

Издается с 1999 г.

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 базу данных Российского индекса научного цитирования

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. 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. 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.

Релакция:

Григорин-Рябова Е. В. Чугунова А. В. Учредитель: Издательство "Новые технологии"

СОДЕРЖАНИЕ ____

ОБШИЕ ВОПРОСЫ

Ломоносов Д. Б. Состояние работ по организационному и правовому обеспечению системы контроля безопасности наноиндустрии	2
НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ	
Потапов А. А. Стратегия становления нанотехнологии	4
наночастиц: анализ амплитуды фазового контраста	12
КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ	
Печерская Е. А. Классификационные модели фазового состояния сегнетоэлектриков	16
МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ	
Тополов В. Ю., Глушанин С. В., Панич А. Е. Корреляция между гидростатиче- скими параметрами 2—2-композита на основе монодоменного кристалла 0,67Pb(Mg _{1/3} Nb _{2/3})O ₃ — 0,33PbTiO ₃	20
ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ	
Барулина М. А., Джашитов В. Э., Панкратов В. М. Миниатюрный датчик давления для мониторинга и диагностики ракетно-космической техники в условиях механических и тепловых воздействий.	26
МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И БИОЭЛЕКТРОНИКА	
Гребенников Е. П., Самойлович М. И., Орловский Ю. В. Бактериородопсин в опаловых матрицах	30
НОВОСТИ НАНО- И МИКРОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКИ	38
ИНФОРМАЦИЯ	52
Contents.	55

Информация о журнале доступна на сайте журнала: http://www.microsystems.ru. http://eLIBRARY.ru

ПОДПИСКА:

Адрес для переписки: по каталогу Роспечати (индекс 79493); по каталогу "Пресса России" (индекс 27849) • e-mail: nmst@novtex.ru • в редакции журнала (тел./факс: (499) 269-55-10)

© Издательство "Новые технологии", "Нано- и микросистемная техника", 2009.

Общие вопросы

УДК 620.3-192

Д. Б. Ломоносов, канд. техн. наук, зам. ген. директора по науке, ОАО "Научно-исследовательский институт нанотехнологии"

СОСТОЯНИЕ РАБОТ ПО ОРГАНИЗАЦИОННОМУ И ПРАВОВОМУ ОБЕСПЕЧЕНИЮ СИСТЕМЫ КОНТРОЛЯ БЕЗОПАСНОСТИ НАНОИНДУСТРИИ

На основе анализа зарубежных и отечественных программных документов, анализа организационной структуры государственных и международных систем нанобезопасности, анализа правового зарубежного и отечественного опыта организации работ в наноиндустрии предложены рекомендации, направленные на совершенствование системы нанобезопасности и системы сертификации наноматериалов.

Ключевые слова: нанобезопасность, наноиндустрия, нанотехнологии, программы развития нанотехнологии, охрана окружающей среды, охрана здоровья человека, экология, оценка риска влияния наноматериалов на здоровье человека, сертификация наноматериалов.

Предсказываемое в настоящее время экспертами ближайшее будущее нанотехнологии (10-15 лет) сулит многообещающие перспективы во многих областях человеческой деятельности. Однако техническая революция в области нанотехнологий может представлять большую угрозу для здоровья человека и безопасности окружающей среды. Опасные факторы и степень риска, связанные с наноматериалами, еще слабо изучены. Во многих случаях отсутствует информация о потенциальной опасности продуктов нанотехнологий и не обеспечиваются надлежащие меры по ее предупреждению.

Разработка критериев и нормативов безопасности, метрологии, систем стандартизации и сертификации для наноматериалов и наноэлектроники отстает от требований промышленности, что вызывает растущее беспокойство в обществе.

Значение и срочность проведения работ по охране здоровья человека и окружающей среды по оценкам экспертов определяется тем обстоятельством, что объем мирового товарооборота рынка нанопродукции в 2014 году будет составлять от 1,2 до 2,9 трлн долл. (в 2007 году составил 700 млрд долл.).

За рубежом — США, Евросоюзе, Японии и других странах — пробле-

ма безопасности наноматериалов при разработке изделий и процессов производства выдвигается в качестве основного принципа. Такие исследования проводятся в США, Евросоюзе, в других странах, а также в ряде международных организаций (ВОЗ, ФАО, Международный научный институт жизни (International Life Science Institute (ILSI)).

Принимая во внимание тот факт, что государственная поддержка работ в области нанотехнологий в ряде зарубежных стран начата на несколько лет раньше, чем в России, целесообразным представляется изучение международного опыта в сфере правового и организационного обеспечения системы контроля нанобезопасности, сравнительной оценке систем контроля безопасности в России и в государствах, приступивших к разработкам на 5-6 лет ранее, и выработке соответствующих рекомендаций по совершенствованию системы контроля нанобезопасности в законодательной и организационной сферах.

В США развитие нанотехнологий находится под контролем государства, которое выделяет для этого значительные финансовые ресурсы. Стратегия Национальной нанотехнологической инициативы (NNI) реализуется по рамочным программам, разрабатываемым Национальным советом по нанотехнологиям (NSTC), обеспечивающим координацию усилий многочисленных организаций-участников в области развития нанонауки, наноинженерии и нанотехнологий. Деятельность Национального совета находится под контролем Президента и обеспечивается решениями Федерального правительства США. В состав NNI входят 25 федеральных агентств, 13 из которых имеют суммарный бюджет в 2009 году в размере 1,5 млрд. долл. Особое внимание в Национальной нанотехнологической инициативе уделено мерам экологической защиты и нанобезопасности (объем финансирования 76,4 млн. долл.).

Вслед за США в разработку нанотехнологий вступила Япония. В докладе Японской экономической ассоциации (Кейданрэн) в марте 2001 г. изложена национальная научно-техническая программа "Нанотехнология и будущее общество ("n-Plan21"), в которой охрана труда и окружающей среды отнесена к основным направлениям развития нанотехнологий, наряду с информационными технологиями, биологией, энергетикой и материаловедением. Основной девиз развития нанотехнологии в Японии — "создание общества гармонии с природой".

В Европе координатором процесса становления и развития нанотехнологий является созданная в 2002 г. некоммерческая государственная "Европейская ассоциация нанобизнеса" (ENA), основная цель которой — содействие развитию сильной и конкурентоспособной европейской промышленности, базирующейся на использовании нанотехнологий. Наряду с этим в странах Европы функционируют несколько неправительственных организаций, специализирующихся на токсикологических, эпидемиологических и медицинских аспектах обеспечения безопасности потребителей. В последние 10 лет эти организации проводят исследования потенциальных рисков при работе с наноматериалами. В рамках Европейского комитета по стандартизации (CEN) создан подкомитет по нанотехнологиям с рабочими группами по охране здоровья и окружающей среды.

В ряде других стран — Китае, Великобритании, Франции, Германии и др. — также созданы национальные системы контроля безопасности при работе с наноматериалами.

Стратегический характер развития нанотехнологии в России определен президентской инициативой "Стратегия развития наноиндустрии". Государственная политика РФ в сфере нанотехнологий сформулирована в "Программе развития наноиндустрии в Российской Федерации до 2015 года", в федеральной целевой программе "Развитие инфраструктуры наноиндустрии в Российской Федерации на 2008-2010 годы", а также в ряде федеральных, целевых, региональных, отраслевых и ведомственных программ. К 2015 году объем товарооборота российской нанопродукции должен достигнуть 4 трлн. рублей. Тогда Россия сможет конкурировать с передовыми странами и занять 4 % мирового рынка в этой области.

На развитие отечественной наноиндустрии выделено 200 млрд. рублей на 5 лет. Научные исследования и инновационная деятельность в отраслевых направлениях координируются Российской корпорацией "Роснанотех", Российским научным центром "Курчатовский институт", концерном "Наноиндустрия", РАН, РАМН. Одним из основных направлений деятельности указанных учреждений и организаций является изучение воздействия наночастиц и наноматериалов на здоровье человека и на окружающую среду, а также метрологическое обеспечение соответствующих исследований. Важной задачей исследований в области безопасности воздействия наноматериалов на здоровье человека и окружающую среду является установление уровня недопустимого риска.

В соответствии с постановлением Главного государственного врача РФ Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека утверждена Концепция токсикологических исследований, методологии оценки риска, методов идентификации и количественного определения наноматериалов.

Учитывая, что в перспективе ожидается все более тесный контакт человека и других биологических объектов с наноматериалами, изучение вопросов потенциальных рисков их использования представляется первостепенной задачей.

Регулирующую роль государства в обеспечении нормативными документами по безопасности в исследованиях, производстве И применении наноматериалов и изделий, созданных с использованием нанотехнологий, осуществляет Агентство по техническому регулированию и метрологии. В соответствии с постановлением Правительства РФ агентство осуществляет контроль и надзор за соблюдением обязательных требований государственстандартов и технических ных регламентов, а также функции по государственному метрологическому контролю и надзору. В полномочия агентства входят создание технических комитетов по стандартизации и координация их деятельности, принятие программ разработки, экспертиза проектов, утверждение национальных стандартов и взаимодействие с международными организациями по вопросам стандартизации. В России в 2005 году создан технический кабинет по стандартизации в области нанотехнологий. В своей деятельности агентство руководствуется Федеральным законом "О техническом регулировании". В России в соответствии с законом "О техническом регулировании", принятом в 2003 году, разрабатываются программы разработки технических регламентов во всех отраслях промышленности. Этот закон призван провести изменения в системе стандартизации и сертификации выпускаемой продукции в соответствии с международными нормами и требованиями ВТО, куда Россия собирается вступить.

Помимо национальных стандартов все государства, так же как и РФ, придают особое значение гармонизации своих стандартов с международными. Взаимодействие стран по стандартизации в области нанотехнологий осуществляется в рамках Международной организации по стандартизации (ISO). В ноябре 2005 года в ISO создан Технический комитет 229 — Нанотехнологии (ISO/TC 299), в состав которого наряду с 39 странами входит Российская Федерация. Направление работ этого технического комитета связано с разработкой Международных стандартов нанотехнологий по трем основным группам: терминология и номенклатура, метрология и определение параметров, влияние на здоровье, безопасность и окружающую среду. Также в обязанности этого комитета входит стандартизация методов тестирования физических, химических, структурных и биологических свойств наноматериалов и наноустройств.

На основе анализа состояния нанобезопасности в России и за рубежом представляется целесообразным:

- создать в ГК Роснанотех головную организацию, основной задачей которой должна быть координация междисциплинарной деятельности по нанобезопасности, разработанной специалистами институтов РАН, РАМН и ЦНИИ Роспотребнадзора;
- разработать и реализовать программу исследований в области нанобезопасности, основанную на положениях Концепции токсикологических исследований, методологии оценки риска, методов идентификации и количественного определения наноматериалов;
- включить в Федеральную целевую программу на 2008—2010 годы работы по развитию нормативно-методологической базы по нанотехнологии в качестве приоритетных;
- создать разветвленную сеть региональных органов сертификации нанотехнологических изделий и аккредитации метрологических организаций;
- расширить международное сотрудничество по совершенствованию законодательства в части развития метрологии и других аспектов нанотехнологии, в том числе по выявлению потенциальных рисков наноматериалов, принятых ОЭСР.

Список литературы

1. **Hullmann A.** Measuring and assessing the development of nanotechnology // Scientometric. 2007. N 70 (3). C. 739–758.

2. Лысцов В. Н., Мурзин Н. В. Проблемы безопасности нанотехнологий. М.: МИФИ, 2007.

3. **Second** Assessment and Recommendations of the National Nanotechnology Advisory Panel. 2008.

4. Мелконян М. Участие российских организаций в проектах Европейских рамочных программ в области нанотехнологий // Наноиндустрия. 2007. Вып. 4.

*ФL*анотехнологии и зондовая микроскопия

УДК 004.3 + 621.3.049.77

А. А. Потапов, д-р хим. наук, проф., Институт динамики систем и теории управления СО РАН, г. Иркутск, e-mail: matrimm@yandex.ru

СТРАТЕГИЯ СТАНОВЛЕНИЯ НАНОТЕХНОЛОГИИ

Обсуждаются вопросы теоретического обеспечения нанотехнологии. Предлагается подход к решению данной проблемы на основе создания прогностической теории электронного строения.

Ключевые слова: атом, модель, теория, электронное строение.

Введение

Нанотехнологии предназначены для производства атомно-молекулярных систем с требуемыми эксплуатационными свойствами. Нанотехнологии можно подразделить на макроскопические и микроскопические. Макроскопические нанотехнологии основаны на последовательном уменьшении геометрических размеров исходных компонентов вплоть до предельно достижимых. Для них характерно континуальное (непрерывное) представление вещества, при котором свойства данного вещества являются статистическим средним по составляющим его структурным элементам. Микроскопические технологии предполагают производство атомно-молекулярных систем непосредственно из отдельных атомов и/или молекул. В настоящее время за этим классом технологий закреплен термин "механосинтез", под которым следует понимать просто атомномолекулярную сборку.

Эти подходы "сверху—вниз" и "снизу—вверх" принципиально различаются по способу формирования атомно-молекулярных систем. Макроподход опирается в первую очередь на физические [1, 2] и химические технологии [3, 4]. Микроподход стал возможен в связи с практическим осуществлением поатомной сборки наносистем путем манипулирования отдельными атомами и молекулами с помощью специальных устройств на основе атомно-силовых и туннельных микроскопов [5]. Как физические и химические технологии, так и механические объединяют общность целей и задач, направленных на создание наноструктур с управляемыми свойствами.

Эволюция технологий

К категории физических технологий обычно относят процессы, в которых материал обрабатывается одним из следующих физических способов:

- механических (штамповка, литье, резание, шлифовка и т. д.);
- тепловых (термическая обработка);
- электрических;
- магнитных;
- оптических (воздействие электромагнитными полями оптического, ультрафиолетового, рентгеновского диапазонов длин волн);
- лучевых (воздействие электронными, ионными и прочими пучками микрочастиц);

химических (травление, очистка поверхностей образца и т. д.) [2]. При всем многообразии физических технологий общим для них является то, что в процессе обработки образца его химический состав х остается неизменным. Это означает, что свойства х создаваемого изделия определяются свойствами исходного материала (его составом x и структурой s) и степенью воздействия внешнего поля F на структуру материала $x = \chi(s, F)|_{x}$

К категории химических технологий относят технологии, в процессе которых происходят существенные изменения химического состава *х*. Они подразделяются на технологии органического и неорганического (минерального) синтеза.

Органический синтез достигается на основе оптимального подбора исходных компонентов системы в соответствии с принятым планом синтеза (т. е. последовательности стадий, ведущих к получению конечного продукта) с использованием синтетических методов в целях осуществления направленного синтеза химических связей или введения функциональных групп в нужном месте синтезируемой молекулы [1, с. 399].

Неорганический синтез сводится к созданию неорганических соединений в результате смешения реагентов, активации реакционной смеси и проведения химической реакции с последующим выделением целевого продукта [1, с. 214]. Активация системы достигается одним из перечисленных выше методов физического воздействия. Характерным для химических технологий является обусловленность свойств конечного продукта его исходными компонентами, т. е. $\chi = \chi(x)|_F$.

Таким образом, в основе физических и химических технологий лежит возможность управления свойствами материала (вещества) путем воздействия на его структуру внешними полями или путем изменения его компонентного состава. Эффективность управления свойствами конечного продукта зависит от уровня знания законов структурообразования вещества. Очевидно, что эти законы определяются пониманием электронного строения собственно атомов и молекул, а также пониманием механизмов их взаимодействия в процессах формирования атомномолекулярных структур. Фактическое отсутствие знаний о внутриатомном строении ограничивает

- НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, № 6, 2009 –

построение теорий вещества на уровне феноменологического описания. Данное обстоятельство предопределяет полуэмпирический характер физических и химических технологий, включая нанотехнологии. По сути, они остаются на уровне поиска удачной технологии методом "проб и ошибок".

Технологии, в основе которых лежит атомно-молекулярная сборка, требуют знания электронного строения атомов и молекул по определению. Именно атомы и молекулы выступают в качестве строительных элементов; они формируют геометрию и архитектуру создаваемой конструкции. И они же обеспечивают связывание (сцепление) элементов между собой, обеспечивая необходимую устойчивость конструкции в целом. Собственно связывание атомов и молекул осуществляется за счет перераспределения электронной плотности исходных микрочастиц. Поэтому в процессе атомной сборки изменяются свойства самих атомов или молекул. Особенно сильно этот эффект проявляется при химическом связывании элементов (см. ниже). Вместе с тем, целенаправленное варьирование свойствами связи (сцеплеосуществлять ния) позволяет управление свойствами наноконструкции в целом. В этом случае интегральное свойство изделия является функцией структуры микрочастиц s, состава x и параметра связи S, т. е. $\chi = \chi(s, x, S)$. Прослеживается эволюция технологий в направлении повышения управляемости свойств создаваемых изделий и продуктов, приведшая в конечном итоге к нанотехнологической революции. Она провозгласила принципиальную возможность создания объектов искусственной природы путем поэлементной организации атомномолекулярных производств.

На рисунке представлена блоксхема гипотетического производства атомно-молекулярных систем. Она дает наглядное представление о еще не решенных в данной области проблемах. Единственным звеном на этой схеме, которое реально существует, является исполнительное устройство. Именно оно послужило толчком к осознанию вновь открывающихся технологических возможностей атомномолекулярной сборки. Рассмотрение вопросов технического совершенствования нанороботов и ассемблеров (в роли исполнительного устройства) не входит в задачу настоящей статьи. Важно, что задача создания совершенного наноробота для технологических целей четко сформулирована, и уже это может служить залогом успешного ее завершения. Главная задача настоящей работы заключается в том, чтобы показать, что кроме чисто технических вопросов нанотехнологии для практического осуществления механосинтеза (и нанотехнологий в целом) предстоит разрешить не менее важную проблему теоретического обеспечения и научного сопровождения нанотехнологии. Эту проблему обычно стараются обходить, несмотря на ее очевидную значимость. Но скрыть ее или обойти каким-либо образом не удастся. Об этом свидетельствует и приведенная на рисунке блок-схема нанопроизводства.

Обязательным звеном, обеспечивающим работу исполнительного устройства, является система управления. В ее основе лежат программное обеспечение (ПО) и алгоритм выполнения операций атомно-



Блок-схема гипотетического производства атомно-молекулярных систем

молекулярной сборки. Чтобы разработать соответствующий алгоритм, нужно располагать методами и практическими рецептами выполнения операций формирования и организации системы нанопроектирования, основой которой должны выступать фундаментальные знания электронного строения атомов и молекул, а также законы межатомных и межмолекулярных взаимодействий. Очевидно, что уровень теоретических разработок на атомно-молекулярном уровне предопределяет успех практической реализации атомно-молекулярного производства.

Квантово-механическое описание вещества

Считается, что основой теоретического обеспечения нанотехнологии может служить квантовая (волновая) теория. Квантово-механическое (неэмпирическое) описание основано на применении уравнения Шредингера [6, 7]

$$H_{\Psi} = E_{\Psi}, \qquad (1)$$

где H — оператор Гамильтона (гамильтониан), определяющий полную энергию системы; ψ — волновая функция; E — собственные значения энергии системы:

$$\begin{split} H &= -\sum \frac{h^2}{2m_i} \nabla_i^2 - \sum \frac{h^2}{2M} \nabla_i^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum \frac{e^2}{r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{R_{\alpha\beta}} - \\ &- \sum \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} \,, \end{split}$$

где е и Z— заряд электрона и ядра соответственно; *m* и M— массы электронов и ядер соответственно; ∇^2 — оператор Лапласа; *r* и R координаты электронов и ядер соответственно; *h*— постоянная Планка; *i* и *j* относятся к электронам, а α и β— к ядрам.

Волновая функция ψ является решением уравнения Шредингера; это нефизическая величина, и ей придается смысл амплитуды вероятности, а квадрату волновой функции $|\psi(x, y, z)|^2$ отводится роль относительной плотности вероятности обнаружить электрон в точке с координатами x, y, z.

Уравнение Шредингера описывает поведение точечной массы *m*

электрона с зарядом е в силовом поле ядра, но движение этой массы выражено не в координатах, как это обычно принято рассматривать в случае частиц, а в изменениях полной и потенциальной энергии. Фактически в его основании заложены несовместимые понятия частицы и волны. "... уравнение Шредингера не имеет строгого вывода. Оно не выводится, но устанавливается, и правомерность его подтверждается согласием с опытом..." [7, с. 487]. Но "согласие с опытом" достигнуто только для одного атома водорода, причем получено оно ценой нарушения логики и потери физического смысла конечного результата. Согласно квантово-механическим представлениям, электрон в атоме чудесным образом превращается в бесформенное облако с максимальной плотностью заряда в центре ядра (!?). Согласно закону Кулона, электрон, в каком бы виде он ни находился, должен упасть на ядро. Отсутствие физического смысла уравнения Шредингера делает его уязвимым для справедливой критики, а полученные с его помощью результаты не вызывают доверия.

последующем уравнение B Шредингера было распространено на многоэлектронные атомы. Этот перенос осуществляется в так называемом одноэлектронном приближении, согласно которому выделенный электрон находится в некотором усредненном поле, создаваемом ядром и всеми остальными электронами. Наиболее широко распространен метод Хартри — Фока, в основании которого лежит процедура нахождения самосогласованного поля (ССП). Результатом ССП являются самосогласованные орбитали, которые и являются решением одноэлектронного уравнения Шредингера [7—11]. Но процедура ССП также не имеет ни теоретического, ни экспериментального обоснования. Известно, что энергия связи (потенциалы ионизации) внешних и внутренних электронов с ядром (или остовом), принадлежащих разным оболочкам, различаются в сотни и тысячи раз. Поэтому идея усреднения энергии ССП, заложенная в процедуре нахождения одноэлектронного уравнения Шредингера, совершенно не отвечает действительному строению атомов. Фактически усреднение внутреннего поля атома приводит к "стиранию" записанной в атоме структурной информации и тем самым исключает саму возможность изучения атома.

Описание орбиталей многоэлектронных атомов осуществляется с помощью набора квантовых чисел n, l, m и *s* в результате решения уравнения Шредингера для атома водорода. В последующем эта идея закрепилась в виде ауфбау-принципа (принципа построения), в соответствии с которым атомная орбиталь многоэлектронного атома конструируется путем последовательного присоединения водородных орбиталей [10, с. 386; 8, с. 436], хотя их первоначальный смысл претерпел удивительные метаморфозы. Главное квантовое число *n*, которое представляет дискретность энергетических уровней атома водорода $\varepsilon = -R_H/n^2$, где R_H — постоянная Ридберга), теперь приобрело смысл порядкового номера *n* электронной оболочки атома. Азимутальное квантовое число *l*, несущее смысл квантования орбитального углового момента атома водорода, при переносе его на описание многоэлектронных атомов трансформировалось в параметр, ответственный за геометрическую форму атомных орбиталей: при l = 0 *p*-орбитали имеют гантелеобразную форму; при l = 2*d*-орбитали имеют форму четырехлепестковых розеток и т. д. Эти представления легли в основу построения электронных конфигураций атомов путем последовательного присоединения электронов в ряду атомных орбиталей: 1s < $< 2s < 2p < 3s < 3p < 3d < \dots$. При заданном главном числе *п* энергии подуровней s-, p-, d-, f-, g-, h-состояний последовательно увеличиваются, а в пределах каждого из этих подуровней энергии атомов оказываются вырожденными, что противоречит данным эксперимента.

Эта методология была тоже принята для объяснения строения периодической таблицы Менделеева, а также для объяснения механизма образования химической связи. Однако анализ экспериментальных данных по оптическим и рентгеновским спектрам, а также по энергиям связи (потенциалам ионизации) убеждает в пол-

ной несостоятельности приведенной выше идеализированной схемы энергетических уровней водородоподобных атомных орбиталей [10, с. 390]. Произошла явная подмена понятий: закон квантования энергетических уровней атома водорода принят в качестве основания для структурной организации многоэлектронных атомов. Но это принципиально разные объекты: в первом случае это спектр возбужденного состояния атома водорода, а во втором — энергия связи основного невозмущенного состояния атомов. Кроме того, допущение о структурной организации атомов по принципу аддитивности водородоподобных атомных орбиталей совершенно не правомерно, поскольку характер внутриатомных взаимодействий у атома водорода и у многоэлектронных атомов существенно различный; а присущие многоэлектронным атомам электрон-электронные взаимодействия у атома водорода вообще отсутствуют. Принятое в настоящее время объяснение периоэлементов личности таблины Менделеева с помощью методологии водородоподобных орбиталей не убедительно. Дело в том, что элементов периодичность по Менделееву не совпадает с последовательностью заполнения оболочек атомов; внешние оболочки образованы s- и p-электронами, а d-, f-, g- и h-орбитали относятся к электронам внутренних оболочек. В этом убеждает тот факт, что внешние оболочки имеют не более восьми электронов. Объяснение химической связи с помощью водородоподобных орбиталей также безосновательно; например, структура молекул в большинстве случаев не совпадает с направленностью орбиталей, и для их согласования приходится вынужденно прибегать к совершенно нереалистическому предположению о формировании sp-, sp²- и sp³-гибридизированных орбиталей [8, 10]. Эти и многие другие несуразности квантового (лучше сказать, волнового) описания вещества являются результатом и следствием нефизичности уравнения Шредингера и входящей в него волновой функции.

Переход к описанию молекул и плотных веществ строится на основе различных процедур, которые в конечном итоге сводятся

к комбинации атомных орбиталей исходных атомов. Поэтому все недостатки. присушие квантовомеханическому методу описания отдельных атомов, переносятся на описание молекул и плотных веществ (например, [12]). То, что сегодня принято считать современной теорией многоэлектронных атомов, не отвечает ни одному из требований, предъявляемых к "обычным" теориям (это - соответствие теории эксперименту, внутренняя непротиворечивость теории и соблюдение логики вывода). В атомной физике утверждается, что будто бы обоснованием квантово-механического подхода служит согласование рассчитываемых величин с экспериментом. Но это не так. Все поставлено с ног на голову. В результате создается ложное представление о действительном состоянии науки о веществе. И как следствие — многочисленные ссылки на специфику квантовых эффектов, затрудняющих постановку и практическую реализацию нанотехнологии в целом. Происходит смешение совершенно разных явлений: квантовых явлений, связанных с дискретностью энергетических уровней атомов и молекул в их возбужденном состоянии, и явлений, связанных с размерностью атомно-молекулярных систем. Первые существенны только в условиях сильного возмущения основного состояния микрочастиц и потому никакого отношения к проблеме построения искусственных атомно-молекулярных систем не имеют. Все "тонкости" атомно-молекулярной сборки наносистем находят свое исчерпывающее объяснение в рамках классических представлений об атомных и молекулярных взаимодействиях. Анализ динамики становления науки о веществе показывает, что логическая линия ее развития претерпела сбой на этапе "неэмпирического описания", когда физическое осмысление явлений и процессов материального мира было подменено математическими абстракциями типа волновых функций. Сегодня можно констатировать, что належлы, связанные с решением проблемы электронного строения вещества на основе квантово-механических (волновых) представлений, не оправдались [13].

Неквантовое описание вещества

Несмотря на культ квантово-волновой парадигмы в физике сохранились традиционные разделы — термодинамика, физика диэлектриков, полупроводников и металлов, механика материалов и т. д. В каждом из этих разделов выработаны характерные для данной области физики методология и инструментарий. Обычно они не выходят 38 рамки феноменологического описания [13]. Все большее распространение находят методы компьютерного моделирования [14], которые в некоторой степени способствуют сближению различных способов описания вещества. Вообще, в области электронного строения вещества наряду с исторически традиционным противостоянием классической и квантово-волновой идеологий всегда имело место встречное движение, направленное на поиск компромиссов между квантово-механическим и классическим описанием вещества. Примером могут служить принцип соответствия Бора, теорема Гельмана-Фейнмана, теория дифференциальной топологии и качественной динамики, теория динамических систем, математическая химия и др. Особенно надо выделить метод функционала электронной плотности, который позволил в своем описании освободиться от волновой функции и перейти к измеряемой величине электронной плотности как параметру теории. "По существу, сейчас мы приходим к переоценке роли классических методов в атомной физике. Успехи этих методов, обнаруженные в последнее лесятилетие. связаны с нелостаточной разработанностью старой классической атомной механики. вытесненной новой квантовой теорией" [16].

В настоящее время получены высокоточные данные по потенциалам ионизации различных порядков [17, 18] и поляризуемостям атомов [19, 20]. Потенциалы ионизации *I* атомов и ионов характеризуют их энергетическое состояние и с учетом спецификации их измерений могут служить количественной мерой энергии связи электронов с ядром (остовом атома) [13]. Поляризуемость α атомов характеризует способность электронных оболочек деформироваться во внешних электрических полях [20]. Анализ имеющихся в настоящее время данных I и α позволяет распространить полуклассическую теорию Бора на многоэлектронные атомы на основе так называемой диполь-оболочечной модели [13, 21].

В отличие от квантово-механического описания в данной модели электроны каждой из оболочек вращаются по круговой или эллиптической орбитам, а их положение относительно друг друга и относительно ядра (остова) строго определено с помощью радиуса и межоболочечных расстояний или длины большой полуоси эллипса [21, 22]. Эти величины получены на основе данных измерения І и α; в этом отношении они относятся к категории "наблюдаемых" величин, что снимает возможные возражения в отношении их несоответствия принципу неопределенности Гейзенберга.

