р техн. наук, проф.,
С. А. Жукова**, канд. техн. наук, зав. сектором,
Е. А. Гринькин**, научн. сотр.,
*"МАТИ" — Российский государственный технологический университет им. К. Э. Циолковского,
** ФГУП "Ордена Трудового Красного Знамени научно-исследовательский физико-химический институт имени Л. Я. Карпова"

ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ СЕНСОРНЫХ МИКРО- И НАНОСИСТЕМ: ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И МАСШТАБНЫЕ ЭФФЕКТЫ. ЧАСТЬ 1. ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ МЕХАНИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ И АКТЮАТОРЫ

Первая часть обзора содержит анализ физических принципов работы и теоретического описания поведения в различных условиях двух основных элементов электромеханических преобразователей сенсорных МЭМС и НЭМС — чувствительных механических элементов и актюаторов различного типа. Соотношения между силой и деформацией (смещением) чувствительных механических элементов показывают, что переход в наномасштаб приводит к значительным изменениям их поведения. С одной стороны, это обеспечивает возможности резкого повышения их деформативности и резонансной частоты, а с другой — увеличивает влияние на них различных побочных эффектов, в частности, внутренних (объемных остаточных) напряжений и поверхностных сил. Анализ соотношений между электрическим и тепловым стимулированием и механической реакцией емкостных и термических актюаторов, а также масштабных эффектов в них показывает потенциальную эффективность их применения в чувствительных механических элементах НЭМС.

Ключевые слова: *сенсорные МЭМС, НЭМС, электромеханические преобразователи, чувствительные механические элементы, актюаторы, физические основы, масштабные эффекты.*

Введение

Изобретение сканирующих туннельных и атомно-силовых микроскопов с использованием микроэлектромеханических преобразователей обусловили интенсивные исследования и разработку различных микро- и наноэлектромеханических систем (МЭМС и НЭМС), действующих по аналогичному принципу, в первую очередь, высокочувствительных сенсорных систем для контроля ускорения (акселерометров), вибраций, теплового и квантового шума, температуры и давления, ИК излучения, микрогравитации и гравитационных волн, напряжений и деформаций в материалах и элементах конструкций, напряженности магнитного и электрического полей (магнето- и электрометров), тактильных эффектов, состава и свойств растворов и газовых сред, а также миниатюрных исполнительных элементов (приводов) и датчиков для робототехники, интеллектуальных материалов и конструкций [1—39]. Основу существующих и разрабатываемых сенсорных МЭМС и НЭМС составляют электромеханические преобразователи, состоящие из чувствительного механического (упругого или инерциального) элемента, который связан через входной и выходной электрический контур (электронную схему) соответственно с актюатором и детектором. Актюатор преобразует входной электрический сигнал — напряжение $V(t)$ или ток $I(t)$ в механическое воздействие — силу $F(t)$, перемещение $z(t)$ или скорость перемещения $u(t)$ механического элемента, а детектор — механическое воздействие или перемещение механического элемента в выходной электрический сигнал. На рис. 1 в обобщенном виде представлена принципиальная схема таких систем. Входной электрический сигнал, преобразуемый с помощью актюатора в смещение чувствительного механического элемента, используется обычно для регулирования состояния или положения механического элемента (задания его определенного смещения или вынужденных колебаний), а также для решения других задач настройки и активирования системы. Реакция механического элемента на действие актюатора или внешнее воздействие, преобразуемая в выходной электрический сигнал с помощью детектора, используется для измерения и контроля этих воздействий с помощью измерительного контура с системой положительной или отрицательной обратной связи с входной и выходной схемами. Например, если чувствительный механический элемент работает как резонатор, измерительная схема с отрицательной обратной связью отслеживает малые сдвиги по фазе с помощью

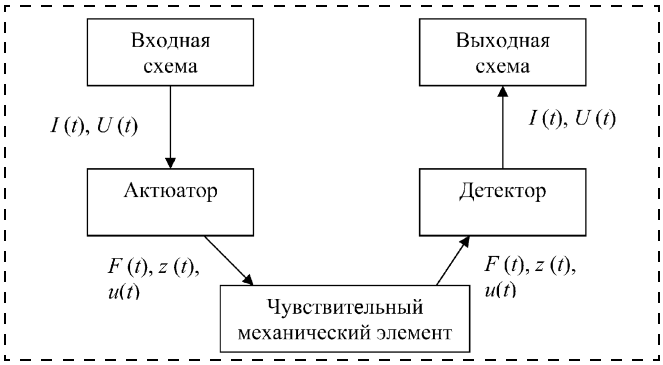

Рис. 1. Принципиальная схема сенсорных микросистем

замкнутого контура, на который подается напряжение с постоянной амплитудой. Наоборот, в схеме с положительной обратной связью чувствительный механический элемент включен в самовозбуждающийся контур как простой гармонический осциллятор.

Сложность и многообразие физических процессов, протекающих при работе таких преобразователей и определяющих чувствительность, разрешающую способность и надежность микросистем в целом, резко выраженная зависимость свойств их элементов и протекающих в них процессов в реальных условиях эксплуатации от типа материалов и технологии производства, основанной на планарной и объемной кремниевой микротехнологии с формированием электронных схем на одном чипе, а также от внешних условий затрудняют расчет и прогнозирование поведения таких элементов и достижение воспроизводимости их параметров. Переход от МЭМС к НЭМС не только открывает качественно новые возможности миниатюризации сенсорных систем, повышения их эффективности и чувствительности, но и сопровождается возникновением новых научных и материаловедческо-технологических проблем, которые необходимо учитывать при проектировании, производстве и использовании таких систем. Сенсорные НЭМС и их элементы отличаются чрезвычайно высокой восприимчивостью и чувствительностью к побочным взаимодействиям и помехам (шумам), которые возникают от различных внешних и внутренних источников вследствие более резкого проявления в наномасштабе по сравнению с микромасштабом различных физико-химических явлений и эффектов, в том числе квантовых [5—34]. Данный обзор содержит анализ физических принципов работы основных элементов электромеханических преобразователей сенсорных МЭМС и НЭМС и теоретического описания их поведения, а также имеющихся расчетных данных и экспериментальных фактов о возможных физико-химических масштабных эффектах, проявляющихся в этих элементах, и их влиянии на чувствительность, разрешающую способность и помехи (шумы) преобразователей при переходе от микро- к наномасштабу. Обзор разделен на две части, первая из которых посвящена чувствительным механическим элементам и актюаторам, а вторая — детекторам, источникам шумов и их характеристикам.

1. Чувствительные механические элементы

Чувствительные механические элементы, используемые в сенсорных микро- и наносистемах, обычно представляют собой упругие балочные элементы — консольные балки (кантилеверы) или закрепленные по обоим концам балки (мостиковые структуры), а также, хотя и значительно реже, закрепленные по периметру упругие мембраны. Все эти элементы изготавливаются из жестких материалов различной природы, которые часто должны обладать требуемыми электрическими и магнитными свойствами. Поскольку производство МЭМС и НЭМС базируется преимущественно на кремниевой технологии микро- и наноэлектроники, на практике чаще всего используются моно- и поликристаллический нелегированный и легированный кремний, его оксиды и нитриды различного состава, другие соединения и модификации, а также различные металлы, керамики, полимеры и их комбинации (биморфные, композиционные или гибридные структуры). Выбор материалов для таких элементов, их геометрическая форма и размеры диктуются как требованиями к конструкции и свойствам сенсорных устройств, так и в значительной степени к технологии их изготовления [29—32].

Чувствительные механические элементы могут работать как в квазистатических, так и в динамических режимах. Аналитическому описанию поведения квазистатических и динамических (колебательных резонирующих) систем посвящен данный подраздел.

1.1. Поведение при статических воздействиях

Физической основой действия чувствительных механических элементов в квазистатическом режиме является возникновение упругих (обратимых) изменений геометрических размеров — относительной деформации $\Delta l/l$, силы F_y при заданной площади A:

$$F = EA\frac{\Delta l}{l},$$

где E — коэффициент пропорциональности (модуль упругости материала). Из самого общего масштабного (скейлингового) анализа этого соотношения [34] следует, что линейный масштабный коэффициент упругой силы равен 2, т. е. изменение силы при заданном E пропорционально квадрату произвольно выбранного линейного масштабного параметра L^2. Ниже рассмотрены конкретные взаимосвязи между силой и деформацией в упругих элементах различного типа, в первую очередь закрепленных с одного (консольных) и с обоих концов (мостиковых) балок (рис. 2, *а* и *б* соответственно) в зависимости от их размеров и свойств материалов [40—43].

В упругой постановке, без учета временных эффектов, квазистатический изгиб тонких пластин и балок описывается в общем виде уравнением Эйлера—Бернулли:

$$\frac{d^2z}{dx^2} = \frac{M(x)}{EI},$$

где x, z — соответственно направления вдоль нейтральной оси в плоскости пластины (x, y) и перпендикулярно ей; $M(x)$ — изгибающий момент как функция координаты x; E — модуль Юнга материала балки; I — момент инерции поперечного сечения балки (при прямоугольном сечении балки высотой a и шириной b: $I = a^3b/12$; при круглом сечении радиусом r: $I = \pi r^4/4$).

При приложении силы F к свободному концу закрепленной с одного края (консольной) балки длиной l, т. е. в точке с координатой $x = l$, смещение нейтральной плоскости балки вдоль оси z относительно исходного ее положения при отсутствии силы определяется выражением

$$z(x) = -\frac{F}{EI}\iint M(x)dxdx + Cx + D,$$

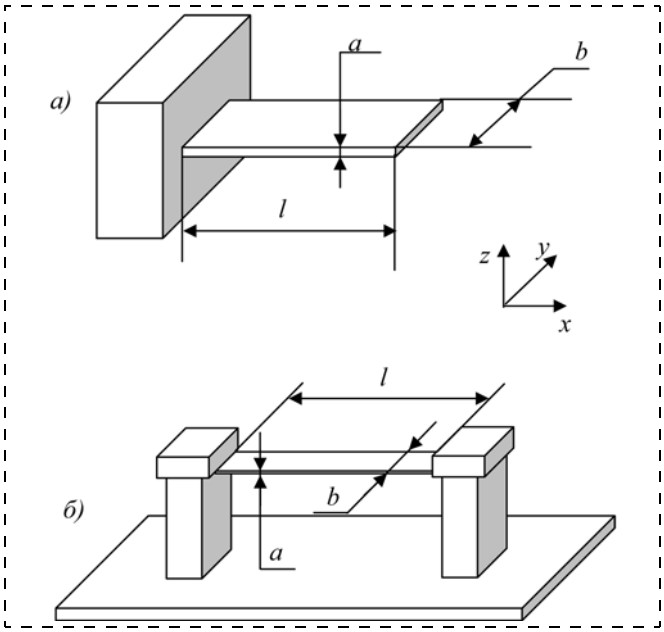

Рис. 2. Схематическое изображение консольной балки (*а*) и мостиковой структуры (*б*) длиной *l*, шириной *b* и толщиной *a* в координатах *x—y—z*

где C и D — константы интегрирования. При граничных условиях $z(x = l) = 0$:

$$z(x) = -\frac{F}{EI}\left(\frac{x^3}{6} - \frac{l^2 x}{2} + \frac{l^3}{3}\right).$$

Максимальное смещение (прогиб) свободного конца балки ($x = l$)

$$\Delta z = \frac{F_y l^3}{3EI}.$$

Соответственно для консольных балок прямоугольного и круглого сечения

$$\Delta z = \frac{4F_y l^3}{Ea^3 b} \text{ и } \Delta z = \frac{4F_y l^3}{3E\pi r^4}.$$

При приложении к консольной балке длиной l распределенной силы $F = Wl$, где W — удельная сила, равная F/l, и при граничных условиях $z(x = l) = 0$:

$$z(x) = -\frac{W}{24EI}(x^4 - 4l^3 + 3l^4).$$

Максимальное смещение свободного конца балки ($x = 0$):

$$\Delta z = \frac{Wl^4}{8EI}.$$

Соответственно для балок прямоугольного и круглого сечения:

$$\Delta z = \frac{3Wl^4}{2Ea^3 b} = \frac{3Fl^3}{2Ea^3 b} \text{ и } \Delta z = \frac{4Wl^4}{3E\pi r^4} = \frac{4Fl^3}{3E\pi r^4}.$$

Примером распределенной силы может служить инерционная сила, действующая на балку при ускорении g. Для балки прямоугольного сечения

$$F = V\rho g = abl\rho g,$$

где V — объем балки; ρ — плотность материала; ρV — масса балки.

Тогда максимальное смещение конца такой балки, при отсутствии прикрепленной массы

$$\Delta z = \frac{3l^4 \rho g}{2Ea^2}.$$

Следует обратить внимание, что при этом ширина балки не играет никакой роли.

Другим важным примером распределенной силы применительно к микро- и наносенсорным устройствам может служить сила тяжести массы M, равномерно распределенной по поверхности балки, например, массы молекул, адсорбированных на внешней поверхности балки: $F = Mg_0$, где g_0 — ускорение силы тяжести. Максимальный прогиб такой балки на ее конце $\Delta z = \dfrac{3l^3 Mg_0}{2Ea^3 b}$. При просвете между балкой и нижележащей плоскостью h_0 максимальное смещение конца балки не может превышать эту величину.

Связь прогиба балок Δz с действующей силой F может быть также описана через коэффициент упругости пружины, или поперечную жесткость балки k_z ($F = k_z \Delta z$). Величина k_z определяется, в первую очередь, геометрией (длиной l и моментом инерции сечения I) балки, а также модулем упругости материала:

$$k_z = \frac{F}{\Delta z} = \frac{3EI}{(l - \Delta l)^3},$$

где Δl — удаление точки приложения силы от свободного конца балки. При приложении силы к свободному концу балки $\Delta l = 0$. Соответственно для балок прямоугольного и круглого сечения:

$$k_z = \frac{Ea^3 b}{4(l - \Delta l)^3} \text{ и } k_z = \frac{3E\pi r^4}{4(l - \Delta l)^3}.$$

Если распределенная сила приложена к консольной балке на часть ее длины от свободного конца l_p, то ее жесткость может быть рассчитана по соотношению [44]

$$k_z = \frac{E^* ba^3}{3l^3}\left(\frac{3}{8 - 6\lambda + \lambda^3}\right),$$

где $\lambda = l_p/l$; E^* — эффективный модуль упругости, равный E материала балки при $a \approx b$ и $E/(1 - \nu^2)$ при $b > 5a$, ν — коэффициент Пуассона.

При продольном кручении балки под действием крутящего момента $M(x)$ упругость консольной балки характеризуется двумя упругими константами:

$$k_{z\theta} = \frac{M(x)}{\Delta z} = \frac{Ea^3 b}{6(l - \Delta l)^3} \text{ и } k_\theta = \frac{M}{\Delta\theta} = \frac{Ea^3 b}{12(l - \Delta l)^3},$$

где Δz — прогиб балки по оси z; $\Delta\theta$ — поворот балки относительно малой оси.

При кручении консольной балки крутящим моментом T вдоль главной оси x максимальный угол

закрутки свободного конца балки $\Delta\varphi$ определяется выражением

$$\Delta\varphi = \frac{Tl}{CGa^3 b},$$

где C — константа, зависящая от отношения a/b и изменяющаяся от 0,1406 до 0,333 при изменении этого отношения от 1 до ∞. Упругая константа при этом равна

$$k_\varphi = \frac{T}{\Delta\varphi} = \frac{Ea^3 b}{6(1+\nu)(l-\Delta l)^3},$$

где ν — коэффициент Пуассона материала балки.

Для *жестко закрепленной по обоим концам балки (мостиковой структуры) прямоугольного сечения* при аналогичных размерах и силе, действующей на середину балки между опорами,

$$\Delta z = \frac{Fl^3}{32Ea^3 b} \text{ и } k_z = \frac{32Ea^3 b}{l^3}.$$

Для *тонких мембран* применение классических методов анализа с использованием уравнений движения, как в случае балок, требует определения координат пластины по осям x и y с учетом всех сдвиговых и изгибающих сил, что приводит к системе шести уравнений с шестью неизвестными. Кроме того, эмпирически установлено, что расчетные данные при этом плохо согласуются с экспериментально определенными. Поэтому на практике используется упрощенный подход, в котором сначала определяется соотношение между прогибом мембраны в центре w_0 и приложенным давлением p. Для квадратной мембраны толщиной a и шириной b, закрепленной по периметру, это соотношение имеет вид

$$p(w_0) = C_1 \frac{a\sigma}{b^2} w_0 + C_2 \frac{aE}{d^4} w_0^3,$$

где $C_1 = 3{,}4$, а C_2 — константа, зависящая от коэффициента Пуассона материала мембраны (изменяется от 2 до 3,4 при изменении коэффициента Пуассона от 0 до 0,5); σ — напряжение в мембране; E — модуль упругости материала. При известном w_0 прогиб мембраны в любой точке с координатами x и y может быть рассчитан по уравнению

$$w(x, y) = \left(w_0 + w_1 \frac{x^2+y^2}{b^2} + w_2 \frac{x^2 y^2}{b^4} \right) \times$$
$$\times \cos\left(\frac{\pi x}{2b}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{2b}\right),$$

причем $w_1/w_0 = 0{,}4$; $w_2/w_0 \approx 1{,}1$. Для точных расчетов поведения мембран при статических воздействиях обычно используют численное моделирование, в частности, метод конечных разностей [42].

