

# НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 5 (118) ✧ 2010

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 систему Российского индекса научного цитирования

Издается с 1999 г.

**Главный редактор**  
Мальцев П. П.

**Зам. гл. редактора**  
Лучинин В. В.

**Редакционный совет:**

Аристов В. В.  
Асеев А. Л.  
Волчихин В. И.  
Гапонов С. В.  
Захаревич В. Г.  
Каляев И. А.  
Квардаков В. В.  
Климов Д. М.  
Ковальчук М. В.  
Нарайкин О. С.  
Никитов С. А.  
Сауров А. Н.  
Серебряников С. В.  
Сигов А. С.  
Стриханов М. Н.  
Чалыгин Ю. А.  
Шахнов В. А.  
Шевченко В. Я.

**Редакционная коллегия:**

Абрамов И. И.  
Андривский Р. А.  
Антонов Б. И.  
Арсентьева И. П.  
Астахов М. В.  
Быков В. А.  
Горнев Е. С.  
Градецкий В. Г.  
Гурович Б. А.  
Кальнов В. А.  
Карякин А. А.  
Колобов Ю. Р.  
Кузин А. Ю.  
Мокров Е. А.  
Норенков И. П.  
Панич А. Е.  
Панфилов Ю. В.  
Петросьянц К. О.  
Петрунин В. Ф.  
Путилов А. В.  
Пятышев Е. Н.  
Сухопаров А. И.  
Телец В. А.  
Тимошенко С. П.  
Тодуа П. А.  
Шубарев В. А.

**Отв. секретарь**

Лысенко А. В.

**Редакция:**

Григорин-Рябова Е. В.  
Чугунова А. В.

Учредитель:  
Издательство  
"Новые технологии"

## СОДЕРЖАНИЕ

### НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

**Бобринецкий И. И., Неволин В. К., Симунин М. М., Комаров И. А.** Роль поверхности тонкопленочных катализаторов при росте углеродных нанотрубок в задачах электроники и сенсорной техники . . . . . 2

### МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

**Самойлович М. И., Чернега Н. В., Кудрявцева А. Д., Белянин А. Ф., Клещева С. М.** Опаловые матрицы как метаматериал: оптико-акустические эффекты в решетчатых упаковках . . . . . 5

**Богинская И. А., Гусев А. В., Маилян К. А., Мешков А. С., Пибалк А. В., Рыжиков И. А., Чвалун С. Н.** Полимерные пленки на основе поли-*p*-ксилилена для применения в микро- и оптоэлектронике . . . . . 17

**Джангуразов Б. Ж., Козлов Г. В., Микитаев А. К.** Физический смысл "эффективной частицы" органоглины в полимерных нанокompозитах. . . . . 22

**Афонин С. М.** Абсолютная устойчивость системы управления деформацией электроупругого преобразователя нано- и микроперемещений. . . . . 25

**Непочатенко В. А., Розумнюк В. Т., Непочатенко И. А.** Предельная фазовая граница при структурном фазовом переходе второго рода . . . . . 32

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

**Иванников Д. И.** Теоретическое обоснование применения теории распознавания образов при конструировании химических мембран . . . . . 35

**Спирин В. Г.** Математическая модель сопротивления тонкопленочного резистора . . . . . 38

### ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

**Масальский Н. В.** Синтез характеристик логических вентилях на двухзатворных суб-25-нанометровых КНИ КМОП-транзисторах для маломощных применений. . . . . 41

**Джашитов В. Э., Панкратов В. М., Барулина М. А.** Теоретические основы разработки и создания суперминиатюрного микромеханического многофункционального датчика инерциальной информации. . . . . 46

**Contents** . . . . . 55

Аннотации на русском и английском языках с 1999 г. по настоящее время находятся в свободном доступе на сайтах журнала (<http://www.microsystems.ru>) и научной электронной библиотеки (<http://elibrary.ru>). Электронные версии полнотекстовых статей расположены на сайте журнала: с 1999 г. по 2003 г. в разделе "ПОИСК СТАТЕЙ", а с 2004 г. — в разделе "АРХИВ".

### ПОДПИСКА:

- по каталогу Роспечати (индекс 79493);
- по каталогу "Пресса России" (индекс 27849)
- в редакции журнала (тел./факс: (499) 269-55-10)

Адрес для переписки:  
e-mail: [nmst@novtex.ru](mailto:nmst@novtex.ru)

УДК 621.38-022.532

**И. И. Бобринецкий**, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., e-mail: vkn@nanotube.ru,

**В. К. Неволин**, д-р физ.-мат. наук, проф., e-mail: vkn@micee.ru,

**М. М. Симунин**, канд. техн. наук, науч. сотр., e-mail: vkn@nanotube.ru,

**И. А. Комаров**, студент, МИЭТ, г. Москва (Зеленоград)

## РОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ПРИ РОСТЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ЗАДАЧАХ ЭЛЕКТРОНИКИ И СЕНСОРНОЙ ТЕХНИКИ

*Исследованы аспекты роста углеродных нанотрубок на тонкопленочных катализаторах для решения задачи создания элементной базы интегральной нанoeлектроники, а также особенности влияния диспергирования ультратонких пленок катализатора при нагреве до 650 °С на диаметр получаемых углеродных нанотрубок. Установлена зависимость диаметра углеродных нанотрубок от шероховатости поверхности ультратонких пленок. Разработаны методики синтеза планарных углеродных нанотрубок на многослойных катализаторах типа Cr—Ni—Cr.*

**Ключевые слова:** нанотрубки, катализатор, химическое осаждение, тонкие пленки

### Введение

В настоящее время в мире наблюдается широкий интерес к углеродным наноструктурам, связанный с возможностью создания электронных устройств на их основе. Одними из устройств, ключевым элементом которых могут служить углеродные нанотрубки, являются химические датчики газов [1]. Важными преимуществами таких устройств по сравнению с традиционными сенсорами на основе полупроводников или оксидов металлов являются на порядок более высокая чувствительность, меньшие размеры и энергопотребление, более высокая радиационная стойкость, а также возможность реализовать интегральную структуру датчика газов на едином кристал-

ле. Однако для создания подобных устройств необходимо решить комплекс конструктивно-технологических задач. Основными проблемами при создании сенсорных структур на основе углеродных нанотрубок являются: создание омического контакта к нанотрубке, выращивание или нанесение нанотрубок в заданные места подложки, функционализация нанотрубок для обеспечения селективности в определении газов.