На основании анализа экспериментальных данных в рамках классических представлений о поведении электронов в центральном поле остова атома автором предложена упомянутая выше диполь-оболочечная модель атома [13, 21, 22] как логическое развитие боровской оболочечной модели [23]. Согласно данной модели, атом представляет собой многослойную структуру вложенных друг в друга электронных квазисферических оболочек. Устойчивость атомов достигается благодаря динамическому равновесию сил кулоновского притяжения электронов в центральном поле ядра и центробежных сил отталкивания вращающихся электронов. Радикальный шаг в усовершенствовании оболочечной модели атомов был сделан в результате введения в описание модели количественных критериев на основе ряда измеряемых энергетических и геометрических величин [13, 21, 22]. В рамках диполь-оболочечной модели многочастичную (многоэлектронную) систему удалось свести к двухчастичной (двухзарядной) системе, состоящей из остова, имеющего положительный заряд +*eN_n* (*N_n* – число электронов на внешней п-й оболочке), и заряда внешней оболочки как системы взаимосвязанных между собой N_n электронов. Энергия связи є электронов каждой из оболочек обусловлена действием сил кулонов-

притяжения ского валентных электронов к остову атома и сил взаимного отталкивания электронов соответствующей оболочки. Электроны каждой оболочки образуют одну из правильных конфигураций с равноудаленными электронами, так что: атомы I группы таблицы Менделеева имеют точечную конфигурацию, атомы II группы — линейную (зеркально-симметричную относительно ядра), атомы III группы — тригональную, атомы IV группы — тетраэдрическую и т. д. вплоть до атомов VIII группы, которым соответствует октаэдрическая (кубическая) конфигурация. Согласно данной модели, электроны локализованы в вершинах перечисленных фигур. Электроны каждой отдельной оболочки тождественны, а их энергии вырождены. Для описания данной модели необходимо и достаточно иметь два параметра: *п* — число оболочек (или номер периода) и N_n — число электронов на *n*-й оболочке. Данная модель атома совместима с динамическим поведением электронов в предположении, что каждый электрон вращается вокруг ядра (остова атома) либо по круговой (для одно- и двухэлектронных оболочек), либо по независимой эллиптической орбите (для многоэлектронных оболочек), фокус которой совпадает с центром (ядром) данного атома. При этом каждая оболочка сохраняет свою конфигурацию за счет самосогласованного движения электронов в центральном поле ядра (остова) и взаимного кулоновского отталкивания электронов одной оболочки. Эллиптические орбиты образуют розетку с числом лепестков, равным числу валентных электронов. В результате у атома формируются выделенные направления с повышенной электронной плоскостью, которые обеспечивают направленность потенциальных связей в процессе организации структуры молекул и плотных веществ.

Как было отмечено выше, в рамках диполь-оболочечной модели атома многочастичную трудно решаемую задачу удается свести к задаче взаимодействий двух зарядов — положительного заряда $+eN_n$ остова атома и заряда каждого из электронов -e. Эта энергия представляет собой потенциальную энергию ε_{Π} каждого из электронов *n*-й оболочки в центральном поле остова, так что

 $\varepsilon_n = -\frac{e^2 N_n}{d_{1n}}$. В этом случае движе-

ние электронов можно представить одноэлектронным уравнением Гамильтона

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{\rm K} + \varepsilon_{\rm II} = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2 N_n}{d_{1n}}$$
или

$$\varepsilon_n = \frac{m}{2} \left[\left(\frac{\partial r}{\partial t} \right)^2 + r^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 \right] - \frac{e^2 N_n}{d_{1n}}, \qquad (2)$$

где $\varepsilon_{\rm K}$ и $\varepsilon_{\rm II}$ — кинетическая и потенциальная энергия соответственно; $\frac{\partial r}{dt}$ и $\frac{\partial \varphi}{dt}$ — радиальная и азимутальная составляющие скорости движения; *m* и *e* — масса и заряд электрона; d_{1n} — расстояние между остовом атома и его валентным электроном, связанное с радиусом атома a_n соотношением

$$a_n = d_n + a_{\text{oct}},$$

где $a_{\text{ост}}$ — радиус остова, который складывается из суммы внутренних межоболочечных расстояний; N_n — порядковый номер атома в *n*-м периоде. Первое слагаемое в (2) представляет кинетическую энергию вращательного движения электрона, а второе — энергию кулоновского притяжения между зарядами остова атома и электрона в зависимости от эффективного расстояния *d* между ними.

Физический смысл одноэлектронного уравнения (2) заключается в том, что движение каждого из электронов соответствующей оболочки задается центральным полем остова и силами взаимного отталкивания электронов данной оболочки. Это означает, что пространственное положение каждого электрона в подвижной системе координат строго определено. В простейшем случае *атома водорода* в модели Бора—Розерфорда,

т. е. при
$$N_n = 1$$
, $d_{1n} = a_B$, $\frac{\partial r}{dt} =$

уравнение (2) приводит к известному выражению для энергии связи [7]

$$\varepsilon_H = -\frac{e^2}{2a_B},\tag{3}$$

где $a_B = 0,529$ Å — боровский радиус атома, который в модели Бора—Резерфорда определен как радиус круговой орбиты электрона в центральном поле ядра.

Симметрия конфигураций электронных оболочек позволяет рассчитать составляющие внутриатомной энергии — энергию электронэлектронного отталкивания ε_{ee} и энергию притяжения электронов остовом атома ε_{ne} . Согласно теореме Гаусса, заряд остова атома равен $+eN_n$; он закономерно увеличивается в соответствии с порядковым номером N_n атома в *n*-м периоде. В свою очередь, увеличение заряда остова приводит к уменьшению исходного радиуса

$$a_{1n}$$
 до величины $a_n = \frac{a_{1n}}{N_n}$ (эффект

самосжатия). Можно показать, что [21]

$$\varepsilon_{ee} = \sum_{n=1}^{N_n - 1} \frac{e^2}{2a_n} = \frac{e^2}{2a_{1n}} N_n (N_n - 1) = \varepsilon_{1n} N_n (N_n - 1), \quad (4)$$

где ε_{1n} — имеет смысл энергии связи атомов I группы *n*-го периода таблицы Менделеева в приближении недеформируемых оболочек. С учетом соотношения $d_n = \frac{d_{1n}}{N_n}$

энергия притяжения каждого из электронов к остову атома определяется выражением

$$\varepsilon_{ne} = -\frac{e^2 N_n}{2d_{1n}} = \varepsilon_{1n} N_n^2, \qquad (5)$$

где d_{1n} — расстояние между валентными электронами с остовом атома; ε_{1n} — энергия связи атома I группы *n*-го периода в приближении недеформируемого остова; N_n — порядковый номер элемента в *n*-м периоде. Результирующая энергия связи ε_n атома в невозмущенном состоянии в приближении точечных зарядов $a_{1n} = d_{1n}$ определяется формулой

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{ne} + \varepsilon_{ee} =$$
$$= -\frac{e^2 N_n}{2a_{1n}} = \varepsilon_{1n} N_n.$$
(6)

– НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, № 6, 2009 -

0

Из данного выражения следует, что энергия связи ε_n в принятом нами приближении линейна по N_n. Величина ε_{1n} выступает здесь в качестве размерной энергетической единицы. Этот теоретический вывод в качественном отношении согласуется с экспериментальными зависимостями $\varepsilon_n(N_n)$ [20, 21]. Чтобы добиться количественного согласия рассчитываемых по формуле (6) величин ε_n , следует учесть эффект экранирования, заменяя заряд остова +eN в выражении (5) на эффективный заряд $q_{N_n} N_n$, и учесть дополнительный вклад в результирующую энергию, обусловленную индукционным взаимодействием внешних электронов с остовом атома. Ясный физический смысл входящих в выражение (6) величин позволяет в процессе дальнейших исследований электронного строения атомов и внутриатомных процессов последовательно совершенствовать модель атома и соответственно повышать точность уравнения (6).

Строение молекул. Химическая связь

В свободном состоянии большинство атомов таблицы Менлелеева обладают высокой химической активностью и в обычных условиях стремятся к объединению в более устойчивые атомно-молекулярные структуры. Высокую активность атомов удается объяснить их дипольной структурой в рамках диполь-оболочечной модели [21, 22], согласно которой атом представляет совокупность диполей, образуемых остовом атома и каждым из валентных электронов. Наибольший дипольный момент имеют атомы І группы таблицы Менделеева. По мере увеличения числа электронов на внешней оболочке атома дипольные моменты отдельных внутриатомных связей взаимно компенсируются. и результирующий момент уменьшается, соответственно уменьшается и их химическая активность. Тем не менее, роль дипольных моментов в образовании молекул остается чрезвычайно важной. Их роль двоякая. Они обусловливают механизм так называемых сил дисперсионного взаимодействия, которые становятся существенными на малых расстояниях или между атомами. Кроме этого электрические поля, создаваемые отдельными диполями, в непосредственной близости от атома полностью не компенсируются, и результирующее поле в выделенном направлении связи с другими атомами отлично от нуля, что вносит свой вклад в электростатическое взаимодействие.

Чрезвычайно важную роль в структурообразовании молекул играет явление, называемое сродством к электрону [17]. Оно проявляется в способности атомов притягивать к себе электроны (протоны), т. е. атомы ведут себя как заряженные микрочастицы. Природа данного явления становится понятной, если исходить из диполь-оболочечной модели атома. Здесь существенным представляется то, что электроны занимают в пространстве строго определенное положение относительно друг друга. Пространственная локализация электронов внешней оболочки означает, что эффективность экранирования заряда остова максимальна в направлениях, совпадающих с направлением отдельных диполей "остов — электрон". В секторах, образованных диполями, остов атома оказывается максимально открытым для взаимодействия с другими атомами. Это взаимодействие осуществляется по принципу комплементарности атомов: "выступ впадина". Роль выступа может играть кажлый из электронов одного атома, а роль впадины — остов другого атома. В результате этого чисто кулоновского взаимодействия происходит "перекрывание" электронных оболочек атомов.

Следуя данной модели химического связывания, атомы І группы таблицы Менделеева образуют молекулы в результате прямого взаимодействия диполей атомов, имеющих одинаковую ориенташию. Максимально открытая поверхность остовов атомов I группы в наибольшей степени благоприятствует перекрыванию оболочек атомов и образованию молекул. Оболочки атомов II группы образованы двумя электронами, вращающимися по круговой орбите. Они представляют конфигурацию в виде пары равных и разнонаправленных диполей. Проникновение на круговую орбиту "лишнего" электрона затруднено, поэтому образование молекул из атомов II группы весьма ограничено. У атомов III и последующих групп оболочки формируются в виде независимых эллиптических орбит. Данное обстоятельство обеспечивает принципиальную возможность перекрывания электронных оболочек по рассмотренному выше комплементарному механизму "выступ — впадина".

Таким образом, химическую связь можно трактовать как результат перекрывания электронных оболочек атомов за счет проникновения электрона одного атома в область притяжения остова другого атома с последующим обобществлением пары электронов на одной из эллиптических орбит. Число возможных химических связей молекулы определяется числом эллиптических орбит у структурообразующего атома. Этим объясняется все многообразие наблюдаемых в природе молекулярных структур.

Устойчивость молекул достигается в результате баланса сил: с одной стороны, сил притяжения между остовом и электроном, принадлежащих разным атомам, и сил взаимного отталкивания одноименно заряженных остовов и электронов с другой стороны. Отличительной особенностью молекулярного уровня организации вещества является то, что межатомные связи молекул имеют сугубо "химический" характер. Это означает, что образование молекул достигается ценой разрушения целостности образующих их атомов. Характерная для молекул структурная устойчивость выделяет молекулы в качестве структурных элементов, сохраняющих свою индивидуальность в составе более сложных атомно-молекулярных об-Они представляют разований. класс молекулярных веществ, архитектура которых поддерживается силами межмолекулярного взаимодействия. У веществ данного класса энергия межмолекулярных взаимолействий сушественно меньше энергии внутримолекулярных взаимодействий. Это огромный класс веществ, включающий в себя всю "органику" и значительную часть неорганических веществ. Присущая молекулам устойчивость предопределяет возможность их использования в качестве строительных элементов в будущих микроконструкциях. Отличительной особенностью межмолекулярных взаимодействий "физический" характер является связывания (сцепления) молекул.

Молекулярные вещества. Физическая связь

Описание физической связи является одной из важнейших задач построения теории электронного строения вещества. Она решается на основе методологии парных потенциалов взаимодействия [24]. В основе данного подхода лежит метод потенциальной функции, представляющей собой зависимость энергии взаимодействия между молекулами от расстояния между ними. Характерной особенностью всех потенциальных функций является наличие у них выраженного минимума энергии, соответствующего равновесному (устойчивому) состоянию вешества. Известно огромное число потенциалов, различающихся способом представления притягивательной и отталкивательной ветвей потенциальной функции u(R) [24]. Правомерность применения того или иного потенциала предопределяет уровень прогностической способности разрабатываемой теории. Недостатком известных потенциалов является необходимость введения в их аналитичевыражения подгоночных ские параметров. Тем самым уже в исходном звене построения теории вешества ее возможности оказываются ограниченными уровнем понимания механизма межатомных и межмолекулярных взаимодействий.

К построению парных потенциальных функций можно подойти принципиально по-новому, опираясь на разрабатываемую автором диполь-оболочечную модель [21, 22]. Приведем модельную потенциальную функцию (в ее символическом виде), с помощью которой можно продемонстрировать характерные особенности данного типа потенциалов [25, 26]:

$$u(R) = u_{\rm np}(R) + u_{\rm or}(R) = -\frac{3}{4} \frac{\alpha^2 \varepsilon}{R^6} + \frac{q^2}{R - 2a_{\rm n}},$$
 (7)

где α — поляризуемость микрочастиц; ε — энергия связи электронов внешней оболочки с атомом; q — эффективный заряд атомов, обусловливающий эффект сродства к электрону; a_{Π} — поляризационный радиус, который представляет собой максимальное расстояние внешних электронов по отношению к ядру. Данная потенциальная функция сохраняет свой стандартный вид. Притягивательная ветвь $u_{\rm np}(R)$ построена так же, как и в известных потенциалах, на основе представлений о дисперсионной природе взаимного притяжения атомов и молекул. Принципиально по-новому решается вопрос с отталкивательной ветвью $u_{\text{от}}(R)$ потенциала. В основе ее построения лежат две илеи: конечные и точно заланные размеры атомов, определяемые радиусом а_п, и эффективные заряды q атомов. В совокупности они формируют потенциальную И функцию. Вдали от равновесного состояния (при $R \gtrsim R_0$) энергия взаимодействия между атомами определяется преимущественно дисперсионной энергией притяжения между атомами (первое слагаемое). Вблизи равновесия $R = R_0$ энергия $u(R_0)$ соответствует энергии связи между двумя микрочастицами. При дальнейшем уменьшении расстояния между ними при $R < R_0$ второе слагаемое в (7) становится преобладаюшим. т. е. начинают преоблалать силы отталкивания между микрочастицами, и при $R \rightarrow 2a_n$ потенциал u(R) резко возрастает, отражая тем самым факт относительной непроницаемости атомов (или молекул). Конечно, уравнение (7) представляет лишь общий подход к построению "бесподгоночных" потенциалов. Для выполнения расчетов оно должно дополнительно включать вклады, учитывающие анизотропию микрочастиц и индивидуальные особенности их строения. Для этого необходимо знать геометрические параметры, тензор поляризуемости, энергию связи валентных электронов в атомах, входящих в состав молекул. Фактическое отсутствие этих данных в настоящее время так или иначе связано с отсутствием действенной теории атомного строения.

Энергия межчастичных взаимодействий

Следующий этап в построении теории вещества связан с описанием его структурной организации в целом. Необходимость этого этапа исследований обусловлена тем, что надатомная или надмоле-

кулярная структура вещества формируется под действием эффективность потенциалов, представляющих действительную энергию межатомных и/или межмолекулярных взаимодействий как совокупность парных потенциалов, участвующих во взаимодействии атомов и молекул. Проблема определения эффективных потенциалов заключается в их неаддитивности по отношению к парным потенциалам. По сути, межмолекулярные взаимодействия носят кооперативный характер, когда эффективная энергия межмолекулярных взаимодействий зависит от числа и типа микрочастиц, окружающих выделенную молекулу. Собственно, именно в этом видится проблема построения теории вещества на конечном этапе описания его архитектуры.

К проблеме поиска эффективной энергии межатомных и/или межмолекулярных взаимодействий можно подойти, используя физически обоснованные парные потенциалы типа (7). Решение данной задачи сводится к анализу поведения энергии связи отдельных атомов (или молекул) в составе кластера в зависимости от числа атомов (молекул) в кластере в целях выявления закономерных связей между этими величинами [25, 26]. Идея проста. В силу исходной симметрии атомов конфигурация кластера в процессе его образования принимает последовательно точечную, парную, тригональную, тетраэдрическую, бипирамидальную и т. д. геометрию. Очевидно, что каждой из этих конфигураций соответствует своя энергия связи между атомами. При достижении некоторого характерного для данного кластера числа *n* атомов свойства кластера (определяемые энергией межатомных связей) перестают зависеть от числа атомов в кластере. Свойства кластера вырождаются в свойства объемного вещества.

В простейшем случае двухатомного кластера энергия физического связывания соответствует энергии парного взаимодействия $u = u_{11}$. Принимая эту энергию в качестве размерной единицы, можно с ее помощью выразить энергию связи атомов в составе кластера, так что $u = ku_{11}$, где k — коэффициент, отражающий кооперативный характер межатомных взаимодействий. Можно показать, что коэффициент k увеличивается с увеличением числа атомов в кластере и быстро достигает некоторого максимального значения, соответствующего структуре кластера в пределах первой координационной сферы. Затем исследуется поведение энергии и в зависимости от числа атомов второй координационной сферы и т. д. В пределе бесконечного радиуса кластера (в пределе — атомной поверхности) коэффициент приближается к числовому значению $k \approx 4$. В объеме вещества коэффициент k определяется координационным числом. Аналогичные расчеты в принципе могут быть выполнены и для несферических микрочастиц, составляющих ту или иную молекулярную систему. Решаемая задача упрощается, если структурный параметр исследуемого объекта известен (например, как у веществ, имеющих трансляционную симметрию, типа кристаллов благородных газов).

Очевидно, что установленные законы перехода между атомномолекулярным и макроскопическим уровнями вещества позволяют объяснить образование различных классов вешеств — металлических, ионных, ковалентных. Например, атомы с большим дипольным моментом и большой поляризуемостью (в первую очередь — атомы I и II групп) в конденсированном состоянии имеют энергию межчастичного взаимолействия, достаточную для отрыва валентных электронов от своих атомов. В результате такой самоионизании атомов возникают лве подсистемы из квазисвободных электронов и катионов. Как частицы, имеющие разные заряды, они благодаря силам кулоновского притяжения переходят в связанное состояние, в результате чего образуют вещества, относящиеся к классу простых металлов (типа цезия). Если в состав исходного вещества входят атомы VI и VII групп (имеющие повышенную энергию сродства к электрону), то они способны захватывать несвязанные с материнскими атомами (атомами I и II групп) электроны и образовывать устойчивые анионы. Возникающие таким образом разнополярные анионы и катионы в результате кулоновского притяжения образуют ионные вещества типа хлористого натрия. Атомы с относительно небольшими поляризуемостями (атомы IV группы) в процессе формирования вещества сохраняют свою электрическую нейтральность, но в результате взаимной поляризации атомов происходит "перекрывание электронных оболочек", за счет чего формируется надмолекулярная тетраэдрическая структура ковалентных веществ типа углерода. Таким образом, строение различных веществ находит исчерпывающее объяснение с единых позиций — с позиций электронного строения атомов как исходных структурных единиц вещества.

Характерной особенностью неорганических веществ является их ион-электронное строение. Наиболее очевидным образом оно выражено у ионных и металлических веществ; у ковалентных веществ оно выражено в меньшей степени. Данное обстоятельство, казалось бы, облегчает построение теории в связи с тем, что описание межчастичвзаимодействий сводится ных к кулоновским силам. Но вместе с этим возникает необходимость в знании параметров остова атомов, в результате чего опять встает проблема внутриатомного строения.

Предлагаемый в данном разделе подход к построению теории электронного строения вещества основан на установлении причинно-следственных связей межлу микро- и макроуровнями вещества. Ланное обстоятельство прелполагает. что макроскопические свойства вещества могут быть выведены на основании свойств составляющих его атомов, а связь между микро- и макроскопическими уровнями вещества становится взаимообратимой. В результате создаваемая теория вещества принимает статус прогностической теории, теории. предсказывающей т. е. свойства проектируемой атомномолекулярной конструкции на основании данных о строении атомов и молекул [27].

Таким образом, предложена общая схема построения теории электронного строения вещества. Она логически и методически выверена и может служить концептуальным основанием для ее последующего уточнения и более деталь-

ных проработок ее отдельных положений. Разрабатываемая теория опирается на законы электростатики и электродинамики и по своей сути является классической; она может быть отнесена к категории ab initio, хотя и не нуждается в привлечении каких-либо квантово-механических представлений. Практическим приложением данной теории в первую очередь является нанотехнология. в части ее теоретического обеспечения. Очевидно и обратное влияние нанотехнологии на нанонауку и науку о веществе в целом. Можно надеяться на то, что насущные запросы нанотехнологии помогут преодолеть в науке о веществе квантово-механический (волновой) синдром и помогут создать благоприятные условия для разработки прогностической теории вещества как основы нанотехнологии.

Таким образом, динамика становления нанотехнологии находится в прямой зависимости от уровня ее научного обоснования и теоретического обеспечения. Назрела настоятельная необходимость в формировании исследовательской программы "Теоретическое обеспечение нанотехнологии". Ее основные этапы:

1. Разработка физических моделей вещества и прогностической теории электронного строения вещества.

2. Разработка концепции теоретического и методического обеспечения нанотехнологии.

3. Разработка методов инженерных расчетов атомно-молекулярных систем, в том числе наноматериалов и наноконструкций.

4. Разработка и аттестация таблиц справочных данных по основным атомно-молекулярным константам (радиусам атомов, межоболочечным расстояниям, энергиям связи атомов, энергиям сцепления и т. д.) как основы проектирования наносистем.

5. Разработка программного обеспечения и системы управления типовыми исполнительными устройствами нанотехнологии.

Очевидно, что выбор стратегического направления в области создания совершенных нанотехнологий — это не только выбор оптимального пути к реализации потенциальных возможностей технологии производства материалов и изделий методом атомно-молекулярной сборки. Это еще и путь к осознанию самой возможности конструирования наносистем, основанному на понимании физической сущности и электронного строения атомов и молекул и механизмов их структурообразования.

Список литературы

1. Химическая энциклопедия. Т. 3. М.: Большая Российская Энциклопедия, 1992.

2. **Физико-технологические** основы методов обработки. Ростов-на-Дону: Феникс, 2006.

- 3. Химическая энциклопедия. Т. 5. М.: Большая Российская Энциклопедия, 1998.
- 4. Кузнецов В. И. Общая химия: тенденции развития. М.: Высш. шк., 1989.

5. Балабанов В. И. Нанотехнологии. Наука будущего. М.: ЭКСМО, 2009.

6. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.

7. Шпольский Э. В. Атомная физика. Т. 1. М.: Физматгиз, 1963.

8. Эткинс П. Физическая химия. Т. 1. М.: Мир, 1963.

9. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. М.: Мир, 1977.

10. Дикерсон 3., Грей, Хейт Дж. Основные законы химии. М.: Мир, 1982.

11. Барсуков Д. А., Ельяшевич М. А. Основы атомной физики. М.: Научный мир, 2006.

12. Долгушин М. Д. Эвристические методы квантовой химии или о смысле научных занятий. М.: Эдиториал УРСС, 2001.

13. Потапов А. А. Научные основы нанотехнологии // Нанотехника. 2009. № 1.

14. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. М.: СОЛОН-Пресс, 2005.

15. Бурцева Л. А., Лисица В. С. Возмущенный атом. М.: ИздАТ, 1997.

16. Борн М. Лекции по атомной механике. М.: Едиториал УРСС, 2005.

17. Бацанов С. С. Экспериментальные основы структурной химии. М.: Изд-во стандартов, 1986.

18. Справочник химика Т. 1 / Под ред. Б. П. Никольского. М.: Химия, 1971. 19. **Miller T. M., Bederson B.** Atomic and Molecular Polarizabilities // Adv. At. Mol. Phys. 1977. V. 13. P. 1–55.

20. Потапов А. А. Деформационная поляризация: поиск оптимальных моделей. Новосибирск: Наука, 2004.

21. Потапов А. А. Оболочечная модель электронного строения атомов // Вестник Иркутского гос. техн. ун-та. 2006. № 3. С. 109—115.

22. Потапов А. А. Динамическая диполь-оболочечная модель атома // Оптимизация, управление, интеллект. 2008. № 1 (13). С. 84—95.

23. Бор Н. Избранные научные труды. М.: Наука, 1970.

24. **Каплан Н. Г.** Введение в теорию взаимодействий. М.: Наука, 1982.

25. Потапов А. А. Концептуальные основы проектирования наносистем // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 7. С. 2—7.

26. Потапов А. А. Принципы проектирования наносистем // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 3. С. 5—13.

27. **Потапов А. А.** Атом: ключ к созданию основ нанотехнологии // Нанои микросистемная техника. 2009. № 1. С. 5—12.

УДК 537.636

В. Л. Миронов, канд. физ.-мат. наук, О. Л. Ермолаева, мл. науч. сотр., Институт физики микроструктур, г. Нижний Новгород, e-mail: mironov@ipm.sci-nnov.ru

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЗОНДОВ МАГНИТНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАССИВОВ СВЕРХМАЛЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ: АНАЛИЗ АМПЛИТУДЫ ФАЗОВОГО КОНТРАСТА

Теоретически рассмотрены возможности оптимизации геометрических параметров зондов магнитно-силового микроскопа (МСМ) в целях реализации максимального контраста при исследовании малых ферромагнитных частиц. Показано, что для зондов любой формы существуют оптимальные геометрические параметры, обеспечивающие максимальный МСМ-контраст, при этом контраст в максимуме определяется не только параметрами зонда и высотой сканирования, но и структурой полей рассеяния, создаваемых исследуемым объектом.

Ключевые слова: магнитно-силовая микроскопия (*MCM*), зонды магнитно-силового микроскопа, фазовый контраст *MCM*, ферромагнитные наночастицы.

Введение

Уменьшение размеров магнитных элементов является одной из основных тенденций развития современных систем магнитной записи информации. В связи с этим большую актуальность в последнее время приобретают исследования магнитных состояний упорядоченных массивов ферромагнитных наночастиц [1]. Особый интерес вызывают массивы частиц, изготавливаемых методами литографии из тонкопленочных структур с перпендикулярной намагниченностью [2, 3], как наиболее перспективные для применения в качестве дискретной среды для сверхплотной записи информации. Минимальные латеральные размеры наночастиц достигают 30 нм, что при пространственном периоде расположения частиц в массиве, равном 45 нм, обеспечивает плотность записи на уровне 300 Гбит/дюйм² [3].

Одним из наиболее информативных методов исследования локальных состояний намагниченности в магнитных наноструктурах является магнитносиловая микроскопия (МСМ) [4]. Чувствительность и пространственное разрешение МСМ определяются в основном размерами и геометрической формой магнитного зонда.

Существующие в настоящее время технологии позволяют изготавливать МСМ-зонды различной конфигурации с варьируемыми параметрами. Наиболее широкое распространение в МСМ получили зондовые датчики в виде иглы, покрытой тонким слоем магнитного материала и расположенной на упругой консоли (кантилевере). Такие датчики изготавливаются на основе технологий микрообработки кремния методами литографии и травления [5]. Развитые к настоящему времени технологии позволяют формировать MCM-зонды в виде пирамид и конусов с различными аспектными отношениями [6]. Повышение пространственного разрешения таких зондов достигается за счет уменьшения площади магнитного покрытия методами литографии и ионного травления [7—12]. При этом на кончике зонда формируется ферромагнитная частица с характерными размерами 30—50 нм, что приводит к существенному увеличению пространственного разрешения.

В последнее время интенсивно развиваются технологии изготовления зондов на основе углеродных нанотрубок. Магнитные зонды формируются посредством покрытия нанотрубок тонкими ферромагнитными слоями за счет заполнения внутреннего пространства нанотрубок магнитным материалом, а также посредством формирования магнитной наночастицы на свободном кончике нанотрубки [13—18]. Минимальные размеры таких магнитных частиц достигают 10 нм, что близко к физическому пределу, обусловленному суперпарамагнетизмом малых ферромагнитных частиц [19].

При МСМ-исследованиях сверхмалых частиц возникает проблема выбора оптимальной формы и размеров зондов. Дело в том, что МСМ-отклик определяется как свойствами применяемого зонда, так и масштабами пространственной неоднородности исследуемых полей рассеяния [20—24]. Поэтому для каждого исследуемого объекта в зависимости от конфигурации полей рассеяния можно подобрать зонд с оптимальными параметрами, обеспечивающими наибольшее значение амплитуды МСМ-контраста.

Настоящая работа посвящена оптимизации геометрических параметров зондов в целях реализации максимального MCM-контраста в MCM-измерениях полей рассеяния малых ферромагнитных частиц.

Зависимость МСМ-контраста от геометрических параметров зондов

В качестве тестового объекта в расчетах рассматривалась ферромагнитная однодоменная, однородно намагниченная, сферическая частица радиуса R_p , магнитный момент которой направлен вдоль оси Z. Магнитное поле такой частицы представляет собой поле точечного магнитного диполя, расположенного в центре сферы, при этом в полярных координатах Z-компонента данного поля определяется выражением

$$H_{z} = \frac{4\pi M_{sp} R_{p}^{3}}{3} \frac{2z^{2} - r^{2}}{\left(z^{2} + r^{2}\right)^{5/2}},$$
(1)

где M_{sp} — намагниченность частицы; z и r — полярные координаты.

Z-компонента силы взаимодействия зонда с частицей может быть представлена в следующем виде:

$$F_{z} = \frac{\partial}{\partial z} \int_{V_{3\text{OHIDA}}} (\vec{H}\vec{M}_{t}) dV, \qquad (2)$$

где \vec{M} — намагниченность зонда. Интеграл берется по всему объему V зонда. В качестве МСМ-контраста рассчитывался сдвиг фазы $\Delta \varphi$ малых колебаний

консоли зондового датчика (кантилевера) за счет взаимодействия зонда с магнитным полем образца:

$$\Delta \varphi = -\frac{Q}{k} \frac{\partial F_z}{\partial z} = \frac{Q}{k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int_{V_t} (\vec{H} \vec{M}_t) dV, \qquad (3)$$

где Q — добротность кантилевера; k — его упругая жесткость.