На поведение чувствительных механических элементов, особенно в наномасштабе, большое влияние может оказывать действие статических объемных и поверхностных сил, возникающих при формировании таких элементов, а также при адсорбции и/или сорбции веществ окружающей среды и проявлении других эффектов (рис. 3, *а* и *б* соответственно) [8, 44—47].

Объемные (внутренние, или остаточные) напряжения в наноразмерных упругих элементах, возникающие при их формировании в виде градиента напряжения $\Delta\sigma$ по толщине и достигающие значений порядка нескольких МПа/мкм, вызывают самопроизвольный прогиб таких элементов — отклонение их нейтральной оси от ее равновесного положения в ненапряженном состоянии. Максимальное значение такого отклонения для консольной балки оценивается по формуле [46, 47]

$$\Delta z_m = \frac{l^3}{2E}\Delta\sigma.$$

К поверхностным силам относится разность растягивающего σ_s^+ и сжимающего σ_s^- поверхностного натяжения на верхней и нижней поверхностях упругих элементов $\Delta\sigma_s$, имеющей размерность Н/м. В случае свободной тонкой пластины произвольной формы действие $\Delta\sigma_s$ вызывает ее равномерный изгиб, радиус кривизны которого с вогнутостью со стороны действия сжимающей силы определяется формулой

$$R = \frac{Ea^2}{6(1-\nu)\Delta\sigma},$$

что эквивалентно действию на свободные края пластины изгибающего момента на единицу длины $M = \Delta\sigma_s a/2$. При этом прогиб напряженной пластины от исходного ненапряженного состояния как функция координат в плоскости (x, y)

$$w(x, y) = \Omega(x^2 + y^2),$$

где $\Omega = \dfrac{3\Delta\sigma_s(1-\nu)}{Ea^2}$ — однородная постоянная кривизна пластины, равная $\frac{1}{2}R^{-1}$ [44].

Для консольной балки прямоугольного сечения эти соотношения применимы при $l/b \gg 1$ и координате y, удаленной от боковых краев балки $y = b/2$, т. е. близкой к 0. В этом случае при $x = l$ и $y = 0$ от-

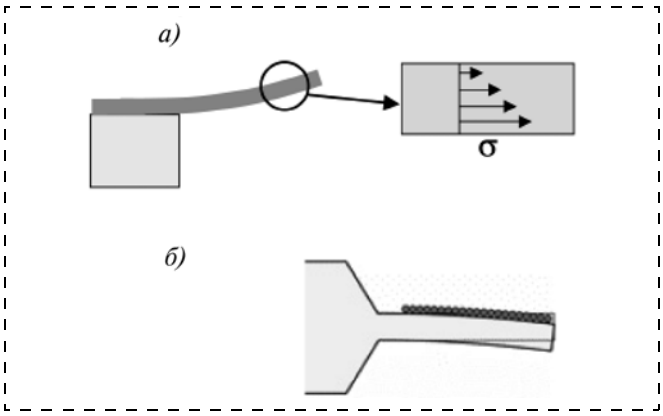

Рис. 3. Схематическое изображение изгиба консольной балки с неравномерным распределением механического напряжения по толщине (*а*) и сжимающим слоем на верхней поверхности (*б*) [8]

клонение конца балки при воздействии разности поверхностного натяжения $\Delta\sigma_s$ [44, 45]

$$\Delta z = \frac{3l^2(1-\nu)}{Ea^2}\Delta\sigma.$$

Как указывалось выше, при описании поведения чувствительных механических элементов в квазистатических условиях в упругой постановке коэффициенты жесткости, или модули упругости материала, а соответственно, и прогиб или смещение элементов рассматриваются независимыми от временных условий нагружения, хотя очевидно, что в реальных условиях при длительных воздействиях и проявлении вязкоупругости материала необходимо учитывать временные эффекты ползучести и релаксации напряжения [48].

2.2. Динамическое поведение

Большинство разрабатываемых электромеханических преобразователей современных сенсорных МЭМС и НЭМС работают как резонаторы, в чувствительных механических (балочных) элементах которых возбуждаются колебания основной изгибной моды. Физической основой действия таких элементов в динамических условиях является смещение (сдвиг по фазе или амплитуде) фундаментальной, собственной, характерной или резонансной частоты при каком-либо воздействии на них или изменении массы [40—43, 77, 78]. Как показано ниже, резонансная частота механических чувствительных элементов масштабируется как $1/L$, и при переходе на наномасштаб ее значение и чувствительность к различным воздействиям должны резко возрастать.

Для описания динамического поведения механических резонаторов используются различные подходы. В наиболее простом из них механический резонатор рассматривается как одномерный линейный гармонический, слабо демпфирующий, т. е. проявляющий слабые вязкоупругие свойства, осциллятор [48]. Он представляет собой некоторую эффективную массу $m_{эфф}$, связанную с упругой пружиной с эффективной жесткостью $k_{эфф}$, способную совершать свободные затухающие или вынужденные гармонические колебания с частичным рассеиванием (диссипацией) упругой энергии за счет внешнего или внутреннего трения с эффективным коэффициентом $\varsigma_{эфф}$. Кинетика свободных колебаний, приводящих к возврату одномерного линейного гармонического демпфирующего осциллятора в равновесное состояние после вывода его из равновесия (задания некоторого начального смещения $z(0)$), описывается дифференциальным уравнением второго порядка:

$$m_{эфф}\frac{d^2z}{dt^2} + \varsigma_{эфф}\frac{dz}{dt} + k_{эфф}z = 0.$$

Решение этого уравнения в терминах комплексных чисел при малом $\varsigma_{эфф}$ описывает затухающие гармонические колебания осциллятора с собственной (фундаментальной) круговой частотой $\omega_0 = 2\pi f_0$ (рад./с), где f_0 — периодическая частота (Гц):

$$z(t) = z(0)\exp\left[\frac{-\varsigma_{эфф}t}{2m_{эфф}}\right]\cos\omega t.$$

Уменьшение амплитуды этих колебаний подчиняется экспоненциальному закону: $z(t) = z(0)\exp\left[\frac{-\varsigma_{эфф}t}{2m_{эфф}}\right]$, причем коэффициент $\frac{\varsigma_{эфф}}{2m_{эфф}} = \alpha$ называется коэффициентом затухания, а собственная частота связана с $m_{эфф}$ и $k_{эфф}$ соотношением

$$\omega_0 = \left[\frac{k_{эфф}}{m_{эфф}} - \left(\frac{\varsigma_{эфф}}{2m_{эфф}}\right)^2\right]^{1/2}.$$

При $\varsigma_{эфф} \to 0$ $\omega_0 = \left[\frac{k_{эфф}}{m_{эфф}}\right]^{1/2}$ или $\omega_0^2 = \frac{k_{эфф}}{m_{эфф}}$.

При этом

$$\alpha = \frac{\varsigma_{эфф}\omega_0^2}{2k_{эфф}} = \frac{\varsigma_{эфф}}{2m_{эфф}}.$$

Натуральный логарифм отношения двух соседних амплитуд соответствует логарифмическому декременту затухания Δ, который связан с α соотношением $\Delta = \frac{2\pi a}{\omega_0}$.

При приложении к гармоническому осциллятору внешней силы, изменяющейся по периодическому закону с круговой частотой ω: $F_0\cos\omega t$, его гармонические колебания описываются уравнением

$$z(t) = \frac{F_0\cos(\omega t - \varphi)}{[(k_{эфф} - m_{эфф}\omega)^2 + \omega^2\varsigma_{эфф}^2]^{1/2}},$$

где φ — угол сдвига фаз между силой и смещением:

$$\mathrm{tg}\varphi = \frac{\omega\varsigma_{эфф}}{k_{эфф} - m_{эфф}\omega^2}.$$

Показателем демпфирующей способности осциллятора при этом является тангенс угла потерь $\mathrm{tg}\delta$, где $\delta = \frac{\pi}{2} - \varphi$, связанный с показателями затухания свободных колебаний известными соотношениями $\mathrm{tg}\delta = \Delta/\pi = 2\alpha/\omega_0$. При равенстве частоты приложения внешней силы частоте собственных (свободных) колебаний $\left(\omega = \omega_0 = \left[\frac{k_{эфф}}{m_{эфф}}\right]^{1/2}\right)$ наблюдается резкое возрастание амплитуды (резонанс) до значения $z_0 = \frac{F_0}{\omega_0\varsigma_{эфф}}$.

Для колеблющихся консольных балок и мостиковых структур соотношения, полученные для одномерного линейного гармонического демпфирующего осциллятора, применимы вблизи резонансной частоты при правильной оценке их эффективной массы и жесткости с учетом соответствующей моды

колебаний. Такие балки при приложении в трансверсальном направлении гармонической нагрузки ведут себя аналогично натянутой струне, и формы, которые они могут принимать при колебаниях в условиях резонанса, т. е. моды их колебаний, аналитически описываются волновым уравнением [42]:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{m_{\text{эфф}}}{l}\frac{\partial^2 z}{\partial t^2}.$$

Это уравнение описывает кривизну балки как функцию времени, и его решение в координатах (z, x) имеет вид

$$z(x) = [A_1\sin(Kx) + A_2\cos(Kx) + A_3\sinh(Kx) + \\ + A_4\cosh(Kx)]\cos(\omega t + \theta),$$

где A_n — константы, определяемые граничными условиями; $K^4 = \frac{\omega m_{\text{эфф}}}{EIl}$. Это решение показывает, что балки при резонансе осциллируют по синусоиде вдоль оси x, а их форма определяется граничными условиями. При этом первая и основная мода колебаний балки соответствует форме, которую она принимает при квазистатическом изгибе, т. е. при нулевой частоте и амплитудном значении прикладываемой нагрузки.

Для консольной балки $m_{\text{эфф}} = 3m/C_n^4$, где C_n — константа, равная для первой моды ($n = 1$) колебаний 1,875, для второй ($n = 2$) — 4,694 и т. д. Следовательно, при ее прямоугольном сечении ab и длине l при первой моде колебаний $m_{\text{эфф}} \approx 0{,}23m$. Для аналогичной мостиковой структуры $m_{\text{эфф}} \approx 0{,}735m$. В этих соотношениях m — истинная масса балки, равная $abl\rho$ (abl — объем балки, ρ — плотность материала). Эффективная жесткость колеблющихся балок равна их коэффициентам упругости, рассчитываемым при статическом изгибе. Для консольной и закрепленной балок эффективная жесткость равна $k_{\text{эфф}} = \frac{Ea^3b}{4l^3}$ и $k_{\text{эфф}} = \frac{32Ea^3b}{l^3}$ соответственно. С учетом $m_{\text{эфф}}$ и $k_{\text{эфф}}$ этих балок их резонансная круговая частота может быть с достаточно высокой точностью рассчитана по соотношению

$$\omega_0 = 2\pi\left(\beta\frac{E}{\rho}\right)^{1/2}\frac{b}{l^2},$$

где β — коэффициент, близкий к 1. Резонансная периодическая частота заданной моды колебаний рассчитывается по соотношению [17]

$$f_{0n} = \frac{C_n^2}{2\pi}\sqrt{\frac{k_{\text{эфф}}}{3m}} = \frac{C_n^2}{4\sqrt{3\pi}}\sqrt{\frac{E}{\rho}}\frac{b}{l^2}.$$

Из этих соотношений следует, что резонансная частота механических чувствительных элементов масштабируется как $1/l$ и при переходе на наномасштаб достигает очень больших значений. Так, мостиковая структура из кремния шириной 50 нм, толщиной 80 нм и длиной 780 нм при $m_{\text{эфф}} = 5{,}3 \cdot 10^{-15}$ г и $k_{\text{эфф}} = 290$ Н/м имеет ω_0 порядка 1 ГГц, а консольная балка прямоугольного сечения из поликристаллического кремния длиной 10 нм и толщиной 1 нм имеет расчетную резонансную частоту первой моды колебаний порядка 20—30 ГГц при амплитуде в резонансе 10^{-3}—10^{-6} нм [48, 52].

Вблизи резонансного пика частотная зависимость амплитуды вынужденных колебаний балок как одномерных линейных, слабо демпфирующих гармонических осцилляторов при отсутствии внешнего трения (вязкости среды, т. е. в вакууме) описывается известным соотношением [49]:

$$A(\omega) = \frac{A_0\omega_{0,n}^2}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_{0,n}^2)^2 + \frac{\omega^2\omega_{0,n}^2}{Q_n^2}}},$$

где A_0 — амплитуда колебаний при нулевой частоте; ω и $\omega_{0,n}$ — фактическая и резонансная (для моды n при отсутствии диссипации энергии) круговая частота соответственно; Q_n — добротность осциллятора (Q-фактор) для моды n. Величина Q является, наряду с собственной или резонансной частотой, важнейшим параметром осциллятора, равным отношению запасенной упругой энергии за один цикл колебаний ($E_з$) к рассеиваемой энергии ($E_р$) или к средним за цикл потерям мощности (P/ω):

$$Q = \frac{E_з}{E_р} = \frac{\omega E_з}{P}.$$

При этом запасенная энергия в механическом осцилляторе равна половине произведения амплитудных значений силы и деформации, а рассеиваемая энергия в виде теплоты в единице объема определяется выражением

$$\Delta W_р = \frac{\pi\omega\varsigma_{\text{эфф}}F_0^2}{(k_{\text{эфф}} - m_{\text{эфф}}\omega^2)^2 + \omega^2\varsigma_{\text{эфф}}^2}.$$

Величина Q-фактора определяет избирательную и разрешающую способность осциллятора: чем больше Q, тем выше резонансный отклик системы по сравнению с нерезонансным и тем большее различие по величине откликов на одинаковые по амплитуде воздействия с близкими частотами. При вынужденных колебаниях осциллятора Q-фактор экспериментально определяется по отношению резонансной частоты ω_0 к ширине резонансного пика по частоте на уровне убывания его высоты в $\sqrt{2}$ раза ($\Delta\omega$): $Q = \omega_0/\Delta\omega$ (рис. 4).

Величина Q зависит от механизма и интенсивности рассеяния энергии в процессе колебаний и связана с основными коэффициентами уравнения движения осциллятора и параметрами механических потерь простыми соотношениями:

$$Q = \frac{\sqrt{m_{\text{эфф}}k_{\text{эфф}}}}{\varsigma_{\text{эфф}}} = \frac{\omega_0 m_{\text{эфф}}}{\varsigma_{\text{эфф}}} = \frac{k_{\text{эфф}}}{\varsigma_{\text{эфф}}} \text{ и}$$

$$Q = \frac{1}{\text{tg}\delta} = \frac{\omega_0}{2\alpha} = \frac{\pi}{\Delta}.$$

При проявлении нескольких источников диссипации энергии в колебательной системе складыва-

ются обратные величины Q-фактора: $\frac{1}{Q_\Sigma} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{Q_i}$. При этом в случае многомодовых колебаний каждая из мод обладает собственным Q-фактором.

При анализе внутренних диссипативных потерь с использованием классической трехэлементной модели вязкоупругого тела (модели Зинера), состоящей из модели Максвелла (последовательного соединения пружины и демпфера), параллельно соединенной со второй пружиной [48], Q-фактор обратно пропорционален тангенсу угла потерь (tgδ) материала балки и является функцией частоты:

$$\mathrm{tg}\delta = Q^{-1} = \frac{\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}\frac{E_u - E_r}{E_r},$$

где τ — среднее время релаксации, равное отношению коэффициента вязкости демпфера к коэффициентам упругости пружин; E_u, E_r — нерелаксированный и релаксированный модуль упругости соответственно.

Q-фактор колебательных систем на основе жестких материалов обычно очень большой вследствие высоких частот и малых времен релаксации и зависит преимущественно от геометрии балок и окружающей среды. Так, экспериментальные исследования зависимости Q-фактора консольных балок из поликристаллического кремния от их длины и резонансной частоты, варьируемых в пределах от 150 до 75 мкм и от 145 до 560 кГц соответственно, при постоянной ширине (15 мкм) и толщине (2 мкм) показали [18], что при малом атмосферном давлении (0,2 Па) Q-фактор для самой длинной балки с самой низкой резонансной частотой составлял значение больше 38 000, уменьшаясь до 15 000 при уменьшении длины и возрастании резонансной частоты балки. При повышенном давлении воздуха (40 Па) Q-фактор для самой длинной балки составил 6000 и возрос до 16 000 при уменьшении длины балки до 75 мкм и возрастании резонансной частоты до 560 кГц.