Из разнообразия существующих направлений создания элементов на основе углеродных нанотрубок тенденции к промышленному освоению имеют два метода: электрофорез [2, 3] и планарный рост углеродных нанотрубок на многослойных пленочных катализаторах [4]. Электрофорез и его вариант диэлектрофорез позволяют осуществлять нанесение углеродных нанотрубок, в том числе и функционализированных, в заданные места подложки [2]. Многослойные пленочные катализаторы позволяют, помимо локализации роста углеродных нанотрубок в заданных местах, решить проблему создания омического контакта к нанотрубкам [5], что обеспечивает возможность интеграции нанотрубок в стандартные схемы микроэлектронных устройств.

Из анализа публикаций по росту углеродных нанотрубок на тонкопленочных металлических катализаторах видно, что такие каталитические структуры используются в основном для синтеза вертикальных массивов углеродных нанотрубок на заданных участках подложки. Также из публикаций видно, что в качестве катализаторов используются тонкие пленки Ni, Fe, Co с подслоем Ta, Al, Pd, Cu, W, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> или без такового [5–8]. Толщина пленок активного каталитического слоя составляет от 1,6 до 5 нм. В качестве подложки чаще всего используется термический оксид кремния.

При этом, как правило, рассматривается пропорциональная зависимость толщины ультратонких каталитических пленок и диаметров получаемых нанотрубок. В данной работе рассматривается влияние шероховатости поверхности ультратонких пленок катализатора на диаметр получаемых нанотрубок, а также исследуются механизмы, определяющие параметры латерального роста нанотрубок на пленках многослойных катализаторов.

## Исследование процесса роста углеродных нанотрубок на тонкопленочных катализаторах различной толщины

Были проведены исследования поведения пленок наноразмерной толщины при вакуумном отжиге. Задачей исследования было изучение изменения их морфологии после вакуумного отжига и определение зависимости размеров получаемых нанотрубок от параметров дисперсности исследуемых пленок. Использовали пленки Ni с толщиной 1,8, 4, 6 и 10 нм, нанесенные на пластины кремния с термическим оксидом толщиной 1 мкм. Нанесение пленок осуществлялось методом магнетронного напыления на холодную подложку. Толщину напыленной пленки регулировали током катода и временем напыления.

Перед проведением эксперимента поверхность кремниевой подложки с термическим оксидом отмывали в 2-пропанол. Далее образцы помещали в реакционную камеру установки CVDomna [9], проводилась откачка камеры до давления 4 кПа и включался нагрев до температуры 650 °С. Скорость нагрева составляла 50 °С/мин. Длительность отжига — 15 мин. Параметры повторяли стандартные значения процесса роста нанотрубок только без напуска углеродсодержащей парогазовой смеси в камеру.

Анализ шероховатости проводился на основе топографии пленки, полученной методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) (рис. 1, см. вторую сторону обложки). Из анализа АСМ-изображений пленок до отжига видно, что шероховатость возрастает при увеличении толщины пленки. Прямая зависимость шероховатости от толщины пленки наблюдается до значений толщины, по оценкам, около 5 нм, а дальше следует резкое падение значения шероховатости. Из работы [10] известно, что рост пленки начинается с островков, которые в дальнейшем срастаются и в конце концов образуют сплошную пленку. Анализируя полученные значения шероховатости пленок, очевидно, что при толщине пленки более 5 нм происходит образование сплошной пленки. При толщине пленки 1,8 и 4 нм шероховатость возрастает при увеличении толщины пленки, что обусловлено срастанием островков пленки. Отжиг катализатора ведет к увеличению шероховатости пленки, причем наблюдается прямая зависимость между шероховатостью пленки до отжига и после него (табл. 1). Из табл. 1 видно, что шероховатость пленки после отжига увеличивается с увеличением толщины пленки до 5 нм. Увеличение значения шероховатости можно объяснить повышенной термодиф-

фузией и срастанием островков Ni. Также очевидно, что у образовавшейся сплошной пленки термодиффузия и образование островков идет, главным образом, в ее поверхностном слое.

Из табл. 1 видно, что для синтеза нанотрубок наибольший интерес представляют пленки толщиной 4 и 10 нм, так как при нагреве значение их шероховатости наибольшее, а следовательно, больше вероятность инициирования роста нанотрубок именно на неоднородностях поверхности. Однако с точки зрения получения одностенных углеродных нанотрубок предпочтителен выбор пленки толщиной 1,8 нм и менее, так как таким образом можно обеспечить наименьший размер зародыша, на котором происходит рост нанотрубки.

Далее проводился синтез углеродных нанотрубок на пленках Ni. Перед синтезом поверхность подложек с пленками также отмывают в 2-пропанол. Далее образцы помещали в установку CVDomna (ООО "РПСЛ"). Камеру откачивали и нагревали до заданной температуры, затем в реактор подавали пары этанола, и на катализаторе начинался рост нанотрубок [11]. Нанотрубки получали при 650 °С и давлении 20 кПа.