Пространственная структура МСМ-контраста от тестового объекта в виде однородно намагниченной сферической частицы представляет собой двумерную поверхность Гауссового типа. Максимальное значение контраста $\Delta \phi_0$ достигается в точке, когда зонд располагается непосредственно над частицей. Характер пространственного распределения МСМ-контраста и значение контраста в максимуме $\Delta \phi_0$ зависят как от параметров частицы, так и от параметров зонда, а также от параметров сканирования (от высоты прохода зонда над частицей). В дальнейшем мы будем исследовать зависимости МСМ-контраста в максимуме $\Delta \phi_0$ от параметров зондов различной формы.

Зонды в виде магнитных наконечников различной формы

Для исследования влияния геометрических параметров зондов на MCM-контраст были рассмотрены зонды в виде однородно намагниченных наконечников различной формы. Расчеты проводились для сферического, параболического, конического и цилиндрического наконечников. Для корректного сравнения рассматривались наконечники в виде фигур вращения, вписанных в цилиндр (рис. 1, *a*).

На рис. 1, δ представлены зависимости МСМконтраста $\Delta \phi_0$ в максимуме для зондов в виде нако-



Рис. 1. Центральные сечения зондов в виде наконечников различной формы (*a*) и зависимость МСМ-контраста от размера зондов в виде наконечников различной формы (*б*). Величина контраста нормирована к максимальной величине контраста параболического зонда. По оси абсцисс отложен радиус вписанного сферического зонда R_{c} , нормированный к радиусу исследуемой частицы

нечников различной формы при пропорциональном увеличении их размеров. Поскольку зависимость контраста от расстояния зонд—частица h (высота сканирования) монотонная, то для простоты в расчетах формально принималось, что расстояние между кончиком зонда и частицей равно нулю.

Из рис. 1, δ видно, что графики для зондов различных форм при примерно равном количестве магнитного материала существенно различаются положением максимума, его значением и полушириной графика на полувысоте. Принципиально отличается вид графика для конического зонда: при увеличении размеров такого зонда МСМ-контраст монотонно возрастает и выходит на постоянный уровень. Таким образом, видно, что на МСМ-контраст существенно влияет не только объем магнитного материала зонда, но и его геометрическая форма.

Сферический зонд

Рассмотрим более подробно зависимость MCMконтраста от размера для однородно намагниченного сферического зонда. Взаимодействие такого зонда с однородно намагниченной сферической частицей эквивалентно взаимодействию двух точечных магнитных диполей, расположенных в центрах зонда и частицы. Задача о нахождении MCM-контраста в этом случае решается аналитически. При проходе сферического зонда над частицей на высоте h максимальный контраст достигается в точке, когда зонд расположен непосредственно над частицей. Значение этого максимального MCM-контраста $\Delta \phi_0$ зависит от высоты прохода и соотношения радиусов зонда и частицы:

$$\Delta \phi_0 = \frac{64}{3} \frac{Q}{k} \frac{\pi^2 M_{sp} M_{st} R_p^3 R_s^3}{\left(R_p + R_s + h\right)^5},$$
(4)

где R_s — радиус сферического зонда; M_{st} — намагниченность насыщения материала зонда. При заданных радиусе частицы и высоте сканирования можно определить оптимальный размер зонда, при котором MCM-контраст в точке непосредственно над частицей будет максимальным. Расчеты показывают, что оптимальным является сферический зонд радиусом

$$R_s^* = \frac{3}{2} (R_p + h).$$
 (5)

Максимальное значение МСМ-контраста при таком радиусе зонда определяется выражением

$$\Delta \varphi_{0\max} = 0.737 \frac{Q}{k} \frac{\pi^2 M_{sp} M_{st} R_p^3}{\left(R_p + h\right)^2}.$$
 (6)

На рис. 2 приведена нормированная зависимость МСМ-контраста от радиуса сферического зонда. Данная зависимость позволяет, зная реальные параметры эксперимента (параметры зонда и частицы, а также высоту сканирования), оценить ожидаемый МСМ-контраст. Ширина зависимости МСМ-контраста от радиуса сферического зонда (рис. 2) на уровне 0,5 составляет $\Delta = 2,78 R_s/R_s^*$.

Характер зависимости МСМ-контраста от размера зонда определяется как формой зонда, так и структурой магнитного поля исследуемого объекта.



Рис. 2. Слева — схематическое изображение зонда и частицы, справа — нормированная зависимость МСМ-контраста от радиуса сферического зонда. Значения МСМ-контраста нормированы к величине $\Delta \phi_{0 \text{ max}}$, а значения радиуса зонда нормированы к R_{*}^{*}

Особенностью поля магнитного диполя является то, что вторая производная от Z-компоненты поля $\partial^2 H_z/\partial z^2$ положительна внутри области, ограниченной конусом с углом раствора $\alpha \approx 35,26$ (tg $\alpha = 1/\sqrt{2}$), и отрицательна вне этой области. С увеличением радиуса сферического зонда до тех пор, пока зонд находится внутри конической области с положительной $\partial^2 H_z/\partial z^2$, MCM-контраст возрастает за счет увеличения магнитного момента зонда. При дальнейшем увеличении радиуса часть зонда попадает в область, где $\partial^2 H_z/\partial z^2 < 0$, что дает отрицательный вклад в MCM-контраст, и суммарный контраст уменьшается (рис. 2).

Цилиндрический зонд бесконечной длины

При рассмотрении взаимодействия протяженных зондов с малыми частицами, когда размеры зонда в направлении Z намного превышают характерный масштаб спадания поля частицы, можно считать, что зонд имеет бесконечную длину, и это существенно упрощает расчеты. Основной вклад в МСМ-контраст в этом случае вносит часть зонда, находящаяся вблизи частицы. В дальнейшем нами использовалось приближение зондов бесконечной длины. В рамках этого приближения у зондов цилиндрической формы остается только один параметр, влияющий на МСМ-контраст, — радиус цилиндра R_c . Нормированная зависимость МСМ-контраста от радиуса для цилиндрического зонда представлена на рис. 3.



Рис. 3. Слева — схематическое изображение зонда и частицы, справа — нормированная зависимость величины МСМ-контраста от радиуса цилиндрического зонда

Расчеты показывают, что для цилиндрического зонда, расположенного над частицей на высоте h, оптимальным является радиус

$$R_c^* = \sqrt{\frac{6}{11}} (R_p + h).$$
(7)

При таком значении радиуса зонда максимальное значение контраста определяется выражением

$$\Delta \varphi_{0\max} = 0.022 \frac{Q}{k} \frac{\pi^2 M_{sp} M_{st} R_p^3}{\left(R_p + h\right)^2}.$$
 (8)

Ширина зависимости МСМ-контраста от радиуса цилиндрического зонда на уровне 0,5 составляет $\Delta = 1,76R_c/R_c^*$.

Параболический зонд бесконечной длины

Для зонда в виде бесконечного параболоида вращения z = ar основным параметром является коэффициент *a*, определяющий ширину параболоида. Расчеты показывают, что для зонда, расположенного над частицей на высоте *h*, оптимальным является коэффициент параболы

$$a^* = \frac{1}{2(R_p + h)}.$$
 (9)

В этом случае максимальный MCM-контраст определяется выражением

$$\Delta \varphi_{0 \max} = \frac{32}{27} \frac{Q}{k} \frac{\pi^2 M_{sp} M_{st} R_p^3}{\left(R_p + h\right)^2}.$$
 (10)

Нормированная зависимость МСМ-контраста от параметра a/a^* представлена на рис. 4. Ширина зависимости МСМ-контраста от параметра a/a^* на уровне 0,5 составляет $\Delta = 4,848a/a^*$.

Заметим, что, как видно из приведенных выше формул (6), (8) и (10), значение контраста $\Delta \phi_{0 \max}$ для зондов любой формы с оптимальными параметрами совпадает с контрастом для эквивалентного сферического зонда радиусом R_s^* , эффективный магнитный момент которого зависит от формы зонда и отличается лишь на постоянный множитель.







Рис. 5. Слева — схематическое изображение зонда и частицы, справа — нормированная зависимость МСМ-контраста от толщины магнитного слоя для зонда параболической формы с оптимальным коэффициентом параболы

Зонд в виде параболоида с магнитным покрытием

На практике наиболее широко используются МСМ-зонды, изготовленные посредством нанесения покрытия из магнитного материала на кремниевый зонд атомно-силового микроскопа. В этом случае значение регистрируемого в МСМ-измерениях контраста зависит от формы зонда и от толщины магнитного покрытия *d*. Рассмотрим зависимость контраста $\Delta \phi_0$ от толщины магнитного покрытия на примере зонда параболической формы. Значение контраста в точке непосредственно над частицей для такого зонда определяется выражением

$$\Delta \phi_0 =$$

$$= 32\pi^2 M_{sp} M_{st} R_p^3 \left(\frac{1}{27(R_p + h)^2} - \frac{(R_p + h)}{(2d + 3(R_p + h))^3} \right). (11)$$

Зависимость контраста $\Delta \phi_0$ от толщины покрытия представлена на рис. 5. Из рис. 5 видно, что при увеличении толщины магнитного слоя значение контраста быстро выходит на постоянный уровень. Толщина покрытия, при которой контраст насыщается, определяется параметрами зонда, а также размерами исследуемого объекта и высотой сканирования. Расчеты показывают, что значение МСМ-контраста достигает уровня $0,78\Delta\phi_{0\,max}$ при толщине покрытия, равной расстоянию от кончика зонда до центра исследуемой частицы.

Заключение

Таким образом, проведен теоретический анализ возможностей оптимизации геометрических параметров зондов в целях реализации максимального контраста в МСМ-измерениях полей рассеяния от малых ферромагнитных частиц. Показано, что для зондов любой формы существуют оптимальные геометрические параметры, обеспечивающие максимальный МСМ-контраст, при этом значение контраста в максимуме определяется не только параметрами зонда и высотой сканирования, но и структурой полей рассеяния, создаваемых исследуемым объектом.

Авторы выражают благодарность Д. С. Никитушкину и А. А. Фраерману за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 08-02-01202).

Список литературы

1. Martin J. I., Nogues J., Liu K., Vicent J. L., Schuller I. K. Growth Mechanisms and Oxidation-Resistance of Gold-Coated Iron Nanoparticles // J. Magn. Magn. Mat. 2003. Vol. 256.

P. 449-501.
2. Albrecht M., Anders S., Thomson T., Rettner C. T., Best M. E., Moser A., Terris B. D. Thermal stability and recording properties of sub-100 nm patterned CoCrPt perpendicular media // J. Appl.
Phys. 2002. Vol. 91. N. 10. P. 6845–6848.
3. Hellwig P., Berger A., Thomson T., Dobisz E., Bandic Z.,
Yang H., Kercher D. S., Fullerton E. E. Separating dipolar

broadening from the intrinsic switching field distribution in per-pendicular patterned media // Appl. Phys. Lett. 2007. Vol. 90. P. 162516-1-3.

P. 162516-1-3.
Albrecht T. R., Akamine S., Carver T. E., Quate C. F. Microfabrication of cantilever styli for the atomic force micro-scope // J. Vac. Sci. Technol. 1990. V. 8. P. 3386-3396.
Babcock K. L., Elings V. B., Shi J., Awschalom D. D., Dugas M. Field-dependence of microscopic probes in magnetic force microscopy // Appl. Phys. Lett. 1996. Vol. 69. N. 5. P. 705-707.

P. 705-707.
6. Koblischka M. R., Hartmann U., Sulzbach T. Improvements of the lateral resolution of the MFM technique // Thin Solid Films. 2003. Vol. 428. P. 93-97.
7. Phillips G. N., Siekman MAbelmann L., Lodder J. High resolution magnetic force microscopy using focused ion beam modified tips // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 81. N. 5. P. 865-867.
8. Litvinov P., Sakhrat Khizroeva S. Orientation-sensitive magnetic force microscopy for future probe storage applications //

magnetic force microscopy for future probe storage applications //
Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 81. N. 10. P. 1878–1880.
9. Koblischka M. R., Hartmann U., Sulzbach T., Resolving

magnetic nanostructures in the 10-nm range using MFM at am-bient conditions // Mater. Sci. and Engin. 2003. Vol. C 23. P. 747-751.

Ruhrig M., Porthum S., Lodder J. C. Magnetic force microscopy using electron-beam fabricated tips // Rev. Sci. Instum.
 Vol. 65. N. 10. P. 3224—3228.
 Gao L., Yue L. P., Yokota T., Skomski R., Liou S. H., Takahoshi H., Saito H., Ishio S. Focused Ion Beam Milled CoPH

Magnetic Force Microscopy Tips for High Resolution Domain Images // IEEE Trans. Mag. 2004. Vol. 40. N. 4. P. 2194–2196. 12. Dang Z., Yenilmez E., Leu J., Hoffman J. E., Straver E.,

Dau H., Moler K. A. Metal-coated carbon nanotube tips for magnetic force microscopy // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 85. N. 25. P. 6263–6265.

13. Yoshida N., Arie T., Akita S., Nakayama Y. Improvement

of MFM tips using Fe-alloy-capped carbon nanotubes // Physica B. 2002. Vol. 323. P. 149–150.
14. Kuramochi H., Uzumaki T., Yasutake M., Tanaka A., Akinaga H., Yokoyama H. A magnetic force microscope using CoFe-coated carbon nanotube probes // Nanotechnology. 2005. Vol. 16. P. 24-27

15. Winkler A., Muhl T., Menzel S., Koshuharova-Koseva R., Hampel S., Leonard A., Buchner B. Magnetic force microscopy sensors using iron-filled carbon nanotubes // J. Appl. Phys. 2006. Vol. 99. P. 104905-1-5.

16. Arie T., Yoshida N., Akita S., Nakayama Y. Quantitative analysis of the magnetic properties of a carbon nanotube probe in magnetic force microscopy // J. Phys. D: Appl. Phys. 2001. Vol. 34. P. L43–L45.

17. Arie T., Nishijima H., Akita S., Nakayama Y. Carbonnanotube probe equipped magnetic force microscope // J. Vac. Sci. Technol. B. 2000. Vol. 18. N. 1. P. 104–106.

18. Hopkins P. F., Moreland J., Malhotra. S. S., Liou S. H. Superparamagnetic magnetic force microscopy tips // J. Appl. Phys. 1996. Vol. 79. N. 8. P. 6448–6450. 19. Lohau J., Kirsch S., Carl A., Dumpich G., Wassermann E. F.

19. Lonau J., Kirsen S., Can A., Dumpen G., Wassermann E. F. Quantitative determination of effective dipole and monopole moments of magnetic force microscopy tips // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 86. N. 6. Р. 3410–3417. 20. Горячев А. В., Попков А. Ф. Калибровочные парамет-

ры зондирующей иглы магнитного силового микроскопа в поле тестирующей токовой петли // ЖТФ. 2006. Т. 76. C. 115-120.

21. Овчинников Д. В., Бухараев А. А. Компьютерное моделирование магнитно-силовой микроскопии изображений в рамках статической модели распределения намагниченности и диполь-дипольного взаимодействия // ЖТФ. 2001.

Количественная калибровка кантилевера магнитно-силово-го микроскопа с использованием проводов с током // Нано-и микросистемная техника. 2007. № 7. С. 70—74. 23. Kebe Th., Carl A. Calibration of magnetic force microscopy tips by using nanoscale current-carrying parallel wires // J. Appl. Phys. 2004. Vol. 95. N. 3. P. 775—792. 24. Gider S., Shi J., Awschalom D. S., Hopcins P. F., Campman K. L., Gossard A. C., Kent A. D., von Molnar S. Imaging and magnetometry of switching in nanometer-scale iron particles // Appl. Phys. Lett. 1996. Vol. 69. N. 18. 3269—3271.

Конструирование и моделирование МНСТ

УДК 621.3.088.23

Е. А. Печерская, канд. техн. наук., Пензенский государственный университет

КЛАССИФИКАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Предложены модели установления фазового состояния сегнетоэлектриков, базирующиеся на термодинамической теории. На их основе разработана методика определения температуры фазового перехода по результатам обработки экспериментальных зависимостей относительной диэлектрической проницаемости от температуры и частоты. Изложена методика оценивания вероятностей ошибочных классификаций фазовых состояний сегнетоэлектриков, позволяющая проводить исследования с гарантированной достоверностью.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, фазовое состояние, температура фазового перехода, вероятность, погрешность измерения.

Введение

Возможность применения сегнетоэлектрических тонких пленок в устройствах микро- и наноиндустрии обусловлена наличием у них фазового перехода, приводящего к изменению вида функциональных зависимостей между параметрами материала, находящегося при температурах ниже и выше температуры T_0 , называемой температурой фазового перехода. Например, одно из актуальных направлений использования рассматриваемых материалов в устройствах динамической памяти с произвольной выборкой (DRAM) объясняется перспективой интеграции коммутационной (МОП) матрицы с пленочными сегнетоэлектрическими элементами хранения, благодаря высокой диэлектрической проницаемости в сегнетоэлектрической фазе. Примером такого сегнетоэлектрика является титанат бария стронция, полученный в виде слоя толщиной 180...300 нм с диэлектрической проницаемостью 600...1000 [1]. Согласно работе [2], возможно определение температуры фазового перехода как экстремума функции $\varepsilon(T)$. Значение T_0 может варьироваться при изменении внешних условий. Одним из влияющих факторов является приложение гидростатического давления. Например, в работе [2] подтверждены факты повышения T₀ в триглицинсульфате

(ТГС) на $2,6 \cdot 10^{-3} \frac{^{\circ}C}{a_{TM}}$ и в сегнетовой соли на $10,4 \cdot 10^{-3} \frac{^{\circ}C}{a_{TM}}$ соответственно. В титанате бария

электрическое поле, приложенное вдоль направления спонтанной поляризации, повышает T₀ на

$$1,4 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{^{\circ}C \cdot c_{M}}{\kappa B}$$
. В работах [3, 4] рассмотрено

влияние химического состава сегнетоэлектрических веществ на значение температуры фазового перехода. В частности, замещение титаната цирконием в титанате бария понижает температуру Т₀, например, при содержании циркония до 30 мол. % понижение составляет примерно 6 $\frac{^{\circ}C}{_{MOЛ.} \%}$. Замещение титаната железом также понижает Т₀, причем наблюдается линейная зависимость T₀ от содержания железа [3]. В работе [4] установлена зависимость температуры фазового перехода от концентрации компонентов твердого раствора и предложена модель для вычислений сегнетоэлектрических параметров и фазовой диаграммы температура концентрация твердых растворов релаксоров.

В работе [5] исследована зависимость температуры Кюри слоистого сегнетоэлектрика от числа перовскитоподобных слоев. Авторы работы [6] предлагают для непосредственного установления температуры фазового перехода использовать общую для сегнетоэлектриков закономерность появления дисперсии в радиочастотном диапазоне непосредственно при переходе в сегнетоэлектрическую фазу, т. е. при $T = T_0$. Там же предложена методика определе-ния T_0 на примере бездефектного образца сегнетоэлектрика ТГС, основанная на использовании результатов измерения функциональной зависимости действительной части относительной диэлектрической проницаемости ε' от частоты f и температуры T.

Методика идентификации фазового состояния

Рассмотрим подробнее методику отнесения фазового состояния сегнетоэлектриков к сегнетоэлектрической или параэлектрической фазе. Для сегнетоэлектриков с фазовым переходом второго рода температура T_0 может быть определена по результатам многократных измерений, например, температурной зависимости относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(T)$ (рис. 1). В этом случае значение аргумента Т, соответствующее максималь-



Рис. 1. Зависимость относительной диэлектрической проницаемости от температуры для образца варикондовой керамики

ным значениям є, принимается за T₀, и возможно принятие одного из трех решений:

$$\begin{cases} T < T_0 - \text{сегнетоэлектрическая фаза;} \\ T = T_0 - \text{фазовый переход;} \\ T > T_0 - \text{параэлектрическая фаза.} \end{cases}$$
(1)

Выражение (1) не учитывает вклады доменных стенок в значение диэлектрической проницаемости. В случае, когда существенно влияние механизмов движения доменных стенок и локального переключения доменов на частотах от долей герц до 1 МГц, а также зажатие кристалла на частотах мегагерцового диапазона, целесообразно использовать методику определения температуры фазового перехода, предложенную в работе [6]. Тогда процедура принятия решения может быть формализована следующим образом:

$$\begin{cases} \varepsilon'(f, T_{s} = \text{const}) \neq \text{const} - \text{ceгнетоэлектрическая фаза;} \\ T_{0} = \frac{T_{s} + T_{p}}{2} - \text{фазовый переход;} \\ \varepsilon'(f, T_{p} = \text{const}) = \text{const} - \text{параэлектрическая фаза,} \end{cases}$$
(2)

где є' — действительная часть относительной диэлектрической проницаемости; f — частота; T_s , T_p соответственно, близлежащие значения температур, при которых дисперсия присутствует и отсутствует.

Классификационная модель фазового состояния сегнетоэлектриков

Задача определения температуры фазового перехода по экспериментально полученным данным одной из функциональных зависимостей $\varepsilon(T)$ либо $\varepsilon'(f, T)$ является основой для построения классификационной модели сегнетоэлектриков при заданных влияющих условиях. Целесообразно распространить на классификационные модели подход функционального и метрологического анализа, изложенный применительно к средствам измерения и контроля в работе [7], что позволит оценить достоверность принятых решений. На рис. 2, а представлена структурная классификационная модель фазового состояния сегнетоэлектрика, отражающая влияние химического состава вещества и давления на значение темпера-



Рис. 2. Структурная классификационная модель фазового состояния сегнетоэлектрика в зависимости от его химического состава, давления и температуры без учета (*a*) и с учетом погрешностей измерения параметров (δ), структурная метрологическая модель информативного преобразования $T \rightarrow \tilde{\varepsilon}$ (*b*)

туры фазового перехода, где А — множество, включающее процентное содержание *i*-го компонента, $A = \{A_i\}; X$ — гидростатическое давление; F(A, X) функциональное преобразование, описывающее зависимость температуры фазового перехода от химического состава и давления. На выходе блока, реализующего это преобразование, формируется зависимость температуры фазового перехода от каждого влияющего фактора при других постоянных фактора, т. е. в нашем примере: $T_0(A)|_{X = \text{const}}$ и $T_0(X)|_{A = \text{const}}$, что в общем случае может быть представлено функцией $T_0(A, X)$. Установление $T_0(A, X)$ может осуществляться по критериям (1) или (2) в зависимости от степени влияния механизмов движения доменных стенок. Значения $T_0(A, X)$ служат в качестве образцовых для принятия решения о фазовом состоянии исследуемого сегнетоэлектрического образца с известным химическим составом и при заданном давлении. Следовательно, по известным $T_0(A, X)$ можно классифицировать фазовое состояние исследуемого сегнетоэлектрика, имеющего температуру Т, основываясь на результатах качественного сравнения его температуры с $T_0(A, X)$. Номинальная функция такого сравнения представляет собой код *N*, который описывается выражением

$$N = \text{sign}[T - T_0(A, X)],$$
 (3)

где $N \in \{-1; 0; 1\}$, что соответствует следующим условиям принятия решения по классификации фазового состояния сегнетоэлектрика:

$$= \begin{cases} \{1 - параэлектрическая фаза; \\ 0 - фазовый переход; \\ -1 - сегнетоэлектрическая фаза. \end{cases} (4)$$

Ν

Реально все значения физических величин в выражении (3) являются результатами измерений, а следовательно, содержат соответствующие погрешности, которые снижают достоверность определения фазового состояния материала. На рис. 2, б приведена структурная классификационная модель, учитывающая погрешности измерений параметров, где $\Delta A = \{\Delta A_i\}$ — абсолютная аддитивная погрешность измерения процентного содержания компонента в химическом составе сегнетоэлектрика; δX — погрешность измерения давления, которую в общем случае при неизвестных преобладающих аддитивных и мультипликативных составляющих удобно представить в относительных единицах; $\hat{A} = \{\hat{A}_i\}, \hat{X}$ — оценки результатов измерений процентного содержания химических компонентов и давления соответственно; δT_0 , ΔT_0 — соответственно мультипликативная в относительных единицах и суммарная аддитивная и нелинейная в абсолютных единицах погрешности установления температура фазового перехода. Например, структурная метрологическая модель информативного преобразования температуры Т в относительную диэлектрическую проницаемость ε, служащая для расчета T_0 по выражению (1), представлена на рис. 2, e, где f(T) — функциональное преобразование информативного параметра температуры в относительную диэлектрическую проницаемость, осуществляемое в сегнетоэлектрике при воздействии температуры. Указанная модель учитывает, что результаты измерения воздействия (температуры) и реакции (относительной диэлектрической проницаемости) имеют погрешности измерений, аддитивные и нелинейные, представленные соответственно в единицах измерения самих величин — ΔT , $\Delta \varepsilon$, а также мультипликативные погрешности в относительных единицах — δT , $\delta \epsilon$. Методика оценивания погрешности измерения однофакторной функциональной зависимости изложена, например, в работе [2].

Для обеспечения гарантированной достоверности установления фазового состояния сегнетоэлектрических материалов необходимо оценить вероятность принятия ошибочного решения.

Оценивание вероятностей ошибочного решения по классификации фазового состояния

Согласно рис. 2, б реальное значение кода \tilde{N} отличается от номинального N (модель приведена на рис. 2, *a*). Если выполняется неравенство sign $[\tilde{T} - \tilde{T}_0(\tilde{A}, \tilde{X})] \neq \pm$ sign $[T - T_0]$, то возникает погрешность определения фазового состояния сегнетоэлектрика, когда в действительности сегнетоэлектрическую фазу принимают за параэлектрическую (вероятность этой ошибки обозначим p_{sp}) или параэлектрическую фазу принимают за сегнетоэлектрическую (вероятность такой ошибки обозначим p_{ps}). Рассмотрим определение температуры фазового перехода T_0 сегнетоэлектрического материала по результатам многократных измерений функций $\varepsilon(T)$ для ряда образцов с одинаковым химическим составом, при идентичных влияющих факторах и рассчитаем перечисленные вероятности ошибочных решений (риски).



Рис. 3. Формирование рисков принятия сегнетоэлектрической фазы за параэлектрическую $p_{sp}(a)$ и параэлектрической фазы за сегнетоэлектрическую $p_{ns}(\delta)$

Для оценивания вероятностей ошибочных решений по классификации параметров необходимо на основе результатов обработки многократных измерений построить график функции плотности распределения максимального значения относительной диэлектрической проницаемости $f\varepsilon(T)$ в окрестностях T_0 (рис. 3) и по известной формуле из теории вероятности рассчитать математическое ожидание температуры фазового перехода M_{T_0} .

Примем, что погрешности измерения функциональной зависимости $\varepsilon(T)$ выражены в единицах измерения температуры Δ_{in} , т. е. приведены ко входу функциональной метрологической модели информативного

преобразования (см. рис. 2, *в*). При этом $\Delta_{in} = \frac{\Delta_{out}}{F(T)}$, где $\Delta_{out} = \Delta_T F(T) + T \delta T F(T) + \Delta \varepsilon + T F(T) \delta \varepsilon$ — результирующая погрешность, приведенная к выходу, т. е. выраженная в относительных единицах, как и диэлектрическая проницаемость.

Пусть в результате метрологического анализа установлена предельная абсолютная погрешность $A = A + T_{ST} + \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta \varepsilon} + T_{Sc} = c_{T}$

 $\Delta_{\rm in} = \Delta_T + T \delta T + \frac{\Delta \varepsilon}{F(T)} + T \delta \varepsilon$ в единицах измерения

температуры, имеющая симметричные интервалы $\pm \Delta T$. Для точного расчета возможного риска принятия ошибочного решения необходимо знать закон распределения, т. е. функцию распределения вероятности $F_{\Delta T}$ того, что погрешность измерения температуры принадлежит интервалу [$-\Delta T$; $+\Delta T$]. На рис. 3 рассмотрен частный случай равномерного закона распределения. Далее применим вероятностный метод оценивания рисков, используемый при контроле массовых

изделий [7]. В рассматриваемой исследовательской задаче следует оценить p_{ss} и p_{pp} — вероятности того, что сегнетоэлектрик безошибочно находится в сегнетоэлектрической и параэлектрической фазе соответственно; p_{ps} и p_{sp} — вероятности, характеризующие риск принятия ошибочных классификационных решений.

На рис. 3, *а* построен график $f_{\varepsilon}^{p}(T)$ условной плотности вероятности того, что температура превышает T_{0} и сегнетоэлектрик находится в параэлектрической фазе, $f_{\varepsilon}^{p}(T) = f_{\varepsilon}(T)F_{\Delta T}$. В этом случае справедливы следующие выражения:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{\varepsilon}(T) F_{\Delta T} dT = p_{pp} + p_{sp},$$
$$p_{sp} = \int_{M_{T_0}^{-} \Delta T}^{M_{T_0}} f_{\varepsilon}^{p}(T).$$

Аналогично, график $f_{\varepsilon}^{s}(T)$ характеризует условную плотность вероятности нахождения материала в сегнетоэлектрической фазе при наличии погрешности измерения: $f_{\varepsilon}^{s}(T) = f_{\varepsilon}(T)(1 - F_{\Delta T})$. Запишем формулу для расчета p_{ps} :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{\varepsilon}(T)(1 - F_{\Delta T})dT = p_{ss} + p_{ps} =$$
$$= 1 - (p_{pp} + p_{sp}),$$
$$M_{T_{C}} + \Delta T$$
$$p_{ps} = \int_{M_{T}}^{M_{T_{C}} + \Delta T} f_{\varepsilon}^{s}(T)dT.$$

Общая вероятность принятия ошибочного решения p_r определяется суммой: $p_r = p_{ps} + p_{sp}$.

Заключение

На примере сегнетоэлектриков рассмотрена методика установления их фазового состояния, описан подход к оцениванию вероятностей принятия ошибочных решений по классификации вследствие наличия погрешностей средств измерений.

Список литературы

1. Сигов А. С. Сегнетоэлектрические тонкие пленки в микроэлектронике // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 10. С. 83—91.

 Барфут Дж. Введение в физику сегнетоэлектрических явлений: Пер. с анг. М.: Мир, 1970. 352 с.
 Иона Ф., Ширане Д. Сегнетоэлектрические кристал-

 Иона Ф., Ширане Д. Сегнетоэлектрические кристаллы. М.: Мир, 1965. 556 с.
 Глинчук М. Д., Елисеев Е. А., Стефанович В. А., на страниции в страниции в странович в странович в страниции в странович в странови странович в странович в странович в странович в странович в

4. Глинчук М. Д., Елисеев Е. А., Стефанович В. А., Хильчер Б. Описание сегнетоэлектрических фазовых переходов в твердых растворах релаксоров в рамках теории случайных полей // Физика твердого тела. 2001. Т. 43. Вып. 7. С. 1247—1254.