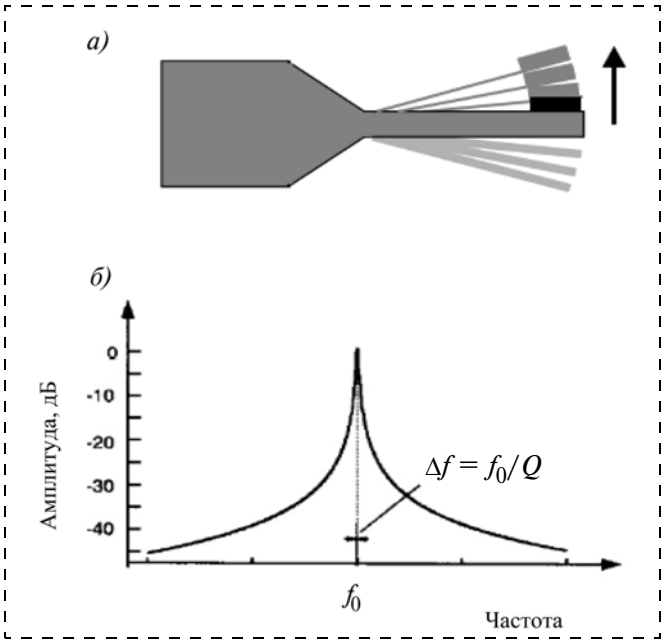

Рис. 4. Схематическое изображение вибрирующей консольной балки (*а*) и амплитуды колебаний как функция частоты (*б*) [8]

Таким образом, окружающая среда с высокой плотностью ρ и вязкостью η может оказывать определяющее влияние как на резонансную частоту, так и на Q-фактор консольных балок в наномасштабе. Теоретически влияние только плотности невязкой среды на $\omega_{R,n}$ (по сравнению с резонансной частотой в вакууме) и Q описывается следующими соотношениями [49]:

$$\omega_{R,n} = \omega_{0,n}\left[1 + \frac{\pi\rho b^2}{4\mu}\right]^{-1/2} \text{ и } Q_n = \frac{4m}{\pi\rho b^2},$$

где $m = \rho_б ba$ — масса балки на единицу длины; $\rho_б$ — плотность материала балки.

Влияние вязкости среды на $\omega_{R,n}$ и Q-фактор свободной консольной балки при вынужденных колебаниях учитывается при этом через гидродинамическую функцию Γ(ω), определяющую изменение Q в вязкой среде по сравнению с вакуумом. Важнейшим масштабным фактором при этом является ширина балки, которая значительно меньше ее длины. Функцию Γ(ω) удалось определить только для консольной балки круглого сечения [50]:

$$\Gamma_k = 1 + \frac{4iK_1(i\sqrt{i\mathrm{Re}})}{\sqrt{i\mathrm{Re}}\,K_0(-i\sqrt{i\mathrm{Re}})}.$$

Здесь K_0 и K_1 — модифицированные Бесселевы функции 3-го типа; Re — число Рейнольдса: $\mathrm{Re} = \rho\omega d^2/4\eta$, где ρ и η — плотность и вязкость среды соответственно, d — диаметр балки.

Для тонкой консольной балки прямоугольного поперечного сечения, ширина b которой значительно больше толщины a, вводится поправочный коэффициент по отношению к цилиндрической балке Ω(ω), который представляет собой комплексную рациональную функцию lgRe: $\Omega(\omega) = \Omega_r(\omega) + i\Omega_i(\omega)$, удовлетворяющую предельным условиям: $\Omega(\omega) \to 1$ при $\mathrm{Re} \to 0$ и $\mathrm{Re} \to \infty$ и рассчитываемую численным нелинейным методом наименьших квадратов. Соответственно $\Gamma_n(\omega) = \Omega(\omega)\Gamma_k = \Gamma_r(\omega) + i\Gamma_i(\omega)$. Значения $\omega_{R,n}$ и Q_n определяются при этом по соотношениям

$$\omega_{R,n} = \omega_{0,n}\left[1 + \frac{\pi\rho b^2}{4\mu}\Gamma_r(\omega_{R,n})\right]^{-1/2} \text{ и}$$

$$Q_n = \frac{\frac{4\mu}{\pi\rho b^2} + \Gamma_r(\omega_{R,n})}{\Gamma_i(\omega_{R,n})}$$

соответственно. Эти соотношения имеют большое значение как для расчета поведения балочных резонаторов в вязких средах (в том числе в воздухе), так и при градуировке кантилеверов СТМ и АСМ или измерении вязкости среды с их помощью.

Балочные чувствительные элементы сенсорных устройств обычно расположены на достаточно близком расстоянии h_0 от подложки и работают в воздушной среде. Поэтому важную роль в их высокочастотных колебаниях играет так называемое демпфирование за счет выдавливания (перетекания) воздуха из промежутка между балкой и подложкой (sqeeze damping) [51—54]. Эффективный коэффици-

ент демпфирования $\varsigma_{эфф}$ при первой моде колебаний, малом безразмерном параметре $\sigma = \frac{12\eta b^2}{ph_0^2}\omega$ и частоте, значительно меньшей критической $\omega_c = \frac{\pi^2 h_0^2 p}{12\eta b^2}$, рассчитывается по соотношению:

$$\varsigma_{эфф} = \frac{96\eta l b^3}{\pi^4 h_0^3},$$

где η — вязкость среды, p — номинальное давление.

2. Актюаторы

Механические смещения чувствительных элементов в статических и динамических условиях могут задаваться (активироваться) элементами, работающими на различных физических принципах электромеханического преобразования: электростатического притяжения заряженных пластин (емкостные актюаторы), термического расширения (термические биметаллические или биморфные актюаторы), пьезоэлектрического эффекта, эффектов электро- и магнитострикции (соответственно пьезоэлектрические, электро- и магнитострикционные актюаторы) и др. Применительно к элементам микро- и, особенно, наносенсорных преобразователей наиболее перспективными являются первые два типа актюаторов. Другие типы или не исследованы на наномасштабе, или их использование в наносистемах встречает значительные технические и технологические трудности.

2.1. Емкостные актюаторы

Физической основой действия этих элементов является сила притяжения (электростатическая сила) F_e между электродами, возникающая при приложении к ним разности потенциалов (напряжения) V и накопления элементарных зарядов q противоположного знака на катоде и аноде (электрической емкости) с возникновением, соответственно, электрического поля напряженностью E_e [42, 55—68]. Электростатическая сила, способная вызывать смещение электродов, может создаваться приложением как постоянного, так и переменного (синусоидального) напряжения, поэтому емкостные актюаторы могут оказывать как квазистатическое, так и динамическое воздействие на чувствительные механические элементы электромеханических преобразователей. Описанию особенностей поведения емкостных актюаторов при таких воздействиях посвящен данный раздел.

А. Статическое воздействие. В микро- и наноэлектромеханических преобразователях поверхности упругих элементов (балок или мембран) и подложки, на которых формируются катод и анод электростатического емкостного актюатора, значительно больше расстояния между ними, поэтому в простейшем случае к ним может быть применена одномерная модель плоского конденсатора с бесконечными плоскопараллельными электродами и малым расстоянием между ними. При приложении к такому конденсатору постоянного напряжения V равновесная нормальная сила притяжения между электродами длиной l, шириной b, площадью поверхности $A = lb$ и расстоянием между ними d определяется соотношениями

$$F_e = \frac{dU}{dz} = \frac{1}{2}\varepsilon\varepsilon_0 lb\frac{V^2}{d^2},$$

а тангенциальная, или поперечная, — соотношением

$$F_{e,t} = \frac{1}{2}\varepsilon\varepsilon_0 b\frac{V^2}{d},$$

где $U = \frac{1}{2}CV^2$ и $C = \frac{q}{V} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0 A}{d}$ — потенциальная энергия и емкость конденсатора соответственно; ε и ε_0 — относительная диэлектрическая проницаемость среды (для воздуха $\varepsilon = 1$ Ф/м) и вакуума ($\varepsilon_0 = 8{,}8542 \cdot 10^{-12}$ Ф/м) соответственно. Из этих соотношений следуют две очень важных особенности емкостных актюаторов: нелинейность между нормальной силой, прикладываемым напряжением и расстоянием или смещением, а также равенство нулю линейного масштабного коэффициента $[L^0]$, т. е. проявление масштабной инвариантности таких актюаторов — независимости величины электростатической силы от пропорционального изменения их геометрических параметров при заданном напряжении и диэлектрических свойствах среды [56]. При этом видно, что хотя для возникновения заметной электростатической силы требуется высокая напряженность поля, она может достаточно легко и безопасно создаваться в микро- и особенно в наномасштабе сравнительно малым прикладываемым напряжением V благодаря очень малым расстояниям между пластинами ($E_e = V/d$) и высокой устойчивости малых прослоек воздуха и других диэлектрических сред к электрическому пробою. Так, если в макромасштабе электрическая прочность сухого воздуха при комнатной температуре и атмосферном давлении составляет величину порядка 30 кВ/см, в микромасштабе (на расстояниях порядка 8 мкм) она может возрастать до 440 кВ/см [69].

Для обобщенного описания как статического, так и динамического поведения емкостных плоскопараллельных микро- и наноактюаторов упругих механических элементов при изменяемом расстоянии между электродами используется их одномерная модель с подвижной и неподвижной пластинами, первая из которых поддерживается линейным одномер-

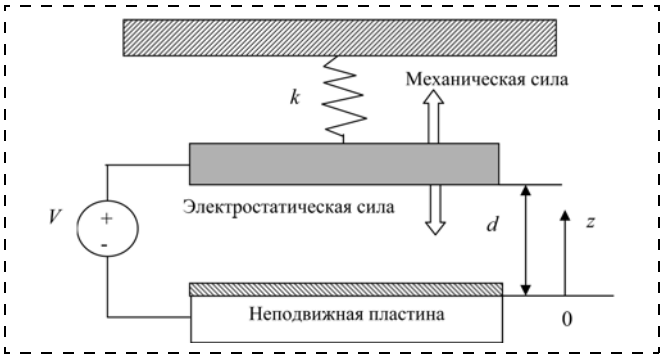

Рис. 5. Одномерная модель упругого механического элемента с микроактюатором в виде плоскопараллельного конденсатора

ным упругим элементом. Схема такой модели приведена на рис. 5 [56].

Исходное расстояние между электродами d соответствует равенству нулю механической упругой и электростатической сил. Приложение напряжения V приводит к смещению подвижного электрода на величину z. Изменяемое расстояние между подвижным и неподвижным электродами при этом равно разности $d - z$. Действие нормальной электростатической силы

$$F_e = \frac{1}{2}\varepsilon\varepsilon_0 A \frac{V^2}{(d-z)^2},$$

или при $z \ll d$

$$F_e \approx \frac{1}{2}\frac{\varepsilon\varepsilon_0 A V^2}{d^2}\left(1 + 2\frac{z}{d}\right)$$

вызывает возникновение равной ей и обратной по направлению упругой силы $F_y = k_{эфф}z$, где $k_{эфф}$ — коэффициент упругости пружины. Из условия равенства этих сил можно установить связь между напряжением и расстоянием между электродами:

$$V(z) = \sqrt{\frac{2k_{эфф}}{\varepsilon\varepsilon_0 A}(z_0 - d)^2 z}.$$

Это уравнение описывает кривую с максимумом, обусловленным тем, что F_e пропорциональна $1/(d - z)^2$, а F_y пропорциональна z. Это приводит к так называемому эффекту нестабильности (залипания) электродов. При изменении напряжения ниже максимального $V_{max}(d - z)$ наблюдается стабильное нелинейное изменение расстояния между электродами до некоторого минимального его значения $(d - z)_{min}$, а после достижения экстремальных значений V и $d - z$ система претерпевает бифуркацию (теряет устойчивость), и пластины слипаются. Простые расчеты показывают, что $(d - z)_{min} = \frac{2}{3}d$, а $V_{max}(d - z)$ определяется геометрией и упругими характеристиками механического элемента, а также диэлектрической характеристикой среды:

$$V_{max}(d - z) = \sqrt{\frac{8k_{эфф}}{27\varepsilon\varepsilon_0 A}z^3}.$$

Так, для кремниевой балки с площадью поверхности $A = 1{,}6 \cdot 10^{-9}$ м^2 и $k_{эфф} = 0{,}17$ Н/м при начальном расстоянии между электродами $d = 3$ мкм $V(z)_{max} = 9{,}8$ В. Минимальное значение $d - z$ при этом равно 2 мкм.

Б. Динамическое воздействие

В качестве уравнения движения при описании динамического поведения одномерной линейной модели емкостного актюатора в виде консольной балки, сочетающей плоскопараллельный конденсатор с площадью пластин A и упругий элемент (см. рис. 5), обычно используется периодическое дифференциальное уравнение, известное как уравнение Мэтью [56, 70—72]. При приложении периодического напряжения $V(t) = V_0\cos(\omega t)$ и учете только первой моды колебаний это уравнение записывается в виде

$$z'' + cz' + (a - q\cos(2\tau)z = u_f(\tau),$$

где штрихами обозначаются соответствующие производные смещения по приведенному времени $\tau = \omega t$; c — малый коэффициент демпфирования, обусловленного как трением о воздух, так и структурными (внутренними) потерями механического элемента; $a = \frac{\omega_0^2}{\omega^2} - \frac{\varepsilon\varepsilon_0 A V_0^2}{m_{эфф}d^3\omega^2}$ ($\omega_0 = \left[\frac{k_{эфф}}{m_{эфф}}\right]^{1/2}$ — резонансная частота упругого элемента, ω — частота прикладываемого электрического поля); коэффициент $q = \frac{\varepsilon\varepsilon_0 A V_0^2}{4m_{эфф}d^3\omega^2}$; $u_f(\tau) = qd\cos^2(\tau)$.

При малой амплитуде прикладываемого напряжения V_0 и равенстве нулю коэффициента q уравнение Мэтью превращается в простое дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\ddot{z} + 2\xi\omega_0\dot{z} + \left(\omega_0^2 - \frac{1}{2}\omega_e V_0^2\right)z = u(t),$$

где ξ — коэффициент демпфирования; ω_0 — собственная частота колебаний упругого элемента (механического резонанса); ω_e — так называемая частота "электростатического резонанса", ответственная за сдвиг эффективной частоты резонанса модели в целом: $\omega_{эфф} = \omega_0^2 - \frac{1}{2}\omega_e V_0^2$.

Так как электростатическая сила имеет квадратичную зависимость от прикладываемого напряжения, то для разделения параметрических и гармонических эффектов при описании динамического поведения одномерной линейной модели электростатического актюатора с помощью уравнения Мэтью используют квадратный корень из прикладываемого синусоидального напряжения $V(t) = [V_0\cos(\omega t)]^{1/2}$. Решение уравнения Мэтью при этом позволяет рассчитывать области стабильного и нестабильного поведения колебательной системы. Внутри нестабильной области, как предсказывает линейная форма этого уравнения, амплитуда колебаний должна расти неограниченно, т. е. до слипания электродов. Однако проявление нелинейных эффектов может переводить систему в состояние установившихся колебаний.

Уравнение Мэтью, даже в линейной форме, не решается аналитически и требует применения численных методов усреднения или возмущений. Экспериментальная проверка величины и скорости смещения конца кантилевера из допированного поликристаллического кремния (модуль упругости порядка 158 ГПа и плотность 2,8 г/см^3) размером 200 × 50 × 2 мкм с расстоянием между поверхностью балки и вторым неподвижным электродом порядка 2 мкм в вакууме, проведенная с помощью лазерного виброметра, показала, в первом приближении, применимость линейного уравнения Мэтью к описанию таких колебаний. Определенные экспериментально значения резонансной частоты ($f_0 = 2\pi/\omega_0 = 50{,}8$ кГц), коэффициента демпфирования ($\xi = 2{,}1 \cdot 10^{-4}$) и Q-фактора ($Q = 2200$), эффективной длины балки ($l_{эфф} = 160$ мкм) и частоты "элек-

тростатического резонанса" ($\omega_e^2 = 2{,}6 \cdot \mathbf{e}^8$ рад./В^2, где **e** — основание натурального логарифма) удовлетворительно согласуются с расчетными данными [55]. В настоящее время на практике при переходе от МЭМС к НЭМС вместо создания плоских электродов непосредственно из балки и подложки используют внешний стробирующий электрод в сочетании с балкой на одном чипе [73]. При этом емкость таких электродов находится параллельно паразитной емкости на чипе, которая может превышать первую на несколько десятичных порядков. Этот эффект должен резко снижать эффективность действия электростатических актюаторов при высоких частотах, хотя имеются сведения, что они способны надежно работать в НЭМС при частотах до 700 МГц [73—75].

На квазистатическое и динамическое поведение электростатических микро- и наноактюаторов в сочетании с упругим элементом при сравнительно малом расстоянии между электродами заметное влияние, помимо их нестабильности, могут оказывать все факторы, определяющие поведение упругого элемента, в первую очередь — температура, внутренние напряжения, адсорбционные эффекты, а также побочные электростатические эффекты, в частности, образование паразитных зарядов на межфазных границах электродов, снижающих напряженность поля между ними и требующих дополнительного компенсационного напряжения для обеспечения требуемого смещения с увеличением допустимого максимального напряжения. При этом компенсационное напряжение определяется соотношением $\Delta V = \frac{\sigma_p}{\varepsilon_d} d_d$, а допустимое напряжение — соотношением

$$V(d - z)_{\max} = \sqrt{\frac{2k_{\text{эфф}}}{3\varepsilon\varepsilon_0 A}\left(\frac{2}{3}d + \frac{d_d}{\varepsilon_d}\right)},$$

где σ_p — межфазный заряд; d_d — толщина межфазного слоя; ε_d — его относительная диэлектрическая постоянная.