Процесс синтеза представляет собой следующую последовательность действий [11]:

1. Заправка спиртом испарительной ячейки.
2. Ввод программы в память электронного блока.
3. Установка подложки с катализатором в рабочую камеру.
4. Откачка до давления 100 Па.
5. Запуск программы и запуск нагрева испарительной ячейки.
6. По достижении температуры реакции выдержка в течение 2 мин при этой температуре (термостабилизация). Далее — напуск парогазовой смеси. После окончания реакции: охлаждение до заданной температуры.

Исследование полученного нанотрубного материала проводили следующим образом. Полученный материал помещали в пробирку эппендорфа, наполненную 2-пропанолом. На следующем шаге проводили ультразвуковую обработку полученного раствора в течение 30 мин до получения однородного раствора. Однородный раствор набирали в чистый шприц и наносили на подложку с заранее сформированным рисунком электродов методом электрофореза [2]. Параметры электрофореза:

- напряжение между электродами 30 В;
- ограничение по току 100 нА.

Ультразвуковая обработка полученного нанотрубного материала в 2-пропанол и электрофорез являются необходимой частью подготовки образцов для дальнейшей визуализации. Это объясняется тем, что при использовании тонкопленочных катализаторов получается значительный объем нанотрубного материала на поверхности подложки. Большой объем нанотрубного материала создает рельеф высотой значительно больше 2 мкм, что является пределом для промышленного сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) серии *Solver* (производство ЗАО

Таблица 1

Толщина пленок, нм	Шероховатость до отжига, нм	Шероховатость после отжига, нм	Средний диаметр нанотрубок, нм
1,8	0,27	0,35	9,7 ± 4,7
4	0,46	0,87	15,0 ± 1,8
6	0,20	0,41	9,0 ± 3,5
10	1,04	4,13	21,0 ± 8,2

"Нанотехнология — МДТ"). Кроме того, использование электрофореза позволяет ускорить процесс визуализации углеродных нанотрубок за счет их локализации на относительно небольшой области и уменьшения количества аморфного углерода, осаждающегося на поверхность подложки.

Далее полученные образцы отжигали на воздухе при температуре 400 °С и помещали в СЗМ. Отжиг образцов также является необходимым этапом в подготовке образцов, так как удаляет большую часть загрязнений, адсорбированных из окружающего воздуха или попавших на подложку из раствора. Время отжига образцов составляло 2 мин. С помощью методов атомно-силовой микроскопии была проведена выборка около 20—30 углеродных нанотрубок и найдено среднее значение их диаметров (см. табл. 1).

Из табл. 1 видно, что диаметр нанотрубок для разных толщин напыленной пленки коррелирует со значениями шероховатости. Особенно интересны результаты для пленок толщиной 1,8 и 6 нм. Для этих пленок диаметр полученных нанотрубок практически совпадает. Полученные данные свидетельствуют о том, что в случае использования в качестве катализатора тонких пленок Ni на диаметр углеродных нанотрубок влияет в большей степени шероховатость поверхности пленки. Влияние шероховатости связано с тем, что при низких температурах роста (650 °С) пленка находится в квазижидком состоянии, сохраняя свою структуру. Тогда центрами роста графеновых островков, из которых начинают формироваться нанотрубки, будут являться неоднородности на поверхности пленки катализатора, размер которых определяется шероховатостью.

Была получена зависимость диаметра углеродных нанотрубок от температуры на пленке катализатора диаметром 10 нм (табл. 2). Выбор именно этой пленки для проведения экспериментов объясняется наибольшим значением шероховатости и наибольшей равномерностью напыления данной пленки. Из таблицы можно выявить общую тенденцию к увеличению диаметра нанотрубок с ростом температуры, что очевидно обусловлено повышенной термодиффузией и срастанием неоднородностей пленки никеля в крупные гранулы.

Можно сделать вывод о том, что для понижения диаметра углеродных нанотрубок необходимо, с одной стороны, уменьшать толщину пленки, а с другой стороны, понижать температуру реакции до 600 °С. Однако возможен вариант создания уже сплошной пленки малой толщины (5...6 нм) с малой и контролируемой шероховатостью поверхности, когда при понижении температуры реакции также будут синтезироваться одностенные или, во всяком случае, тонкие углеродные нанотрубки.

Таблица 2

Температура реакции, °С	Диаметр полученных УНТ, нм
600	18,0 ± 5,6
650	21,0 ± 8,2
700	35,9 ± 8,7

## Рост планарных нанотрубных структур на многослойных катализаторах

Однако рост на сплошных однослойных пленках не решает задачи направленного роста углеродных нанотрубок в задачах электроники и сенсорной техники. В качестве прототипов структур, позволяющих обеспечить рост углеродных нанотрубок не в случайных направлениях, как на рассмотренном выше катализаторе, а латерально — вдоль поверхности подложки, были выбраны многослойные катализаторы на основе трехслойной пленки V—Ni—V [4]. Углеродные нанотрубки синтезировали при температуре выше 600 °С, кроме того при температуре 750 °С происходило диспергирование катализатора поверхности защитного слоя. При попытке формировать устройства на основе таких катализаторов на важнейшем этапе синтеза нанотрубок возникла серьезная проблема: в большинстве случаев нанотрубки в катализаторе росли не в бок, а вверх, разрушая верхний защитный слой, что существенно уменьшает выход годных.

Длительные экспериментальные поиски и анализ диаграмм фазовых равновесий привели к пониманию кинетики роста углеродных нанотрубок на многослойных катализаторах и кинетики взаимодействия между слоями катализатора. Рост углеродных нанотрубок вверх с разрушением защитного слоя связан с тем, что зародыш углеродной нанотрубки формируется на резкой границе раздела. Оказалось, что латеральный рост углеродных нанотрубок возможен только при условии "размытости" границы (плавной границы) фаз между пленками катализатора и верхних, и нижних слоев, и только в этом случае нанотрубкам задается жесткое направление роста вдоль поверхности подложки.