5. Лотонов А. М., Новик В. К., Гаврилова Н. Д. Диэлектрическая дисперсия как признак появления полярной фазы в сегнетоэлектриках // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. Вып. 6. С. 969—972.

6. Shil'nikov A. V., Nesterov V. N., Burkhanov A. I. Simulation motion of domain and interphase boundaries and their contribution to the dielectric properties of ferroelectrics // Ferroelectrics. 1996. V. 175. P. 145–151.

7. Шлыков Г. П. Функциональный и метрологический анализ средств измерений и контроля: учебное пособие. Ч. 1. Пенза: Изд-во Пенз. гос. ун-та, 1998. 94 с.

Материаловедческие и технологические основы МНСТ

УДК 537.228.1 + 539.219.1

В. Ю. Тополов, д-р физ.-мат. наук, проф., Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, e-mail: topolov@phys.rsu.ru; piezo@sfedu.ru С. В. Глушанин, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., Южно-Российский государственный университет экономики и сервиса, г. Шахты, А. Е. Панич, д-р техн. наук, директор — главный конструктор НКТБ "Пьезоприбор", Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону

КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ ГИДРОСТАТИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ 2—2-КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ МОНОДОМЕННОГО КРИСТАЛЛА 0,67Pb($Mg_{1/3}Nb_{2/3}$)O₃ — 0,33PbTiO₃

В ходе анализа ориентационных и концентрационных зависимостей эффективных свойств нового 2—2-композита "монодоменный кристалл 0,67Pb($Mg_{1/3}Nb_{2/3}$) $O_3 - 0,33PbTiO_3 - полимер" установлена существенная кор$ реляция между его гидростатическими параметрами $коэффициентом электромеханической связи <math>k_h$ и пьезомодулем d_h^* . Определены ориентации вектора спонтанной поляризации и оптимальная концентрация данного кристалла, при которых $|k_h| \approx 0,7...0,8$ и $|d_h| \approx 400$ пКл/H существенно превышают аналогичные параметры композитов на основе сегнетопьезокерамики.

Ключевые слова: пьезоактивный 2—2-композит, гидростатический пьезомодуль, гидростатический коэффициент электромеханической связи, кристалл релаксорасегнетоэлектрика, электромеханические свойства.

Параметры новых композитов на основе кристаллов твердых растворов релаксоров-сегнетоэлектриков (1 - x)Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃ - xPbTiO₃ (PMN-xPT) или (1 - y)Pb(Zn_{1/3}Nb_{2/3})O₃ - yPbTiO₃ (PZN-yPT) неразрывно связаны с электромеханическими свойствами данных кристаллов вблизи морфотропной границы [1—4] и с возможностью формирования в кристаллах определенных доменных структур (*domain engineered* по терминологии работ [1, 2]), активно влияющих на свойства. Эффективные электромеханические свойства и другие параметры двухкомпонентных композитов "PZN-0,08PT — полимер" [5], "PMN-0,33PT — эпоксидная смола" [6], "PMN-0,30PT — эпоксидная смола" [7] (связность 1—3), "PMN-xPT — сополимер фторида винилидена трифторэтилена" при x = 0,30; 0,33; 0,42 [8] (связ-

ность 0-3) и других способствуют их применению в качестве активных элементов актюаторов, сенсоров, гидрофонов, гидроакустических антенн и т. д. Среди перечисленных выше твердых растворов особое место занимает PMN-0,33PT. Для кристалла PMN-0,33РТ известны полные наборы экспериментальных электромеханических констант как в монодоменном состоянии (симметрия сегнетоэлектрической фазы 3*m* [3, 4]), так и в полидоменном состоянии (макроскопическая симметрия 4mm [1]). Однако до настоящего времени в литературе отсутствуют данные по эффективным свойствам и другим параметрам композитов на основе монодоменного кристалла PMN-0,33PT или другого состава. Кроме того, ранее мало исследовались коэффициенты электромеханической связи (КЭС) композитов на основе кристаллов PMN-*x*PT или PZN-*x*PT. Эти и другие факторы стимулируют рассмотрение электромеханических связей в новых композитах на основе монодоменного кристалла. Цель настоящей работы — исследовать по-ведение гидростатического КЭС k_h^* и его связь с дру-гими параметрами 2—2-композита на основе монодоменного кристалла PMN-0,33PT при различных направлениях векторов поляризации компонентов.



Рис. 1. Схематическое изображение 2—2-композита "кристалл полимер" с параллельным соединением слоев. $(X_1X_2X_3)$ — прямоугольная система координат, *m* и 1 — *m* — объемные концентрации кристалла и полимера соответственно, $P_s^{(1)}$ и $P_r^{(2)}$ — вектор спонтанной поляризации кристалла и вектор остаточной поляризации полимера соответственно. На вставке 1 показаны углы Эйлера φ , ψ , θ , описывающие поворот главных кристаллографических осей монодоменного кристалла $(X_1^0X_2^0X_3^0) \rightarrow (X_1'X_2'X_3')$; на вставках 2 и 3 показаны векторы остаточной поляризации полимера $P_r^{(2)} || OX_3$

Эффективные электромеханические свойства и гидростатические параметры определяются в рамках модели 2-2-композита с регулярным распределением слоев (рис. 1), протяженных вдоль осей координат OX_2 и OX_3 и разделенных плоскостями $x_1 = \text{const.}$ Каждый слой монодоменного кристалла PMN-0,33PT характеризуется вектором спонтанной поляризации $P_{s}^{(1)}$, ориентация которого задается углами Эйлера φ, ψ, θ (рис. 1, вставка 1). В качестве полимерного компонента выбирается либо сегнетоактивный (пьезоактивный в поляризованном состоянии) полимер либо полимер, не обладающий сегнетои пьезоэлектрическими свойствами. В частности, предполагается, что слои сегнетоактивного фторида поливинилидена (PVDF) имеют остаточную поляризацию $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ или $P_r^{(2)} \uparrow \uparrow OX_3$ (рис. 1, вставки 2, 3). Присутствие компонентов с различными направлениями векторов $P_s^{(1)}$ и $P_r^{(2)}$ возможно при последовательной поляризации компонентов, для которых справедливо условие [9, 10] $E_c^{(1)} \ll E_c^{(2)}$, где $E_{c}^{(n)}$ — напряженность коэрцитивного поля кри-

сталла (n = 1) или полимера (n = 2). При определении эффективных свойств используются измеренные при комнатной температуре полные наборы упругих податливостей $||s^{(n), E}||$ (при напряженности электрического поля E = const), пьезомодулей $||d^{(n)}||$ и диэлектрических проницаемостей $||\varepsilon^{(n), \sigma}||$ (при механическом напряжении $\sigma = \text{const}$) монодоменного кристалла PMN-0,33PT [4], PVDF [11] и других полимеров. При произвольной ориентации $P_s^{(1)}$ (см. рис. 1, вставка 1) электромеханические константы кристалла в системе координат композита ($X_1X_2X_3$) представляются в тензорной форме с учетом матрицы поворота [12]

 $\|r\| = \begin{pmatrix} \cos\psi\cos\varphi - \sin\psi\cos\theta\sin\varphi & \cos\psi\sin\varphi + \sin\psi\cos\theta\cos\varphi & \sin\psi\sin\theta \\ -\sin\psi\cos\varphi - \cos\psi\cos\theta\sin\varphi & -\sin\psi\sin\varphi + \cos\psi\cos\theta\cos\varphi & \cos\psi\sin\theta \\ \sin\theta\sin\varphi & -\sin\theta\cos\varphi & \cos\theta \end{pmatrix}$

следующим образом:

$$s_{qtuv}^{(1), E} = r_{qa}r_{tb}r_{uc}r_{vd}(s_{abcd}^{E})_{0};$$

$$d_{efg}^{(1)} = r_{ej}r_{fk}r_{gl}(d_{jkl})_{0};$$

$$\varepsilon_{pw}^{(1), \sigma} = r_{ph}r_{wz}(\varepsilon_{hz}^{\sigma})_{0}.$$
 (1)

Нижний индекс "0" в формулах (1) указывает на то, что константы задаются в системе главных кристаллографических осей $(X_1^0 X_2^0 X_3^0)$, причем $OX_i^0 || OX_i$ при $\varphi = \psi = \theta = 0^\circ$ и i = 1; 2; 3. Матричные элементы r_{qa} , r_{tb} , ..., r_{wz} из (1) описывают поворот главных кристаллографических осей $(X_1^0 X_2^0 X_3^0) \rightarrow (X_1' X_2' X_3')$, как показано на вставке 1 рис. 1. Далее тензорные компоненты $s_{qtuv}^{(1), E}$ и $d_{efg}^{(1)}$ из (1) приводятся к двухиндексной форме записи [13] и используются в процедуре усреднения свойств [14].

Матрица электромеханических констант *n*-го компонента

$$\|C_n\| = \begin{pmatrix} \|s^{(n), E}\| & \|d^{(n)}\|^T \\ \|d^{(n)}\| & \|\varepsilon^{(n), \sigma}\| \end{pmatrix}$$
(2)

и матрица эффективных электромеханических свойств композита в системе координат $(X_1X_2X_3)$

$$\|C^*\| = (m\|C_1\|\|M\| + (1-m)\|C_2\|)(m\|M\| + (1-m)\|I\|)^{-1} (3)$$

имеют одинаковую блочную структуру, а верхний индекс Т в выражении (2) обозначает транспонирование. Матрица ||M|| из выражения (3) содержит элементы матриц $||C_n||$ из (2) (n = 1; 2) и записывается [14] с учетом граничных условий для компонент электрических и механических полей внутри композита при $x_1 = \text{const}$ (см. рис. 1), ||I|| - единичная матрица, *т* — объемная концентрация кристалла. Углы Эйлера могут изменяться в интервалах $0^{\circ} \le \phi \le 360^{\circ}$, $0^{\circ} \leq \psi \leq 360^{\circ}$ и $0^{\circ} \leq \theta \leq 180^{\circ}$, однако в случае монодоменного кристалла с симметрией 3*m* [3, 4] угол ф достаточно изменять в интервале $0^{\circ} \le \phi \le 120^{\circ}$ [12]. Матрицы эффективных свойств $\|s^{*E}\|$, $\|d^{*}\|$ и $\|\varepsilon^{*\sigma}\|$, входящие в состав || C*|| из (3), являются определенными в длинноволновом приближении, т. е. при условии, что длина воздействующей на композит акустической волны значительно больше толщины любого его слоя. Зная элементы матрицы (3), можно рассчитать гидростатический КЭС композита по формуле

 $k_h^* = d_h^* / (\epsilon_{33}^{*\sigma} s_h^{*E})^{1/2},$

где

$$d_{h}^{*} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} d_{ij}^{*} \mathsf{M}$$
$$s_{h}^{*E} = \sum_{a=1}^{3} \sum_{b=1}^{3} s_{ab}^{*E} - (5)$$

гидростатический пьезомодуль и гидростатическая упругая податливость (при E = const) соответственно. Ниже мы рассмотрим особенности поведения $k_h^*(m, \varphi, \psi, \theta)$ в 2—2-композитах на основе монодоменного кристалла PMN-0,33PT.

Сначала предположим, что композит содержит слои PVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ (см. рис. 1, вставка 3). Такие слои характеризуются пьезомодулями $d_{31}^{(2)} < 0$, $d_{33}^{(2)} > 0$ и $d_{15}^{(2)} > 0$, т. е. знаки $d_{ij}^{(2)}$ совпадают со знаками пьезомодулей различных сегнетопьезокерамик (СПК) на основе Pb(Zr, Ti)O₃ (см., например, данные [15]). Гидростатический КЭС $k_h^{(2)}$ слоев

- НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, № 6, 2009 —

(4)

РVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ положителен вследствие выполнения условия $d_h^{(2)} = d_{33}^{(2)} + 2d_{31}^{(2)} > 0.$

Анализ зависимости $k_h^*(m, \varphi, \psi, \theta)$ композита "монодоменный кристалл PMN-0,33PT — PVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ " показывает, что наибольшие значения k_h^* достигаются вблизи m = 0,15 и $\theta = 15^\circ$, а наименьшие k_h^* — вблизи m = 0,15 и $\theta = 165^\circ$. Зависимость $k_h^*(m, \varphi, \psi, \theta)$ проявляет бо́льшую чувствительность к изменениям m и θ . Это объясняется как существенной зависимостью ряда пьезомодулей d_{ij}^* , упругих податливостей s_{ab}^{*E} (см. формулы (5)) и диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{33}^{*\sigma}$ (см. формулу (4)) от m, так и зависимостью d_{ij}^* от θ . Система локальных максимумов $k_h^*(0,15,\varphi,\psi,15^\circ)$, образующих своеобразный гребень (рис. 2, a), удовлетворяет условиям

$$\varphi + \psi = 240^{\circ}; \ 0^{\circ} \le \varphi \le 120^{\circ}; \ 120^{\circ} \le \psi \le 240^{\circ}.$$
 (6)

При выполнении (6) имеем $k_h^*(0,15, \varphi, \psi, 15^\circ) \approx$ \approx const (табл. 1), т. е. открывается возможность выбора нескольких предпочтительных ориентаций главных кристаллографических осей кристалла. Слабые изменения k_h^* (см. таблицу) связаны с относительно небольшими изменениями компонент P_1 и P_2 вектора спонтанной поляризации $P_s^{(1)}(P_1; P_2; P_3)$ в системе координат композита ($X_1X_2X_3$). Представляет интерес случай $\varphi = 60^\circ; \psi = 180^\circ; \theta = 15^\circ:$ при такой ориентации $P_s^{(1)}$ его компонента $P_1 = 0$ (см. табл. 1), а сам вектор $P_s^{(1)}$ лежит в плоскости X_2OX_3 , параллельной границам раздела слоев (см. рис. 1).

Система локальных минимумов $k_h^*(0,15, \varphi, \psi, 165^\circ)$ (рис. 2, δ) наблюдается при

$$\varphi = \psi; \ 0^{\circ} \leqslant \varphi + \psi \leqslant 120^{\circ}. \tag{7}$$



Рис. 2. Ориентационные зависимости гидростатического КЭС $k_h^*(0,15, \varphi, \psi, 15^\circ)$ и $k_h^*(0,15, \varphi, \psi, 165^\circ)$ в области наибольших (*a*) и наименьших (*b*) значений k_h^* соответственно. Расчеты проведены для 2—2-композита "монодоменный кристалл PMN-0,33PT — PVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ "

Ориентационная зависимость гидростатического КЭС $k_h^*(0,15,\,\varphi,\,\psi,\,15^\circ)$ 2—2-композита "монодоменный кристалл

PMN-0,33PT – PVDF c $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX$	3" при выполнении условий (6) и соответствующие компоненты вектора
спонтанной поляризации ${\it P}_{s}^{(1)}({\it A})$	$P_1; P_2; P_3)$ кристалла PMN-0,33PT в системе координат ($X_1X_2X_3$)

φ, ° ψ, °	0 240	15 225	30 210	45 195	60 180	75 165	90 150	105 135	120 120
k_h^*	0,75	0,772	0,774	0,766	0,762	0,766	0,774	0,772	0,745
$P_1 / P_s^{(1)}$	-0,224	-0,183	-0,129	-0,0670	0	0,0670	0,129	0,183	0,224
$P_2/P_s^{(1)}$	-0,129	-0,183	-0,224	-0,250	-0,259	-0,250	-0,224	-0,183	-0,129
Примечание. $P_3 = 0.966 P_s^{(1)}$ независимо от углов Эйлера φ и ψ .									

Значения k_h^* при выполнении условий (7) изменяются от -0,783 до -0,758, т. е. ситуация аналогична описанной выше для локальных максимумов k_h^* данного композита. Различия между значениями k_h^* , удовлетворяющими условиям (6), и $|k_h^*|$, удовлетворяющими условиям (7), обусловлены пьезоактивностью слоев PVDF. Присутствие в формулах (6) и (7) углов, кратных 120°, тесно связано с симметрией 3m монодоменного кристалла PMN-0,33РТ [4, 12], а именно, с присутствием оси третьего порядка.

Вблизи *m* = 0,15; *θ* = 15° и *m* = 0,15; $\theta = 165^{\circ}$ впервые обнаружена оригинальная корреляция между гидростатическими параметрами k_h^* и d_h^* (рис. 3, 4), входящими в формулу (4). Такая корреляозначает, что произведение шия $\varepsilon_{33}^{*\sigma} s_h^{*E}$ в (4) остается практически постоянным. Например, с увеличением *т* возрастание $\varepsilon_{33}^{*\sigma}$ компенсируется уменьшением s_h^{*E} , так что $\varepsilon_{33}^{*\sigma} s_h^{*E} \approx$ ≈ const при заданных углах ориентации φ, ψ и θ. Подобное поведение электромеханических свойств, описываемых тензорами четных рангов, ранее не рассматривалось в литературе по пьезоактивным композитам. Отметим также значительное увеличение $|k_h^*|$ и $|d_{h}^{*}|$ (рис. 3, 4) в области максимумов или минимумов по сравнению с аналогичными параметрами компонентов вследствие перераспределения электрических и механических полей внутри композита. Согласно экспериментальным данным [4, 11] $k_h^{(1)} = 0,048$ и $d_{h}^{(1)} = 10$ пКл/Н для монодоменного кристалла PMN-0,33PT с $P_s^{(1)} \uparrow \uparrow OX_3$, $k_h^{(2)} = 0,083$ и $d_h^{(2)} = 12,8$ пКл/Н для PVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$. Приведенные на рис. 4, δ значения d_h^* превышают $\max d_h^*$ композитов "СПК типа РZТ – полимер" со связностями 2-2 [16], 1-3 [17], 3-3 [14] и 1-3-композитов "полидоменный кристалл релаксора-сегнетоэлектрика — аральдит" [14]. В по-



 $k_h^{-}(0,15, \varphi, \psi, \theta)$ (графики *a*, *e*, *d*, *ж*) и гидростатического пьезомодуля $k_h^{-}(0,15, \varphi, \psi, \theta)$, пКл/Н, (графики *б*, *c*, *e*, *s*) 2—2-композита "монодоменный кристалл РМN-0,33PT — PVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ ".





Рис. 4. Корреляция между концентрационными зависимостями гидростатического КЭС $k_h^*(m, \varphi, \psi, 15^\circ)(a)$ и гидростатического пьезомодуля $k_h^*(m, \varphi, \psi, 15^\circ)$, пКл/Н, (б) 2—2-композита "монодоменный кристалл РМN-0,33PT — PVDF $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ ".

На обоих графиках кривая 1 соответствует $\varphi = 30^\circ$, $\psi = 210^\circ$; кривая 2 — $\varphi = 20^\circ$, $\psi = 210^\circ$; кривая 3 — $\varphi = 40^\circ$, $\psi = 210^\circ$; кривая 4 — $\varphi = 30^\circ$, $\psi = 200^\circ$; кривая 5 — $\varphi = 30^\circ$, $\psi = 220^\circ$

следнем случае в качестве пьезоактивного компонента использовались следующие кристаллы, поляризованные вдоль направления [001]: PMN-*x*PT с x = 0,30; 0,33; 0,42 и PZN-*y*PT с y = 0,045; 0,07; 0,08 [14].

ные вдоль направления [001]. Питучи г с x = 0,50, 0,33; 0,42 и PZN-*y*PT с y = 0,045; 0,07; 0,08 [14]. При изменении направления $P_r^{(2)}$ на обратное (т. е. теперь $P_r^{(2)} \uparrow \uparrow OX_3$, как показано на вставке 2 рис. 1) наибольшие значения $|k_h^*|$ изменяются примерно на 2—3 %. Такие изменения связаны с относительно слабым влиянием пьезоэлектрических свойств PVDF на гидростатические параметры 2—2-композита при m > 0,1, т. е. когда эффективные пьезомодули композита d_h^* значительно превышают по абсолютной величине пьезомодули PVDF $d_{ij}^{(2)}$.

Гидростатический отклик композита, содержащего пьезопассивный полимер вместо PVDF, характеризуется уменьшением $|k_h^*|$ и $|d_h^*|$. Например, для композита "монодоменный кристалл PMN-0,33PT — аральдит" значения $|k_h^*|$ не превосходят 0,560, а соответствующие наибольшим $|k_h^*|$ значения $|d_h^*| \approx 132$ пКл/Н. Для композита "монодоменный кристалл PMN-0,33PT — полиуретан" определены $|k_{h}^{*}| \leq 0,534$ и соответствующие наибольшим $|k_{h}^{*}|$ значения |*d*^{*}_{*h*}| ≈ 130 пКл/Н. Данные численные оценки сделаны с использованием экспериментальных констант компонентов из работ [4, 18, 19]. Очевидное уменьшение $|k_h^*|$ и $|d_h^*|$ по сравнению со значениями, приведенными на рис. 3, 4, главным образом, связано с ослаблением электромеханического взаимодействия между кристаллическими слоями (см. рис. 1), разделенными слоями пьезопассивного полимера.

Поведение k_h^* ранее исследовалось для 1—2—2композита "полидоменный кристалл PMN-0,33PT, поляризованный вдоль [001] перовскитовой ячейки аральдит — эластомер" [20]. Данный композит характеризуется $\max k_h^* = 0,473$ [20], тогда как поли-доменный кристалл PMN-0,33PT имеет $k_{h}^{(1)} = 0,167$ и окружен слоистой матрицей, содержащей два пьезопассивных полимера. Наибольшее значение $k_h^* = 0,17$, определенное для 1—3-композитов "СПК ПКР-7М — полимер" [21], уменьшается при замене пьезоактивного полимера на пьезопассивный. Для сравнения также укажем, что у 1-3-композита "СПК РZТ — пористый полиуретан" $k_h^* = 0,11...0,57$ в зависимости от упругих свойств пористой матрицы, а соответствующие объемные концентрации СПК находятся в интервале от 0,010 до 0,041 [19]. Бо́льшие объемные концентрации т в нашем случае (см., например, рис. 4, а) облегчают получение 2-2-композита на основе монодоменного кристалла PMN-0,33PT с $k_h^* \approx 0,7...0,8$.

Заключение

В работе впервые исследовано поведение КЭС $k_h^*(m, \varphi, \psi, \theta)$ 2—2-композита "монодоменный кристалл РМN-0,33РТ — полимер". Концентрационные (*m*) и ориентационные (φ, ψ, θ) зависимости k_h^* рассчитаны и проанализированы для низкосимметричного композита при произвольной ориентации вектора спонтанной поляризации кристалла $P_s^{(1)}$ и фиксированной ориентации вектора остаточной поляризации полимера $P_r^{(2)}$. Результаты работы указывают на преимущества исследованного композита и

важность ориентационного эффекта при формировании электромеханических связей и гидростатического отклика. В частности, для 2-2-композита "монодоменный кристалл PMN-0,33PT — PVDF с $P_r^{(2)} \uparrow \downarrow OX_3$ " при определенных углах Эйлера φ , ψ , θ значения $|k_h^*|$ приблизительно в 16 раз превышают $k_h^{(1)}$ данного кристалла, а соответствующие этим углам значения $|d_h^*|$ примерно в 40 раз больше $d_h^{(1)}$ кристалла. Установленная корреляция между $k_{h}^{*}(m, \phi, \psi, \theta)$ и $d_h^*(m, \varphi, \psi, \theta)$ не имеет аналогов среди исследованных ранее пьезоактивных композитов и важна при дальнейшем прогнозировании гидростатического отклика 2-2-композитов на основе кристаллов релаксоров-сегнетоэлектриков с высокой пьезоактивностью. Полученные в настоящей работе результаты могут способствовать применению новых композитов в качестве элементов пьезоэлектрических преобразователей и гидроакустических устройств, а также представляются важными при целенаправленном отборе компонентов для композитов с большими значениями гидростатических параметров.

Авторы выражают благодарность Dr. C. R. Bowen (University of Bath, Бат, Соединенное Королевство) и Dr. P. Bisegna (University of Rome "Tor Vergata", Рим, Италия) за большой интерес к проблеме исследований пьезоактивных композитов и полезную дискуссию. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Южного федерального университета (тема НИР 11.01.09ф).

Список литературы

1. Zhang R., Jiang B., Cao W. Elastic, piezoelectric, and dielectric properties of multidomain $0.67Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.33PbTiO_3$ single crystals // Journal of Applied Physics. 2001. V. 90. N 7. P. 3471-3475.

2. Zhang R., Jiang B., Jiang W., Cao W. Complete set of properties of $0.92Pb(Zn_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.08PbTiO_3$ single crystal with engineered domains // Materials Letters. 2003. V. 51. N 7. P. 1305–1308.

3. Zhang R., Jiang B., Cao W. Single-domain properties of $0.67Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.33PbTiO_3$ single crystals under electric field bias // Applied Physics Letters. 2003. V. 82. N 5. P. 787–789.

4. Zhang R., Jiang B., Cao W. Orientation dependence of piezoelectric properties of single domain $0.67Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.33PbTiO_3$ crystals // Applied Physics Letters. 2003. V. 82. N 21. P. 3737–3739.

5. **Ritter T., Geng X., Shung K. K.** et al. Single crystal PZN/PT — polymer composites for ultrasound transducer applications // IEEE Transactions on Ultrasonics,

Ferroelectrics, and Frequency Control. 2000. V. 47. N 4. P. 792–800.

6. Cheng K. C., Chan H. L. W., Choy C. L. et al. Single crystal PMN-0.33PT/epoxy 1–3 composites for ultrasonic transducer applications // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2003. V. 50. N 9. P. 1177–1183.

7. Wang F., He C., Tang Y. et al. Single-crystal $0.7Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.3PbTiO_3/epoxy 1-3$ piezoelectric composites prepared by the lamination technique // Materials Chemistry and Physics. 2007. V. 105. N 2-3. P. 273-277.

8. **Topolov V. Yu., Krivoruchko A. V., Bowen C. R.** Maxima of effective parameters of novel piezo-composites based on relaxor-ferroelectric single crystals // Ferroelectrics. 2007. V. 351. P. 145–152.

9. Zhang R., Jiang B., Jiang W., Cao W. Complete set of elastic, dielectric, and piezoelectric coefficients of $0.93Pb(Zn_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.07PbTiO_3$ single crystal poled along [011] // Applied Physics Letters. 2006. V. 89. N 24. P. 242908-3 p.

10. **Sessler G. M.** Piezoelectricity in polyvinylidenefluoride // Journal of the Acoustical Society of America. 1981. V. 70. N 6. P. 1596—1608.

11. **Kar-Gupta R., Venkatesh T. A.** Electromechanical response of 1–3 piezoelectric composites: An analytical model // Acta Materialia. 2007. V. 55. N 3. P. 1093–1108.

12. **Topolov V. Yu.** The remarkable orientation and concentration dependences of the electromechanical properties of $0.67Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - 0.33PbTiO_3$ single crystals // Journal of Physics: Condensed Matter. 2004. V. 16. N 12. P. 2115–2128.

13. **Желудев И. А.** Физика кристаллических диэлектриков. М.: Наука, 1968. 464 с.

14. **Topolov V. Yu., Bowen C. R.** Electromechanical properties in composites based on ferroelectrics. London: Springer, 2009. 202 p., xvi p.

15. Гориш А. В., Дудкевич В. П., Куприянов М. Ф. и др. Пьезоэлектрическое приборостроение. Т. 1. Физика сегнетоэлектрической керамики / Под ред. А. В. Гориша. М.: Издат. предпр. ред. журн. "Радиотехника", 1999. 368 с.

16. **Grekov A. A., Kramarov S. O., Kuprienko A. A.** Anomalous behavior of the two-phase lamellar piezoelectric texture // Ferroelectrics. 1987. V. 76. N 1–4. P. 43–48.

17. Греков А. А., Крамаров С. О., Куприенко А. А. Эффективные свойства трансверсально-изотропного пьезокомпозита с цилиндрическими включениями // Механика композит. матер. 1989. № 1. С. 62—69.

18. **Chan H. L. W., Unsworth J.** Simple model for piezoelectric ceramic/polymer 1–3 composites used in ultrasonic transducer applications // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 1989. V. 36. N 4. P. 434–441.

19. Gibiansky L. V., Torquato S. On the use of the homogenization theory to design optimal piezocomposites for hydrophone applications // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1997. V. 45. N 5. P. 689–708.

20. **Panich A. E., Topolov V. Yu., Glushanin S. V.** Highperformance 1–3-type relaxor-ferroelectric-based composites // Vibroengineering, 6th International Conference. Proceedings. October 12–14, 2006. Kaunas University of Technology, Lithuania. Kaunas: Technologija, 2006. P. 226–230.

21. **Криворучко А. В., Тополов В. Ю.** Прогнозирование гидростатического пьезоэлектрического отклика анизотропных 1—3-композитов "сегнетопьезокерамика — полимер" // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 7. С. 35—39.

Элементы МНСТ

УДК 629.7.054

М. А. Барулина, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., В. Э. Джашитов, д-р техн. наук, проф., зав. лабораторией, В. М. Панкратов, д-р техн. наук, проф., зам. директора по науке, Институт проблем точной механики и управления РАН, г. Саратов, e-mail: iptmuran@san.ru

МИНИАТЮРНЫЙ ДАТЧИК ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ РАКЕТНО-КОСМИЧЕСКОЙ ТЕХНИКИ В УСЛОВИЯХ МЕХАНИЧЕСКИХ И ТЕПЛОВЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Построены связанные математические модели нестационарных тепловых процессов, термоупругого напряженно-деформированного состояния и прочности миниатюрного датчика давления, применяемого для мониторинга и диагностики состояния ракетно-космической техники и функционирующего в условиях механических и тепловых ударов. Решены задачи расчета и анализа нестационарных температурных полей датчика и его термоупругого напряженно-деформированного состояния. Получены оценки прочности датчика при механических и тепловых воздействиях. Проведены компьютерные эксперименты, подтверждающие адекватность и работоспособность математического, алгоритмического и программного обеспечения, получены количественные оценки и выработаны рекомендации по обеспечению эффективного функционирования миниатюрного датчика давления.