Дополнительные взаимодействия между электродами за счет сил Ван-дер-Ваальса или Казимира могут также влиять на поведение электростатических микро- и наноактюаторов, однако при реально применяемых расстояниях между электродами порядка нескольких микрометров эти силы на несколько десятичных порядков меньше электростатических сил [76].

2.2. Термические (биметаллические, или диморфные) актюаторы

Принцип действия этих актюаторов основан на преобразовании энергии нагревания в механическую силу деформирования элемента, сочетающего два разнородных материала с различными термическими коэффициентами расширения при заданных теплоемкости и теплопроводности, обеспечивающих требуемое изменение температуры и, соответственно, требуемое время отклика. Это делает их простой альтернативой актюаторам для МЭМС и НЭМС, работающим на других принципах. Уменьшение масштаба облегчает достижение нужных эффектов в термических актюаторах, хотя теплообмен в микро- и наномасштабе в них может создавать определенные проблемы. Однако сочетание способности таких актюаторов создавать значительные усилия и смещения при сравнительно малых разностях температур обусловливает большой интерес, проявляемый к ним [16, 42, 78]. Они представляют собой обычный упругий элемент, балка которого, состоящая из двух тонких слоев разнородных материалов, например, допированного кремния и его диэлектрических производных (оксидов или нитридов) или кремния и благородных металлов (золота, платины), одновременно выполняет функцию упругого элемента и актюатора. В случае консольной балки длиной l, толщиной a и шириной b смещение ее конца (прогиб) Δz при изменении температуры на величину ΔT и равномерном распределении теплоты определяется соотношением [42]

$$\Delta z = \frac{3l^2(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T(a_1 + a_2)}{7(a_1 + a_2)^2 - 2a_1a_2 + \frac{\chi b_1 a_1^3}{b_2 a_2} + \frac{b_2 a_2^3}{\chi b_1 a_1}},$$

где α — термический коэффициент линейного расширения; $\chi = E_1/E_2$. Индекс 1 относится к слою с меньшим значением термического коэффициента расширения α, индекс 2 — с большим. Радиус кривизны балки определяется по нейтральной оси, лежащей на границе раздела слоев, причем при $\alpha_1 > \alpha_2$ слой 1 располагается с вогнутой стороны, а слой 2 — с выпуклой. Из этого соотношения видно, что вследствие достаточно малой разности термических коэффициентов и модулей упругости используемых материалов основные возможности в получения заданного смещения конца балки лежат в варьировании ее геометрических параметров, в первую очередь, длины и толщины. Анализ этого уравнения показывает, что максимальная величина z наблюдается при одинаковых минимальных значениях толщины a и ширины b обоих слоев и максимальной длине балки. При $a_1 = a_2 = b_1 = b_2 = a$ уравнение принимает более простой вид:

$$\Delta z = \frac{3l^2(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T}{2a\left(5 + \chi + \frac{1}{\chi}\right)}.$$

Развиваемое при этом усилие на ее конце может быть рассчитано через коэффициент жесткости $k_z = \frac{E^* a^3 b}{4l^3}$:

$$F_T = k_z \Delta z = \frac{3(E_1 + E_2)a^2 b(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T}{8l\left(5 + \chi + \frac{1}{2}\right)},$$

где E^* — эффективный модуль упругости двухслойной балки, который в первом приближении рассчитан по простому правилу аддитивности с учетом долей толщины слоев в общей толщине

$$E^* = \varphi_1 E_1 + \varphi_2 E_2,$$

где $\varphi_1 = \dfrac{a_1}{a_1 + a_2}$ и $\varphi_2 = \dfrac{a_2}{a_1 + a_2}$. Из общего скейлингового (масштабного) анализа этого соотношения следует, что масштабный коэффициент термической упругой силы равен 2, т. е. изменение силы, при прочих заданных условиях, пропорционально квадрату произвольно выбранного линейного масштабного параметра L^2.

Аналогично эффективному модулю упругости двухслойной балки, без учета эффекта границы раздела между слоями, по правилу аддитивности могут быть рассчитаны и другие ее свойства по соответствующим свойствам слоев и их долям.

Очевидно, что при статических условиях работы для поддержания заданной температуры балки необходимы минимальные теплопотери. Наоборот, при динамических условиях необходима максимальная скорость теплоотвода, чтобы тепловая постоянная времени, соответствующая времени отклика $\tau_T = H/G$, где G и H — теплопроводность и теплоемкость структуры соответственно, не превышала периода колебаний. Если исключить конвективный теплообмен и учитывать только ИК излучение, то это время может быть определено по уравнению Стефана—Больцмана

$$mc_p \frac{\Delta T}{dt} = \sigma_d \varepsilon_m A(T^4 - T_0^4),$$

где m и c_p — масса балки и аддитивная удельная теплоемкость ее материалов соответственно; σ_d — константа, равная $5{,}67 \cdot 10^{-8}$ Вт/м^{2}К^4; ε_m — излучательная способность материала; A — площадь поверхности; T_0 — начальная температура. Расчеты показывают, что в наномасштабе можно получить тепловую постоянную времени в пределах 1пс $\leqslant \tau_T \leqslant$ 1нс, что позволит использовать тепловую активацию в наносистемах. Трудной проблемой при этом становится создание теплового импульса. Более перспективным по сравнению с нагревом за счет омического сопротивления представляется использование радиационного нагревания, например, за счет лазерных импульсов [7].

Важное значение при разработке и использовании термических биметаллических актюаторов, особенно при их работе в динамических условиях, имеет проблема их усталостной выносливости и долговечности, обусловленная частым перепадом температур и высоким уровнем возникающих напряжений и изгибных деформаций при наличии границы раздела между неоднородными материалами.

Выводы

Анализ соотношений между локализованной и распределенной силой и деформацией (смещением) чувствительных механических элементов сенсорных МЭМС и НЭМС в виде тонких консольных балок, мостиковых и мембранных структур в зависимости от их размеров и внешней среды в квазистатических и динамических условиях с использованием классических подходов теорий упругости и вязкоупругости показывает, что при линейном масштабном (скейлинговом) коэффициенте упругих сил, равном двум, переход в наномасштаб приводит к значительным изменениям поведения механических элементов. С одной стороны, это обеспечивает возможности резкого повышения их деформативности и резонансной частоты, а с другой — увеличивает влияние на них различных побочных эффектов, в частности, внутренних (объемных остаточных) напряжений и поверхностных сил. Анализ физических принципов действия емкостных и термических (биметаллических, или биморфных) актюаторов, соотношений между их электрическим стимулированием и механической реакцией, а также масштабных эффектов в них показывает потенциальную эффективность их применения в чувствительных механических элементах НЭМС.

Список литературы

1. **Миронов В.** Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера, 2004. 143 с.
2. **Варадан В., Виной К., Джозе К.** ВЧ МЭМС и их применение. М.: Техносфера, 2004. 525 с.
3. **Уорден К.** Новые интеллектуальные материалы и конструкции. М.: Техносфера, 2005. 334 с.
4. **Рогальский А.** Инфракрасные детекторы: Пер с англ. / Под ред. А. В. Войцеховского. Новосибирск: Наука, 2003. 636 с.
5. **Lil Mo, Tang H. X., Roukes M. L.** Ultrasensitive NEMS-based cantilevers for sensing, scanned probe and very high frequency applications // Nature Nanotechnology. 2006. № 2. P. 114—120.
6. **Roukes M. L.** Nanoelectromechanical systems // TRANSDUCERS '01. EUROSENSORS, 11th International Conference on Solid-State Sensors and Actuators. Digest of Technical Papers, 2001. V. 1. P. 658—661.
7. **Ekinci K. L.** Electromechanical Transducers at the Nanoscale: Actuation and Sensing of Motion in Nanoelectromechanical Systems (NEMS) // Small: nano micro. 2005. V. 1. N 8—9. P. 786—787.
8. **Bausells J.** Micro- and nano-electromechanical systems for [bio]molecular analysis // Contributions to Science. 2005. V. 3. № 1. P. 67—78.
9. **Datskos P. G., Lavrik N. V., Rajic S.** Performance of uncooled microcantilever thermal detectors // Review of Scientific Instruments. 2004. V. 75. № 4. P. 1134—1148.
10. **Raiteri R., Grattarola M., Butt H.-J., Skládal P.** Micromechanical cantilever-based sensors // Sensors and Actuators. 2001. B 79. P. 115—126.
11. **Zinoviev K., Plaza J. A., Dominguez C., Lechuga L.** Multi-cantilever array fabrication technology // Digest of technical papers, 18th European Conference on Solid-State Sensors (Eurosensors 2004). September 12—15, 2004, Rome, Italy. 2004. P. 536—537.
12. **Ghatnekar-Nilsson S., Forsen E., Abadal G., Verd J., Campabadal F., Pérez-Murano F., Esteve J., Barniol N., Boisen A., Montelius L.** Resonators with integrated CMOS circuitry for mass sensing applications, fabricated by electron beam lithography // Nanotechnology. 2005. V. 16. P. 98—102.
13. **Abadal G., Teva J., Esteve J., Pérez-Murano F., Barniol N.** A method for mass detection testing in the femto-gram range of micro/nano-cantilever based mass sensors // Abstracts book, Micro and Nano Engineering. 2004. 19—22 September 2004, Rotterdam, The Netherlands. 2004. P. 240—241.
14. **Gupta A., Akin D., Bashir R.** Single virus particle mass detection using microresonators with nanoscale thickness // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. P. 1976—1978.
15. **Villanueva G., Montserrat J., Pérez-Murano F., Rius G., Bausells J.** Submicron piezoresistive cantilevers in a CMOS-compatible technology for intermolecular force detection // Microelectronic Eng. 2004. V. 73—74. P. 480—486.
16. **Nezhadian S. K., Rezazadeh G., Arya Sh. Kh.** MEMS Tunneling Micro Thermometer Based on Tip Deflection of Bimetallic Cantilever Beam // Sensors & Transducers Journal. 2007. V. 84. № 10.
17. **Davis Z. J.** Nano-resonators for high resolution mass detection // Ph. D. Thesis, Mikroelektronik Centret, Technical University of Denmark. March 31, 2003.
18. **Davis Z. J., Svendsen W., Boisen A.** Design, fabrication and testing of a novel MEMS resonator for mass sensing applications // Microelectronic Engineering. 2007. V. 84. P. 1601—1605.
19. **Berger R., Gerber Ch., Lang H. P., Gimzewski J. K.** Micromechanics: A toolbox for femtoscale science: Towards a laboratory on a tip // Microelectronic Engineering. 1997. V. 35. № 1—4. P. 373—379.
20. **Lange D., Hagleitner C., Brand O., Baltes H.** Cmos resonant beam gas sensing system with on-chip self excitation // Mi-

cro Electro Mechanical Systems. 2001. MEMS 2001. The 14th IEEE International Conference. P. 547—552.
21. **Hammiche A., Bozec L., Conroy M., Pollock H. M., Mills G., Weaver J. M. R., Price D. M., Reading M., Hourston D. J., Song M.** Highly localized thermal, mechanical, and spectroscopic characterization of polymers using miniaturized thermal probes // Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures. 2000. V. 18. N 3. P. 1322—1332.
22. **Lalinsky T., Burian E., Drzik M., Hascik S., Mozolova Z., Kuzmik J.** Thermal actuation of a gas cantilever beam // Journal of Micromechanics and Microengineering. 2000. V. 10. P. 293—298.
23. **Zaborowski M., Grabiec P., Gotszalk T., Romanowska E., Rangelow W.** A temperature microsensor for biological investigations // Microelectronic Engineering. 2001. V. 57—58. P. 787—792.
24. **Jensenius H., Thaysen J., Rasmussen P. A., Veje L. H., Hansen O., Boisen A.** A microcantilever-based alcohol vapor sensor-application and response model // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. N 18. P. 2615—2617.
25. **Yang Y. T., Ekinci K. L., Huang X. M. H., Schiavone L. M., Roukes M. L.** Monocrystalline silicon carbide nanoelectromechanical systems // Appl. Phys. Lett. 2001. V. 78. № 2. P. 162—164.
26. **Cleland A. N., Roukes M. L.** Fabrication of high frequency nanometer scale mechanical resonators from bulk Si crystals // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 69. N 28. P. 2653—2655.
27. **Cleland A. N., Pophristic M., Ferguson I.** Single-crystal aluminum nitride nanomechanical resonators // Appl. Phys. Lett. 2001. V. 79. № 13. P. 2070—2072.
28. **Salapaka S.** et al. High Bandwidth Nano-Positioner // A Robust Control Approach, Rev. Sci. Instrum. 2002. V. 73. N 9. P. 3232—3241.
29. **Boggild P., Hansen T. M., Tanasa C., Grey F.** Fabrication and actuation of customized nanotweezers with a 25 nm gap // Nanotechnology. 2001. V. 12. N 3. P. 331—335.
30. **Srikar V. T., Spearing S. M.** Materials selection for microfabricated electrostatic actuators // Sensors and Actuators A. 2003. V. 102. P. 279—285.
31. **Spearing S. M.** Materials issues in microelectromechanical systems (MEMS) // Acta materials. 2000. V. 48. P. 179—196.
32. **Romig J. A. D., Dugger M. T., McWhorter P. J.** Materials issues in microelectromechanical devices: science, engineering, manufacturability and reliability // Acta Materialia. 2003. V. 51. P. 5837—5866.
33. **Napoli M., Bamieh B., Turner K.** A Capacitive Microcantilever: Modelling, Validation, and Estimation Using Current Measurements // Journal of Dynamic Systems, Measurement, and Control. 2004. V. 126. P. 319—325.
34. **Peirs J., Reynaerts D., Brussel H. V.** Scale effects and thermal considerations for micro-actuators // Proceedings of the 1998 IEEE International Conference on Robotics & Automation, Leuven, Belgium, May 1998. P. 1516—1521.
35. **Thaysen J., Yalcinkaya A. D., Vestergaard R. K., Jensen S., Mortensen M. W., Vettiger P., Menon A.** Su-8 based piezoresistive mechanical sensors // Technical Digest of MEMS 2002 (CatNo. 0780371852). 2002. P. 320—323.
36. **Taniguchi N.** Nanotechnology — Integrated processing systems for ultraprecision and ultra-fine products. Oxford Science Publications, 1996.
37. **Heidari B., Bogdanov A., Keil M., Montelius L.** Imprint lithography for mass production // Microprocesses and Nanotechnology International Conference. 2001. P. 94—95.
38. **Abadal G., Davis Z. J., Boisen A., Prez-Murano F., Barniol N., Borris X.** Combining laser and jumping mode AFM lithography on aluminum for the fabrication of nanoelectromechanical devices // Probe Microscopy. 2001. V. 2. N 2. P. 121—128.
39. **Buks E., Roukes M. L.** 60 condensed matter: Structural, mechanical and thermal properties — metastability and the casimir effect in micromechanical systems // Europhysics Letters. 2001. V. 54. N 2. P. 220—226.
40. **Механцев И. Б., Лысенко И. Е.** Физические основы микросистемной техники: Учебн. пос. Таганрог: Таганрогск. гос. радиотехнический ун-т, 1998. 56 с.
41. **Ландау Л. Д., Лившиц Е. М.** Теория упругости. М.: Наука. 1965. 204 с.
42. **Stark B.** Common Device Elements // MEMS Reliability Assurance Guidelines for Space Applications / B. Stark Editor, JPL Publication 99-1, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, California, January 1999. Chapter 6.
43. **Yang J., Ono T., and Esashi M.** Mechanical behavior of ultrathin microcantilever // Sensors and Actuators. 2000. V. 82. P. 102—107.
44. **Sader J. E.** Surface stress induced deflections of cantilever plates with applications to the atomic force microscope: Rectangular plates // Journal of Applied Physics. 2001. V. 89. N 5. P. 2911—2921.
45. **Yang J., Ono T., Esashi M.** Investigating surface stress: Surface loss in ultrathin single-crystal silicon cantilevers // Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures. 2001. V. 19. N 2. P. 551—556.
46. **Lafontan** et. al. The advent of MEMS in space // Microelectronics Reliability. 2003. V. 43. P. 1061—1083.
47. **Rocha L. A., Cretu E., Wolffenbuttel R. F.** Full characterization of pull-in single-sided clamped beams // Sensors and Actuators A. 2004. V. 110. P. 301—309.
48. **Ekinci K. L., Yang Y. T., Roukes M. L.** Ultimate limits to inertial mass sensing based upon nanoelectromechanical systems // Journal of Applied Physics. 2004. V. 95. N 5. P. 2682—2689.
49. **Sader J. E.** Frequency response of cantilever beams immersed in viscous fluids with applications to the atomic force microscope // Journal of Applied Physics. 1998. V. 84. N 1. P. 64—76.
50. **Rosenhead L.** Laminar Boundary Layers. Clarendon, Oxford, 1963.
51. **Garcia R., San Paulo A.** Dynamics of a vibrating tip near or in intermittent contact with a surface // Physical Review — Section B — Condensed Matter. 2000. V. 61. N 20. P. 13381.
52. **Corman T., Enoksson P., Stemme G.** Gas damping of electrostatically excited resonators // Sensors and Actuators A: Physica. 1997. V. 61. № 1—3. P. 249—255.
53. **Veijola T., Kuisma H., Lahdenpera J.** The influence of gas-surface interaction on gas film damping in a silicon accelerometer // Sensors and Actuators A. 1998. V. 66. P. 83—92.
54. **Vemuri S., Fedder G. K., Mukherjee T.** Low-Order Squeeze Film Model for Simulation of MEMS Devices // International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems. 2000, March 27—29, San Diego. 2000. P. 206—208.
55. **Napoli M., Bamieh B., Turner K.** A Capacituve Microcantilever: Modeling, Validation, and Estimation Using Current Measurements // J. Dynamic Systems, Measurement, and Control. 2004. V. 126. P. 319—325.
56. **Zhang W.-M., Meng G., Chen Di.** Stability, Nonlinearity and Reliability of Electrostatically Actuated MEMS Devices // Sensors. 2007. V. 7. P. 760—796.
57. **Price R. H., Wood J. E., Jacobsen S. C.** Modelling considerations for electrostatic forces in electrostatic microactuators // Sensors and Actuators. 1989. V. 20. P. 107—114.
58. **Hu Y. C., Chang C. M., Huang S. C.** Some design considerations on the electrostatically actuated microstructures // Sensors and Actuators A. 2004. V. 112. P. 155—161.
59. **Pamidighantam S., Puers R., Baert K., Tilmans H. A. C.** Pull-in voltage analysis of electrostatically actuated beam structures with fixed-fixed and fixed-free end conditions // J. Micromech. Microeng. 2002. V. 12. P. 454—464.
60. **Bao M. H., Yang H., Yin H., Shen S. Q.** Effects of electrostatic forces generated by the driving signal on capacitive sensing devices // Sensors and Actuators A. 2000. V. 24. P. 213— 219.
61. **MoCarthy B., Adams G. G., McGruer N. E., Potter D.** A dynamical model, including contact bounce, of an electrostatically actuated microswitch // J. Microelectromech. Syst. 2002. V. 11. P. 276—283.
62. **Millet O.** et. al. Electrostatic actuated micro gripper using an amplification mechanism // Sensors and Actuators A. 2004. V. 114. P. 371—378.
63. **Zhang W. M., Meng G.** Nonlinear dynamic analysis of electrostatically actuated resonant MEMS sensors under parametric excitation // IEEE Sensors Journal. 2007. V. 7 (3). P. 370—380.
64. **Castaner L., Rodriguez A., Pons J., Senturia S. D.** Pull-in time energy product of electrostatic actuators: comparison of experiments with simulations // Sensors and Actuators A. 2000. V. 83. P. 263—269.
65. **Nadal-Guardia R., Dehe A., Aigner R., Castaner L. M.** Current drive methods to extend the range of travel of electrostatic microactuators beyond the voltage pull-in point // J. Microelectromech. Syst. 2002. V. 11. P. 255—263.
66. **Younis M. I., Abdel-Rahman E. M., Nayfeh A.** A reduced-order model for electrically actuated microbeam-based MEMS // J. Microelectromech Syst. 2003. V. 12 (5). P. 672—680.
67. **O'Mahony C., Duane R., Hill M., Mathewson A.** Low-voltage micromechanical test structures for measurement of residual charge in dielectrics // Electronics Letters. 2005. V. 41 (7). P. 409—410.
68. **Rocha L. A., Cretu E., Wolffenbuttel R. F.** Compensation of temperature effects on the pull-in voltage of microstructures // Sensors and Actuators A. 2004. V. 115. P. 351—356.