Для достижения такого эффекта пленка катализатора должна хорошо растворяться и диффундировать в соседних слоях. Ванадий как компаньон никеля подходит под это требование, имея растворимость при эвтектической температуре 43 ат. %, однако при температурах 405, 922 и 1045 °С он образует соединения Ni<sub>8</sub>V, Ni<sub>2</sub>V и Ni<sub>3</sub>V соответственно [12]. Образование этих соединений влечет за собой образование фазы с резкой границей раздела, что, в свою очередь, ведет к разрушению верхнего слоя. На основе новых ужесточенных требований был создан катализатор на основе трехслойной пленки Cr—Ni—Cr. На данном катализаторе был достигнут рост углеродных нанотрубок диаметрами 5...20 нм и длиной до 5 мкм в технологическом диапазоне 630...700 °С (рис. 2, см. вторую сторону обложки).

## Выводы

Диаметр углеродных нанотрубок уменьшается с уменьшением значения шероховатости пленки катализатора и температуры синтеза. Для формирования углеродных нанотрубок, имеющих размеры, достаточные для использования в электронике и сенсорной технике, требуется стабилизация значения шероховатости пленки катализатора. Для обеспечения лате-

рального роста углеродных нанотрубок с требуемыми параметрами пленка катализатора должна хорошо растворяться и диффундировать в соседние слои многослойных катализаторов. На каталитической структуре, созданной с соблюдением вышеуказанного требования, удалось обеспечить рост углеродных нанотрубок диаметром 5...20 нм и длиной до 5 мкм.

*Работа выполнена в рамках реализации ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009—2013 годы (государственный контракт № П1534).*

#### Список литературы

1. Аксенов А. И., Бобринецкий И. И., Неволин В. К., Симунин М. М. Химические сенсоры на основе пучков углеродных нанотрубок для обнаружения низких концентраций молекул хлора в атмосфере // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 12. С. 12—15.
2. Бобринецкий И. И. Электрофорез в задачах очистки, сепарирования и интеграции углеродных нанотрубок // Российские нанотехнологии. 2009. Т. 4, № 1—2. С. 62—66.
3. Бобринецкий И. И. Методы параллельной интеграции углеродных нанотрубок при формировании функциональных устройств микроэлектроники и сенсорной техники // Микроэлектроника. 2009. Т. 38, № 5. С. 353—360.
4. Гаврилов С. А., Ильичев Э. А., Козлитин А. И. и др. Латеральный эмиттер как элемент интегральной эмиссионной электроники // ПЖТФ. 2004. Т. 30, № 11. С. 48—53.

5. Nessim G. D., Seita M., O'Brien K. P., Hart A. J., Bonaparte R. K., Mitchell R. R., Thompson C. V. Low temperature synthesis of vertically aligned carbon nanotubes with electrical contact to metallic substrates enabled by thermal decomposition of the carbon feedstock // Nano Letters. 2009. Vol. 9, N 10. P. 3398—3405.

6. Hofmann S., Cantoro M., Kleinsorge B., Casiraghi C., Parvez A., Robertson J., Ducati C. Effects of catalyst film thickness on plasma-enhanced carbon nanotube growth // Journal of applied physics. 2005. 98. 034308.

7. Rouleau C. M., Eres G., Cui H., Christen H. M., Poretzky A. A., Geohegan D. B. Altering the catalytic activity of thin metal catalyst films for controlled growth of chemical vapor deposited vertically aligned carbon nanotube arrays // Applied Physics A Materials Science & Processing. 2008. 93. P. 1005—1009.

8. Zhao B., Futaba Don N., Yasuda S., Akoshima M., Yamada T., Hata K. Exploring advantages of diverse carbon nanotube forests with tailored structures synthesized by supergrowth from engineered catalysts // ACSNANO. Vol. 3. N 1.

9. Неволин В. К., Симунин М. М. Установка для получения углеродных нанотрубок методом каталитического пиролиза из газовой фазы этанола // Наноиндустрия. 2007. № 3. С. 34—36.

10. Технология тонких пленок. Справочник / Под ред. Л. Майссела, Р. Глэнга. М.: Советское радио, 1977.

11. Бобринецкий И. И., Неволин В. К., Симунин М. М. Технология производства углеродных нанотрубок методом каталитического пиролиза этанола из газовой фазы // Химическая технология. 2007. Т. 8, № 2. С. 58—62.

12. Лякишев Н. П. Диаграммы состояния двойных металлических систем. М.: Машиностроение, 2000.

## МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

УДК 539.2

**М. И. Самойлович**<sup>1</sup>, д-р физ.-мат. наук, проф., нач. лаб.,  
**Н. В. Чернега**<sup>2</sup>, канд. физ.-мат. наук, зав. лаб.,  
**А. Д. Кудрявцева**<sup>2</sup>, канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотр.,  
**А. Ф. Белянин**<sup>1</sup>, д-р техн. наук, проф., нач. лаб.,  
**С. М. Клещева**<sup>1</sup>, канд. геол.-мин. наук, ст. науч. сотр.,  
<sup>1</sup> Центральное научно-исследовательское технологическое учреждение "Техномаш",  
e-mail: samoylovich@technomash.ru,  
<sup>2</sup> Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН,  
e-mail: tchera@sci.lebedev.ru

### ОПАЛОВЫЕ МАТРИЦЫ КАК МЕТАМАТЕРИАЛ: ОПТИКО- АКУСТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В РИШЕТЧАТЫХ УПАКОВКАХ

*Приводятся результаты экспериментальных исследований фотон-фононного взаимодействия в правильных упаковках наносфер кремнезема (опаловых матрицах) и в наноккомпозитах на их основе. Показано, что в таких струк-*