Ключевые слова: миниатюрный датчик давления, температурные поля, напряженно-деформированное состояние, конечно-элементная математическая модель, механические и тепловые воздействия.

Введение, постановка задач и выбор методов решения

Современные высоконадежные миниатюрные датчики давления [1], предназначенные для измерения процессов статико-динамического давления жидких и газообразных сред (кислорода, азота, водорода и др.) в ракетно-космической технике, функционируют в условиях жестких механических и температурных воздействий. Например, давление измеряемой среды может достигать 125 МПа, а температуры измеряемой среды могут изменяться в широком диапазоне (-196÷+100) °С.

Такие ударные механические и тепловые воздействия могут привести к сложному изменению термоупругого напряженно-деформированного состояния датчика, недопустимым внутренним температурам, деформациям и напряжениям и, в конечном итоге, к погрешностям и нарушениям нормального функционирования датчика. Основной узел датчиков давления — воспринимающий элемент (сплав 29H26KXБТЮ-П), показанный на рис. 1 (см. третью сторону обложки), на мембрану которого методами тонкопленочной технологии [2, 3] наносятся тензорезисторы, контактные площадки или емкостные микроэлектромеханические (МЭМС) структуры и другие электроэлементы, которые необходимы для съема выходной информации о деформациях и прогибах мембраны, являющихся мерой измеряемого давления.

Цель работы — обеспечение эффективного функционирования датчика давления, работающего в условиях механических и тепловых воздействий.

Для достижения поставленной цели *ставятся и решаются* следующие задачи:

- построение и исследование математической модели нестационарных тепловых процессов, протекающих в датчике давления;
- построение и исследование конечно-элементной математической модели нестационарного термоупругого напряженно-деформированного состояния датчика;
- оценка эффективности работы датчика давления по точности измерений, по способам съема информации и оптимальному расположению сенсоров (тензорезисторов или емкостных МЭМСструктур), по прочности воспринимающего элемента и по другим критериям с учетом сложных механических и тепловых воздействий.

Для решения поставленных задач использована многофункциональная система конечно-элементного анализа ANSYS 11.0, реализующая метод конечных элементов для решения связанных задач теплового анализа и расчета термоупругого напряженнодеформированного состояния датчика давления.

Особенностью использования готовых пакетов программ является то, что используемый в них математический аппарат не всегда прозрачен, и это вызывает необходимость проверки адекватности получаемых с их помощью результатов.

Такая качественная и количественная проверка адекватности результатов в настоящей работе проведена для всех поставленных задач.

Задача построения математической модели тепловых процессов, расчета и анализа температурных полей датчика давления решалась как методом конечных элементов с помощью пакета ANSYS, так и модифицированным методом элементарных тепловых балансов [4, 5]. Алгоритмы этого метода хорошо апробированы для решения задач расчета, анализа и визуализации нестационарных температурных полей различных датчиков авиакосмического прибо-



ростроения, и авторы накопили большой опыт [2, 4, 5] применения этого метода.

Как показали проведенные сравнительные исследования результатов расчетов температурных полей датчика давления методом конечных элементов (МКЭ) и модифицированным методом элементарных тепловых балансов (МЭБ), эти результаты качественно и количественно совпадают.

Математическая конечно-элементная модель термоупругого напряженно-деформированного состояния датчика давления

Конечно-элементная модель датчика давления с адаптивной сеткой, сгенерированная с помощью пакета ANSYS, представлена на рис. 2 (см. третью сторону обложки).

Входные параметры — геометрические и теплофизические характеристики датчика и его элементов, тепловые воздействия и измеряемое механиче-



ское распределенное давление, действующее на мембрану.

численное решение МКЭ

Выходными характеристиками системы конечноэлементного анализа ANSYS являются поля напряжений, деформаций и перемещений элементов датчика давления как функций тепловых воздействий, геометрических и теплофизических параметров датчика.

Для проверки адекватности результатов расчета напряженно-деформированного состояния (НДС) датчика давления использовались, в качестве тестовых, задачи теории упругости для расчета НДС круглых тонких пластин с известными аналитическими решениями [6].

Сравнительные результаты расчетов приведены на рис. 3.

В верхней части рисунка показаны жестко защемленная тонкая круглая пластинка (мембрана) радиуса R и толщины h ($R/h \ge 5$), для которой известно аналитическое решение [6], определяющее ее НДС при действии распределенной нагрузки интенсивности *q*, и близкая к реальной конструкция мембраны в составе воспринимающего элемента датчика давления, для которой численно, методом конечных элементов, рассчитано напряженно-деформированное состояние при номинальных температурных условиях. В нижней части рисунка представлены характеристики напряженно-деформированного состояния мембраны (прогибы *w*, напряжения σ_{φ} , σ_r и деформации ε_{φ} , ε_r) как функции радиальной безразмерной координаты $\rho = r/R$ мембраны. Здесь φ — окружная координата; r — чрезмерная радиальная координата.

Как видим, результаты аналитических и численных расчетов качественно и количественно достаточно хорошо совпадают. Наибольшие отклонения численных решений от аналитических имеют место на краях мембраны, что вполне объясняется имеющими место граничными условиями задачи. А именно: при аналитическом решении использовались идеализированные граничные условия жесткого защемления круглой пластинки по внешнему радиусу; при численном решении использовались граничные условия, соответствующие реальной конструкции воспринимающего элемента (см. рис. 2, рис. 3).

Таким образом, построенную конечно-элементную модель миниатюрного датчика давления можно считать адекватной и ее можно использовать при исследовании термоупругого напряженно-деформированного состояния датчика.

По рассчитанным полям напряжений, с помощью системы конечно-элементного анализа ANSYS автоматизированно могут быть определены главные напряжения и эквивалентное напряжение

$$\sigma_{9} = \sqrt{\frac{\left(\sigma_{I} - \sigma_{II}\right)^{2} + \left(\sigma_{II} - \sigma_{III}\right)^{2} + \left(\sigma_{III} - \sigma_{I}\right)^{2}}{2}}$$

где $\sigma_{I}, \sigma_{II}, \sigma_{III}$ — главные напряжения.

Эквивалентное напряжение является важной величиной при оценке прочности в соответствии с различными условиями и теориями прочности [7]. Так, например, по условию прочности Губера, разрушение не происходит, если эквивалентное напряжение не превышает предел прочности $\sigma_9 < \sigma_{\Pi}$.

Таким образом, построенные связанные математические модели тепловых процессов, термоупругого напряженно-деформированного состояния и прочности датчика давления позволяют решать поставленные задачи.

Компьютерные эксперименты и анализ полученных результатов

Основные исходные данные для расчета НДС элементов датчика давления:

- модуль Юнга $E = 200 \ \Gamma \Pi a;$
- коэффициент линейного температурного расширения $\alpha = 1.8 \cdot 10^{-6} 1/^{\circ}$ C;
- толщина и радиус мембраны h = 0,05 см; R = 0,25 см;
- коэффициент Пуассона µ = 0,3.
 Система термостатирования датчика отсутствует.

На первом этапе рассчитано нестационарное температурное поле датчика давления при механическом и тепловом ударе:

- начальная (номинальная) температура и температура окружающей среды T₀ = T_c + 50 °C;
- температура измеряемой среды изменяется ступенчато в диапазоне $T_{\rm изм} = (-196 \div +100)$ °C;
- давление измеряемой среды $q = 125 \text{ M}\Pi a$.

Цветовые топограммы установившихся температурных полей и графики текущих максимальных и минимальных температур для моделируемых режимов термоударов представлены на рис. 4 (см. четвертую сторону обложки).

Как видим, температурные поля датчика давлений существенно неоднородны, быстрее всего остывает или нагревается зона мембраны, непосредственно контактирующая с измеряемой средой.

Проведем анализ рассчитанного термоупругого напряженно-деформированного состояния датчика давления, которое обусловлено рассматриваемыми механическими и температурными воздействиями.



Рис. 6. Деформации $\varepsilon_{\varphi}(\rho)$, $\varepsilon_{r}(\rho)$, $\varepsilon_{z}(\rho)$ при $T_{u_{3M}} = -196$ °С (*a*) и прогибы $w(\rho)$ мембраны (б):

1 — номинальная температура измеряемой среды +50 °C; 2 — температура измеряемой среды −196 °C; 3 — температура измеряемой среды +100 °C

28

Цветовые топограммы установившихся полей деформаций всего датчика давления представлены на рис. 5 (см. четвертую сторону обложки), а деформации и прогибы его мембраны в моделируемых режимах механического и теплового ударов представлены на рис. 6.

Как видим, максимальные деформации датчика давления при температуре измеряемой среды -196 °C на ≈ 12 % больше, чем при температуре измеряемой среды +100 °C.

На рис. 6 показаны деформации ε_{φ} , ε_r , ε_z при $T_{\mu_{3M}} = -196$ °C и прогибы *w* мембраны при температурах $T_{\mu_{3M}} = T_{HOM} = +50$ °C, $T_{\mu_{3M}} = -196$ °C, $T_{\mu_{3M}} = +100$ °C как функции радиальной безразмерной координаты $\rho = r/R$.

Максимальные деформации на мембране имеют место в ее центре и на расстоянии от центра мембраны $\rho \approx 0.6 \div 0.8$ (рис. 6, *a*).

Максимальные прогибы имеют место в центре мембраны и различаются примерно на 10 % при изменении температур измеряемой среды в диапазоне $(-196 \div +100)$ °C (рис. 6, δ). При этом прогиб "замороженной" мембраны больше, чем "нагретой", поскольку одно и то же механическое давление измеряемой среды приходится для "замороженной" мембраны на меньшую площадь (мембрана сжимается при охлаждении).

Полученные данные по деформациям и прогибам мембраны датчика давления позволили оценить погрешности показаний датчика давлений при различных температурах измеряемой среды (погрешности до 10 %).

Эти же данные позволяют оптимальным образом выбрать месторасположение тензорезисторов или тонкопленочных емкостных МЭМС-структур (в зависимости от выбранного способа съема выходного сигнала датчика). Например, тензорезисторы, измеряющие деформации мембраны, могут быть расположены на расстоянии от центра мембраны $\rho \approx 0,6 \div 0,8$.

Цветовые топограммы установившихся полей эквивалентных напряжений в датчике давления для моделируемых режимов механического и теплового ударов представлены на рис. 7 (см. четвертую сторону обложки). На рис. 8 показано эквивалентное напряжение σ_3 в мембране датчика в зависимости от радиальной безразмерной координаты $\rho = r/R$ мембраны.

Максимальные эквивалентные напряжения имеют место в центре мембраны, в рассматриваемом диапазоне температур измеряемой среды различаются незначительно (рис. 8) и достигают значения $\approx 1,2$ ГПа (это почти в 10 раз больше измеряемого давления q = 0,125 ГПа).

Полученные данные по напряжениям, возникающим в датчике давления и его элементах, позволили провести оценки прочности, согласно теории [7], воспринимающего элемента и его мембраны. Предел прочности материала мембраны должен быть $\sigma_{\rm fr} > 1,2$ ГПа.

Заключение

Построенные и исследованные математические модели датчика давления, работающего в условиях



Рис. 8. Эквивалентные напряжения $\sigma_{\vartheta}(\rho)$ в мембране датчика

сложных механических и тепловых воздействий, позволили решить поставленные задачи анализа и оценок эффективности работы датчика давления по точности измерений, по способам съема информации и оптимальному расположению сенсоров съема выходной информации (тензорезисторов или емкостных МЭМС-структур), по прочности воспринимающего элемента.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) по проекту 08-08-00084а.

Список литературы

1. Датчики и преобразующая аппаратура. Каталог. Российское авиационно-космическое агентство. Пенза: ФГУП "Научно-исследовательский институт физических измерений", 2002. 157 с.

2. Джашитов В. Э., Панкратов В. М., Улыбин В. И., Мокров Е. А., Метальников В. В., Семенов В. А. Влияние тепловых воздействий на датчик давления для космических летательных аппаратов // Авиакосмическое приборостроение. 2003. № 7. С. 2—10.

3. Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е. Тонкопленочные емкостные МЭМС-структуры с минимизацией влияния температур для датчиков давления // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 10 (99). С. 42—47.

4. Дульнев Г. Н., Парфенов В. Г., Сигалов А. В. Методы расчета теплового режима приборов. М.: Радио и связь, 1990. 312 с.

5. Джашитов В. Э., Панкратов В. М. Датчики, приборы и системы авиакосмического и морского приборостроения в условиях тепловых воздействий / Под общей редакцией В. Г. Пешехонова. СПб.: ГНЦ РФ ЦНИИ "Электроприбор", 2005. 404 с.

6. Глушков Г. С., Синдеев В. А. Курс сопротивления материалов. М.: Высшая школа, 1965. 768 с.

7. **Прочность.** Устойчивость. Колебания: Справочник в 3 т. Т. 1 / Под ред. И. А. Биргера и Я. Г. Пановко М.: Машиностроение, 1968. 835 с.

Молекулярная электроника и биоэлектроника

УДК 621.38.049.772.1 + 577.37

Е. П. Гребенников, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., М. И. Самойлович, д-р физ.-мат. наук, проф., нач. лаб., Центральный научно-исследовательский технологический институт "Техномаш", г. Москва, Ю. В. Орловский, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. сектором,

Институт общей физики РАН им. А. М. Прохорова

БАКТЕРИОРОДОПСИН В ОПАЛОВЫХ МАТРИЦАХ

Обзор посвящен исследованию оптических свойств нанокомпозитных материалов на основе фотохромного белка бактериородопсина и опаловых матриц из кубических упаковок наносфер SiO₂. Исследовано влияние различных подложек, в том числе сильных пьезоэлектриков ниобата бария—стронция и ниобата лития, на спектры люминесценции и комбинационного рассеивания (Раманспектры) сформированных на них пленок нанокомпозитов бактериородопсин — опаловая матрица. Рассмотрены перспективы создания нейросетевых систем обработки оптической информации на основе бактериородопсинсодержащих опаловых нанокомпозитов.

Ключевые слова: бактериородопсин, опаловые матрицы, люминесценция.

Введение

Молекулы бактериородопсина (БР), имеющие рекордную для белковых молекул термостабильность, могут быть охарактеризованы как "ионные насосы" со смещением активного центра при внутримолекулярных движениях протона, или, в физических терминах, с двумя (фактически с тремя при определенных условиях) устойчивыми состояниями, обусловленными конформационными изменениями молекулы. Существенно, что в БР избыточная энергия запасается (в результате фотоцикла) в виде градиента электрохимического потенциала ионов водорода. Хотя изменение положения протона и связано с запасанием энергии поглощенного света, очень важно, что фотоцикл БР не включает (в отличие от фотосинтеза) каких-либо окислительно-восстановительных реакций, т. е. не сопровождается отрывом и переносом электронов между различными молекулами. Последнее означает, что все изменения в системе БР достигаются в результате внутримолекулярных перестроек и поляризации ближайшего окружения ретиналя (хромофора белка). Не менее существенно для практических применений БР то, что все переходы между конформационными состоя-

ниями этого белка регулируются кулоновскими взаимодействиями, в частности, в области активного центра (т. е. тесно связаны с внутримолекулярным переносом протона). Сам фотоцикл БР сопровождается возникновением устойчивых и хорошо разрешимых спектральных максимумов оптического поглощения, причем продукты фотосинтеза — формы БР не только светочувствительны к определенным длинам волн и изменяют свое состояние при дополнительном освещении, но и переходы между различными состояниями сопровождаются образованием фотопотенциала (значением до 1 В по некоторым данным). Так, образующаяся под действием желтого света форма М₄₁₀ (410 — длина волны поглощения в нанометрах) под действием синего света регенерирует в исходное состояние БР₅₇₀ с образованием фотопотенциала. При этом, если в темноте электрические поля (до 10⁷ В/м) не вызывают изменений в полосе поглощения M_{410} , то их включение на фоне синезеленого света приводит к существенному увеличению стационарной концентрации формы M₄₁₀. Для технологических применений важно, что электроиндуцированные продукты, в отличие от фотоиндуцированных, не дают начала циклу темновых превращений БР.

Поскольку БР может подвергаться существенным модификациям (чтобы использовать его в качестве основы для разработки новых перспективных материалов), необходимо изучение процессов функционирования бактериородопсина в условиях различных внешних воздействий (рН, температуры, электрических и магнитных полей и т. п), а также в разнообразном внешнем окружении, обеспечивающем интерфейс данного биокомпонента с остальной частью электронной и/или оптической системы.

Поскольку скорости ряда превращений составляют доли пикосекунд, что обусловлено уникальностью ситуации с молекулой БР, в которой оптические эффекты связаны со смещением ядер, в этом случае скорости превращения могут быть даже меньше скоростей электронно-колебательных процессов (а именно, $<10^{-12}$ с), сохраняя при этом ярко выраженную зависимость от электрических зарядов и значения диэлектрической постоянной окружения.

Бактериородопсин как оптическая среда. Экспериментальная часть

Как известно, основные области реального использования уникальных характеристик бактериородопсина (эффективность фотоэлектрической конверсии, фотовольтаические и фотохромные свойства) определяются прогрессом в создании систем с высокой степенью ориентации таких молекул. Максимальная степень упорядоченности может быть достигнута в самосогласованных ансамблях типа супра-



Рис. 1. Атомно-силовая микроскопия нанокомпозита бактериородопсин — опаловая матрица

молекул в оптически активных материалах. Для достижения этой цели были разработаны специальные технологические методы получения таких ансамблей (рис. 1) в межсферических пустотах кубических упаковок наносфер SiO₂ (опаловых матриц) на различных подложках, в том числе на ориентированных срезах пластин, вырезанных из кристаллов, относящихся к классу сильных пьезоэлектриков, а следовательно, имеющих значительный пироэффект, ниобата бария — стронция (SBN) и ниобата лития (LiNbO₃). Основную проблему при введении в опаловую матрицу БР из водной суспензии представляет то, что скорость проникновения воды значительно выше, чем для комплексов молекул БР и, в результате, их транспорт в опаловую матрицу затруднен. Данная проблема была успешно решена в ОАО "ЦНИТИ "Техномаш". На указанных образцах были изучены особенности фотолюминесценции полученных наноструктур при комнатной и повышенной температурах.

Фотохимический цикл БР содержит несколько интермедиатов, которые могут быть идентифицированы по их спектроскопическим характеристикам, главным образом, по положению максимумов их полос поглощения. На рис. 2 показан фотоцикл БР [1, 2], на котором интермедиаты представлены в виде общепринятого кода — отдельными буквами с нижними индексами, указывающими максимумы поглощения. Фотохимические и температурные переходы показаны толстыми и тонкими стрелками соответственно. Прямыми буквами показаны транс-конфигурации ретиналя, например В и О, а наклонными буквами представлен 13-цис-ретиналь. В темноте БР релаксирует в 6:4 смесь состояний D и В [1]. Такая смесь состояний называется адаптированным к темноте БР, но при облучении светом БР переходит в состояние, адаптированное к свету, так что весь материал БР возвращается в состояние В. Именно из указанного состояния и начинается фотоцикл, который приводит к транспорту протона.

Методом корреляционного счета одиночных фотонов [3] при прямом импульсном наносекундном лазерном возбуждении при комнатной температуре и при нагреве на ~20 °C были измерены спектры люминесценции в пленках опаловых матриц, содержащих молекулы бактериородопсина, на стеклянных и кристаллических подложках.

Оптическая схема эксперимента представлена на рис. 3. Возбуждение осуществлялось на длине волны 578,2 нм импульсным лазером на парах меди с частотой повторения 10 кГц и длительностью импульса 10 нс. Для селекции и регистрации люминесценции использовались монохроматор МДР-23 и фотоумножитель ФЭУ-79, работающий в режиме счета фотонов. Метод корреляционного счета одиночных фотонов реализовывался на электронных модулях стандарта NIM и интерфейсной плате многоканального амплитудного анализатора (фирма ORTEC, США). Сбор данных проводился с помощью программы *Timeres*, созданной в НЦ ЛМТ ИОФАН. Для увеличения отношения сигнал/шум до запуска программы выбиралось временное окно, совпадающее по положению и длительности с наносекундной кривой затухания люминесценции бактериородопсина, длительность которой определялась длительностью лазерного импульса. Затем согласовывались спектральное разрешение монохроматора и скорость его сканирования со временем накопления одной точки спектра. В рассматриваемом случае при скорости сканирования монохроматора, равной 0,333 нм/с, время накопления уста-



НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, № 6, 2009 –

навливалось равным 2 с. При этом запись результатов происходит следующим образом. Отсчеты, накопленные за 2 с, суммируются в выбранном временном окне и программа записывает одну точку спектра в память компьютера. Далее процесс повторяется для следующей точки спектра пока не будет пройден весь наперед заданный спектральный диапазон.

Для того, чтобы рассеянное лазерное излучение не попадало на фотокатод ФЭУ, фильтр (КС-11 из набора цветного оптического стекла) помещался непосредственно перед фотокатодом, а не перед входной щелью монохроматора в целях уменьшения возможной собственной люминесценции фильтра под действием лазерного возбуждения.

Для проверки отсутствия люминесценции фильтра вместо образца ставился прозрачный необлученный кристалл LiF. В таких условиях были измерены спектры люминесценции компонентов установки, при этом оказалось, что с фильтром интенсивность рассеянного излучения на 2-3 порядка меньше, чем без него. Поскольку измеренные спектры люминесценции искажены спектральной передаточной функцией установки, являющейся произведением передаточных спектральных функций монохроматора, фильтра и ФЭУ, они нуждаются в корректировке. Была измерена передаточная спектральная функция установки. В качестве калибровочного источника света была использована лампа накаливания, с учетом слабой зависимости ее интенсивности от длины волны излучения в диапазоне длин волн 600...850 нм. В результате измерений было установлено, что в диапазоне 650...750 нм передаточная функция является константой, не зависящей от длины волны. Возникающие искажения спектров люминесценции в диапазоне 600...650 нм и 750...850 нм, связанные с ростом пропускания фильтра КС-11 и падением спектральной чувствительности ФЭУ-79 соответственно, учитывались при определении положения максимумов и ширины измеренных спектров люминесценции.

При использованных параметрах источника излучения (лазер на парах меди с длиной волны 578 нм, длительностью импульса на полувысоте 8 нс, частотой повторения 10 кГц) можно рассматривать возбуждение БР как квазинепрерывное, а его реакцию и условия регистрации как квазистационарные. В этом случае в возбужденном БР ответственными за люминесценцию из общих соображений должны быть наиболее долгоживущие (и, естественно, имеющие достаточное поглощение на длине волны 578 нм) один или несколько интермедиатов B, K, L, N, O [4]. Непрерывный характер спектра люминесценции может быть следствием значительной исходной ширины полос поглощения интермедиатов, что должно непосредственно влиять на ширину полосы люминесценции (120 нм) при возможных обратных переходах в форму БР570. Заметим также, что в используемом нами в экспериментах штамме БР не возникают формы Р и О.

Для анализа измеренных спектров люминесценции сложную молекулу БР, принимая во внимание все ее интермедиаты и переходные состояния, можно представить как единый оптический центр, основное и возбужденное электронные состояния которого описываются в модели адиабатических потенциалов [5]. В литературе указанную схему иногда называют конфигурационной координатной моделью (configurational coordinate model) [6]. Энергии электронных термов молекул, между которыми происходит переход, сильно зависят от межъядерных расстояний и поэтому стационарными являются не электронные, а электрон-колебательные состояния.

На рис. 4 показаны электронные уровни энергии (адиабатические потенциалы) как функции обобщенных или нормальных координат Q для двух простейших состояний системы в отсутствие электронного вырождения, и соответствующие им колебательные состояния (горизонтальные уровни). Переход между термами не является чисто электронным, поскольку меняется и колебательное состояние, а частота поглошаемого и излучаемого кванта зависит от колебательного состояния исходного электронного терма. С учетом температурной зависимости заселенности колебательных состояний. различия вероятностей переходов и собственной ширины каждого перехода это приводит к тому, что в спектрах вместо узких атомных линий наблюдаются широкие полосы гауссовой формы. Кривая адиабатического потенциала для возбужденного электронного состояния смещена по оси Q относительно кривой адиабатического потенциала для основного электронного состояния на значение величины S (параметр Хуанга — Риса или константа тепловыделения). Данная схема может объяснить следующие экспериментальные данные:

- Стоксов сдвиг, а именно уменьшение энергии испущенного фотона (фотона люминесценции) по сравнению с энергией поглощенного фотона;
- уширение полосы поглощения и люминесценции с ростом температуры.

Значение смещения *S* может меняться под воздействием внешнего электростатического поля для молекул с преимущественно ионной или частично ионной связью, а также под воздействием электри-



Рис. 4. Адиабатические потенциалы, колебательные уровни и "вертикальные" электронные переходы

ческого поля движущегося точечного заряда (в данном случае протона), который определяет возмущения, приводящие к изменению формы и дополнительному сдвигу адиабатических потенциалов молекул (оба фактора могут действовать одновременно).

Исследования люминесценции бактериородопсина — поиск возможностей управления характеристиками

Проведены исследования фотолюминесценции БР, введенного в опаловые матрицы, представленные правильными кубическими упаковками наносфер SiO₂ толщиной 5—10 слоев, как с использованием стеклянных подложек, так и кристаллических на основе материалов, обладающих сильными как пьезо-, так и пироэлектрическим эффектами. На рис. 5 приведены спектры люминесценции нанокомпозита в виде опаловой матрицы, содержащей БР на стеклянной подложке. Для сравнения приведен спектр люминесценции пленки БР на такой же подложке (без опаловой матрицы). Наблюдается значительный рост выхода фотолюминесценции для нанокомпозита БР — опаловая матрица, что согласуется с полученными ранее результатами по увеличению фотолюминесценции эрбия в условиях квантоворазмерных структур, формируемых в фотонных кристаллах на основе опаловых матриц [7].

При нагреве на ~20 °С нанокомпозита БР — опаловая матрица интенсивность люминесценции существенно уменьшается, что можно связать с тепловым тушением люминесценции. В случае кристаллических подложек интенсивность люминесценции увеличивается, что определяется воздействием электрического поля (возникающего за счет пироэффекта) кристаллической подложки на поведение различных интермедиатов.

На рис. 6 приведен нормированный по максимуму спектр люминесценции для нанокомпозита БР опаловая матрица на стеклянной подложке при комнатной температуре в сравнении со спектром люминесценции пленки чистого БР. В соответствии с рассматриваемой моделью основной вклад в спектр БР вносит люминесценция состояний, имеющих максимумы в районе ~700 нм и ~730 нм. При введении БР в нанокомпозит вклад компонента с $\lambda_{max} \approx 700$ нм становится подавляющим.



Рис. 5. Спектр люминесценции нанокомпозита бактериородопсин — опаловая матрица на стеклянной подложке при комнатной (2) и повышенной (3) температурах в сравнении с люминесценцией пленки чистого БР (1)



Рис. 6. Нормированный спектр люминесценции нанокомпозита бактериородопсин — опаловая матрица на стеклянной подложке при комнатной (кривая 2) температуре в сравнении с люминесценцией пленки чистого БР (кривая 1)



Рис. 7. Спектр люминесценции пленки БР при комнатной температуре, нанесенной на отрицательно заряженную поверхность подложки монодоменного кристалла LiNbO₃ (кривая 2) и на стеклянную подложку (кривая 1)

На рис. 7 представлены спектры люминесценции образца БР при комнатной температуре, нанесенного на поверхность подложки монодоменного кристалла LiNbO₃ (кривая 2) и стекла (кривая 1). Направление полярной оси подложки монодоменного кристалла LiNbO3 определялось с использованием пьезотестера. Как известно, направление полярной оси соответствует заряду, который возникает на поверхности реального кристалла как при кратковременном изменении температуры нелинейной кристаллической подложки (пироэлектрический эффект) [8], так и за счет неоднородности собственно кристалла. Возникновение заряда связано с проявлением спонтанной поляризации и означает, что в монодоменном кристалле элементарные диполи направлены одинаково. Такая одинаковая направленность приводит к появлению разноименных зарядов на противоположных поверхностях подложки из монодоменного кристалла LiNbO₃, например, под воздействием кратковременного нагрева, поскольку при постоянной температуре большая часть указанных зарядов скомпенсирована свободными зарядами диэлектрика.

Спектр люминесценции образца пленки БР, нанесенной на ту сторону подложки, поверхность которой заряжается отрицательно в результате кратковременного нагрева под действием лазерного возбуждения (далее отрицательно заряжаемая поверхность), смещен (здесь и далее смещение оценивается по положению максимума полосы в спектре люминесценции) на 10 нм в длинноволновую область относительно спектра люминесценции образца, нанесенного на стеклянную подложку, главным образом, за счет появления длинноволнового крыла в спектре.

Таким образом, можно предположить, что смещение в длинноволновую область спектра люминесценции образца чистого БР на подложке из монодоменного кристалла LiNbO3 может быть вызвано влиянием отрицательно заряженной, вследствие пироэффекта, поверхности подложки на положение электронных уровней оптического центра БР. Следовательно, одно из возможных объяснений заключается в том, что смещению максимума спектра люминесценции в длинноволновую область при постоянной температуре в диаграмме адиабатических потенциалов энергетических уровней основного и возбужденного состояний оптического центра БР соответствует увеличение параметра S, а смещению в коротковолновую область — его уменьшение. Необходимо сделать сушественную оговорку о возможном влиянии на полученные данные такого неизученного явления, как изменение относительной доли различных интермедиатов на заряженных подложках.