69. **Torres J. M., Dhariwal R. S.** Electric field breakdown at micrometre separations in air and vacuum // Microsystem Technologies. 1999. V. 6. P. 6—10.
70. **Arnold V.** Mathematical Methods of Classical Mechanics. Springer. 1988.
71. **Randt R.** Lecture Notes on Nonlinear Vibrations, available online http:// www.tam.cornell.edu/randdocs/, 2001.
72. **Vidyasagar M.** Nonlinear Systems Analysis, SIAM, 1993.
73. **Rosa M. A., Bruyker D. D., Volkel A. R., Peeters E.** A novel external electrode configuration for the electrostatic actuation of MEMS based devices // J. Micromech. Microeng. 2004. V. 14. P. 446—451.
74. **Sun Y., Piyabongkarn D., Sezen A., Nelson B. J., Rajamani R.** A high-aspect-ratio two-axis electrostatic microactuator with extended travel range // Sensors and Actuators A. 2002. V. 102. P. 49—60.
75. **Bochobza-Degani O., Elata D., Nemirovsky Y.** A general relation between the ranges of stability of electrostatic actuators under charge or voltage control // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 82. P. 302—304.
76. **Buks E., Roukes M. L.** 60 condensed matter: Structural, mechanical and thermal properties — metastability and the casimir effect in micromechanical systems // Europhysics Letters. 2001. V. 54. № 2. P. 220—226.
77. **Гридчин В. А., Драгунов В. П.** Физика микросистем. В 2 ч. Ч. 1. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. 416 с.
78. **Тарасов В. В., Якушенков Ю. Г.** Инфракрасные системы "смотрящего" типа. М.: Логос, 2004. 444 с.

УДК 621.3.049.776

В. Г. Спирин, канд. техн. наук,
Арзамасский политехнический институт, филиал Нижегородского технического университета им. Р. Е. Алексеева

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОГРЕШНОСТИ СОПРОТИВЛЕНИЯ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО РЕЗИСТОРА, ВЫЗВАННОЙ ИСКЛЮЧЕНИЕМ КОНТАКТНЫХ ПЛОЩАДОК ПЕРЕКРЫТИЯ РЕЗИСТИВНОГО И ПРОВОДЯЩЕГО СЛОЕВ

Для конструкции тонкопленочного резистора без контактных площадок перекрытия резистивного элемента и проводника исследована зависимость погрешности сопротивления ТПР от несовмещения ФШ с проводящим слоем подложки при второй фотолитографии, которая достигает своего максимального значения при коэффициенте формы резистора, равном 1,0.

Ключевые слова: *тонкопленочный резистор; контактная площадка перекрытия.*

Как известно, при формировании тонкопленочных резисторов (ТПР), в их конструкции предусматривают четыре контактные площадки перекрытия (КПП) резистивного и проводящих элементов [1], которые исключают влияние несовмещения фотошаблонов (ФШ) на погрешность сопротивления резистора. В этом случае повышение точности сопротивления ТПР приводит к тому, что снижается плотность межсоединений на тонкопленочной плате за счет увеличения промежутка между тонкопленочными элементами (рис. 1).

Найдем формулы для расчета минимальных размеров КПП и зазора между проводником и резистором. Ширина $b_к$ КПП должна быть такой, чтобы резистивный элемент не выходил за пределы КПП. Таким образом, минимальная ширина КПП будет зависеть от следующих производственных погрешностей: несовмещения комплекта ФШ $\Delta B_{фш}$; несовмещения проводящего слоя платы и второго ФШ, формирующего резистивный слой, $\Delta B_{фл}$; изменения размеров ТПР, обусловленных первой фотолитографией. Следовательно, минимальная ширина КПП составит:

$$b_{к.мин} = \Delta B_{фш} + \Delta B_{фл} + \Delta l/2, \qquad (1)$$

где Δl — случайная абсолютная погрешность длины ТПР.

По данным литературы [2, 3] минимальные погрешности топологических элементов, входящие в выражение (1), в случае применения ФШ класса С составляют $\Delta B_{фш}$ = 3,5 мкм; $\Delta B_{фл}$ = 1,5 мкм; Δl = 2 мкм. Откуда $b_{к.мин}$ = 6 мкм.

Расчеты показывают, что даже в случае применения прецизионных ФШ и фотолитографии плотность межсоединений может быть существенно уменьшена.

Минимальная длина КПП будет определяться следующим выражением:

$$l_{к.мин} = \Delta B_{фл} + 2(\Delta l_с + \Delta l),$$

где $\Delta l_с$ — абсолютная систематическая погрешность длины ТПР.

Минимальный зазор между проводниками обычно равен минимальной ширине проводника. Минимальный зазор $b_{з.мин}$ (см. рис. 1) между резистором и проводником будет дополнительно ограничиваться шириной КПП. Размер этого зазора можно найти по формуле

$$b_{з.мин} = 1{,}5(\Delta l_с + \Delta l) + b_к.$$

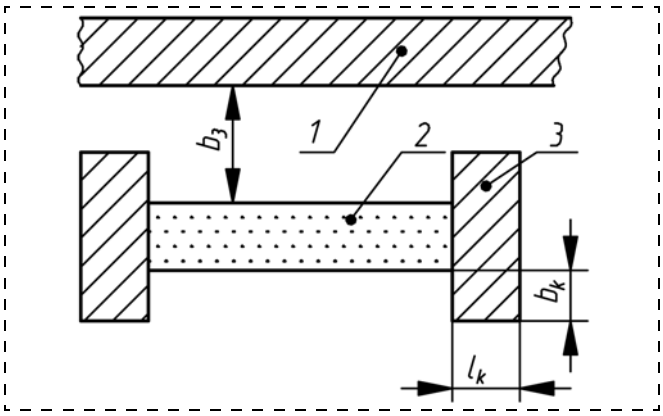

Рис. 1. Влияние КПП на плотность межсоединений:
1 — проводник; *2* — резистивный элемент; *3* — КПП

Так как КПП увеличивают промежуток между тонкопленочными элементами, то для проектирования тонкопленочной платы представляет интерес рассмотрение погрешности сопротивления конструкции резистора без КПП. Конструкция такого резистора, полученного при смещении ФШ резистивного слоя относительно проводящего слоя платы, показана на рис. 2, *а*.

Конфигурацию резистора $R_{см}$ можно представить в виде двух параллельно соединенных резисторов $R1$, $R2$, формы которых приведены на рис. 2, *б*, *в*. Сопротивления резисторов $R1$, $R2$ будут определяться выражениями:

$$R1 = \rho(l/\Delta B + 2m);\ R2 = \rho l/(b - \Delta B),$$

где ΔB — смещение резистивного слоя относительно проводящего слоя; m — число квадратов углового участка резистивного элемента резистора $R1$ (на данном участке происходит искривление протекания тока); ρ — удельное поверхностное сопротивление резистивной пленки.

Значение смещения ΔB определяется двумя технологическими погрешностями: погрешностью несовмещения комплекта ФШ $\Delta B_{фш}$ погрешностью несовмещения проводящего слоя платы и второго ФШ, формирующего резистивный слой, $\Delta B_{фл}$. Откуда $\Delta B = \Delta B_{фш} + \Delta B_{фл}$.

Определим сопротивление $R_{см}$:

$$R_{см} = \rho\frac{K1_ф K2_ф}{K1_ф + K2_ф} = \frac{\rho l(l/\Delta B + 2m)/(b - \Delta B)}{l/\Delta B + 2m + l/(b - \Delta B)} =$$

$$= \frac{\rho l(l + 2m\Delta B)}{lb + 2m\Delta B(b - \Delta B)} = \rho K_{ф.см}, \qquad (2)$$

где $K1_ф$, $K2_ф$ — коэффициенты формы резисторов $R1$, $R2$; $K_{ф.см}$ — коэффициент формы резистора $R_{см}$.

Преобразуем величину $K_{ф.см}$ из выражения (2) путем деления числителя и знаменателя на lb. Обозначая

$K_ф = 1/b$ и $\delta B = \Delta B/b$ находим

$$K_{ф.см} = \frac{l/b + 2m\Delta B/b}{1 + 2m\Delta Bb/lb - 2m\Delta B^2/lb} =$$

$$= \frac{K_ф + 2m\delta B}{1 + 2m\delta B/K_ф - 2m\delta B^2/K_ф} = \frac{K_ф(K_ф + 2m\delta B)}{K_ф + 2m\delta B - 2m\delta B^2} =$$

$$= \frac{K_ф}{1 - [2m\delta B^2/(K_ф + 2m\delta B)]}, \qquad (3)$$

где $K_ф = 1/b$ — коэффициент формы резистора $R_{см}$ при $\delta B = 0$, т. е. при отсутствии смещения.

Используя выражение (3), найдем абсолютную $\Delta K_ф$ и относительную $\delta K_ф$ погрешность коэффициента формы резистора $R_{см}$:

$$\Delta K_ф = K_{ф.см} - K_ф =$$

$$= \frac{K_ф}{1 - [2m\delta B^2/(K_ф + 2m\delta B)]} - K_ф;$$

$$\delta K_ф = \frac{\Delta K_ф}{K_ф} = \frac{1}{1 - [2m\delta B^2/(K_ф + 2m\delta B)]} - 1. \qquad (4)$$

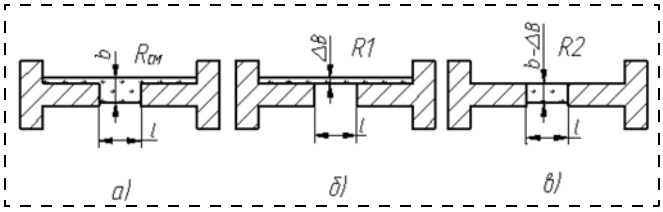

Рис. 2. Формирование погрешности сопротивления ТПР за счет исключения КПП

Рассчитаем систематическую погрешность сопротивления $R_с$ за счет исключения КПП:

$$R_с = R_{см} - R = \rho\Delta K_ф.$$

Эта погрешность увеличивает сопротивление ТПР. Как видно из выражения (4), погрешность коэффициента формы будет определяться значением смещения δB и коэффициентом формы несмещенного резистора $K_ф$. Задаваясь значениями δB и $K_ф$ можно определить погрешность резистора за счет смещения ФШ. Необходимо отметить, что $\delta B = f(K_ф)$. При $K_ф \geqslant 1$, $\delta B = \text{const}$, так как $b = \text{const}$, $l = \text{var}$. При $K_ф < 1$ δB уменьшается, так как увеличивается размер b.

Из рассмотрения конструкции ТПР (рис. 2) следует предположить, что значение m является функцией длины электродов смещенного резистивного элемента, $l_{эл}$ и ΔB. В работе [4] был проведен теоретический расчет функции $m = f(l_э/\Delta B)$, который показал, что при $(l_э/\Delta B) < 1$ значение m начинает резко возрастать (рис. 3), а при значениях $(l_э/\Delta B) \geqslant 1$ значение m практически постоянно (для $l_э = \Delta B$, $m = 0{,}461$, а для $l_э = 3\Delta B$, $m = 0{,}436$).

Для подтверждения теоретического расчета m был проведен эксперимент с помощью специально разработанной тестовой схемы (рис. 4). Размеры резисторов $R3$, $R4$ ($l = b = 3$ мм) и смещение ($\Delta B = 1{,}5$ мм) были выбраны большими в целях минимизации влияния производственных погрешностей сопротивления ТПР на результат измерения. Для приведенных значений $K_ф$ и ΔB тестовой схемы после несложных преобразований из формулы (4) можно найти m:

$$m = 2\delta K_ф/(1 - \delta K_ф). \qquad (5)$$

Для нахождения m в центральной части подложки были сформированы четыре тестовых схемы. В состав тестовой схемы входил один резистор $R4$ и два резистора $R3$, у одного из которых длина электрода $l_э = \Delta B$, а у другого — $l_э = 3\Delta B$. Было изготовлено шесть подложек, на которых были измерены сопротивления всех резисторов. Величину m находили по следующему алгоритму:

1. Вычислим отношения сопротивлений резисторов

$$K3_i = R3_i/R4_i,$$

где i — номер тестовой схемы.

2. Найдем среднее значение коэффициентов

$$K3 = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} K3_i,$$

где k — число тестовых схем.

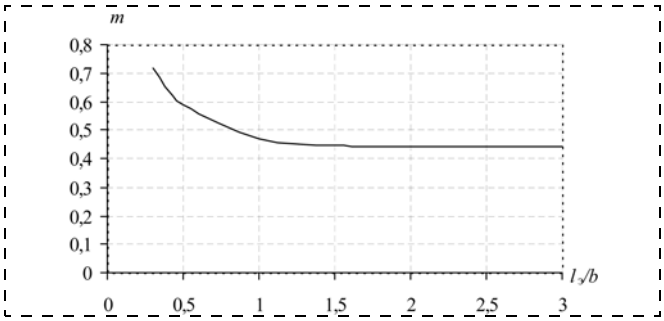

Рис. 3. Зависимость сопротивления углового участка от приведенной длины электрода

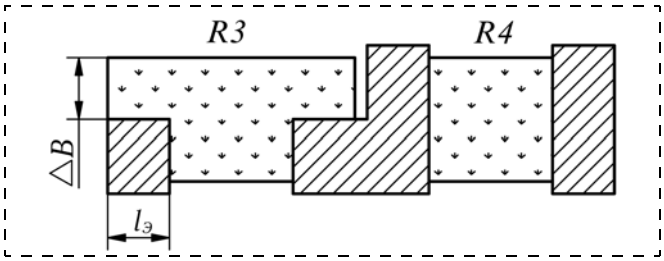

Рис. 4. Тестовая схема для определения *m*

3. Учитывая, что $\delta K3_ф = K3 - 1$, и используя формулу (5), определим

$$m = 2(K3 - 1)/(2 - K3).$$

В результате эксперимента получены средние значения $m = 0{,}41$ для $l_э = \Delta B$ и $m_2 = 0{,}40$ для $l_э = 3\Delta B$. При этом разброс значений m составил: 0,348...0,448. Такой разброс можно объяснить погрешностью микродефектов $\delta K_д$. Используя формулу (5), рассчитаем значения m для некоторых значений $\delta K_ф$, которые близки к экспериментальным значениям (см. таблицу).