*турах происходит эффективное преобразование лазерного излучения в акустические колебания наносфер, образующих матрицу. Установлено, что частотные сдвиги компонент рассеянного света соответствуют частотам собственных колебаний наносфер кремнезема. Исследована зависимость генерации вынужденных рассеяний света в опаловых матрицах от положения запрещенной фотонной зоны.*

**Ключевые слова:** опаловые матрицы, наноккомпозиты, акустические эффекты

#### Введение

Материалы, обладающие периодически изменяющимися диэлектрической проницаемостью и упругими характеристиками с периодом изменений порядка длины волны света, а именно, метаматериалы с запрещенными фононными зонами (акустические метаматериалы) [1—5] являются в настоящее время объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. В последние годы были начаты работы по получению и изучению подобных метаматериалов, получивших, по аналогии, название *фононных кристаллов*. Действительно, независимо от природы волн групповая скорость не обязательно совпадает с направлением волнового

вектора, например, в изотропной среде частота колебаний определяется модулем волнового вектора  $k$ , а следовательно, групповая скорость волнового пакета может быть направлена по  $k$  или по  $-k$  в зависимости от знака производной частоты от волнового вектора. Сказанное относится и к акустическим колебаниям в метаматериалах, где поведение функции состояний для различных зон в фононных материалах (содержащих разрешенные и запрещенные фононные зоны) будет определяться особенностями групповой скорости в определенном диапазоне частот, задаваемом собственно наноструктурированностью метаматериала. При заданных условиях могут возникать состояния с отрицательными значениями соответствующих коэффициентов и формированием в такой системе режима полного внутреннего отражения для акустических волн в определенном диапазоне частот. Однако расчеты показывают, что наиболее важными как для понимания физики процессов в метаматериалах, так и для их практического применения являются системы, относящиеся одновременно как к фотонным, так и к фононным материалам.

Для практических приложений наиболее интересны трехмерные структуры — опаловые матрицы, представляющие собой искусственный материал, образованный решетчатой упаковкой монодисперсных наносфер кремнезема ( $\text{SiO}_2$ ) с пространственной модуляцией как оптических (диэлектрической проницаемости), так и акустических свойств с масштабом в несколько сотен нанометров [2—4]. Благодаря субмикрометровым размерам наносфер  $\text{SiO}_2$ , опаловая матрица имеет оптические стоп-зоны (диапазон частот, в котором распространение электромагнитного излучения запрещено для определенного набора волновых векторов) в видимом спектральном диапазоне. Полная запрещенная фотонная зона с близкой к нулевой плотностью фотонных состояний не существует в опаловых матрицах главным образом благодаря небольшому показателю преломления кремнезема ( $n_{\text{SiO}_2}$ ). Полная запрещенная фотонная зона может быть реализована в инвертированных опаловых матрицах с контрастом показателя преломления, большем чем 2,85 [2] (в инвертированном образце межсферические нанополости заполнены веществом с большим  $n$ , а сферы  $\text{SiO}_2$  удалены). Тем не менее, опаловые матрицы удобно использовать для исследований нелинейного взаимодействия светового излучения с веществом вследствие возможности определять положение стоп-зон и управлять их свойствами.

Полости между наносферами в опаловых матрицах имеют октаэдрическую и тетраэдрическую форму, так что заполняя такие нанополости жидкостями с различными показателями преломления и используя матрицы с различными размерами наносфер, можно эффективно управлять параметрами стоп-зоны (ее положением в спектре и контрастом). При

этом вследствие изменения плотности фотонных состояний вблизи края запрещенной зоны порог нелинейных процессов может понижаться, увеличивая их эффективность, а также могут возникать новые, неизвестные ранее нелинейные эффекты. Исследование нелинейно-оптических эффектов в опаловых матрицах, в частности, таких как генерация акустических колебаний в гигагерцовой области, вынужденное рассеяние света на наносферах (ВР) и комбинационное рассеяние света (КР) в наноструктурированных средах [7], необычно интенсивная и длительная акустолуминесценция, названная эффектом фотонного пламени [7, 8], может дать важную информацию об особенностях фотон-фононного взаимодействия в фотонных кристаллах. В ряде работ, например [9], было показано, что интенсивное лазерное излучение приводит к генерации в конденсированных средах гиперзвуковых волн, на которых происходит дифракция света с возрастанием стоковых компонент. Отметим, что изучаемые эффекты не относятся к вынужденному рассеиванию Мандельштама—Брюллиэна, которое имеет место в результате взаимодействия бегущей акустической волны и лазерного излучения.

Особый интерес представляет возбуждение акустических колебаний в метаматериалах с использованием оптических лазеров, когда заметную роль играют эффекты возникновения автоколебательных состояний и особенности взаимодействия фононной и фотонной подсистем (зон). Если в системе имеется источник энергии, тогда потери, вызванные диссипацией (внутреннее трение), будут компенсироваться за счет поступающей энергии (не обязательно периодической или непрерывной) — эффект отрицательного трения. Такая система [10] может относиться к автоколебательным для тех случаев, когда ее положение равновесия теряет устойчивость и в системе возникают движения, переводящие ее в режим стационарных периодических колебаний с постоянными амплитудой и фазой.

Условием для подобного поведения [10] является наличие в системе трех составляющих, а именно: собственно колебательной подсистемы, источника энергии, воздействие которого на колебательную систему делает положение равновесия неустойчивым, и некоторого нелинейного "ограничителя", переводящего нарастающие (как правило, экспоненциально) колебания в стационарное состояние. Поскольку в подобных системах важную составляющую должны иметь процессы теплообмена между элементами метаматериала, в частности, между наносферами  $\text{SiO}_2$  (при использовании опаловых матриц), в таких системах соотношения длительности релаксации процесса теплопереноса и периодов колебаний значительно отличаются от аналогичных параметров в сплошных (кристаллических) средах, что приводит к существенно иным частотным зависимостям коэффициентов затухания звука.