Максимум спектра люминесценции образца нанокомпозита опаловая матрица + БР, нанесенного на одну сторону подложки (кривая 2) из монодоменного кристалла LiNbO₃, смещен в длинноволновую область на 4,7 нм относительно спектра люминесценции образца на стекле, а смещение спектра люминесценции образца, нанесенного на противоположную сторону подложки (кривая 3) из LiNbO₃, происходит в коротковолновую область и составляет 5,9 нм (рис. 8). Смещение в разные стороны максимумов спектров люминесценции образцов, нанесенных на противоположные поверхности подложки из LiNbO₃, вызвано их разным зарядом и, соответственно, ростом или уменьшением силы электрон-фононной связи *S* по сравнению с нейтральной подложкой. На основании приведенных выше данных можно предположить, что для образца на подложке из



Рис. 8. Спектр люминесценции образца нанокомпозита: опаловая матрица + БР на разнозаряжаемых сторонах подложки из монодоменного кристалла LiNbO₃ (кривые 2 и 3) и подложке из стекла (кривая 1) при комнатной температуре



Рис. 9. Спектр люминесценции образца пленки БР, нанесенной на положительно заряженную поверхность подложки из монодоменного кристалла SBN (кривая 2) и на подложку из стекла (кривая 1) при комнатной температуре

LiNbO₃ смещение в длинноволновую область спектра относительно образца на стекле связано с взаимодействием оптического центра с отрицательно заряженной поверхностью (S растет), а смещение в коротковолновую область — с положительно заряженной поверхностью (S падает). При этом в опаловой матрице сдвиг спектра люминесценции оптического центра БР оказывается несколько меньше (4,7 нм) по сравнению со сдвигом спектра люминесценции оптического центра чистого БР (10 нм), что может быть связано как с ростом расстояния до заряженной поверхности подложки, так и с экранированием опаловой матрицей влияния электростатического поля подложки на оптический центр БР.

Для образца в виде пленки БР, нанесенной на поверхность монодоменного кристалла SBN (которая заряжается положительно под действием лазерного импульса — далее положительно заряжаемая поверхность), смещение спектра люминесценции образца (кривая 2 на рис. 9) происходит в длинноволновую область на 11 нм относительно образца на стекле (кривая 1 на рис. 9), как и в случае спектра люминесценции образца, нанесенного на отрицательно заряженную поверхность подложки из монодоменного LiNbO₃ (рис. 10). Направление смещения спектра люминесценции образца на подложке из SBN нахо-



Рис. 10. Спектр люминесценции образца нанокомпозита: опаловая матрица + БР на полидоменной (кривая 3) и монодоменной (кривая 2) подложках кристалла SBN и подложке из стекла (кривая 1) при комнатной температуре

дится в обратной зависимости от заряда поверхности подложки по сравнению с направлением сдвига спектра люминесценции образца на подложке из LiNbO₃, что требует дальнейших исследований.

Спектр люминесценции образца композита опаловая матрица + БР, нанесенного на отрицательно заряжаемую поверхность подложки из монодоменного кристалла SBN, при комнатной температуре (см. рис. 9) сильно смещен в коротковолновую область (на 65 нм) относительно спектра люминесценции образца, нанесенного на подложку из стекла, тогда как спектр люминесценции образца, нанесенного на подложку из полидоменного кристалла SBN, смещен в длинноволновую область всего на 3 нм относительно спектра люминесценции образца на стеклянной подложке. Подложка из SBN монодоменизировалась в постоянном электрическом поле напряженностью ~5-6 кВ/см при комнатной температуре. При этом к поверхности, на которую наносился образец, прикладывался положительный электрод. Сдвиг спектров в разные стороны, скорее всего, связан с разным зарядом поверхности подложки из кристалла SBN, а не с его значением, тогда как значение сдвига, скорее всего, связано с величиной заряда поверхности подложки, определяемой степенью ее монодоменизации. Сдвиг спектра люминесценции в коротковолновую область образца, помещенного на отрицательно заряжаемую поверхность монодоменной подложки SBN, согласуется с предыдущим экспериментом, где БР наносился на положительно заряжаемую поверхность, а максимум сдвигался в длинноволновую область относительно аналогичного образца на стекле. Что касается значения сдвига, то полидоменная структура имеет слабую поляризацию и, следовательно, малый заряд поверхностей, в результате чего спектр люминесценции образца на полидоменной подложке сдвигается незначительно (3 нм) относительно образца на неполяризованной подложке из стекла по сравнению со сдвигом спектра люминесценции образца на монодоменной подложке (65 нм). Монодоменная подложка характеризуется сильной поляризацией и большим зарядом поверхностей, а следовательно, большим влиянием на положение спектра люминесценции оптического центра БР. Сдвиг спектра люминесценции образца на подложке из монодоменного кристалла LiNbO3 существенно меньше (3 нм), чем сдвиг аналогичного образца на подложке из монодоменного кристалла SBN (65 нм) относительно спектра люминесценции образца на стекле при комнатной температуре, что соответствует большей степени поляризации подложки из монодоменного кристалла SBN. Согласно работе [9], значение пироэлектрического коэффициента находится в диапазоне 0,5...1 мкКл/(град \cdot см²) для кристалла SBN, а для кристалла LiNbO3 данное значение только 0,2 мкКл/(град · см²) [10].

При повышении температуры образца нанокомпозита опаловая матрица + БР, нанесенного на подложку из стекла (кривая 2 на рис. 11), происходит сдвиг спектра люминесценции в коротковолновую область на 16 нм относительно спектра при комнатной температуре (кривая *1*). Помимо смещения происходит уширение спектра люминесценции образца



Рис. 11. Спектр люминесценции образца нанокомпозита: опаловая матрица + БР, нанесенный на разнозаряженные (кривые 3 и 4) поверхности подложки монодоменного кристалла LiNbO₃ при повышенной температуре (T = 310 K) и на стеклянную подложку при комнатной (кривая I) и повышенной (кривая 2) температурах (T = 314 K)

на стекле и ширина на полувысоте составляет 147 нм. Уширение спектра люминесценции при повышении температуры связано с ростом заселенности верхних колебательных состояний возбужденного электронного терма оптического центра БР. При повышении температуры спектры люминесценции образца, нанесенного на разнозаряжаемые поверхности подложки из монодоменного кристалла LiNbO₃, сдвигаются в коротковолновую область на ~8 нм относительно спектра образца на стекле, имея при этом одинаковую ширину на полувысоте, равную ~160 нм, приблизительно такую же, как и на стеклянной подложке. Относительно небольшой сдвиг 0,5 нм и значительное уширение спектров люминесценции на подложке из монодоменного кристалла LiNbO₃ при повышении температуры как на положительно, так и на отрицательно заряжаемых поверхностях, привело почти к их полному наложению друг на друга. Небольшой сдвиг максимумов спектров люминесценции образцов при повышенной температуре относительно друг друга (кривые 3 и 4 на рис. 11) может быть связан либо с незначительным влиянием лазерного импульса на изменение температуры предварительно нагретого кристалла, вследствие чего пироэффект слабо проявляет себя, либо с увеличением собственной проводимости диэлектрической подложки с ростом температуры. в результате чего пироэффект ослабляется. Близкое расположение максимумов спектра люминесценции образца на стекле (кривая 1) и образца, нанесенного на разнозаряжаемые стороны подложки монодоменного кристалла LiNbO₃ при повышенной температуре, подтверждает слабость пироэффекта. Сдвиг спектра люминесценции в коротковолновую область при повышенной температуре может быть связан с преобладанием в оптическом центре БР люминесценции одного из интермедиатов с максимумом, сдвинутым в коротковолновую область [11].

При повышенной температуре происходит также смещение на 62 нм и 41 нм в коротковолновую область соответственно максимумов спектров люминесценции образцов, нанесенных на монодоменную и полидоменную подложки из кристалла SBN отно-



Рис. 12. Спектр люминесценции образца нанокомпозита: опаловая матрица + БР, нанесенный на монодоменную (кривая 3) (T = 313 K) и полидоменную (кривая 4) (T = 306 K) подложки кристалла SBN и стеклянную подложку при комнатной (кривая 1) и повышенной температуре (кривая 2) (T = 314 K)

сительно спектра люминесценции образца на стекле при комнатной температуре (рис. 12).

Разница в положении максимумов составляет 21 нм, это больше, чем, когда в качестве подложки используется пластина из монодоменного кристалла LiNbO₃, в котором имеет место наложение спектров люминесценции (сдвиг составляет всего 0,5 нм). Полного наложения спектров люминесценции образца, нанесенного на разные типы подложек из кристалла SBN, может и не наблюдаться вследствие следующих причин: неодинакового электронфононного взаимодействия для разных подложек; более сильной поляризации монодоменной подложки (по сравнению с полидоменной).

В результате для монодоменной подложки лазерное возбуждение, нагревающее подложку и вызывающее пироэффект, может оказывать воздействие даже на предварительно слабо нагретый (на 20 °C) образец.

Анализ зависимости ширины спектров люминесценции образцов нанокомпозита опаловая матрица + БР на различных подложках показывает, что высокочастотный край измеренных спектров люминесценции для длины волны меньше 650 нм существенно искажается пропусканием фильтра КС-11. Низкочастотный край несильно зависит от спектральной чувствительности ФЭУ, поэтому искажения несущественны и можно сравнивать ширину спектров по полуширине на полувысоте со стороны длинноволнового крыла. В предположении, что спектры люминесценции имеют симметричную форму, полную ширину на полувысоте можно определить простым удвоением полуширины.

Сказанное выше подтверждается измерениями особенностей кинетики люминесценции образцов нанокомпозита БР — опаловая матрица на стеклянной подложке для различных длин волн регистрации (рис. 13). Не следует исключать при объяснении спектров люминесценции как технологические особенности получения (а следовательно, и поведения) БР [12] с одной стороны, так и возможность участия в общей схеме двухфотонных и трехфотонных процессов [4].

Для дальнейшей проверки полученных экспериментальных данных о влиянии свойств подложки на состояние молекул БР в опаловой матрице были



Рис. 13. Кинетика люминесценции нанокомпозита бактериородопсин — опаловая матрица на стеклянной подложке для различных длин волн регистрации



Рис. 14. Раман-спектр молекул БР в опаловой матрице на подложке из SBN (кривая *I*) и из кварцевого стекла (кривая *2*)

сняты рамановские спектры на такого рода образцах, представленных упорядоченными ансамблями БP — опаловая матрица на подложке из SBN и на подложке из кварцевого стекла. Рамановские спектры получали на спектрометре S3000 (*Instruments S. A.*) в режиме микрозонда, используя для возбуждения рассеяния излучение Ar⁺ лазера на длине волны 514,5 нм.

На рис. 14 представлен рамановский спектр, на котором хорошо видно перераспределение интенсивности полос в областях 1565 и 1530 см⁻¹ для различных подложек. Указанные полосы соотносятся с колебаниями, принадлежащими двойной связи С=С [13]. Полученные данные подтверждают, что действительно имеет место воздействие электрического заряда в приповерхностном слое подложки (в случае SBN) на положение протона в ретинале, а значит, и на состояние молекул БР в такого рода упорядоченных ансамблях. Можно считать, что указанные особенности спектра соответствуют предположению [13], что в БР происходит не только образование трансконфигураций ("излом" цепи ретиналя) по двойной связи C=C. но и дополнительное скручивание вокруг одной из одиночных связей С-С, так что положение протона ретиналя существенно влияет на электрическое поле отрицательно заряженных групп. Именно такого рода (или близким к ним) взаимодействиям и можно объяснить экспериментально наблюдаемые особенности рамановского спектра, приведенного на рис. 14.

Перспективы создания нейросетевых систем обработки оптической информации на основе БР-содержащих опаловых нанокомпозитов

Использование молекул БР для создания систем хранения и обработки оптической информации является наиболее перспективным в сочетании с материалами с запрещенной фотонной зоной — фотонными кристаллами. Большая часть неудачных попыток использования уникальных свойств БР обусловлена их применением в виде макромассивов (в частности сухих пленок), когда электростатическое влияние молекул друг на друга практически нивелирует наиболее чувствительные свойства молекул БР (отметим, что строение зрительных клеток сходно со строением фотонных кристаллов). Задача состоит в использовании индивидуальных молекул БР. "заменяя" образование протонного градиента искусственно создаваемыми электрическими полями при сохранении описанных выше механизмов отрицательной обратной связи, а следовательно, в использовании внутримолекулярного механизма фотопревращений и его зависимости от электрического поля.

Применение фотонных кристаллов (в настоящее время единственными технологически реализуемыми трехмерными фотонными кристаллами являются опаловые матрицы) позволяет использовать целый ряд физических явлений, характерных именно для фотонных кристаллов: образование полной запрещенной фотонной зоны необходимого диапазона частот (за счет введения в опаловую матрицу материалов с различным показателем преломления и ε), вплоть до "запирания" светового излучения; образование волноводов в трехмерном массиве и туннелирование света под действием внешних полей за счет снятия запретов в оптических переходах и в распространении света в областях точечных и линейных дефектов (последнее позволяет рассчитывать на образование сетей, по аналогии с нейросетями, взаимодействующих молекул); явление поверхностного плазмонного резонанса для усиления оптического излучения в микрополостях (например, использование сферических коллоидов Аи или Аg с размерами микрополостей, соответствующими размерам молекул БР — 5 нм) [14], размещаемых в межсферических пустотах опаловых матриц. Для подобных сред наблюдается существенное увеличение оптических откликов, как линейных, так и нелинейных, вследствие многообразия поверхностных особенностей, характерных для подобных нанокомпозитов [15].

Фотоцикл БР сопровождается возникновением устойчивых и хорошо разрешимых спектральных максимумов оптического поглощения, так что продукты фотосинтеза — формы БР не только светочувствительны к определенным длинам волн и изменяют свое состояние при дополнительном освещении, но и переходы между различными состояниями сопровождаются образованием фотопотенциала (значение до 1 В по некоторым данным). В результате, образующаяся под действием желтого света форма M_{412} (412 — длина волны поглощения в нанометрах), при облучении синим светом регенерирует в исходное состояние БР₅₇₀ с образованием фотопотенциала. При этом, если в темноте электриче-

ские поля (до 10^7 В/м) не вызывают изменений в полосе поглощения M_{412} , то их включение на фоне синезеленого света приводит к увеличению стационарной концентрации формы M_{412} . Для технологических применений важно, что электроиндуцированные продукты, в отличие от фотоиндуцированных, не дают начала циклу темновых превращений БР.

Заключение

Как известно [15, 16], основные области реального использования уникальных характеристик бактериородопсина (эффективность фотоэлектрической конверсии, фотовольтаические и фотохромные свойства) определяются прогрессом в создании систем с высокой степенью ориентации этих молекул. Поскольку БР может подвергаться существенным модификациям (чтобы использовать его в качестве основы для разработки новых перспективных материалов), необходимо изучение процессов функционирования бактериородопсина в условиях различных внешних воздействий — pH, температуры, электрических и магнитных полей и других, а также в разнообразном внешнем окружении, обеспечивающем интерфейс этого биокомпонента с остальной частью электронной и/или оптической системы.

Максимальная степень упорядоченности может быть достигнута в самосогласованных ансамблях типа супрамолекул в оптически активных материалах. Использование молекул БР для создания систем хранения и обработки оптической информации наиболее перспективно в сочетании с материалами с запрещенной фотонной зоной — фотонными кристаллами. Большая часть неудачных попыток использования уникальных свойств БР обусловлена их применением в виде макромассивов (в частности сухих пленок), когда электростатическое влияние молекул друг на друга практически нивелирует наиболее чувствительные свойства молекул БР (отметим, что строение зрительных клеток сходно со строением фотонных кристаллов). Задача состоит в использовании индивидуальных молекул БР, "заменяя" протонные градиенты искусственно создаваемыми электрическими полями (при сохранении описанных выше механизмов отрицательной обратной связи), а следовательно, в использовании внутримолекулярного механизма фотопревращений и его зависимости от электрического поля.

Авторы благодарят Л. И. Ивлеву и М. И. Цветкова за содействие при выполнении экспериментальной части работы.

Список литературы

1. **Hampp N.** Bacteriorhodopsin as a Photochromic Retinal Protein for Optical Memories // Chemical Review. 2000. V. 100. P. 1755–1776.

2. Neutze R., Pebay-Peroula E., Edman K., Royant A., Navarro J., Landau E. M. Bacteriorhodopsin: a high-resolution structural view of vectorial proton transport // Biochimica et Biophysica Acta. 2002. V. 1565. P. 144–167.

3. **Binkert T. H., Tschanz H. P., Zinsli P. E.** The measurement of fluorescence decay curves with the single-photon counting method and the evaluation of rate parameters // Journal of Luminescence. 1972. V. 5. P. 187–217.

4. Ohtani H., Tsukamoto Y., Sakoda Y., Hamaguchi H. Fluorescence spectra of bacteriorhodopsin and the intermediates O and Q at room temperature // FEBS Letters. 1995. V. 359. P. 65–68.

5. Берсукер И. Б. Электронное строение и свойства координатных соединений. Ленинград: Химия. Ленингр. отд., 1986. 288 с.

6. **Di Bartolo B.** Optical Interactions in Solids. John Wiley & Sons Inc, 1968. P. 431.

7. Самойлович С. М. Автореферат канд. диссертации. М.: МГУ, 1999.

8. Кузьминов Ю. С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. М.: Наука, 1987.

9. Воронов В. В., Карлов Н. В., Кузьмин Г. П., Кузьминов Ю. С., Курицын Б. А., Никифоров С. М., Осико В. В., Прохоров А. М. Малоинерционный пироэлектрический детектор на основе кристаллов Ba_{0.25}Sr_{0.75}Nb₂O₆ // Квантовая электроника. 1977. Т. 4. № 9. С. 1903—1911.

10. Шаскольская М. П. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1976. 392 с.

11. Atkinson G. H., Blanchard D., Brack T. L. Fluorescence from the primary products o the bacteriorhodopsin photocycle // Journal of luminescence. 1991. V. 48–49. P. 410–414.

12. Гребенников Е. П. Молекулярные нейросетевые устройства на основе белка бактериородопсина // Высокие технологии в промышленности России (материалы и устройства электронной техники): Монографический сборник. М.: Изд. ЦНИТИ "Техномаш", 2003. С. 135—195.

13. **Яковлев Ю. М., Генделев С. Ш.** Монокристаллы ферритов в радиоэлектронике. М.: Сов. радио, 1975. 360 с.

14 **Hampp N.** Bacteriorhodopsin as a Photochromic Retinal Protein for Optical Memories // Chemical Review. 2000. V. 100. P. 1755–1776.

15. Neutze R., Pebay-Peroula E., Edman K., Royant A., Navarro J., Landau E. M. Bacteriorhodopsin: a high-resolution structural view of vectorial proton transport // Biochimica et Biophysica Acta. 2002. V. 1565. P. 144–167.

16. Samoylovich M. I., Belyanin A. F., Grebennikov E. P., Guriyanov A. V. Bacteriorhodopsin — the basis of molecular superfast nanoelectronics // Nanotechnology. 2002. V. 13. P. 124–12.

Човости нанои микросистемной техники

Кремниевые нанопроволочные транзисторы с каналом шириной 4 нм

Появление технологии сверхчувствительных датчиков, основанной на кремниевых нанопроволоках, требует как изготовления проволок с наноразмерным диаметром, так и интеграции с микроэлектронными процессами. Была продемонстрирована AFM-литография, которая обеспечивает воспроизводимое изготовление сложных полевых транзисторов на основе монокристаллических кремниевых нанопроволок с высокими значениями электрических характеристик. Нанопроволоки получали из пластины со структурой кремний-наизоляторе (КНИ) посредством комбинации процессов локального окисления с использованием силового микроскопа и операций травления. Был изготовлен кремниевый нанопроволочный транзистор с шириной канала 4 нм и измерены электрические характеристики. Гибкость процесса изготовления была проиллюстрирована на примере электрических характеристик двух нанопроволочных схем с различной геометрией. Метод изготовления совместим со стандартной КМОП-технологией и может быть использован для разработки широкого диапазона архитектур и новых микроэлектронных приборов.

МГУ и IBM готовят альтернативу транзисторам

МГУ им. М. В. Ломоносова и компания IBM займутся совместными исследованиями в области нанотехнологий с применением суперкомпьютера Blue Gene/P, установленного на факультете вычислительной математики и кибернетики (BMK). Первым проектом станет изучение наномолекулярных электронных переключателей, которые со временем могут вытеснить традиционные транзисторы и совершить революцию в мире микросхем.

МГУ им. М. В. Ломоносова и корпорация IBM, согласно ранее подписанному соглашению о сотрудничестве, начинают совместные исследования с применением высокопроизводительных вычислений. Работать ученые будут на базе недавно открытой на факультете ВМК МГУ суперкомпьютерной лаборатории Blue Gene. Среди предметов вычислений будут задачи по нанопроцессам, биологии, финансовая деятельность и управление рисками.

На факультете уже установлены две аппаратные стойки системы Blue Gene/P, которые университет приобрел в начале 2008 г. Каждая из этих стоек содержит по 1024 четырехъядерных процессоров с общей пиковой производительностью 27,8 трлн операций в секунду (Тфлопс). По словам заведующего лабораторией вычислительной техники факультета ВМК МГУ Евгения Гуревича, сейчас из 30 Тфлопс суперкомпьютера уже достигнута производительность в 23 Тфлопс, что является "очень хорошим показателем". Стоимость Blue Gene составляет как минимум 125 млн рублей.

J. Martinez et al. Silicon Nanowire Transistors with a Channel Width of 4 nm Fabricated by Atomic Force Microscope Nanolithography.

Nano Letters, October 1, 2008.

Второй суперкомпьютер, которым располагает МГУ, собранный российскими и белорусскими разработчиками СКИФ, в 2 раза мощнее своего "младшего брата". По данным последнего, сентябрьского рейтинга 50 самых мощных суперкомпьютеров России и СНГ, он занял второе место. Его производительность на тесте Linpack составила 60 Тфлопс, на тесте Linpack он показывает 47,3 Тфлопс (78,9 % пиковой). Что касается Blue Gene, то это "всего лишь мощный калькулятор, поддерживающий работу тех гениальных ученых, которые со стороны России и IBM будут участвовать в этом совместном исследовании", заявил CNews вице-президент IBM, генеральный директор IBM в России и СНГ Кирилл Корнильев.

Первый проект сотрудничества МГУ и IBM будет связан с изучением функционирования наномолекулярных электронных переключателей в различных условиях, которые могут однажды стать реальной альтернативой современным транзисторам. Декан факультета ВМК МГУ, академик РАН Евгений Моисеев заявил, что со временем такими переключателями "кремний будет вытеснен".

Наномолекулярные электронные логические переключатели могут способствовать появлению нового поколения сверхкомпактных мощных вычислительных систем. Концепция применения молекул в виде электронных элементов находится еще на самом раннем этапе изучения: прежде всего, необходимо научиться предсказывать поведение сложных наносистем. Суперкомпьютер с массовым параллелизмом поможет моделировать процессы сверхвысокой сложности. Кстати, исследователи лаборатории IBM в Цюрихе уже продемонстрировали возможность устойчивой работы молекулярного "переключателя".

По словам ректора МГУ Виктора Садовничего, самое главное — это начало плодотворного тесного сотрудничества ведущего вуза России с одной из ведущих исследовательских лабораторий. Ожидается, что дружба двух гигантов позволит решить глобальные проблемы в сфере нанотехнологий и что, самое главное, разработки будут вестись в России.

http://cnews.ru/news/top/index.shtml?2008/10/27/324885# top_static

AMD разделяется на две независимые компании

Второй мировой производитель микропроцессоров компания AMD сегодня объявит о разделении собственного бизнеса на две большие и независимые части. По словам источников в компании, разделение предусматривает появление компании, которая занимается только разработкой и проектированием чипов и соответствующих архитектур, а также компании, которая занимается их промышленным производством. Логика данного разделения проста компания хочет снизить издержки, чтобы наконец-то выбраться из убытков, в которых производитель оказался с 2006 г., а также удержать рыночную долю под напором основного конкурента Intel.

По условиям реорганизации, предприятие, которое займется производством процессоров, будет представлять собой классическое СП, в котором лишь некоторая часть акций будет принадлежать самой Advanced Micro Devices, остальная часть бумаг будет принадлежать инвестфонду Mubadala Development из Абу-Даби, который ранее уже купил 8 % акций AMD за 622 млн долл. и на днях сообщил о своей готовности инвестировать в производство еще 5 млрд долл.

В "аппаратное" подразделение разделенной AMD войдут несколько крупных промышленных заводов в Германии и других странах. После разделения эти заводы будут штамповать чипы не только для AMD, но и для других производителей (пока неизвестно каких). В итоге, по плану менеджмента AMD и инвесторов из Mubadala Develpoment, производственное подразделение должно значительно повысить объемы генерации денег, что позволит AMD тратить больше средств на исследования, а кроме того повысит конкурентоспособность компании в целом.

Инвесторы из Абу-Даби говорят, что они готовы вложиться в полное переоснащение двух заводов AMD в Дрездене, а также дать деньги на постройку нового завода AMD в Нью-Йорке (у AMD уже есть один завод в этом штате). Однако в обмен на это в "аппаратном" подразделении Mubadala Development хочет получить блокпакет в размере 66,6 % акций. На долю самой AMD отойдут оставшиеся 33,4 % бумаг.

Несмотря на то, что на данный момент в AMD не комментируют данную информацию, известно, что внутри компании данная стратегия получила название "легкие активы", намекая на то, что в компанию придет большой поток нужных денег, однако за них придется заплатить собственным производством.

В целом, многие компании, например ARM, разрабатывают чипы, но не занимаются их производством на аппаратном уровне, что позволяет им выпускать продукцию с существенно меньшими затратами. В AMD могут переключиться на проектирование чипов, а когда будет нужно, начать их аппаратное производство, поэтому компания сможет выбрать, где и как это сделать с максимальной эффективностью.

"Это самый крупный анонс в нашей истории. Такой шаг должен сделать нашу компанию сильнее в финансовом смысле, выгода очевидна как в краткосрочной, так и в долгосрочной перспективе", — заявил исполнительный директор AMD Дирк Мейер.

Кроме того, очень важную поддержку новому "аппаратному" СП оказала и корпорация International Business Mashines, которая продолжительное время была партнером AMD в производстве процессоров. В процессе переговоров с AMD топ-менеджмент IBM выразил желание продлить соглашение по про-изводству с новым СП до 2015 г.

Несмотря на новые неофициальные данные, инвесторы пока не особо воодушевлены планами компании и по итогам торгов в США бумаги AMD снизились в цене на 7 %.

http://www.cybersecurity.ru/hard/56559.html

Наномеханический датчик массы с атомным разрешением

Механические резонаторы широко используются в инерционных весах для обнаружения небольшого количества адсорбированной массы посредством смещения генерируемой частоты. Достижения в области литографии и синтеза материалов обеспечивают возможность изготовления наноразмерных механических резонаторов, которые могут работать в качестве прецизионных датчиков силы, положения и массы. В работе был продемонстрирован наномеханический резонатор на базе углеродной нанотрубки, работающий при комнатной температуре.

Наблюдался атомный дробовый шум, что аналогично электронному дробовому шуму, измеряемому во многих полупроводниковых экспериментах. В отличие от традиционных масс-спектрометров, наномеханические масс-спектрометры не подвергаются потенциально разрушающей ионизацией тестового образца и более чувствительны к большим молекулам и в конечном итоге могут быть размещены на кристалле.

K. Jensen et al. An atomic-resolution nanomechanical mass sensor.

Nature Nanotechnology 3. 533-537 (2008).

Перспективы создания электронных устройств на базе нанотрубок

Полупроводниковые углеродные нанотрубки (CNTs) показали себя перспективным исполнением для создания электронных устройств, особенно в гибком исполнении. Но существует проблема разделения полупроводниковых и металлических нанотрубок, присутствующих в исходном материале. Группа ученых из Стэнфордского университета и исследовательского института фирмы Samsung использовали "bottom-up" для полного устранения металлических нанотрубок из прибора. Процесс осуществляется на поверхностном окисном слое, функционирование которого ограничивается Силановыми группами, ограниченными аминами и фенилами. Если CNTs наносятся на такую поверхность пластины, полупроводниковые трубки прилипают преимущественно к поверхности, ограниченной аминами. Это делает возможным изготовление быстролействующих CNT транзисторов, датчиков и прозрачных электродов. Вместе с тем ученые Иллинойского университета и университета Пердью не пытаются устранять металлические нанотрубки из смеси, а совершенствуют "top-down" процесс для ограничения их влияния. Посредством отсекания рисунка в сети нанотрубок с использованием литографии и реактивного ионного травления была получена возможность закороток приборов под влиянием металлических нанотрубок. У таких транзисторов была получена подвижность 80 см $^2B^{-1}c^{-1}$ и отношение on/off 105. Этот полход позволяет создавать законченные ИС на основе CNTs. Демонстрационные испытания на пластмассовых подложках показали пример возможного использования в гибкой электронике.

Promising future for nanotube-based electronics. Materialstoday, August 21, 2008.

Тактовый MEMS-генератор военного назначения

Широко известно, что MEMS-технология широко применяется в бытовой технике, например, в воздушных мешках для автомобилей, но очень медленно используются ее достоинства, выражающиеся в малых размерах и надежности, в военной технике. Ситуацию может изменить новый тактовый генератор VMEM5Q фирмы Vectron International. В конструкции применяется MEMS-резонатор, изготовленный по технологии PureSilicon Resonator фирмы Discera, в которой используется недорогая промышленная КМОП-технология. Новый тактовый генератор сконструирован с целью противостоять ударной нагрузке до 100 000 g. Испытания на надежность 125 МГц прибора не выявили ухудшения характеристик прибора при нагрузке на ось 30 000 g. Генератор работает при напряжении от +2,7 В до +3,6 В и максимальном токе 9 мА в диапазоне 1-40 МГц, 10 мА в диапазоне 40-80 МГц и 16 мА в диапазоне 80-125 МГц. Время переднего и заднего фронтов составляет 5 нс с периодом дрожания 5 пс. В конструкцию включена схема внутренней компенсации для усиления температурной стабильности. Используется экологически чистый корпус для поверхностного монтажа с размерами 5 × 3,2 мм. Прибор проверен и соответствует требованиям стандарта MIL-PRF-55310.

J. Browne. Military Clock Oscillator Rides MEMS Technology.

Military Electronics, Sept. 2008, p. 8.

Структурные и электрические характеристики полевых транзисторов на углеродных нанотрубках, изготовленных с использованием нового метода самосовмешенного выращивания

Сообщается об изготовлении полевых транзисторов на углеродных нанотрубках (CNTFETs) с использованием недорогого технологического процесса, основанного на химическом выращивании углеродных нанотрубок (CNTs) из паровой фазы. Процесс выращивания CNTs осуществляется на всей поверхности пластины с использованием жертвенного катализатора Ni/Al. Процесс не содержит ни сложных манипуляций над SWNTs, ни многоэтапных операций литографии, что позволяет избежать риска несовмещения. Каждая технологическая операция совместима с обычной КМОП-технологией. Изготовленные структуры представляют собой униполярные CNTFETs, работающие подобно *p*-MOS-FETs с отношением on/off до 3×106 .