Как следует из таблицы, разброс $\delta K_ф = 2$ %, характерный для эксперимента, приводит к разбросу $m = 0{,}353...0{,}469$, что хорошо согласуется с полученными экспериментальными результатами. Погрешность теоретического значения m относительно среднего экспериментального не превышает 11 %. Тем не менее, учитывая разброс m, для $l_э \geqslant \Delta B$ при расчете $\delta K_ф = f(K_ф)$ будем использовать значение $m = 0{,}461$. На рис. 5 приведен график $\delta K_ф = f(K_ф)$. Проектирование ТПР с $(l_э/\Delta B) < 1$ не рекомендуется, так как при этом величина погрешности (4) резко возрастет.

Полученные результаты исследований особенно значимы при проектировании ТПР с малыми топологическими размерами. Как известно, смещение фотошаблона при прецизионной фотолитографии достигает 1,5 мкм [2]. Погрешность изготовления фотошаблонов класса С составляет не менее 3,5 мкм [3]. Перечисленные погрешности дают суммарную погрешность $\Delta B = 5$ мкм, что при ширине ТПР в 12 мкм

Расчет *m* по формуле (5)

$\delta K_ф$	0,15	0,16	0,17	0,18	0,19
m	0,353	0,381	0,41	0,439	0,469

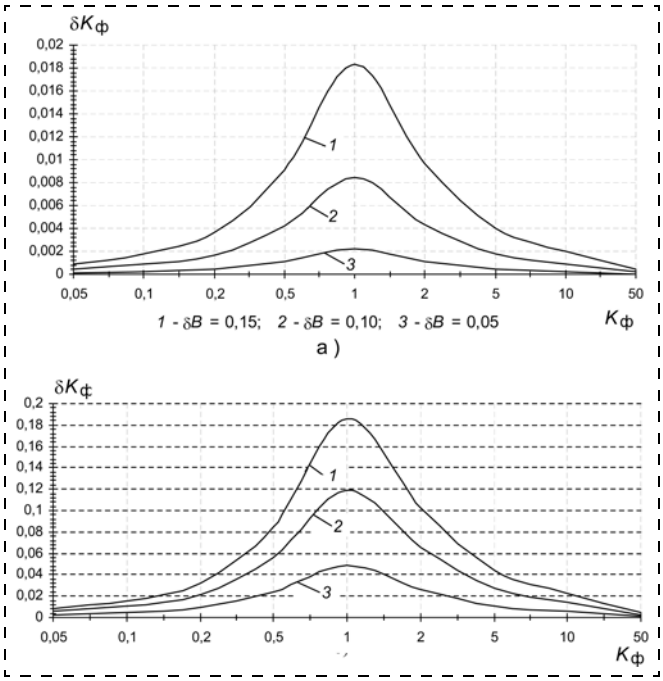

Рис. 5. Зависимость относительной погрешности коэффициента формы ТПР от значения коэффициента формы при различных значениях относительного несовмещения фотошаблона:
а — кривая *1* — $\delta B = 0{,}15$; *2* — $\delta B = 0{,}10$; *3* — $\delta B = 0{,}05$; *б* — кривая *1* — $\delta B = 0{,}5$; *2* — $\delta B = 0{,}4$; *3* — $\delta B = 0{,}25$

вносит дополнительную погрешность в его сопротивление соответствующую кривой *1* на рис. 5, *б*.

Выводы

Для конструкции резистора без контактных площадок перекрытия резистивного элемента и электродов впервые исследована зависимость погрешности сопротивления ТПР от несовмещения ФШ при второй фотолитографии с проводящим слоем подложки. Получена формула систематической погрешности, которая увеличивает общее сопротивление ТПР. Эта погрешность достигает своего максимального значения при $K_ф = 1$. В большинстве случаев ($K_ф < 0{,}1$; $K_ф > 10$) ТПР можно изготавливать без КПП, что существенно повысит плотность межсоединений. Однако изготовление без КПП ТПР с малыми размерами и $0{,}1 < K_ф < 10$, даже в случае прецизионного изготовления фотошаблонов и тонкопленочной платы, приводит к недопустимой погрешности сопротивления ТПР.

Список литературы

1. **Бондаренко О. Е., Федотов Л. М.** Конструктивно-технологические основы проектирования микросборок. М.: Радио и связь, 1988. 136 с.
2. **Готра З. Ю.** Технология микроэлектронных устройств. М.: Радио и связь, 1991. 528 с.
3. **ОСТ 4 ГО.073.210—84.** Фотошаблоны прецизионные. Общие технические условия.
4. **Потехин В. А., Спирин В. Г., Шурыгин Б. Д.** Расчет функции числа квадратов углового участка тонкопленочного резистора. Прогрессивные технологии в машино- и приборостроении // Межвузовский сборник статей по материалам Всероссийской НТК с участием международных специалистов. Н. Новгород — Арзамас, НГТУ — АФ НГТУ. 2003. С. 366—369.

УДК 621.315:539.3

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

АБСОЛЮТНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ДЕФОРМАЦИЕЙ ПЬЕЗОАКТЮАТОРА НАНО- И МИКРОПЕРЕМЕЩЕНИЙ

Показано, что для пьезоактюатора с гистерезисной характеристикой множество положений равновесия системы управления его деформацией представляет собой отрезок покоя и возможны автоколебания при движении торца пьезоактюатора. Определено множество положений равновесия. Получено аналитическое выражение для обобщенных условий абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора.

Ключевые слова: *пьезоактюатор, абсолютная стабильность, системы управления, деформация, нано- и микроперемещения.*

Введение

Микро- и нанометрическая точность оборудования микроэлектроники и нанотехнологии обеспечивается прецизионными электромеханическими системами с пьезоэлектрическим приводом, основанными на деформации исполнительного преобразователя. В системе управления микро- и нанометрической деформацией пьезоактюатора (пьезопреобразователя) предъявляются жесткие требования к отсутствию автоколебаний и к устойчивости системы, поскольку рабочий режим прецизионной электромеханической системы микро- и наноперемещений без обеспечения абсолютной устойчивости системы управления деформацией может оказаться вообще нереализуемым.

Аналитические выражения условий абсолютной устойчивости системы с гистерезисной нелинейностью записываются с использованием критерия абсолютной устойчивости Якубовича, развивающего критерий абсолютной устойчивости Попова. Для систем управления, устойчивых по Ляпунову, критерий абсолютной устойчивости Якубовича для систем с одной гистерезисной нелинейностью дает наиболее простое и наглядное представление результатов исследования устойчивости и возможность синтеза корректирующих устройств системы, обеспечивающих устойчивость системы управления.

Для получения обобщенных условий абсолютной устойчивости системы управления деформацией простого, составного или биморфного пьезоактюатора рассматривается преобразованная система управления деформацией пьезоактюатора, в которой звенья системы сгруппированы с выделением нелинейного гистерезисного элемента и линейной части системы управления.

В системе управления деформацией пьезоактюатора множество положений равновесия системы управления представляет собою отрезок покоя. Для различных видов пьезоэффекта определены обобщенные условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией.

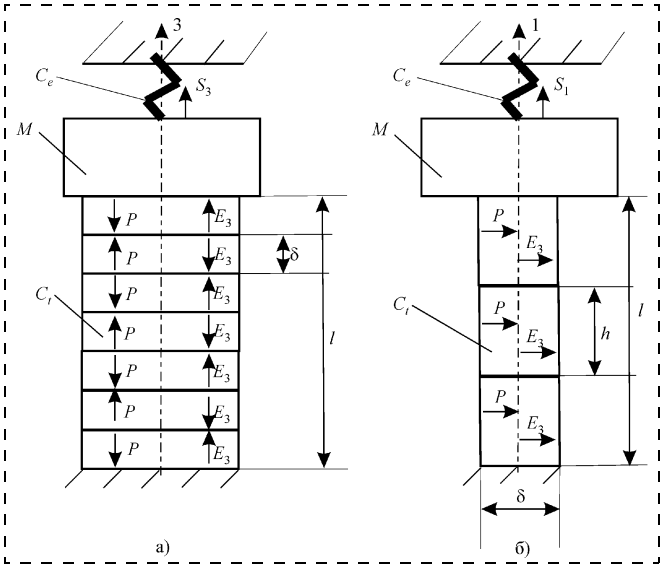

Рис. 1. Кинематическая схема составного пьезоактюатора:
а — при продольном; *б* — при поперечном пьезоэффекте; *l* — длина составного пьезоактюатора; δ — толщина пьезоэлемента; *h* — высота пьезоэлемента

Пьезоактюатор работает на основе обратного пьезоэффекта, перемещение достигается за счет его деформации при приложении электрического напряжения, увеличение диапазона перемещения от единиц нанометров до десятков микрометров обеспечивается применением составного пьезоактюатора (рис. 1). Использование пьезоактюатора перспективно в области нанотехнологии, микроэлектроники и астрономии для прецизионного совмещения, компенсации температурных и гравитационных деформаций, а также атмосферной турбулентности путем коррекции волнового фронта [1—3]. Пьезоактюаторы (пьезопреобразователи, пьезодвигатели) имеют в системе управления диапазон перемещения до десятков микрометров, нагрузочную способность до 1000 Н, мощность на выходном валу до 100 Вт и полосу пропускания порядка нескольких десятков герц.

Наряду с преимуществами пьезоактюаторов, таких как высокая точность, большая нагрузочная способность, широкая полоса пропускания, имеется существенный недостаток — нелинейная гистерезисная статическая характеристика, наличие которой усложняет проектирование систем управления деформацией пьезоактюатора.

В отличие от системы управления с однозначной нелинейностью, для которой устойчивость положения равновесия описывается с помощью функций Ляпунова или критерия Попова [4, 5], устойчивость системы управления деформацией пьезоактюатора с гистерезисной нелинейностью и множеством положений равновесия оценивается с применением критерия абсолютной устойчивости Якубовича [6].

Исследование возможности автоколебаний и множества положений равновесия пьезоактюатора

Динамические характеристики пьезоактюатора рассчитываются на основе совместного решения волнового уравнения, уравнения пьезоэффекта при нулевых начальных и соответствующих граничных условиях. При этом используется волновое уравне-

ние [2, 3], описывающее распространение волны в длинной линии с затуханием без искажений:

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

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

Обобщенное уравнение пьезоэффекта [3, 7] при управлении по напряжению пьезоактюатором записывается в виде

$$S_j = d_{ij}E_i + s^E_{jk}T_k, \quad (2)$$

где S_j — относительное перемещение сечения пьезоактюатора по оси j; d_{ij} — пьезомодуль, соответственно

$$d_{ij} = \begin{cases} d_{31} \text{ — при поперечном пьезоэффекте;} \\ d_{33} \text{ — при продольном пьезоэффекте;} \\ d_{15} \text{ — при сдвиговом пьезоэффекте;} \end{cases}$$

E_i — напряженность электрического поля в пьезоактюаторе по оси i; s^E_{jk} — упругая податливость при $E = \text{const}$; T_k — механическое напряжение по оси k, причем индексы j, $k = 1, 2, 3, ..., 6$; $i = 1, 2, 3$.

При одном закрепленном торце пьезоактюатора (рис. 1), например при $x = 0$, получаем $\xi(x, t) = 0$ и при упругоинерционной нагрузке на пьезоактюатор при $x = l$ имеем уравнение сил, действующих на другом торце пьезоактюатора:

$$T_kS_0 = -M\frac{\partial^2\xi(x,t)}{\partial t^2} - C_e\xi(x,t), \quad (3)$$

где S_0 — площадь поперечного сечения пьезоактюатора; C_e — жесткость нагрузки; $F = T_kS_0$ — внешняя сила, приложенная к торцу пьезоактюатора; M — перемещаемая масса.

С учетом преобразования Лапласа смещение сечения пьезоактюатора

$$\Xi(x,p) = L\{\xi(x,t)\} = \int_0^\infty \xi(x,t)\mathbf{e}^{-pt}dt, \quad (4)$$

где p — оператор Лапласа.

С учетом (1)—(4) передаточная функция [2] $W_{ij}(p)$ пьезоактюатора, закрепленного одним торцем, при упругоинерционной нагрузке при $M \gg m$ (рис. 1), где m — масса пьезоактюатора, записывается в виде

$$W_{ij}(p) = \frac{\Xi_j(p)}{E_i(p)} = \frac{d_{ij}l}{\left(1+\frac{C_e}{C_t}\right)\left(T_t^2p^2 + 2T_t\xi_tp + 1\right)}; \quad (5)$$

$$T_t = \sqrt{\frac{M}{C_e + C_t}}; \; \xi_t = \frac{\alpha l^2 C_t}{3c^E\sqrt{M(C_e + C_t)}},$$

где $\Xi_j(p)$ — преобразование Лапласа для перемещения торца пьезоактюатора при нулевых начальных условиях; $E_i(p)$ — преобразование Лапласа напряженности электрического поля в пьезоактюаторе

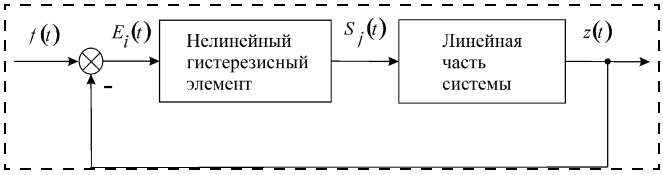

Рис. 2. Обобщенная структурная схема системы управления деформацией пьезоактюатора

при нулевых начальных условиях; n — число пьезопластин в пьезоактюаторе; C_t — жесткость пьезоактюатора; T_t, ξ_t — постоянная времени и коэффициент затухания колебательного звена при упругоинерционной нагрузке пьезоактюатора.

Рассмотрим в обобщенном виде систему управления деформацией пьезоактюатора (рис. 2), где $f(t)$ — внешнее воздействие; $E_i(t)$ — напряженность электрического поля по оси i; $S_j(t)$ — относительная деформация торца пьезоактюатора по оси j; $z(t)$ — выходной сигнал.

С учетом (5) передаточная функция линейной части $W_{ij_l}(p)$ системы записывается в виде

$$W_{ij_l}(p) = \frac{k}{T_t^2p^2 + 2T_t\xi_tp + 1}, \quad (6)$$

где k — коэффициент передачи.

Аналитическое выражение для основной обобщенной гистерезисной петли торца пьезоактюатора (рис. 3) [2, 6] имеет вид

$$S_j = d_{ij}E_i - \gamma_{ij}E_{im}\left(1 - \frac{E_i^2}{E_{im}^2}\right)^{n_{ij}} \operatorname{sign}\dot{E}_t, \quad (7)$$

где S_j — относительное перемещение торца пьезоактюатора; E_i — напряженность электрического поля в пьезоактюаторе; $d_{ij} = S_{jm}/E_{im}$ — пьезомодуль, определяемый по статической характеристике, E_{im} — амплитуда напряженности электрического поля в пьезоактюаторе, S_{jm} — максимальное относительное перемещение торца пьезоактюатора при $E_i = E_{im}$,

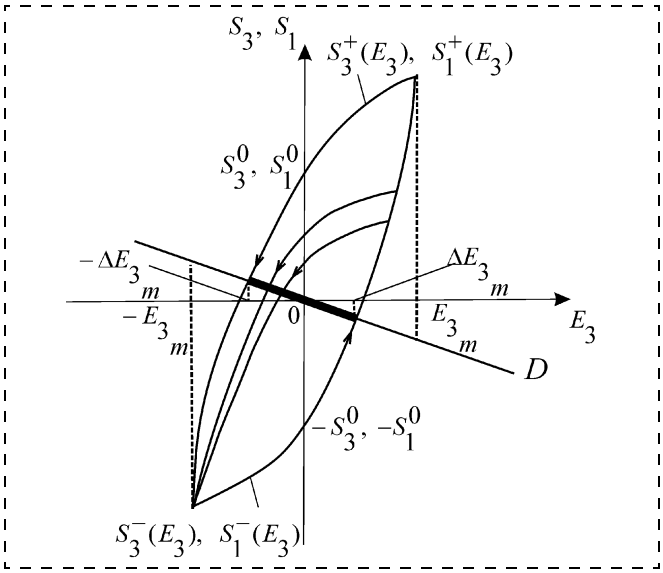

Рис. 3. Обобщенная гистерезисная характеристика пьезоактюатора

S_j^0 (рис. 3) — остаточная относительная величина статической характеристики при $E_i = 0$; $\gamma_{ij} = S_j^0 / E_{im}$ — остаточный пьезомодуль; n_{ij} — степенной коэффициент, определяемый формой гистерезисной кривой (для составного пьезоактюатора из пьезокерамики на основе цирконата и титаната свинца промышленных марок ЦТС или PZT имеем $n_{ij} = 1$); $\dot{E}_i$ — скорость изменения напряженности электрического поля.