Ситуация для метаматериалов отличается от кристаллических по крайней мере двумя факторами: во-первых, в таких материалах длина волны акустических колебаний рассматриваемого типа определяется его внутренним строением, например, диаметром ( $D$ ) наносфер  $\text{SiO}_2$  в опаловых матрицах; во-вторых, длина пробега фононов за счет различных факторов, например, наличия акустических полостей-резонаторов в опаловых матрицах, также становится порядка  $D$  наносфер. Таким образом, диапазон частот с "благоприятными" (для опаловых матриц) условиями по затуханию должен определяться в области от единиц до десятка гигагерц с характерными зависимостями от диаметров наносфер  $\text{SiO}_2$  и механических свойств контактных зон между ними.

Настоящая работа посвящена исследованию преобразования излучения мощных твердотельных лазеров в акустические колебания. Экспериментально эффект проявляется в возникновении в спектре прошедшего образца и отраженного от образца излучения линий вынужденного рассеивания, расположенных в стоксовой области и имеющих смещение относительно возбуждающего излучения порядка нескольких десятых долей обратного сантиметра. Одновременно проводилось изучение особенностей возбуждения вынужденного рассеяния и акустических колебаний в опаловых матрицах и нанокompозитах на их основе в зависимости от положения заперщенной фотонной зоны (диаметра наносфер).

### Экспериментальные данные

Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. В качестве источника возбуждения нелинейных эффектов использовался рубиновый лазер 1 с модулированной добротностью (длина волны генерации  $\lambda = 694,3$  нм, длительность лазерного импульса  $\tau = 20$  нс; максимальная энергия в импульсе  $E_{\text{max}} = 0,3$  Дж, расходимость  $\gamma = 3,5 \cdot 10^{-4}$  рад, ширина линии генерации  $m = 0,015$   $\text{см}^{-1}$ ).

Возбуждающее излучение фокусировалось в образец 2 линзами 3. Полупрозрачные стеклянные пластины 4, 5, 6 использовались для направления световых пучков на регистрирующие системы 7, 8. Система 7 использовалась для контроля энергетиче-

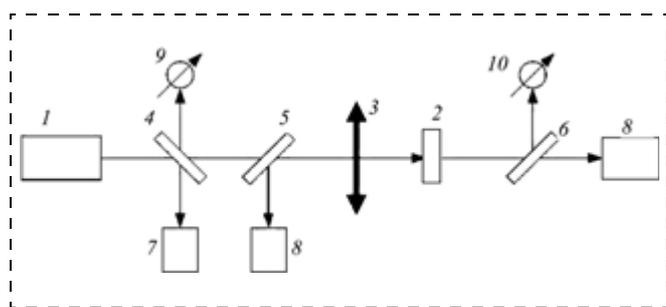


Рис. 1. Схема установки

ских, пространственных и временных параметров возбуждающего лазерного излучения, а системы 8 — для регистрации спектрального состава рассеянного излучения. Энергия рассеянного излучения измерялась с использованием калиброванных светодиодов 9 и 10. Спектры КР регистрировались с применением мини-спектрометров FSD-8 с волоконно-оптическим входом (диапазон 240—1000 нм, спектральное разрешение 6 нм), спектры ВР — с использованием интерферометров Фабри—Перо с переменной базой, что позволяло варьировать область дисперсии от  $0,42$   $\text{см}^{-1}$  до  $1,67$   $\text{см}^{-1}$ . Измерения проводились для линз с фокусными расстояниями 50, 90 и 150 мм при различных положениях исследуемого образца относительно фокусирующей оптики и различных энергий возбуждающего излучения. Последнее позволяло проводить измерения для различных плотностей мощности на входе в исследуемый образец и различных распределений поля внутри образца. Образцы опаловых матриц имели размеры  $1 \times 5 \times 5$  мм и были вырезаны параллельно плоскости (111). Угол падения пучка возбуждающего лазерного излучения на плоскость (111) мог варьироваться от 0 до  $60^\circ$  относительно нормали к плоскости (111). Исследовались опаловые матрицы, образованные решетчатой упаковкой наносфер рентгеноаморфного  $\text{SiO}_2$  с диаметрами 200, 230, 260, 300 и 320 нм, и нанокompозиты (опаловые матрицы, межсферические нанополости которых заполнены различными нелинейными жидкостями (ацетон, бензол, нитробензол, этанол, вода и четыреххлористый углерод), активными в КР). Все измерения проводились в области температур 80—350 К.

Под действием мощного лазерного излучения в опаловых матрицах возбуждаются акустические колебания с частотами, лежащими в гигагерцовом диапазоне, с высокой эффективностью преобразования. Частоты колебаний определяются собственными частотами, присущими опаловым матрицам как метаматериалам. В результате рассеяния лазерного возбуждающего излучения на гиперзвуковых колебаниях возникает ВР со смещением относительно частоты накачки порядка нескольких десятых долей  $\text{см}^{-1}$ . Коэффициент преобразования возбуждающего лазерного излучения в ВР может достигать 50 %. Расходимости пучков ВР и накачки близки. Порог возникновения эффекта и число линий, а также их относительная интенсивность зависят от типа наполнителя. При заполнении межсферических нанополостей опаловой матрицы жидкостями с  $n$ , близким к  $n_{\text{SiO}_2}$ , образцы становятся прозрачными. В данном случае можно наблюдать ВР как в направлении "назад", так и в направлении "вперед". На рис. 2 представлены интерферограммы ВР для опаловой матрицы, межсферические нанополости которой заполнены ацетоном, при различной плотности мощности возбуждающего излучения.