L. Rispal, U. Schwalke. Structural and electrical characterization of carbon nanotube field-effect transistors fabricated by novel self-aligned growth method.

3rd International Conference on Design and Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era. 25–27 March 2008, pp. 1–5.

Конструкция КМОП/молекулярной ячейки памяти на основе передаточного вентиля

КМОП/молекулярная ячейка памяти (СМОL) предполагает высокую плотность, программируемость, простое конфигурирование наряду с долгим сроком хранения на основе свойств наноприбора. Результаты моделирования показали, что существующая архитектура может быть модифицирована с использованием существующих спецификаций наноприбора, включая напряжения ON и OFF. В статье приводится описание ячейки памяти CMOL на основе передаточного вентиля, в которой решаются существующие рабочие проблемы, включая падение напряжения, и которая пригодна для работы с использованием КМОПтехнологии 45 нм и обычных ячеек КМОП СОЗУ.

3rd International Conference on Design and Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era. 25–27 March 2008, pp. 1–4.

Структура наноэлектронной матрицы, основанной на двух типах молекулярных переключателей

Приводится описание структуры матрицы, основанной на гибридной интеграции КМОП-структуры и молекулярной структуры, известной, как CMOL, в которой используются преимущества двух типов молекулярных переключателей для реализации маломощных, быстродействующих наноэлектронных CMOL-схем. Молекулярные переключатели программируются посредством использования специальных уровней напряжения. Для предлагаемой структуры характерно значительное уменьшение потребляемой мощности и времени задержки по сравнению с первоначальной конструкцией CMOL, в которой был использован КМОПузел, изготовленный по 45-нанометровой технологии.

3rd International Conference on Design and Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era. 25–27 March 2008. p. 1–4.

Демонстрация светоизлучающих нанотрубок

Сначала ученые исследовательской лаборатории фирмы IBM установили, что излучательная эффективность нанотрубок выше, чем у светодиодов. На этот раз нанотрубка помещалась внутри оптического волновода для получения направленной поверхностной эмиссии, выбора длины волны и получения сверхвысокой эффективности. Поверхностная эмиссия была получена посредством совместного использования полевого транзистора на базе одной нанотрубки и пары металлических зеркал — одного над, а другого под нанотрубкой, лежащей на плоскости кремниевого кристалла. Нижнее зеркало изготовлено из серебра, половина верхнего зеркала изготовлена из золота. Свет излучается из нанотрубки в полость, которая заполнена прозрачным диэлектриком. Расстояние между верхним и нижним зеркалами рассчитывалось до половины нужной длины волны излучения, которая задается близкой к длине волны связи 1,55 мкм. Свет отражается от дна полости, причем половина проходит как поверхностная эмиссия от нанотрубки, а другая половина отражается обратно к нижнему зеркалу для усиления эмиссии.

Эмиссия в оптической полости с двумя зеркалами была ограничена таким образом, чтобы свет формировал стоячую волну между зеркалами с увеличением частот, длина которой равна половине размера полости. Для формирования полости была использована литография. Нанотрубки имели различные диаметры (в данном случае около 2 нм). Как результат, они имели несколько различные значения ширины запрещенной зоны, поэтому эмиссия была на нескольких различающихся частотах. Тем не менее, интеграция нанотрубки внутри полости, физические ограничения в структуре устраняют нежелательные частоты.

Были продемонстрированы два метода эмиссии света в нанотрубках. В одном случае осуществлялась инжекция горячих носителей на каждом конце трубки, в другом случае один конец инжектировал электроны, а другой конец — дырки.

В дальнейшем намечается проведение экспериментов по совмещению нанотрубок в сверхрешетки. Это позволит изготовление матрицы нанотрубок в составе будущих кремниевых оптоэлектронных схем.

R. C. Johnson. IBM demonstrates light-emitting nano-tube.

M. Barua, Z, Abid. Design of a transmission gate based CMOS/molecular (CMOL) memory cell.

A. Alma'aitah et al. A nanoelectronic array structure based on two types of molecular swithes.

www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID = 210200 443

A. S. Mutschler. IBM makes first steps toward carbon nanotube-based nanophotonic. Electronic News $- \frac{8}{25}/2008$.

Интегральные трехмерные микроэлектромеханические приборы из обработанных пластин с углеродными нанотрубками

Для того чтобы быть полезными в качестве микроэлектромеханических приборов, углеродные нанотрубки с хорошо контролируемыми свойствами и ориентацией должны быть изготовлены с высокой плотностью и помещены в заранее намеченных местах. Данная проблема была решена посредством иерархической сборки углеродных нанотрубок на плотно упакованных и высоко совмещенных трехмерных пленках на пластине, из которых может быть изготовлен литографическим способом сложные трехмерные нанотрубчатые структуры широкого диапазона. К ним относятся островки из нанотрубок на подложке, подвешенные пластинки и балки, трехмерные кантилеверы, которые существуют как отдельные связанные приборы с полезными механическими и электрическими свойствами. Каждая технологическая операция является как параллельной, так и масштабируемой, что позволяет интегрировать эти структуры в системы на основе функциональных трехмерных наноприборов. Данный подход открывает новые пути для изготовления экономичных и масштабируемых приборов с беспрецедентными структурной сложностью и функциональными возможностями.

Y. Hayamizu et al. Integrated three-dimensional microelectromechanical devices from processable carbon nanotube wafers.

Nature Nanotechnology. 2008. 3. P. 284-289.

Новые схемы нанопроволочной интеграции для производственных наноразмерных электронных и оптоэлектронных устройств с массовым параллелизмом

В прошлом десятилетии отмечался значительный прогресс в синтезе и демонстрации новых приборов с полупроводниковыми нанопроволоками. Однако интерфейс и интеграция нанопроволок в приборы и схемы остаются трудно решаемой проблемой, так как они исходно представлялись как базовые блоки будущих электронных, оптоэлектронных и считывающих систем. Была продемонстрирована эпитаксиальная технология формирования перемычек для обеспечения интерфейса нанопроволок, которая обеспечивает индивидуальный электрический доступ к большому числу нанопроволочных приборов без помощи нанозондов или трудоемких и дорогих методов последовательного интерфейса. Две противостоящие, электрически изолированные полупроводниковые поверхности подвергаются обработке с использованием грубой оптической литографии,

мокрого или сухого травления. Затем горизонтальные нанопроволоки выращиваются на одной поверхности и эпитаксиальным способом подсоединяются к другой поверхности, образуя электрически постоянные и надежные "наномосты". Электрическая изоляция обеспечивается использованием структуры на КНИ-подложке (кремний-на-изоляторе). Нанопроволочные приборы, изготовленные с использованием технологии мостового интерфейса, показали на два порядка меньшее контактное сопротивление и на три порядка меньший уровень электрических шумов, чем в случае других подходов.

Метод был расширен в плане использования перемычек между кремниевыми поверхностями из гетерогенных InP нанопроволок. Наблюдались такие интересные свойства, как ограниченный ток пространственного заряда и различимый уровень устойчивого фототока. Эта технология может быть использована для изготовления нанопроволочных приборов на любом типе подложек, например, из аморфных материалов и даже металлов. В частности, был сконструирован полупроводниковый фотодетектор на основе наномостика и изготовлен на кварцевой подложке. Была измерена впечатляющая полоса пропускания, равная 30 ГГц. Указанные результаты показали, что имеется возможность конструирования и изготовления полупроводниковых приборов на основе нанопроволок без использования дорогих монокристаллических подложек.

M. S. Islam et al. Novel nanowire integration schemes for massively parallel and manufacturable nanoscale electronics and photonics.

2nd IEEE International Nanoelectronics Conference, 24–27 March, 2008. P. 1009–1014.

Новые СВЧ концепции, основанные на углеродных нанотрубках

Приводится краткое описание физических свойств углеродных нанотрубок. Далее детально рассматриваются приборы с полевой эмиссией, квантовые электронные приборы, СВЧ активные и пассивные приборы на основе углеродных нанотрубок с оценкой их характеристик.

Hartangel, H. Ludvig. New microwave concepts based on carbon nano tubes.

2nd IEEE International Nanoelectronics Conference, 24–27 March, 2008. P. 112–116.

Р—і—п-переход в кремниевых нанопроволоках

P—i—n-переходы были изготовлены вдоль кремниевых нанопроволок поперечным сечением 8 нм с использованием обычного top-down метода. Наблюдались характеристики электрического выпрямления, фактор *ideality* оценивался в 3,8, приписываемый к захваченным зарядам в герметизирующем слое двуокиси кремния. Диффузия примеси вдоль проволок уменьшает эффективную длину внутренней области. Обратный пробой смещения проявляющий отрицательный коэффициент, может быть связан с туннельным эффектом. Р—i—n-переходы хорошо реагировали на освещение вопреки их малой области захвата.

2nd IEEE International Nanoelectronics Conference, 24–27 March, 2008. P. 1137–1139.

Наноразмерная система межсоединений для наноразмерных микропроцессоров

Быстрый прогресс в технологии изготовления наноразмерных приборов вынуждает специалистов исследовать соответствующие наноразмерные компьютерные архитектуры с плотностью упаковки, выходящей за физические ограничения обычной литографии. Однако вследствие ограничений технологии и топологии, а также высокой плотности дефектов, ожидаемой в наноразмерной системе межсоединений, намеченная плотность приборов может оказаться невозможной при интеграции в вычислительную систему. Поэтому желательна наноразмерная архитектура, которая позволит сохранить преимущества плотной упаковки. В статье приводится описание новой наноразмерной архитектуры, основанной на полупроводниковых нанопроволоках: NASICs (Nanoscale Application Specific ICs — наноразмерные специализированные ИС). NASIC представляет собой структуру межсоединений, построенную на 2Dнанопроволочной сети и нанопроволочных полевых транзисторах. Изготовлен процессор WISP-0 (Wire Streaming Processor), в конструкции которого были использованы принципы и оптимизация NASIC, а также была использована техника поддержания отказоустойчивости. Оценка показала, что плотность WISP-0 в 2-3 раза выше плотности аналогичного КМОП-процессора, изготовленного с использованием 18-нанометровой технологии, ожидаемой в 2018 г.

Teng et al. NASICs: A nanoscale fabric for nanoscale microprocessors.

2nd IEEE International Nanoelectronics Conference, 24–27 March, 2008. P. 989–994.

Сравнение аналоговых и цифровых наносистем: проблемы наноархитектуры

Совершенствование производства и сборки новых приборов, таких как углеродные нанотрубки и полупроводниковые нанопроволоки, вынуждает проводить исследования новых наноархитектур с использованием указанных приборов для применения в вычислительной технике, устройствах для обработки изображений и т. д. В статье обсуждаются варианты возможной наноразмерной реализации сотовых нейронных сетей (Cellular Neural Networks (CNN)). Поскольку аналоговая реализация CNN может быть затруднена с использованием подходов, базирующихся на принципах самосборки, сформулированы требования по специализации приборов и произвольной маршрутизации. В ближайшее время может быть подготовлен цифровой эквивалент. Показано, что одна такая цифровая CNN-конструкция базируется на наноразмерной структуре NASICs (Nanoscale Application Specisic ICs), в которой используются сеть 2D-нанопроволок и нанопроволочные полевые транзисторы. Обсуждается специализированная архитектура для CNN на примере резонансных туннельных диодов.

Narayanan et al. Comparison of analog and digital nanosystem: Issues for the nano-architect.

2nd IEE International Nanoelectronics Conference, 24–27 March, 2008. P. 1003–1008.

Нанофототрубки — новый подход для развития электроники

Дано описание нового электронного прибора новатрона. Новатрон представляет собой наноразмерную триодную вакуумную трубку, в которой электроны освобождаются от катода посредством фотоэмиссии, а не термоэмиссии. Новая технология позволяет создавать СВЧ приборы, приближаясь к терагерцовому диапазону, и открывает новые возможности интеграции электронных элементов.

G. Diament et al. Nano phototubes — a new approach toward electronics.

2nd IEEE International Nanoelectronics Conference, 24–27 March, 2008. P. 999–1002.

Монокристаллические PtSi нанопроволоки, PtSi/Si/PtSi нанопроволочные гетероструктуры и наноприборы

Сообщается о формировании PtSi нанопроволок, PtSi/Si/PtSi нанопроволочных гетероструктур и наноприборов из указанных гетероструктур. Исследования с использованием сканирующего электронного микроскопа показали, что кремниевые нанопроволоки могут быть преобразованы в PtSi нанопроволоки посредством выполнения контролируемых реакций между платиновыми площадками с рисунком, выполненным литографическим способом, и кремниевыми нанопроволоками. Исследования с использованием просвечивающего электронного микроскопа показали, что PtSi/Si/PtSi гетероструктуры имеют на атомном уровне резкий интерфейс с эпитаксиальными структурами Si[110]//PtSi[010] и Si(111)//PtSi(101). Электрические измерения показали, что чистые PtSi нанопроволоки имеют низкое удельное сопротивление и высокую плотность тока пробоя.

С использованием монокристаллических PtSi/Si/PtSi нанопроволочных гетероструктур с резким интерфейсом на атомном уровне были изготовлены быстродействующие наноразмерные полевые транзисторы из внутренних кремниевых нанопроволок, в которых контакты истока и стока определялись областями металлических PtSi нанопроволок, а длина затвора определялась Si нанопроволочной областью. Электрические измерения показали близкие к совершенным характеристики *p*-канального транзистора с режимом обогащения.

1 ГГц ИС с использованием межсоединений из углеродных нанотрубок и кремниевых транзисторов

Металлические углеродные нанотрубки вследствие их превосходных электрических характеристик представляют собой перспективные материалы для реализации межсоединений в будущих ИС. Результаты моделирования показали, что использование металлических углеродных нанотрубок обеспечит реализацию более эффективных по мощности и более быстродействующих ИС. Следующий этап заключается в создании экспериментального образца быстродействующей ИС (более 1 ГГц) с использованием кремниевых транзисторов и межсоединений из углеродных нанотрубок на одном кристалле. Считается, что этот образец послужит инструментом для исследования углеродных нанотрубок на кремниевых платформах при высоких частотах и проложит путь для будущего многогигагерцовой наноэлектроники.

G. F. Close et al. A 1 GHz Integrated Circuit with Carbon Nanotube Interconnects and Silicon Transistors. Nano Letters, 2008. Vol. 8. No 2. P. 706–709.

Высокочастотный одноэлектронный транзистор на основе гетероструктурной нанопроволоки InAs/InP

Продемонстрированы высокочастотные одноэлектронные транзисторы, изготовленные из InAs/InP гетероструктурных нанопроволок, полученных методом эпитаксиального наращивания. Были выращены два комплекта проволок с двойным барьером с различными значениями толщины барьеров. Проволоки были подвешены на высоте 15 нм над металлическим затворным электродом. Электрические измерения нанопроволок с высоким сопротивлением показали периодические регулярные кулоновские колебания при затворном напряжении от -0,5 до (по меньшей мере) 1,8 В. Была измерена зарядная чувствительность.

H. A. Nilsson et al. A Radio Frequency Single-Electron Transistor Based on an InAs/InP Heterostructure Nanowire. Nano Letters, 2008. Vol. 8. N 3. P. 872–875.

Наноструктуры, магнитные полупроводники и спинтроника

Представлен краткий обзор последних достижений в области полупроводниковых наноматериалов, которым предстоят многообещающие применения. В частности, это касается материалов со спин-поляризованным транспортом носителей заряда. Показано, что на базе последних теоретических и экспериментальных достижений развитие разбавленных полупроводников с контролируемой неупорядоченностью и широкой запрещенной зоной, а также исследование их молекулярных структур являются очень перспективными направлениями для производства новых магнитных полупроводников.

P. Kervalishvili, A. Lagutin. Nanostructures, magnetic semiconductors and spintronics.

Microelectrinics Journal. 2008. 39. P. 1060-1065.

Разработаны первые в мире 22-нанометровые модули памяти

Компании IBM, AMD, Freescale и Toshiba в сотрудничестве с американским Колледжем наноисследований и инжиниринга сегодня сообщили о разработке самых компактных в мире модулей памяти формата SRAM (Static Random Access Memory). Одновременно с этим компании сообщили, что при создании модулей первыми в мире ими был использован 22-нанометровый технологический процесс производства.

По данным пресс-службы IBM, 22-нанометровые модули были изготовлены в лабораториях корпорации в Нью-Йорке на базе используемых на сегодня 300-миллиметровых кремниевых подложек. В IBM говорят, что изготовленные модули являются не прототипами, а реально работающими образцами.

22-нанометровые чипы памяти обладают производительностью, достаточной для использования в сложных электронных устройствах, например в микропроцессорах. Одна базовая ячейка 22-нанометровой памяти состоит из шести нанотранзисторов. Толщина одного нанотранзистора, использованного для новых модулей, в 80 000 раз тоньше человеческого волоса.

"Мы работаем буквально на переднем крае доступных сейчас технологий. В будущем на основе этих разработок будут создаваться чипы новых поколений. 22нанометровый техпроцесс является новым достижением для микроэлектроники", — говорит руководитель нью-йоркской исследовательской лаборатории и вицепрезидент Колледжа наноисследований Т. С. Чен.

На данный момент основной технологией для производства микроэлектроники является 45-нано-

Yu-Ch Lin et al. Single Crystalline PtSi Nanowires, PtSi/Si/PtSi Nanowire Heterostructures, and Nanodevices. Nano Letters, 2008. Vol. 8. N 3. P. 913–918.

метровая технология. К 2010 г. производители намерены освоить в массовом масштабе 32-нанометровый процесс, а лишь затем перейти к 22-нанометровым чипам.

Как рассказали в IBM, в основе новых чипов SRAM находятся транзисторы, созданные по патентованной технологии high-K metal gate, которую задействуют и в производстве 32-нанометровых чипов. "Как правило, плотность чипов SRAM повышается за счет уменьшения размеров базовых элементов чипов — ячеек. В случае с новыми уменьшенными ячейками удалось добиться не только их уменьшения, но и нового более плотного размещения относительно друг друга", — говорят в IBM.

Также в создании модулей памяти был применен и новый процесс литографии, который рассчитан на использование 300-миллиметровых подложек, но со значительно более плотным трехмерным размещением ячеек.

http://www.cybersecurity.ru/hard/53440.html

Bottom-up сборка крупномасштабных матриц нанопроволочных резонаторов

Направленная сборка приборов на основе нанопроволок позволит разработку ИС с новыми функциями, далеко выходящими за пределы традиционной цифровой логики. Например, наноэлектромеханические резонаторы являются очень привлекательными для реализации сенсорных матриц на кристалле ввиду их потенциала для сверхчувствительного обнаружения массы. В статье приводится описание нового bottom-up метода сборки для изготовления крупномасштабных наноэлектромеханических матриц, содержащих каждая более 2000 однопроволочных резонаторов. Нанопроволоки синтезируются и химически обрабатываются до того, как они интегрируются на кремниевый кристалл в заранее намеченные места. Зондовые молекулы из пептидов нуклеиновой кислоты крепятся к нанопроволокам до сборки, сохраняя их селективность и возможность распознавания комплементарных олигонуклеотидных целей после сборки резонаторной матрицы. Два типа кантилеверных резонаторов, интегрированных в вакууме с использованием кремниевых и родиевых нанопроволок, имели Q-факторы 4500 и 1500 соответственно. Собранные данные показывают, что bottom-up нанопроволочная сборка может составить практическую альтернативу традиционному (top-down) методу изготовления устройств обнаружения на основе чувствительных схем на кристалле.

Логические схемы на основе нанопроволочных полевых транзисторов

Были исследованы электрические характеристики логических вентилей NOT и NAND, изготовленных на основе ZnO нанопроволочных полевых транзисторов с верхним затвором с Al_2O_3 затворными слоями с высоким значением k. Для образования логической схемы NOT два идентичных полевых транзистора, чье отношение $I_{on}/I_{off} = 108$, были подсоединены последовательно к одному ZnO нанопроволочному каналу. Его передаточные характеристики проявились при инверсионной работе, и его перепад логических уровней составил 98 %. Кроме того, в статье обсуждаются характеристики логической схемы NAND, составленной из трех полевых транзисторов с верхним затвором, подсоединенных последовательно к одному нанопроволочному каналу.

Nanotechnology. Issue 26, 2 July, 2008.

Разработка транзистора на базе углеродной нанотрубки с временем задержки на затворе 5 пс

Полупроводниковые углеродные нанотрубки привлекают к себе внимание прежде всего в качестве материала канала полевых транзисторов ввиду высокой подвижности носителей заряда. В выполненной работе показано, что локальный CNT-затвор может значительно улучшить характеристику допороговой крутизны по сравнению с конструкцией с нижним затвором и обеспечивает задержку на затворе 5 пс. СNТ-транзисторы с СNТ-затворной функцией изготавливаются с использованием двухэтапного метода осаждения из паровой фазы. Измеренные переходные характеристики соответствуют результатам теоретического моделирования, что подтверждает принцип работы транзисторов. Задержка на затворе менее 2 пс может быть легко достигнута посредством уменьшения толщины затворного диэлектрика.

Nanotechnology. Issue 32, 13 August, 2008.

Нанопроволочная литография на кремнии

В нанопроволочной литографии используются нанопроволоки, выращенные и собранные химическими методами, как маски травления для передачи их одномерной морфологии на нижележащую подложку. Показано, что нанопроволоки из SiO₂ являются про-

M. Li et al. Bottompup assembly of large-area nanowire resonator arrays.

Nature Nanotechnology. 3.88-92 (2008).

D. Yeom et al. NOT and NAND logic circuit composed of top-gate ZnO nanowire field-effect transistors with high-k Al2O3 gate layers.

J. Svensson et al. A carbon nanotube gated carbon nanotube transistor with 5 ps gate delay.

стой и совместимой системой для выполнения нанолитографии на кристаллическом кремнии и изготовления архитектур и приборов широкого диапазона. Планарные полевые транзисторы, изготовленные из одного КНИ - нанопроволочного канала и показавшие контактное сопротивление ниже 20 кОм, масштабируются по ширине канала. Кроме того, выполнена оценка электрических характеристик нанопроволочных сетей, полученных с использованием маски из SiO₂ нанопроволок струйным методом из раствора. Результирующая конформная сеть, вытравленная в нижележащей пластине, является монолитной с монокристаллическими объемными переходами. Таким образом, отсутствует разница в электропроводности между нанопроволочным мостом и перколяционной сетью. Был также расширен потенциал нанопроволочной литографии на третье измерение посредством периодического подтравливания, в результате чего получается матрица вертикально упакованных нанопроволок из одной нанопроволочной маски.

A. Colli et al. Nanowire Lithography on Silicon. Nano Lett. 2008. 8 (5). P. 1358–1362.

Использование в качестве материала межсоединений многостенных углеродных нанотрубок/нанокристаллических медных нанокомпозитных пленок

Изготовлены нанокомпозитные пленки, включающие многостенные углеродные нанотрубки (MWCNTs) (диаметр 10...40 нм, длина 1 мкм) и нанокристаллический медный слой, с использованием недорогого электрохимического метода. Благодаря импульсному осаждению с несколькими добавками MWCNTs были хорошо распределены по пленкам по толщине. Для нанокомпозитных пленок характерна плотная структура без каких-либо пустот. Для использования в качестве электронных межсоединений были выполнены измерения модуля упругости, твердости, электрического сопротивления MWCNT/Cu нанокомпозитных пленок. Было установлено, что механические свойства несколько усиливаются ввиду добавления MWCNTs, а электропроводность и теплопроводность нанокомпозитных пленок резко уменьшаются. Поэтому целесообразно проведение дальнейших исследований.

Возможности создания логических схем на базе CNT FETs на пластине

Сотрудники Стэнфордского университета и Полупроводниковой исследовательской корпорации (SRC) впервые продемонстрировали возможность создания работающих схем на полевых транзисторах на базе углеродных нанотрубок (CNT FETs) на пластине. Сообщение было сделано на Симпозиуме по СБИС и технологии в Гонолулу, включая демонстрацию выращивания CNTs на кварцевой пластине, полномасштабную передачу CNTs с кварцевой пластины на кремниевую пластину для интеграции на кремнии и изготовление логических схем, которые обладают стойкостью к нарушению позиционирования CNTs. Логические структуры включают: NAND, NOR, AND-OR-INVERT, OR-AND-INVERT.

Выполненная работа представляется важной в отношении дополнения кремниевой КМОП-технологии технологией углеродных трубок.

J. Walko. Stanford researches claim CNT wafer-scale advances.

www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID=208700874 Stanford researches overcome mispositioned carbon nanotubes to create logic circuits at waferscale.

www.smalltimes.com/articles/article_display.cfm?ARTI CLE ID = 332298

Развитие кремниевых нанопроволочных матриц сверхвысокоплотной плотности для использования в электронике

В статье представлены последние достижения в области создания электронных устройств на основе нанопроволочных матриц сверхвысокой плотности. Для изготовления кремниевых нанопроволочных матриц использовался метод передачи рисунка сверхрешетки нанопроволок (*superlattice nanowire pattern* (SNAP)).

Рассматриваются проблемы обработки и материалов, связанных с достижением характеристик проводимости при использовании кремниевых нанопроволок шириной 10—20 нм.

Обсуждаются полевые транзисторы на базе кремниевых нанопроволок. Такие транзисторы обеспечивают создание базовых блоков для построения различных электронных схем: памяти, логики, устройств преобразования энергии и др.

Особое внимание уделяется комплементарным симметричным нанопроволочным логическим схемам, так как они обеспечивают создание метрики, пользующейся наибольшим спросом для управления нанотехнологией.

Обсуждаются такие проблемы, как контроль плотности и пространственное распределение примесей как *p*-типа, так и *n*-типа в нанопроволочных матрицах, поскольку они являются общими методами получения омических контактов к нанопроволо-

J. J. Yoo et al. Multi-walled carbon nanotube/nanocrystalline copper nanocomposite film as an interconnect material.

⁵⁸th Conference on Electronic Components and Technology. 27-30 May. 2008. P. 1282-1286.

кам. Эти различные материалы и достижения нанотехнологии в своей совокупности позволяют продемонстрировать комплементарные симметричные нанопроволочные логические схемы, эффективные по энергопотреблению.

D. Wang et al. Development of Ultra-High Density Silicon Nanowire Arrays for Electronics Applications.

Nano Res (2008) 1: 9—12. Р. 10—21. (Первый выпуск журнала Nano Research Издательства Springer).

Полевая эмиссия из вертикально расположенных кремниевых нанотрубок

При изготовлении кремниевых нанотрубок были использованы алмазные наночастицы в качестве наномасок. Алмазные наночастицы диаметром около 100 нм как маски равномерно распределялись на поверхности кремниевой пластины. Кремниевые нанотрубки были синтезированы посредством метода сухого травления в индуктивно связанной плазменной системе. Были установлены характеристики полевой эмиссии кремниевых нанотрубок.

R. H. Yao et al. Field emission from vertically aligned silicon nanotubes.

IEEE 20th International Conference on Vacuum Nanoelectronics. 8–12 July 2007. P. 133–134.

Новый тип памяти

Ученые Пенсильванского университета создают новый прибор для хранения информации на базе нанопроволоки, способного хранить три значения бита: "0", "1" и "2" вместо обычных "0" и "1". Используемые нанопроволоки имеют структуру "core-shell" (ядро — оболочка), как коаксиальный кабель, и состоит из материалов с изменяемой фазой. Ядро изготавливается из $Ge_2Sb_2Te_5$, а оболочка изготавливается из GeTe.

Изменения фазы обеспечиваются воздействием на нанопроволоки импульсными электрическими полями. При этом процессе нагревается нанопроволока, меняя структуру ядра и оболочки с кристаллической (упорядоченной) на аморфную (неупорядоченную). Эти два состояния соответствуют двум различным электрическим сопротивлениям: низкое сопротивление для случая, когда как ядро, так и оболочка являются кристаллическими, и высокое сопротивление, когда оба элемента являются аморфными. В свою очередь, эти сопротивления представляют собой значения двух битов из трех. Третье значение бита соответствует случаю, когда ядро является аморфным, а оболочка является кристаллической (или наоборот).

Нанопроволоки являются превосходной средой для хранения информации вследствие нескольких факторов. К таковым относятся бездефектные кристаллические структуры, что обеспечивает наилучшие характеристики, которые могут настраиваться посредством изменения размеров нанопроволок (например, диаметра) и контролируемых свойств. Кроме того, для создания устройства хранения информации на базе нанопроволоки может быть использован метод "bottom-up", который использует естественную тенденцию малых структур к самосборке в большие структуры. Это позволяет избежать ограничений, накладываемых традиционными методами "top-down", связанными с формированием рисунка схемы в кремниевой пластине посредством осаждения нанопроволочных тонких пленок.

В дальнейшем намечено исследовать, как размеры нанопроволок и химический состав влияют на их электрические параметры, в надежде найти новые свойства, которые могут привести к созданию электронных приборов с новыми свойствами.

New Nanowire-Based Memory Could Beef up Information Storage.

www.physorg.com/printnews.php?newsid = 134214217

Фирма IBM планирует выделить 1,5 млра долларов на выполнение проектов по созданию схем на базе нанотехнологии

Фирма IBM планирует инвестировать 1,5 млрд долларов на создание схем на базе нанотехнологии, включая строительство исследовательского центра в штате Нью-Йорк, место для которого пока не выбрано.

Власти штата уже в течение нескольких лет пытаются разбудить экономику, в частности, решено выделить 140 млн на гранты, нацеленные на экономическое развитие. Губернатор Паттерсон надеется, что инвестиции позволят создать 1000 рабочих мест в сфере высоких технологий.

Помимо создания нового исследовательского центра, IBM расширяет свои работы в Колледже наноразмерной науки и техники при университете Олбани и будет модернизировать свой комплекс в Ист Фишкилле.

www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID = 209100 268

Формирователь диаграммы направленности РЛС на базе MEMS

Представлена конструкция линзового формирователя диаграммы направленности Ротмана на базе MEMS, в котором используется толстая PZT-пленка с высокой диэлектрической постоянной внутри линзовой полости. Линза Ротмана толщиной 56 мкм имеет площадь 5,5 × 7,1 мм, включает три лучевых порта, пять матричных портов и работает на частоте 77 ГГц. Линза имеет усиление главного лепестка 35 дБ при угле сканирования в 4°. Малые размеры форми-

IBM to invest \$1.5B in nanotechnology.