Учитывая передаточную функцию линейной части системы и аналитическое выражение для основной гистерезисной петли пьезоактюатора при $n_{ij} = 1$, получаем следующее дифференциальное уравнение системы:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{2\xi_t}{T_t}\frac{dx}{dt} + \frac{(1 + kd_{ij})x}{T_t^2} - \frac{\left(1 - x^2\right)k\gamma_{ij}}{T_t^2}\operatorname{sign}\frac{dx}{dt} = 0, \qquad (8)$$

где $x = E_i/E_{im}$.

Следовательно, с учетом (8) система управления описывается в виде системы дифференциальных уравнений первого порядка:

$$y = \frac{dx}{dt} = P(x, y); \qquad (9)$$

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{2\xi_t y}{T_t} - \frac{(1 + kd_{ij})x}{T_t^2} + \frac{\left(1 - x^2\right)k\gamma_{ij}}{T_t^2}\operatorname{sign} y = Q(x, y),$$

где $P(x, y)$, $Q(x, y)$ — функции аналитические на всей фазовой плоскости x, y.

Для анализа нелинейной системы автоматического управления (см. рис. 2) воспользуемся критерием Бендиксона [8]: если в некоторой односвязной области на фазовой плоскости выражение

$$\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} \qquad (10)$$

знакопостоянно, то в этой плоскости не существует замкнутых контуров, целиком составленных из фазовых траекторий динамической системы. Раскрывая (10), получим

$$\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} = -\frac{2\xi_t}{T_t} + \frac{\left(1 - x^2\right)k\gamma_{ij}}{T_t^2} \times \frac{\partial(\operatorname{sign} y)}{\partial y} = -\frac{2\xi_t}{T_t} + \frac{\left(1 - x^2\right)k\gamma_{ij}\delta(y)}{T_t^2}, \qquad (11)$$

где $\delta(y)$ — дельта-функция.

Из (11) находим

$$\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} = \begin{cases} -\dfrac{2\xi_t}{T_t} < 0, \text{ если } y \neq 0; \\ > 0, \text{ если } y = 0, \end{cases}$$

т. е. наблюдается изменение знака выражения. Следовательно, можно говорить о возможности возникновения в системе автоколебаний при деформации пьезоактюатора.

Используя полученные аналитические выражения для y и dy/dt, запишем уравнение изоклины для системы в виде

$$y = ax^2 + bx + c, \qquad (12)$$

где

$$a = -\frac{k\gamma_{ij}\operatorname{sign} y}{T_t^2\left(\dfrac{dy}{dx} + \dfrac{2\xi_t}{T_t}\right)};$$

$$b = -\frac{1 + kd_{ij}}{T_t^2\left(\dfrac{dy}{dx} + \dfrac{2\xi_t}{T_t}\right)};$$

$$c = \frac{k\gamma_{ij}\operatorname{sign} y}{T_t^2\left(\dfrac{dy}{dx} + \dfrac{2\xi_t}{T_t}\right)}.$$

Полученному уравнению изоклины соответствует фазовый портрет системы автоматического управления деформацией пьезоактюатора с симметричной зоной покоя на оси X с шириной 2Δ или соответственно на оси E_i с шириной $2\Delta E_{im}$ при $E_i = E_{im}$.

Соответственно из уравнения изоклины получаем уравнение

$$\Delta^2 + \frac{1 + kd_{ij}}{k\gamma_{ij}}\Delta - 1 = 0. \qquad (13)$$

Из (13) определяем ширину зоны покоя

$$2\Delta = -\frac{1 + kd_{ij}}{k\gamma_{ij}} + \sqrt{\frac{(1 + kd_{ij})^2}{k^2\gamma_{ij}^2} + 4}, \qquad (14)$$

причем $\gamma_{ij} = \begin{cases} \gamma_{31} \text{ — при поперечном пьезоэффекте;} \\ \gamma_{33} \text{ — при продольном пьезоэффекте;} \\ \gamma_{15} \text{ — при сдвигом пьезоэффекте.} \end{cases}$

Проведенный анализ позволяет сделать выводы о том, что множество положений равновесия системы управления деформацией пьезоактюатора представляет собой отрезок покоя, в системе возможны автоколебания пьезоактюатора, а для обеспечения устойчивости и точности системы управления необходимы корректирующие устройства.

В системе управления деформацией пьезоактюатора из пьезокерамики промышленной марки ЦТС-19 при продольном пьезоэффекте $d_{33} = 4 \cdot 10^{-10}$ м/В; $k = 2{,}5 \cdot 10^9$ В/м; $\gamma_{33} = 1 \cdot 10^{-10}$ м/В; $E_{3m} = 5 \cdot 10^5$ В/м имеем ширину зоны покоя $2\Delta = 0{,}24$ и с учетом амплитуды E_{3m} напряженности электрического поля по оси 3 (см. рис. 1) ширину зоны покоя $2\Delta E_{3m} = 1{,}2 \cdot 10^5$ В/м.

Условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора

Исследование абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора (см. рис. 2) проведем на основе критерия Якубовича [6], являющегося развитием критерия абсолютной устойчивости Попова. При описании системы используем передаточную функцию линейной части системы $W_{ij_l}(p)$ и гистерезисную функцию S_j пьезоактюатора.

Описание гистерезисной нелинейности пьезоактюатора в общем виде

$$S_j = F[E_i|_0^t, t, S_j(0), \operatorname{sign}\dot{E}_i] \qquad (15)$$

означает, что значение функции S_j в каждый момент времени t зависит от поведения функции $E_i(t)$ на промежутке $[0, t]$, от t и от начального значения $S_j(0)$. При этом $S_j(0)$ должно принадлежать некоторому дополнительно заданному множеству $L[E_i(0)]$, зависящему в общем случае от $E_i(0)$.

Рассмотрим гистерезисную характеристику пьезоактюатора (см. рис. 3). Обход петли гистерезиса осуществляется против часовой стрелки. Множеством $L[E_i(0)]$ является вертикальный отрезок $[S_j^0, -S_j^0]$ — пересечение оси ординат с заполненной петлей гистерезиса, снятой экспериментально при максимально допустимой напряженности электрического поля в пьезоактюаторе. Гистерезисные характеристики пьезоактюаторов не лежат ни в одном из секторов, проходящих через начало координат, поэтому для системы управления деформацией пьезоактюатора (см. рис. 2) стационарное множество или множество положений равновесия состоит не из одной изолированной точки, а из бесконечного числа точек. Возможно лишь, что $S_j(t)$ при $t \to \infty$ приближается к стационарному множеству.

Найдем стационарное множество системы управления деформацией пьезоактюатора при устойчивой линейной части системы управления. На плоскости (E_i, S_j) проведем прямую D с уравнением

$$E_i + W_{ij_l}(0)S_j = 0,$$

где $W_{ij_l}(0)$ — значение передаточной функции линейной части системы управления при $p \to 0$. Множество точек $M = \{(E_i, S_j)\}$ пересечения этой прямой с гистерезисной характеристикой представляет собой отрезок прямой (см. рис. 3).

Пусть $E_i(t) \equiv E_i(0)$, $S_j(t) \equiv S_j(0)$ — стационарное решение системы. Следовательно, получаем уравнение прямой

$$E_{i0} + W_{ij_l}(0)S_{j0} = 0. \qquad (16)$$

Таким образом, стационарным множеством системы будет множество таких пар (E_{i0}, S_{j0}), для которых выполняется полученное уравнение прямой D. Каждой точке пересечения нелинейности с прямой D соответствует одно положение равновесия $(E_{i0}, S_{j0}) \in M$.

Функция $S_j(t)$ гистерезисной нелинейности пьезоактюатора непрерывна, причем

$$\nu_{1ij}, \nu_{2ij} \in [0, \nu_{ij}], \qquad (17)$$

где $\nu_{ij} = \max[dS_j/dE_i]$.

Величины ν_{1ij} и ν_{2ij} определяем по гистерезисной статической характеристике (см. рис. 3), измеренной при максимально допустимой напряженности электрического поля в пьезоактюаторе, где и $\nu_{1ij} = 0$ и $\nu_{2ij} = \nu_{ij}$ — соответственно минимальное и максимальное значение тангенса угла наклона касательной к гистерезисной нелинейности пьезоактюатора.

Соответственно отношение тангенсов угла наклона касательной к гистерезисной нелинейности пьезоактюатора при продольном, поперечном и сдвиговом пьезоэффекте для пьезоактюатора пропорционально отношению соответствующих пьезомодулей

$$\nu_{31} : \nu_{33} : \nu_{15} = d_{31} : d_{33} : d_{15}, \qquad (18)$$

причем $\nu_{ij} = \begin{cases} \nu_{31} \text{ — при поперечном пьезоэффекте;} \\ \nu_{33} \text{ — при продольном пьезоэффекте;} \\ \nu_{15} \text{ — при сдвиговом пьезоэффекте.} \end{cases}$

Тогда достаточные условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора (рис. 4) имеют вид

$$\operatorname{Re}\nu_{ij} W_{ij_l}(j\omega) \geqslant -1 \qquad (19)$$

или

$$\operatorname{Re} W_{ij_l}(j\omega) + \nu_{ij}^{-1} \geqslant 0, \qquad (20)$$

где в круглой скобке j — мнимая единица, ω — частота.

Частотный критерий абсолютной устойчивости (19) прост и удобен для синтеза корректирующих устройств [9] системы управления деформацией пьезоактюатора.

Для пьезоактюатора из пьезокерамики на основе цирконата и титаната свинца промышленных марок ЦТС или PZT максимальное значение тангенса угла наклона касательной к нелинейности при продольном пьезоэффекте составляет порядка 1 нм/В, а при поперечном пьезоэффекте — порядка 0,6 нм/В.

Условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора при случайных воздействиях

Исследование абсолютной устойчивости системы автоматического управления деформацией пьезоактюатора при случайных воздействиях проведем на основе критерия Якубовича [4, 6].

Критерий для системы управления деформацией пьезоактюатора для продольного пьезоэффекта имеет следующую формулировку: для того чтобы нели-

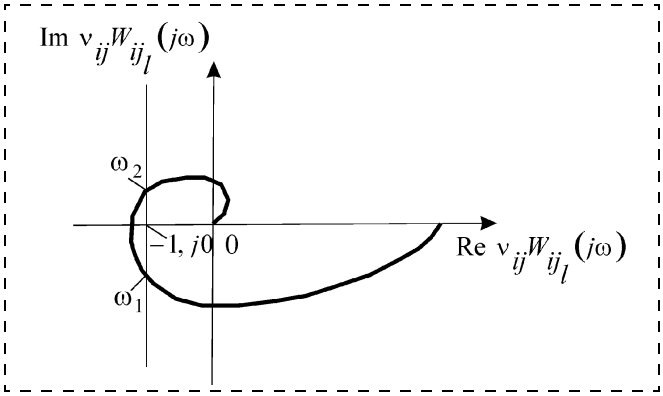

Рис. 4. Критерий абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора на плоскости

нейная система автоматического управления, на которую действует внешнее воздействие, содержащее случайную составляющую

$$f(t) = m_f(t) + f_0(t), \tag{21}$$

причем

$$|m_f(t)| \leqslant R_f, \tag{22}$$

где R_f — верхняя оценка модуля математического ожидания m_f, была абсолютно устойчивой относительно математических ожиданий, достаточно, чтобы при всех $\omega \geqslant 0$ выполнялось неравенство

$$\operatorname{Re} W_{33_l}(j\omega) + \nu_{33}^{-1} \geqslant 0 \tag{23}$$

и производная нелинейной характеристики $\partial m_{S_3}/\partial m_{E_3}$ удовлетворяла неравенству

$$0 < \frac{\partial m_{S_3}\left(m_{E_3}, \sigma_{E_3}\right)}{\partial m_{E_3}} < \nu_{33}. \tag{24}$$

Дисперсию $\sigma_{E_3}^2$ можно оценить посредством дисперсии внешнего воздействия, т. е.

$$\sigma_{E_3}^2 \leqslant k_\sigma^2 \sigma_f^2, \tag{25}$$

где k_σ — взаимная корреляционная функция f и E_3. Тогда приведенное выше двойное неравенство перепишется следующим образом, если σ_{E_3} заменить его верхним значением:

$$0 < \frac{\partial m_{S_3}\left(m_{E_3}, k_\sigma \sigma_f\right)}{\partial m_{E_3}} < \nu_{33}, \tag{26}$$

причем

$$\frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = \frac{1}{2\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) \left[S_3^+ + (E_3) + S_3^-(E_3) \right] \times$$

$$\times \frac{1}{\sigma_{E_3}\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{\left(E_3 - m_{E_3}\right)^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3, \tag{27}$$

где $S_3^+(E_3)$, $S_3^-(E_3)$ — верхняя и нижняя кривые гистерезисной петли.

Так как вершины основных гистерезисных петель находятся на начальной кривой $S_3 = F_1(E_3)$, причем $S_{3m} = d_{33m}E_{3m}$, где d_{33m} — максимальное значение продольного пьезомодуля для каждой основной гистерезисной кривой пьезоактюатора, следовательно, выражение для производной нелинейной характеристики (27) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = \frac{1}{\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) \times$$

$$\times F_1(E_3) \frac{1}{\sigma_{E_3}\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{\left(E_3 - m_{E_3}\right)^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3. \tag{28}$$

Начальная кривая пьезоактюатора при продольном пьезоэффекте

$$F_1(E_3) = d_{33}^0 E_3 + a_{33} E_3^3 + b_{33} E_3^5, \tag{29}$$

причем максимальное значение продольного пьезомодуля для каждой основной гистерезисной кривой имеет вид

$$d_{33m} = d_{33}^0 + a_{33} E_{3m}^3 + b_{33} E_{3m}^4, \tag{30}$$

где d_{33}^0 — начальное значение пьезомодуля; a_{33}, b_{33} — коэффициенты степенного полинома.

Для пьезоактюатоов из пьезокерамики ЦТС-19 при продольном пьезоэффекте имеем следующие значения: $d_{33}^0 = 4 \cdot 10^{-10}$ м/В, $a_{33} = 3{,}1 \cdot 10^{-22}$ м^3/В^3, $b_{33} = -5 \cdot 10^{-35}$ м^5/В^5.

Учитывая полученную зависимость (29), выражение для производной нелинейной характеристики пьезоактюатора (28) преобразуется к виду

$$\frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = \frac{1}{\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) \times$$

$$\times d_{33m} E_3 \frac{1}{\sigma_{E_3}\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{\left(E_3 - m_{E_3}\right)^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3. \tag{31}$$

Используя метод статистической линеаризации, оценим при $m_{E_3} = 0$ величины частных производных относительного перемещения по напряженности электрического поля при продольном пьезоэффекте.

Для системы автоматического управления пьезоактюатором при продольном пьезоэффекте частная производная (31) преобразуется к виду

$$\frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = \frac{1}{\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d_{33m} E_3^2 \frac{1}{\sigma_{E_3}\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{E_3^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3 = d_{33m}. \tag{32}$$

Полученные зависимости позволяют проводить синтез корректирующих устройств для систем управления пьезоактюаторами при продольном пьезоэффекте по критерию абсолютной устойчивости.

Исследование абсолютной устойчивости системы автоматического управления пьезоактюатором при поперечном пьезоэффекте при случайных воздействиях также проведем на основе критерия Якубовича. Аналогично для системы автоматического управления пьезоактюатором при поперечном пьезоэффекте частная производная преобразуется к следующему виду:

$$\frac{\partial m_{S_1}}{\partial m_{E_3}} = \frac{1}{\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d_{31m} E_3^2 \frac{1}{\sigma_{E_3}\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{E_3^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3 = d_{31m}. \tag{33}$$

Преобразуем критерий абсолютной устойчивости системы автоматического управления [4, 6] пьезоактюатором (рис. 4) к виду

$$\mathrm{Re}\nu_{ij} W_{ij_l}(j\omega) + 1 \geqslant 0. \qquad (34)$$

Рассмотрим геометрическую интерпретацию критерия на плоскости амплитудно-фазовой характеристики разомкнутой системы, получаемой из исходной нелинейной системы заменой нелинейного элемента линейным усилителем с коэффициентом усиления ν_{ij}. Соответственно амплитудно-фазовая характеристика разомкнутой системы $\nu_{ij}W_{ij_l}(j\omega)$ должна быть для всех $\omega \geqslant 0$ расположена правее прямой $\mathrm{Re}\nu_{ij} W_{ij_l}(j\omega) = -1$ (рис. 4), причем ω_1 и ω_2 — граничные частоты амплитудно-фазовой характеристики разомкнутой системы, не удовлетворяющей критерию абсолютной устойчивости.

Критерий абсолютной устойчивости системы [4, 6, 9] на плоскости логарифмической амплитудной частотной характеристики и фазовой частотной характеристики разомкнутой системы $\nu_{ij} W_{ij_l}(j\omega)$ в декартовой системе координат $L(\omega) = Q[\varphi(\omega)]$, где $L(\omega) = 20\lg|\nu_{ij} W_{ij_l}(j\omega)|$ — логарифмическая амплитудная частотная характеристика, $\varphi(\omega)$ — фазовая частотная характеристика, формулируется следующим образом: для абсолютной устойчивости системы достаточно, чтобы логарифмическая амплитудная частотная характеристика $L(\omega) = Q[\varphi(\omega)]$ разомкнутой системы управления пьезоактюатором для всех $\omega \geqslant 0$ располагалась ниже граничной кривой $L(\omega) = 20\lg|1/\cos\varphi|$ (рис. 5).