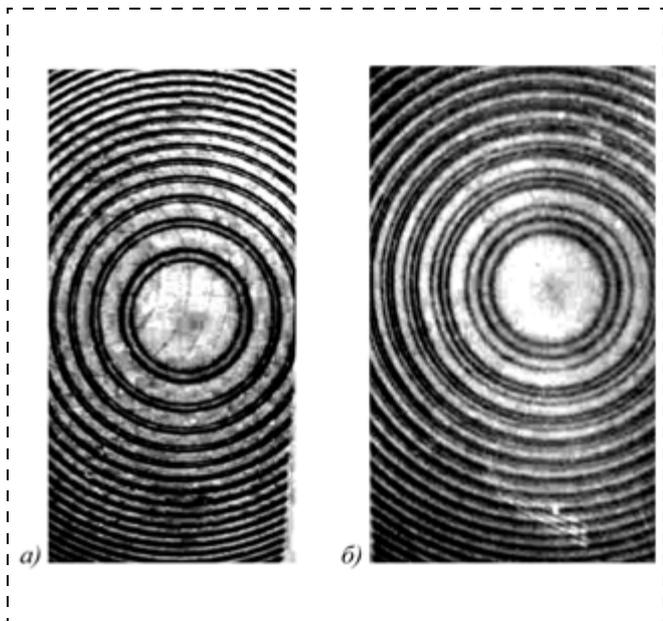


Рис. 2. Спектр ВР "назад" в нанокompозите (опаловая матрица, межсферические нанополости которой заполнены ацетоном). Область дисперсии интерферометра Фабри-Перо  $1,67 \text{ см}^{-1}$ . Плотность мощности накачки:

$a - 0,12 \text{ ГВт/см}^2$ ,  $b - 0,21 \text{ ГВт/см}^2$

Были проведены измерения частотных сдвигов стоксовых компонент ВР в опаловых матрицах и нанокompозитах на их основе (для указанных выше жидкостей, заполняющих межсферические нанополости) и для различной температуры образцов. Представляло интерес сравнить полученные в стандартном приближении частоты ВР с частотами собственных колебаний наносфер  $\text{SiO}_2$ . Колебания упругого сферического тела рассматривались в работе [10], а в [11, 12] были вычислены частоты  $\nu$  наносфер из плавленого кварца при условии, что продольная и поперечная скорости акустической моды  $c_l = 5279 \text{ м/с}$  и  $c_t = 3344 \text{ м/с}$ . Подобные частоты (в ГГц) равны

$$\begin{aligned} \nu_{10} &= 2,617/D, \nu_{12} = 2,796/D, \\ \nu_{20} &= 4,017/D, \nu_{30} = 6,343/D, \end{aligned} \quad (1)$$

где диаметр наносфер  $D$  берется в  $10^{-6} \text{ м}$ .

В действительности замеренные скорости распространения звука (продольные колебания) в опаловых матрицах для различных образцов находятся в интервале  $2,1\text{--}3,3 \text{ км/с}$  (300 К,  $5\text{--}15 \text{ МГц}$ ) и поперечные — в интервале  $1,66\text{--}1,96 \text{ км/с}$  и довольно сильно зависят от типа упрочнения образцов и размеров наносфер, играющих роль метаатомов (метаатом — объединение атомов, характерное для метаматериалов с обязательным поведением в определенных процессах как "большого" атома). Поскольку с изменением  $D$  наносфер и степени упрочнения изменяется плотность образцов, возможно, именно плотность в значительной степени определяет особенности скорости распространения звука и наблю-

даемые зависимости частот от  $D$  наносфер. Реальные опаловые матрицы и, как правило, все метаматериалы на основе агрегатов (метаатомов) не обладают трансляционной инвариантностью в кристаллографическом понимании данного термина, поскольку для решетчатых упаковок указанное определение можно распространить только на центры наносфер, образующих такую упаковку. Поэтому стандартное рассмотрение с использованием плоских монохроматических волн невозможно.

Для акустических колебаний описание распространения таких волн в рамках аппарата механики сплошных сред просто неверно, поскольку необходимо использовать функцию отклика материала, учитывающую (через координатную зависимость) пространственную дисперсию в распределении вещества. При рассмотрении функциональной зависимости частоты  $\omega(\mathbf{k})$  от  $\mathbf{k}$  в метаматериалах необходимо учитывать вклад, обусловленный наличием пространственной дисперсии, который может быть значительно больше, чем доля зависимости без его учета.

В использованных экспериментальных системах в зависимости от условий возбуждения регистрировалось до трех стоксовых компонент. Понижение температуры образцов до 90 К приводило к существенному повышению эффективности преобразования волны накачки в рассеянную волну и понижению порога ВР. В табл. 1 представлены частоты компонент ВР, измеренные экспериментально для различных образцов при комнатной температуре и при температуре  $-80 \text{ К}$ , а также вычисленные собственные частоты наносфер  $\text{SiO}_2$ .

Измерения параметров стоп-зоны, выполненные для тех же образцов, демонстрируют линейную зависимость положения максимума в спектре отражения от  $D$  наносфер (рис. 3). Такие данные были получены при использовании неполяризованного бело-

Таблица 1

**Частотный сдвиг компонент ВР в зависимости от состава вещества, заполняющего межсферические нанополости, и температуры (экспериментальные и вычисленные величины)**

Вид рассеяния	Температура, К	Частота, ГГц (вычисл.)	Частота, ГГц (эксп.)
Нанокompозит (ацетон)			
ВР "назад"	295	8,8 13,6	8,0 13,0
ВР "вперед"	295	8,8	8,0
Нанокompозит (этанол)			
ВР "назад"	295	8,8 13,6	7,8 12,6
ВР "вперед"	295	8,8	7,4
	80	8,8	8,0
		13,6 21,4	15,7 22,6