рователя позволяют размещать его вертикально или горизонтально, реализуя компактную РЛС на базе MEMS в сочетании с микрополосковыми антеннами и необходимыми микроэлектронными схемами.

Устройство может быть использовано в системе исключения столкновений автомобиля для установления близости других автомобилей или препятствий.

Ah. Sinjari et al. MEMS automotive collision avoidance radar beamformer.

IEEE International Symposium on Circuits and Systems. 18–21 May 2008. P. 2086–2989.

Использование полевой эмиссии для считывания резонанса с использованием MEMS/NEMS

В последнее время в кругах, занятых разработкой датчиков, проявляется значительный интерес к переводу приборов с микрометровых размеров к наноразмерам обычно за счет масштабирования резонаторов в виде кантилеверных балок. Масштабированные балки обеспечивают преимущество в более быстрой реакции, повышении чувствительности, однако обнаружение их резонанса становится проблемным по мере уменьшения размеров. Сообщается об использовании полевой эмиссии как метода обнаружения резонанса у масштабированных резонаторов. Существует несколько преимуществ использования полевой эмиссии: геометрическое масштабирование осуществляется без потери сигнала; высокая пропускная способность; возможность интеграции со стандартной технологией.

IEEE 20th International Conference on Vacuum Nanoelectronics. 8–12 July 2007. P. 72–73.

Прогноз рынка MEMS

Фирма Yole Development продолжает исследования рынка MEMS. В таблице приведен прогноз мирового рынка MEMS по областям применения по 2012 г. в млн долларов.

Область применения	Годы							
	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	
Телекоммуни- кации	380	556	650	791	1002	1325	1627	
Медицина, здравоохране- ние	768	876	996	1121	1283	1790	2206	
Промышлен- ность	717	790	861	966	1093	1269	1756	
Оборона	259	343	415	489	559	629	925	
Бытовая тех- ника	2962	3068	3625	4424	5534	6523	7289	
Аэронавтика Автомобили	30 1278	38 1362	46 1422	53 1465	61 1454	67 1486	78 1572	

Прогноз рынка MEMS

По состоянию на 2007 г. продажи составили 5,6 млрд долларов. Ведущие позиции занимают Hewlett Packard, Texas Instruments, Robert Bosch, STMicroelectronics. 30 крупнейших фирм занимают 80 % мирового рынка MEMS. Продажи девяти фирм превысили 200 млн долларов, тогда как в предыдущем году таких фирм было лишь четыре.

P. Doe. MEMS at SEMICON WEST. www.solid-state.com/articles/print.html?id = 333137Yole Updates 2007 MEMS Ranking. Semiconductor International - 7/2/2008.

Создание совместной лаборатории в области нанотехники

Фирма IBM и Цюрихский университет ETH пришли к соглашению по поводу создания лаборатории для проведения совместных исследований в области нанотехники. Исследования будут направлены на исследования технологий постКМОП-эры, таких как материалы на базе нанотрубок, нанофотоника, спинтроника, нанопроволоки и трибология.

Согласно данным плана-графика (roadmap), эра КМОП просуществует еще лет 10—15. Ученые уже сейчас работают над заменой транзистора. По мнению ученых IBM, базовый переключательный элемент, возможно, будет иметь совершенно другую архитектуру. Здесь перспективы имеет спинтроника, хотя работы ведутся на фундаментальном уровне и до промышленного освоения понадобится 10—20 лет.

Другие направления включают молекулярную электронику и графены, а углеродные нанотрубки исследуются в Исследовательском центре Уотсона фирмы IBM. Инвестиции составляют 90 млн долларов. Около трети указанной суммы будет потрачено на оборудование. Нулевой цикл намечен на весну 2009 г., исследовательская работа начнется в 2011 г. Лаборатория будет иметь площадь 6000 м², включая чистое помещение площадью 900 м². Стратегическое партнерство запланировано, по крайней мере, на десять лет.

Проект по созданию интегрального устройства на базе алмазной MEMS и КМОП-прибора для использования в РЛС и системах мобильной связи

Аргоннская национальная лаборатория Министерства энергетики США получила финансирование в сумме 1,4 млн долларов от Агентства перспективных исследований в интересах МО (DARPA) на выполнение третьей фазы исследовательского проекта по созданию интегрального устройства на базе

C. K. Yang et al. Field emission for resonance sensing in MEMS/NEMS.

Ch. Hammerschmaidt. IBM, Zurich university build joint nanotech lab.

www.eetimes.com/news/semi/showArticle.jhtml?articleI D = 208800746

алмазной MEMS и КМОП-прибора для использования в РЛС и системах мобильной связи с использованием разработанной в лаборатории и запатентованной технологии получения ультрананокристаллических алмазных пленок (UNCD). Интеграция емкостных ВЧ MEMS и КМОП-приборов обеспечит быстрое электронное сканирование радиолокационными лучами, что существенно улучшит быстродействие и точность РЛС. Монолитная интеграция ВЧ МЕМS/КМОП-приборов значительно увеличит функциональные возможности современных беспроводных приборов. ВЧ MEMS-приборы (резонаторы, переключатели) позволят значительно улучшить функциональные возможности и характеристики ВЧ и СВЧ систем.

Соисполнителями по программе являются: Advanced Diamond Technologies, Inc; Innovative Micro Technology (IMT); MEMtronics Corp.; Peregrine Semiconductor, Пенсильванский университет, университет Ли (Leigh).

Аргоннская лаборатория имеет опыт в освоении UNCD-технологии и работает совместно с академическими учреждениями и промышленными фирмами в области разработки новых MEMS-приборов на основе UNCD и других гибридных технологий, включая интеграцию оксидных пьезоэлектрических и UNCD-пленок, которая позволяет изготовить UNCD-резонаторы с пьезоэлектрическим возбуждением и нанопереключатели с наинизшей потребляемой мощностью. Аргоннский центр наноразмерных материалов (CNM) в настоящее время располагает единственной в мире установкой для выращивания UNCD-пленок при температуре до 200 °С на пластинах диаметром ≤ 400 мм, расположенной в чистом помещении для изготовления наноэлектромеханических систем. Размеры зерен UNCD-пленок составляют 5 нм, что в тысячи раз меньше размеров зерен традиционных микрокристаллических алмазных пленок.

DARPA funds Argonne project to develop MEMs and CMOS-based mobile communication technology.

www.smalltimes.com/articles/article_display.cfm?ARTI CLE_ID = 332436

Успешное выполнение программы по использованию микрои нанотехнологии для создания приборов на основе алмаза

Подошла к успешному завершению программа по созданию микромеханических алмазных приборов (Micromachined Diamond Device Initiative (MIDDI)), реализуемая специалистами фирмы Element Six Ltd. в сотрудничестве со специалистами Института фотоники Стратсклайдского университета и финансируемая Министерством торговли и промышленности Великобритании. Целью программы MIDDI является разработка технологии мирового уровня для изготовления алмазных микроэлектронных приборов, что позволит европейским компаниям составить конкуренцию компаниям Японии и США.

В рамках программы были сделаны достижения в трех областях, которые позволили фирме Element Six поддержать разработку активных электронных приборов на основе алмаза. Во-первых, была усовершенствована технология синтеза и обработки для изготовления подложек и эпитаксиальных слоев с неровностями атомного размера. Возможность изготовления наноразмерных слоев алмаза с высокой точностью зависит от числа сложных операций и синтеза. Для изготовления высокочастотных активных электронных приборов требуется, чтобы отдельные слои имели толщину в несколько нанометров и имели чрезвычайно острые профили легирования.

Во-вторых, Element Six освоила процесс осаждения тонких слоев алмаза, легированного бором, на наноразмерном уровне. В концепции предлагаемого переключательного прибора на основе алмаза, например MESFET (полевого униполярного транзистора с затвором, образованным контактом Шоттки), используются такие тонкие слои, расположенные между двумя нелегированными внутренними алмазными слоями для обеспечения функционирования транзистора.

Наконец, в рамках MIDDI создана надежная и воспроизводимая технология сухого травления, пригодная для изготовления транзисторных структур. Указанная технология может быть использована для изготовления не только транзисторов, но и детекторов радиации и микрооптических приборов.

www.smalltimes.com/articles/article_display.cfm?ARTI CLE_ID = 329767

КМОП—МЕМS-зонды для реконфигурируемых ИС

Сообщается о прогрессе в разработке электротермических проводящих КМОП – MEMS-зондов для самоконфигурируемых ИС с запоминанием. Назначение ИС заключается в использовании проводящих MEMS-зондов для реконфигурирования схемы посредством механической адресации и прохождения тока через изменение сопротивления в схеме, встроенной на кристалле. Кантилеверные зонды сконструированы с площадями 1, 4, 9, 16 и 25 мкм², которые покрываются никелем. Вертикальный диапазон электротермического актуатора равен 23,9 мкм² при мощности нагрева 3,7 мВт, но диапазон уменьшается в случае контакта со стеклянным слайдом, покрытым золотом, вследствие тепловых эффектов. Контакт зонда к золоту варьируется в диапазоне 10-50 Ом при многочисленных циклах с наконечниками площадью 1 мкм².

Project to develop micro, nano tech for diamond device fabrication concludes with launch.

J. Liu et al. CMOS-MEMS probes for reconfigurable IC's. IEEE 21st International Conference on Micro Electro Mechanical Systems. MEMS 2008. 13–17 Jan. 2008. P. 515–518.

Использование кремниевых нанощипцов в качестве биофизического инструмента для молекулярных экспериментов

Приводится описание метода снятия биомеханических характеристик нитевидных молекул на основе MEMS. Система состоит из двух кремниевых наноножниц, активируемых электростатическим способом, и дифференциального емкостного датчика, подсоединенного к подвижному наконечнику ножниц. С помощью этого инструмента было достигнуто разрешение субнанометрового перемещения (около 0,2 нм), обнаружено улавливание нанопроволок ДНК и измерена эволюция их биомеханических характеристик через смешение резонансной частоты.

C. Yamahata et al. Silicon nanotweezers: A new biophysical tool for molecular experimentation.

IEEE 21st International Conference on micro Electro Mechanical Systems. 2008. 13–17 Jan. 2008. P. 681–684.

Конструирование и изготовление мезоразмерного гироскопа

Целью работы было создание недорогого гироскопа для авиации общего назначения. Новая конструкция представляет собой мезоразмерный гироскоп, изготовленный по MEMS-технологии. Увеличение амплитуды сигнала достигается посредством использования пьезоэлектрических актуаторов и датчиков (вместо обычных электростатических). Пленки Pb(Zr2O, Ti(80)O₃, легированные Nb, были выращены на обеих сторонах 100-миллиметровые пластины из Pt/TiO₂/SiO₂/Si/SiO₂/TiO₂/Pt посредством осаждения из химического раствора. Были измерены эффективные трансверсальные пьезоэлектрические коэффициенты этих пленок на переменном и постоянном токе. Эти пленки были затем использованы для изготовления мезоразмерного гироскопа на основе стандартной фотолитографии, мокрого травления, ионного фрезерования, глубокого реактивного ионного травления. Одна сторона пленки используется для выполнения исполнительной функции, другая сторона - для считывания гироскопа. Резонансная частота гироскопа составила 12,60 кГц, что хорошо согласуется с результатами моделирования.

Супергетеродинный приемопередатчик на базе MEMS

Совмещение MEMS-технологии, позволяющей создавать ВЧ резонаторы на объемных акустических волнах, фильтры и низкочастотные кремниевые резо-

наторы, и технологии ВЧ ИС позволяют выполнить несколько инновационных решений в конструкции приборов, их архитектуре и корпусировании.

В докладе рассматриваются особенности архитектуры и характеристики супергетеродинного приемопередатчика на базе MEMS, сконструированного для работы в полосе 2,4 ГГц.

Ruffieux et al. A 2.4 GHz MEMS-Based Transceiver.

IEEE International Solid-State Circuits Conference. ISSCC 2008 2008. Digest of Technical Papers. 3–7 Feb. 2008. P. 522–523.

Интегральный микромеханический ВЧ входной каскад

Представлен обзор MEMS-техники, позволяющей реализовать функции частотной синхронизации ВЧ входного каскада, необходимые для программируемого радиоприемника. Среди описанной техники: вибрационные дисковые микромеханические резонаторы, которые обеспечивают запись на изделия с высокой частотной добротностью, интегральные микромеханические схемы среднего уровня интеграции для реализации коммутируемых гребенок фильтров и технология, в которой интегрированы никелевые MEMS с заводскими КМОП-транзисторами в едином производственном цикле.

Nguyen, Clark T.-C. Integrated Micromechanical Radio Front-Ends.

International Symposium on VLSI Technology, Systems and Applications. 21–23 April 2008. P. 3–4.

Прогноз мирового рынка нанотехники

По данным фирмы BCC research, мировой рынок нанотехники в 2007 г. составил 11,6 млрд долларов. Далее ожидается увеличение рынка до 12,7 млрд долларов в 2008 г. и к концу 2013 г. до 27,0 млрд долларов при среднегодовом приросте в 16,3 %.

Рынок распределяется по сферам применения на наноматериалы, нанооборудование и наноприборы. Исходя из этого наноматериалы в 2007 г. составили 87 % рынка. В стоимостном выражении в 2008 г. наноматериалы составили 10,8 млрд долларов, а в 2013 г. должны составить 18,7 млрд долларов при среднегодовом приросте 11,7 %. Нанооборудование в 2007 г. составило 12,8 % рынка. В стоимостном выражении рынок нанооборудования в 2008 г. составил 1,9 млрд долларов, а в 2013 г. должен составить 8,0 млрд долларов при среднегодовом приросте 33,3 %.

Рынок нанооборудования, которое включает нанолитографические установки, используемые для производства следующего поколения полупроводниковых приборов, будет расти гораздо быстрее рынка наноматериалов. В результате доля нанооборудования увеличится в 2013 г. до 29,4 %, а доля наноматериалов снизится до 69,2 %.

Kotru et al. Design and Fabrication of a Meso-Scale Gyroscope.

IEEE Workshop on Microelectronics and Electron Devices. WMED 2008, 18 April 2008. P. 5-8.

Сектор наноприборов увеличится с 28,2 млн долларов в 2008 г. до 366,2 млн долларов к концу 2013 г. при среднегодовом приросте 69,5 %.

В 2007 г. основными областями применения нанотехники были контроль окружающей среды (56 % от общего рынка (электроника 20,8 %), энергетика (14,1 %). В последующие пять лет наибольший рост применения будет касаться электроники, биомедицинской и бытовой техники (30,3 %; 56,2 %; 45,9 % соответственно). Среднегодовой прирост энергетических применений составит лишь 12,6 %, а использование устройств контроля окружающей среды будет снижаться на 1,5 % в год.

Мировой рынок нанороботов и MEMS (наноэлектромеханических устройств) возрастет с 40,3 млн долларов до 830,4 млн долларов в 2011 г. при среднегодовом приросте 83,1 %. В 2011 г. доля нанооборудования составит 9,2 %, а доля нанороботов составит 67,5 % от общего рынка.

Global market for nanotechnology stated for high growth through 2013.

www.smalltimes.com/articles/stm_print_screen.cfm? ARTICLE_ID = 330974

Nanorobotics and MEMS.

 $www.globalspec.com/Featured/Products/Datail/BBC\\ Research$

Матрицы из углеродных нанотрубок на гибкой подложке

и их характеристики полевой эмиссии

Приведено описание процесса серийного изготовления углеродных нанотрубок на гибкой подложке. Предварительно изготовленные матрицы из углеродных нанотрубок сначала смешиваются с полимером, а затем переносятся на полимерную пленку с использованием химического осаждения парилена из паровой фазы. Таким образом получаются матрицы из углеродных нанотрубок на гибкой подложке. Электрические измерения выявили, что матрицы нанотрубок ведут себя как омические проводники, а их вольт-амперная характеристика является линейной. Нанотрубки, внедренные в полимер, были подвергнуты плазменному О2-травлению. Выполненные измерения выявили у обработанных матриц нанотрубок низкопороговую полевую эмиссию при 0,58 В/мкм и фактор усиления поля составил 5500. Таким образом, рассматриваемые структуры использованы для создания гибких приборов с полевой эмиссией.

Микрорезонаторы, связанные кремниевой нанопроволокой

Приводится описание микроэлектромеханического резонаторного интерфейса к наномеханической структуре. Для интеграции микрорезонатора — нанопроволоки были использованы кремниевые нанопроволоки в качестве механических настраивающих элементов, которые активируют частотные характеристики резонаторной системы. Две связанные конфигурации были сконструированы и тестированы: первая — с нанопроволочной балкой, связанной с точками максимального смещения закрепленных микрорезонаторов; во второй системе нанопроволочная балка связана с соединительной балкой, прикрепленной на расстоянии 1,5 мкм от мест крепления резонаторов, работающих в изгибающем режиме. Для настройки частотных характеристик связанных систем использовался сфокусированный ионный луч. В заключение приведено описание нанопроволочного полосного фильтра.

Соглашение между Роснанотех и фирмой Intel в области нанотехники

Президент фирмы Intel К. Баретт подписал соглашение с Роснанотех (Российской государственной организацией в области нанотехники) о совместных работах по развитию в нескольких областях, включая суб45-нанометровые ИС. Соглашение было подписано на Международном экономическом форуме, состоявшемся с 6 по 8 июня в Санкт-Петербурге.

Стороны согласились о сотрудничестве в создании наноматериалов и наносистем и применении их в наноэлектронике и других областях.

Совместные исследования будут проводиться в нескольких областях нанотехнологии и будут включать разработку новых материалов для разработки суб45-нанометровых ИС. Кроме того, Intel и Роснанотех планируют совместные исследования в области микропроцессорных и многоядерных систем, а также программных средств для моделирования наноматериалов. Частью соглашения является также обучение и коммерциализация. Стоимость соглашения не раскрывается.

В 2007 г. Российское государство выделило 130 млрд руб. (около 5,5 млрд долларов) на создание инфраструктуры нанотехники в России. На ранней стадии инвестиции на выполнение проектов в области нанотехники осуществляются с использованием партнеров из частного сектора, привлечением бизнес-инкубаторов и инвестиционных фондов.

T-H Chen et al. Carbon nanotube arrays on flexible substrate and their field emission characteristics.

IEEE 21 st International Conference on Micro Electro Mechanical Systems. MEMS 2008. 13–17 Jan. 2008. P. 687–700.

A. Arellano et al. Silicon nanowire coupled mico-resonatores. IEEE 21st International Conference on Micro Electro Mechanical Systems. MEMS 2008. 13–17 Jan. 2008. P. 721–724.

D. Wilson. Intel inks Russian agreement for sub-45 nm research.

www.eetimes.com/news/semi/showArticle.jhtml?articleI D = 208402746

Rosnanotech, Intel to cooperate in developing nanotechnology. www.semiconductor.net/index.asp?layout = articleXML. Print&xmIID-804036930

Фотокатоды на базе углеродных нанотрубок

Приводится описание нового фотокатода, который представляет собой матрицу вертикально совмещенных многостенных углеродных нанотрубок (MWCNTs), каждая из которых связана с p-i-n-фотодиодом. В отличие от обычных фотокатодов, функции преобразования фотон-электрон и последующая эмиссия электронов физически разделены. Преобразование фотон-электрон достигается p-i-n-фотодиодами, а эмиссия электронов осуществляется от MWCNTs. Модуляция тока высоко эффективна, поскольку используется оптически контролируемая реконфигурация электрического поля в местах MWCNT. Такие приборы совместимы с высокочастотным и очень широко полосным режимом работы и могут найти применение в компактных. легких и эффективных СВЧ усилителях для спутниковой телесвязи. В демонстрационных целях новой концепции фотокатода был изготовлен первый фотокатод с использованием кремниевых p-i-n-фотодиодов и пучков MWCNT. При использовании зеленого лазера этот фотокатод выдал 0,5 мА при внутренней квантовой эффективности 10 % и отношении ION/IOFF = 30.

L. Hudanski et al. Carbon nanotube based photocathodes. Nanotechnology, 12 March 2008, Issue 10. P. 6.

Наногенераторы и нанопьезотроника

Разработка новых технологий для беспроводных наноприборов и наносистем имеет исключительно важное значение для систем, работающих в реальном времени и выполняющих функции имплантируемого биосчитывания, биомедицинского монито-

ринга и биообнаружения. В высшей степени желательно для беспроводных приборов, особенно в случае имплантируемых биомедицинских приборов, чтобы они работали с самообеспечением питания, т. е. без использования батареи. Поэтому большое значение приобретают исследования инновационных технологий для преобразования механической энергии (например, движения тела, мускульных усилий), вибрационной энергии (акустические/ультразвуковые волны), гидравлической энергии (жидкость тела, поток крови) в электрическую энергию, которую можно использовать для питания наноприборов. В работе был продемонстрирован инновационный подход для преобразования наноразмерной механической энергии в электрическую с использованием пьезоэлектрических матриц пьезоэлектрических нанопроволок из оксида цинка. Недавно был разработан наногенератор постоянного тока, возбуждаемый ультразвуковыми волнами. Это представляет собой существенный шаг в реализации наногенераторов на основе пьезоэлектрики.

Механизм работы электрического генератора основан на уникальной связи пьезоэлектрических и полупроводниковых свойств ZnO, а также выпрямительной функции барьера Шоттки, образованного между металлическим наконечником и нанопроволокой. На основе этого принципа были изготовлены: пьезоэлектрические полевые транзисторы, диоды, датчики и резонаторы. Все указанные компоненты являются фундаментальными компонентами нанопьезотроники. Пьезотроника представляет собой область использования связанных пьезоэлектрических и полупроводниковых свойств для изготовления новых и уникальных электронных приборов и компонентов.

Составил В. А. Юдинцев



ВЫСТАВКА

ЧИПЭКСПО-2009

7-я Международная выставка электроники и микроэлектроники

21-23 октября 2009, Экспоцентр

Организатор: ЗАО "ЧипЭКСПО"

Тематика выставки:

- полупроводниковые устройства
- силовые электронные компоненты
- оптоэлектронные компоненты
- микропроцессоры и микроконтроллеры
- микросхемы памяти
- процессоры цифровой обработки сигнала
- специализированные и заказные ИС
- пассивные компоненты и соединители
- датчики
- компоненты СВЧ

- пьезоэлектрические компоненты
- средства отладки и программирования
- промышленные контроллеры и компоненты
- аппаратные и программные инструментальные средства разработки
- средства отображения информации
- средства измерения
- источники питания
- печатные платы и технологии монтажа
- сервисное и производственное оборудование

Z. L. Wang. Nanogenerators and Nanopiezotronics. IEEE International Electron Device Meeting, 10–12 Dec. 2007. P. 371–375.



МОСКВА, 9-11 сентября 2009 г.

Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана

ОАО ЦНИТИ "Техномаш"

XV Международная научно-техническая конференция

ВЫСОКИЕ ТЕХНОЛОГИИ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ РОССИИ (материалы и устройства функциональной электроники и микрофотоники)

XXII Международный симпозиум

тонкие пленки в электронике

Посвящается 70-летию специальности "Электронное машиностроение"

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

И. Б. Федоров — ректор МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва

сопредседатели

В. Д. Житковский — генеральный директор ОАО ЦНИТИ "Техномаш", Москва

К. Е. Демихов — проректор по научной работе МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ

Екатерина Вадимовна Булыгина — доцент кафедры "Электронные технологии в машиностроении"

МГТУ им. Н. Э. Баумана ☎ (495) 267-09-83

(495) 267-09-83
 Факс (495) 267-17-39

E-mail: k.bulygina@mail.ru

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ

- Нанотехнология инженерные проблемы
- Метаматериалы: получение, применение и исследования
- Материалы, оборудование и технологии наноэлектроники и микрофотоники
- Новые технологии производства, обработки и исследования наноструктурированных материалов
- Системы и устройства радиотехники и средств связи
- Наноструктурированные материалы на основе углерода и фотонные кристаллы в оптоэлектронике и оптическом приборостроении
- Технологии и оборудование для производства приборов электронной техники и радиоэлектронных устройств
- Микроэлектромеханические системы в медицине и промышленности
- Получение, свойства и применение тонких пленок в электронике. Слоистые структуры на основе тонких пленок
- Методы контроля функциональных свойств материалов электронной техники, измерительная аппаратура и аналитические методы
- Моделирование и информационное обеспечение исследований

ПУБЛИКАЦИИ

К началу работы конференций будут изданы сборники полных текстов доклада. Рабочие языки конференций — русский и английский.

Адреса для переписки:

 105005, Россия, г. Москва, 2-я Бауманская ул., 5, МТ-11 E-mail: panfilov@bmstu.ru; k.bulygina@mail.ru
 (495) 267-09-83, Тел./факс (495) 267-17-39
 121108, Россия, г. Москва, ул. Ивана Франко, 4 E-mail: samoylovich@technomash.ru
 (499) 146-10-95, Тел./факс (499) 146-19-42

Президиум Российской академии наук Отделение химии и наук о материалах РАН Российский фонд фундаментальных исследований Институт проблем химической физики РАН Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН Центр фотохимии РАН Научный совет по строению и реакционной способности РАН Компания "Парк-медиа" При поддержке: Министерства образования и науки России Федерального агентства по науке и инновациям

ХХІ СИМПОЗИУМ "СОВРЕМЕННАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА"

ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ "ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ДЛЯ НАНОБИОТЕХНОЛОГИЙ" И МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ "ФИЗИКО-ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ"

С 25 сентября по 6 октября в пансионате "Маяк" (г. Туапсе) состоится XXI симпозиум "Современная химическая физика". В этом году участников ждет много нового: насыщенная научная и деловая программы с участием известных специалистов, конкурсы для молодых ученых и многое другое.

ОСНОВНЫЕ ПРИЧИНЫ ОБЯЗАТЕЛЬНОГО УЧАСТИЯ В СИМПОЗИУМЕ:

1. БОЛЬШЕ профессионалов

Тщательный подход к приглашению докладчиков, лекторов. Деловая и научная программы сформированы с акцентом на практическую составляющую. Каждый лектор обладает многолетним опытом работы в науке, на практике знает возможности внедрения инновационных разработок и ведения бизнеса.

2. БОЛЬШЕ междисциплинарных лекций

Школа-семинар для молодых ученых "Химическая физика для нанобиотехнологий" будет проведена при участии ведущих специалистов.

3. БОЛЬШЕ конкретных примеров взаимодействия науки и бизнеса

Программа симпозиума ориентирована на обучение молодых ученых, освещение современных научных тенденций, представление опыта внедрения разработок и ведения бизнеса.

4. БОЛЬШЕ личной пользы

У участников будет больше возможностей получить ответ на СВОЙ вопрос: персональные консультации ДО, ВО ВРЕМЯ и ПОСЛЕ симпозиума, а также выступить с докладом и принять участие в дискуссии

5. БОЛЬШЕ контактов

Уникальная специальная секция "Вечер науки", сборники докладов и программа мероприятия позволят познакомиться с коллегами.

МЕЖДУНАРОДНАЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННАЯ ВЫСТАВКА НАНОИНДУСТРИЯ — 2009

29 сентября — 01 октября 2009, Экспоцентр

Организатор: Компания For-Expo

Основные тематические разделы

Нанометрология:

- разработка методов тестирования зондов и наноматериалов
- зондовые исследования в нанометровом диапазоне
- создание тест-объектов для нанотехнологий
- приборы с электронным индикатором контакта для измерения внутренних и наружных размеров
- меры для воспроизведения параметров длин в нанометровом диапазоне

Наноэлектроника (микроэлектроника):

- разработка физических основ работы активных приборов с нанометровыми размерами (квантовых)
- разработка физических основ технологических процессов
- разработка самих приборов и технологий их изготовления
- разработка интегральных схем с нанометровыми технологическими размерами и изделий электроники на основе наноэлектронной элементной базы
- другие наноэлектронные приборы и технологии

Оборудование для наноиндустрии:

- наноспутники
- датчики перемещений на основе емкостного эф-фекта
- зеркальная оптика высокой разрешающей способности для систем видеонаблюдения
- высокочувствительные сейсмические и акустические туннельные датчики
- манипуляторы на основе пьезокерамических элементов
- наноаккумуляторы
- нанокомпьютеры (квантовые компьютеры)

Технологии локальной модификации поверхности на наноуровне:

- формирования наноразмерных структур из жид-костей и газов на различных поверхностях
- локальные модификации электрических, геометрических и других свойств самих поверхностей

Нанороботы, наноботы

Другие научно-технические разработки в области наноиндустрии.

CONTENTS

Keywords: nanosafety, nanoindustry, nanotechnology, nanotechnology development programme, environment protection, human health protection, ecology, influence of nanotechnology on human health, certification of nanomaterials.

Keywords: atom, model, theory, nanotechnology, electronic structure.

Keywords: magnetic-force microscopy, MFM tips, MFM phase contrast, ferromagnetic nanoparticles.

Keywords: ferroelectric, phase condition, phase transition temperature, probabity, error of measurement.

 determined at which the parameters $|k_h^*| \approx 0.7...0.8$ and $|d_h^*| \approx 400 \text{ pC/N}$ are considerably more than those related to the composites based on poled ferroelectric ceramics.

Keywords: piezo-active 2–2 composite, hydrostatic piezoelectric coefficient, hydrostatic electromechanical coupling factor, relaxor-ferroelectric single crystal, electromechanical properties.

Keywords: miniature pressure sensor, temperature fields, strained-deformed condition, finite-element mathematical model, mechanical and thermal effects.

Keywords: bacteriorhodopsin, opal matrix, luminescence.

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(499) 269-5510. E-mail: nmst@novtex.ru; http://www.microsystems.ru

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромынский пер., 4. Телефон редакции журнала (499) 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 Т. В. Арбузова

Домпер 1. п. посорелова. Голин Гелин редактор 2. п. патружева. Корректор 1. Б. проузова

Сдано в набор 14.04.2009. Подписано в печать 19.05.2009. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,36. Заказ 455. Цена договорная

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