Граничная кривая $L(\omega) = 20\lg|1/\cos\varphi|$ является отображением прямой $\mathrm{Re}\nu_{ij} W_{ij_l}(j\omega) = -1$ на плоскости в декартовой системе координат логарифмическая амплитудная частотная характеристика — фазовая частотная характеристика разомкнутой системы управления.

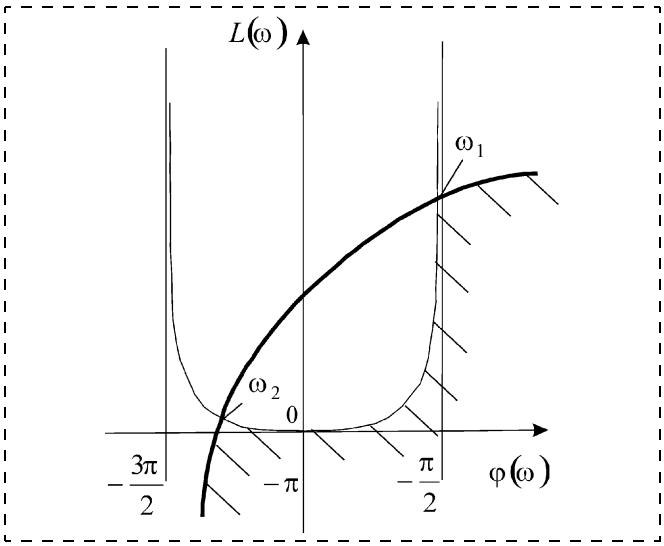

Рис. 5. Выбор корректирующего устройства по критерию абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора. Заштрихована скорректированная логарифмическая амплитудная частотная характеристика, для которой выполняются условия абсолютной устойчивости

В случае, когда логарифмическая амплитудная частотная характеристика $L(\omega) = Q[\varphi(\omega)]$ пересекает граничную кривую $L(\omega) = 20\lg|1/\cos\varphi|$, естественно, возникает задача введения в систему корректирующего устройства, при наличии которого условие абсолютной устойчивости выполняется. На рис. 5 заштрихована скорректированная логарифмическая амплитудная частотная характеристика абсолютно устойчивой системы управления деформацией пьезоактюатора.

Следовательно, при введении в систему корректирующего устройства, надлежащим образом деформирующего амплитудную частотную характеристику линейной части системы, достаточный частотный критерий абсолютной устойчивости будет выполняться.

При практическом использовании в абсолютно устойчивой системе управления образцов пьезоактюаторов из пьезокерамики промышленной марки ЦТС-19 получены следующие экспериментальные характеристики: продольный и поперечный пьезомодули d_{33} = 0,4 нм/В, d_{31} = 0,24 нм/В, которым соответствуют максимальные тангенсы углов наклона гистерезисных характеристик порядка ν_{33} = 1 нм/В, ν_{31} = 0,6 нм/В и полоса пропускания порядка 100 Гц системы управления деформацией пьезоактюатора.

Заключение

Частотный критерий абсолютной устойчивости множества положений равновесия в системе управления деформацией пьезоактюатора с гистерезисной нелинейностью справедлив для представления пьезоактюатора как объекта управления с сосредоточенными или распределенными параметрами. Полученные условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезоактюатора позволяют оценивать устойчивость и рассчитывать характеристики системы управления деформацией пьезоактюатора.

Список литературы

1. **Акопьян В. А., Панин 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.** Деформирование, разрушение и механические характеристики составного пьезопреобразователя // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2003. № 6. С. 97—101.
3. **Афонин С. М.** Исследование и расчет статических и динамических характеристик пьезоактюатора нано- и микроперемещений // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 3. С. 30—41.
4. **Наумов Б. Н.** Теория нелинейных автоматических систем. Частотные методы. М.: Наука, 1972. 544 с.
5. **Наумов Б. Н.** Частотный метод абсолютной устойчивости и качества нелинейных систем и систем с переменными во времени параметрами при заданных и случайных воздействиях // Многосвязные и инвариантные системы. Нелинейные и дискретные системы / Под общ. ред. В. А. Трапезникова. М.: Наука, 1968. С. 254—270.
6. **Барабанов Н. Е., Якубович В. А.** Абсолютная устойчивость систем регулирования с одной гистерезисной нелинейностью // Автоматика и телемеханика. 1979. № 12. С. 5—12.
7. **Физическая** акустика. Т. 1. Часть А. Методы и приборы ультразвуковых исследований / Под ред. У. Мэзона. М.: Мир, 1966. 592 с.
8. **Андронов А. А., Вит А. А., Хайкин С. Э.** Теория колебаний. М.: Физматгиз, 1959. 915 с.
9. **Бесекерский В. А., Попов Е. П.** Теория систем автоматического регулирования. М.: Профессия, 2004. 752 с.

О МОДЕЛИРОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ ATOMISTIX TOOL KIT

В настоящее время в ВУЗах, вследствие их недостаточного финансирования, не всегда имеется возможность приобретения современных дорогостоящих установок для проведения лабораторных занятий и практикумов со студентами. При всеобщей компьютеризации учебного процесса проблема приобретения лабораторного оборудования решается в пользу компьютерной техники. Поэтому, чтобы решить большую часть этих проблем, необходимы специальные методики, направленные на обучение студентов с использованием современных компьютерных технологий, с основными навыками, использования которых будущие специалисты должны ознакомиться уже в процессе обучения в ВУЗе. В том числе, изучение в ВУЗе структуры и свойств молекул требует высокой точности и глубокого анализа, поэтому здесь практически невозможно обойтись без математического моделирования и компьютерных методов ввиду сложности и трудоемкости выполняемых работ.

Компания *Atomistix* (Дания) на основе впервые в мире разработанных ею квантово-механических алгоритмов, применяя инструменты *Atomistix Tool Kit* (ATK) позволяет проводить полноценное моделирование химических соединений, которые дают возможность создания нанотехнологических материалов и устройств на их базе (рис. 1, см. четвертую сторону обложки).

Это коммерческая программа, но после переговоров с представителем компании *Atomistix*, Кафедре микросистемной техники МИРЭА была предоставлена возможность бесплатного лицензионного использования продукта данной компании в течение шести месяцев. Компания предоставляет демоверсию, с которой можно ознакомиться по электронному адресу http://www.atomistix.com.

Данное программное обеспечение имеет стандартный, интуитивно-понятный интерфейс, а также требует минимум времени для освоения.

Моделирование структуры молекул начинается с ввода в компьютер информации с помощью электронной таблицы Менделеева или целых их компонентов молекул из базы данных с учетом способов их соединения, определяемых валентностью атомов. Ввод информации приводит к визуализации на дисплее структуры молекулы.

В работе с данной программой была поставлена задача показать, как можно добиться повышения качества обучения студентов за счет формирования у них не только пространственных представлений о строении сложных молекул, но и навыков моделирования, необходимых в современном учебном процессе.

Программа *Atomistix* предоставляет следующие возможности (рис. 2, см. четвертую сторону обложки):

- "собрать" молекулу посредством встроенной таблицы Менделеева, используя порядковый номер, заряд, валентность, электронную конфигурацию, атомный радиус;
- при заданной конфигурации и способе соединения атомов в молекулу оптимизировать ее структуру из условия минимума энергии в основном состоянии;
- просмотреть "собранную" молекулу в трехмерном виде, применяя инструменты преобразования, вращения, уменьшения (увеличения), поворота и др.;
- рассчитать энергию связи, дипольный момент, колебательный и электронный спектры молекулы;
- использовать встроенные базы готовых соединений.

За полгода работы с *Atomistix* студенты смогли закрепить представления о молекулярном строении вещества, физических и химических законах, и наблюдать созданную ими модель.

Солодовникова И. Е.
e-mail: solodovnikova@mirea.ru

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РАСПОРЯЖЕНИЕ

от 12 августа 2008 г. № 1169-р

МОСКВА

1. Принять предложение Минобрнауки России, согласованное с государственной корпорацией "Российская корпорация нанотехнологий", о проведении 3—5 декабря 2008 г. в г. Москве Международного форума по нанотехнологиям (далее — форум).

2. Образовать организационный комитет по подготовке и проведению форума и утвердить его состав (прилагается).

3. Принять к сведению, что организация и проведение форума осуществляются за счет собственных и привлекаемых государственной корпорацией "Российская корпорация нанотехнологий" средств.

4. Рекомендовать федеральным органам исполнительной власти, органам исполнительной власти субъектов Российской Федерации и общественным объединениям, а также представителям деловых кругов оказать содействие в подготовке форума и принять участие в его работе.

Председатель Правительства Российской Федерации

В. Путин

ПЕРВЫЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ КОНКУРС НАУЧНЫХ РАБОТ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ В ОБЛАСТИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

Первый международный конкурс научных работ молодых ученых в области нанотехнологий будет проходить в рамках Международного форума по нанотехнологиям, проводимого Государственной корпорацией "Российская корпорация нанотехнологий" с 3 по 5 декабря 2008 г. в Экспоцентре (г. Москва).

Цель конкурса — привлечение внимания научной и деловой общественности к научным достижениям молодых ученых в области нанотехнологий.

К участию в конкурсе допускаются российские и иностранные студенты, аспиранты и молодые специалисты в возрасте до 30 лет включительно (не старше 1978 г. р.). Содержание научных работ, заявленных для участия в конкурсе, должно соответствовать основным тематикам секций Форума:

- Наноэлектроника
- Нанофотоника
- Нанодиагностика
- Наноматериалы:
  - Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества
  - Функциональные наноматериалы для энергетики
  - Конструкционные наноматериалы и наноматериалы со специальными свойствами
  - Функциональные наноматериалы (катализаторы, сорбенты, мембраны)
  - Химия и химические технологии наноматериалов
  - Наноматериалы для электроники, магнитных систем и оптики
- Неорганические наноматериалы для электрохимических источников энергии
- Наноэлектромеханические системы
- Нанотехнологии в энергетике, наномеханика и наноплазма
- Нанобиотехнологии
- Биологические молекулярные машины
- Нанотехнологии в медицине
- Нанотехнологии в онкологии
- Математическое моделирование нанотехнологий
- Образование в области нанотехнологий

На пленарном заседании Форума 5 декабря 2008 года будут объявлены победители конкурса. Авторам лучших работ и их научным руководителям будут вручены почетные дипломы Форума. Кроме того, победителям конкурса по каждой секции будут вручены денежные призы:

1-е место — 50 000 руб.;
2-е место — 40 000 руб.;
3-е место — 30 000 руб.

Дирекция Форума: Государственная корпорация "Российская корпорация нанотехнологий"
117420, Россия, Москва, ул. Наметкина, 12А
Тел.: +7 (495) 642-73-35, 542-44-44
Факс: +7 (495) 542-44-34
rusnanoforum@rusnano.com www.rusnanoforum.ru

CONTENTS

Sigov A. S., Emohonov V. N., Verbitskiy S. S., Shilyaev A. A. *Absorption of Electromagnetic Radiation by Metallic Nanostructures* 2

It is shown the possibility of complete absorption electromagnetic radiation in wide spectral an interval — infra-red (IR), submillimetre (SMM) and superhigh-frequency range by experiment. Absorption occur the most intensity in mediums with qusione-dimensional metallic nanostructures.

The term of complete absorption is used while coefficient of reflection is nearly by −20 dB.

Obtained results agree with theoretical estimation.

Keywords: niello, thinfilm coating for absorption of radiation, smal metallic, particles, wide range of lengths of waves, nanostructures.

Bashorov M. T., Kozlov G. V., Ovcharenko E. N., Mikitaev A. K. *A Nanostructures in Polymers: Synergetics of Nonequilibrium Phase Transition "Shear-Crazing"* 5

The transition from shear mechanism to crazing mechanism was considered within the frameworks of synergetics as nonequilibrium phase transition. It was shown that the indicated transition is connected with self-organizing criticality effect of polymeric nanostructures.

Keywords: polymer, nanoclusters, shear, crazing, synergetics.

Tyanginsky A. Yu., Trepov D. A., Tserulev M. V., Sleptsov V. V. *Electrical Impulse Methods of Generation Silver Nanoclusters in Water* 13

In the present paper the connection between parameters of electric discharge in water and size of silver colloidal nanoparticles was performed. The type of electric discharge in water was determine. Correlation between energy of electric discharge in water and concentration of colloidal silver solutions was shown.

The development of machine, which able to start electric discharge in water and product silver colloidal nanoparticles was described. This machine also can control the size of discharge space in electrode system.

Keywords: impulse electric discharge in water, silver nanoparticles, colloidal solution, clean area, sterilization of medical devices and water, individual protective gear.

Zhigalina O. M., Vorotilov K. A., Khmelenin D. N., Sigov A. S. *Structural Behaviour of PZT Films Prepared by Chemical Solution Deposition with Different Lead Content* 17

Ferroelectric lead zirconate titanate (PZT) films prepared by chemical solution deposition technique on Si—SiO_2—Ti—Pt substrates are studied by electron microscopy and XRD. Microstructure of the films are studied as a function of lead excess in film-forming solution (5, 10, 30, 50 mol. %). Correlation between microstructure and phase composition with electrical properties is established.

Keywords: ferroelectric films, electron microscopy, microstructure, phase composition, electrical properties.

Tarnavsky G. A., Anishchik V. S. *Software Suites for Computer Design of Microelectromechanical Systems* 23

We cite (with direction of Internet-addresses) and analyse a number of program tools for computer support of scientifical researches and applied design of microelectromechanical systems in silicon electronics.

Keywords: silicon electronics, semiconductor materials, microelectromechanical systems, computer design, program tools.

Loktev D. V., Andreev V. M., Zinoviev D. V., Tuzovsky K. A., Shyshkova I. N. *Investigation of Heat Transfer at the Air Pressure in MEMS* 29

The article lies in the course of several publications about single crystal sensitive elements.

The limit of macro thermal fluids science equations was discussed.

Based on molecular — kinetics Boltsmann equatation, the structuring of boundary layer at high gradient zone was represented.

The new mechanism of heat transfer was confirmed by a set of unusual effects.

Keywords: microheater, thermoresistor, MEMS, molecular-kinetics Boltzmann equatation.

Babayevsky P. G., Reznichenko G. M., Zhukov A. A., Zhukova S. A., Grinkin E. A. *Electromechanical Transducers of Sensor Micro- and Nanosystems: Physical Foundations and Scaling Effects. Part 1. Sensing Mechanical Elements and Actuators* 32
First part of the review involves analytical treatments of physical operational principles and behavior in different conditions of different types of two main MEMS and NEMS elements — sensing mechanical elements and actuators. Relationships between force and deformation in sensing mechanical elements shows that transfer to nanoscale causes changes of their behavior significantly. From one point of view this provides possibility to increase their deformability and resonance frequency markedly but from another — increases influence on them different side effects such as internal and surface stresses. Analysis of relationships between electrical and thermal stimuli and mechanical response of electrostatical and thermal actuators respectively as well as their scaling effects shows potential efficiency of their applications in NEMS sensing mechanical elements.
Keywords: sensor MEMS, NEMS, electromechanical transducers, sensing mechanical elements, actuators, physical foundations, scaling effects.

Spirin V. G. *Study of Thin-Film Resistor Resistance Error due to Elimination of Resistive and Conductive Layers Overlapping Contact Pads* 44
A relationship between a thin-film resistor resistance error and mask misalignment with a substrate conductive layer at the second photolithography stage for a thin-film resistor design in which the resistive element does not overlap conductor pads is studied. The error value is at a maximum when the resistor aspect ratio is equal to 1.0.
Keywords: thin-film resistor; overlapping contact pad.

Afonin S. M. *Absolute Stability for Control System of Deformation a Piezoactuator for Nano- and Micrometric Movement* 47
Problems of using criterion absolute stability of automatic control system of deformation a piezoactuator are discussed. Main features and principles of absolute stability of these systems are given. Characteristics of criterion absolute stability of automatic control systems of deformation a piezoactuator are proposed.

For foreign subscribers:

Journal of "NANO and MICROSYSTEM TECHNIQUE" (Nano- i mikrosistemnaya tekhnika, ISSN 1813-8586)

The journal bought since november 1999.
Editor-in-Chief Ph. D. Petr P. Maltsev
ISSN 1813-8586.
Address is: 4, Stromynsky Lane, Moscow, 107076, Russia. Tel./Fax: +7(495) 269-5510.
E-mail: nmst@novtex.ru; http://www.microsystems.ru

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромынский пер., 4/1. Телефон редакции журнала **(495) 269-5510. E-mail: nmst@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 17.09.2008. Подписано в печать 16.10.2008. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 6,86 Уч.-изд. л. 7,86. Заказ 1127. Цена договорная

Отпечатано в ООО "Подольская Периодика", 142110, Московская обл., г. Подольск, ул. Кирова, 15