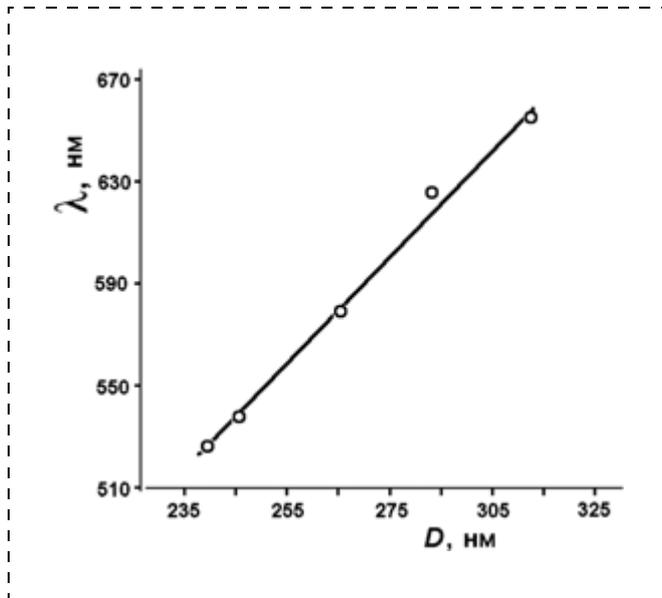


Рис. 3. Зависимость положения максимума в спектре отражения от  $D$  наносфер (комнатная температура, межсферические нанополости опаловой матрицы заполнены этанолом)

го света для случая нормального падения на плоскость (111) гранецентрической кубической (ГЦК) решетчатой упаковки исследуемых образцов (отражающая поверхность образца совпадала с его плоскостью формирования). Свойства запрещенной фотонной зоны зависят от  $D$  наносфер, образующих опаловую матрицу, и от вещества, заполняющего межсферические нанополости. Положение центра фотонной запрещенной зоны ( $\Lambda_{pbg}$ ) определяется соотношениями (2) и (3):

$$\Lambda_{pbg} = 2D\sqrt{2/3} n_{эфф} \cos\theta. \quad (2)$$

Здесь  $\theta$  — угол падения лазерного пучка на объект (относительно нормали к поверхности образца, в условиях нашего эксперимента  $\theta = 0$ );  $n_{эфф}$  — эффективное значение показателя преломления, которое вычислялось по формуле

$$n_{эфф} = \sqrt{(1-f)n_{SiO_2}^2 + fn^2}, \quad (3)$$

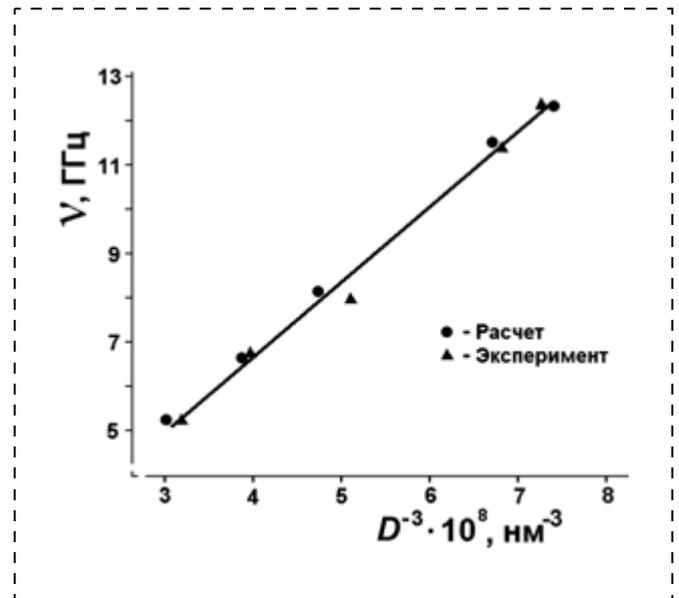


Рис. 4. Зависимость частотного сдвига излучения ВР "вперед", относительно частоты возбуждающего лазерного излучения, от диаметра наносфер опаловой матрицы (межсферические нанополости заполнены этанолом)

где  $f$  определяет, какая часть объема образца заполнена нелинейной средой (в нашем случае  $f = 0,26$ ). Для выяснения влияния запрещенной фотонной зоны на генерацию ВР и КР было проведено исследование возникновения рассматриваемых видов рассеяния в различных образцах [3].

Измерения частотного сдвига рассеянного излучения относительно частоты лазерного излучения от  $D$  наносфер (табл. 2) показали, что данное соотношение существенно отличается от того, что задается выражениями (1). Экспериментально наблюдается линейная зависимость частотного сдвига излучения ВР относительно частоты возбуждающего лазерного излучения от  $D^{-3}$  (рис. 4). Изменение угла падения приводит к смещению стоп-зоны в соответствии с условиями брэгговского отражения, при этом частотные сдвиги излучения ВР ("вперед") остаются без изменений. Возбуждение в исследуемых средах ВР с высоким коэффициентом преобразования одно-

Таблица 2

Частотные сдвиги излучения ВР и положение максимума в спектре отражения в зависимости от размера наносфер

$\nu_i$ , ГГц (эксперимент)	Диаметр наносфер $D$ , нм, $\pm 5$ нм (по данным электронной микроскопии)	$\nu_0/\nu_i$	$(\nu_0/\nu_i)^{1/3}$	Размеры сфер, нм (расчетные при кубической зависимости)	Положение максимума отражения, нм (эксперимент)	Отношение $\alpha = \lambda/D$	Положение максимума отражения, нм (расчетные по $\alpha_{ср}$ и линейной зависимости/то же для значений столбца)
1	2	3	4	5	6	7	8
5,1	315	2,176	1,297	317,7	656	2,07	677/674
6,6	290	1,682	1,189	291,3	628	2,15	621/621
7,8	270	1,423	1,125	275,6	575	2,09	587/578
$\nu_0 = 11,1$	245	1,0	1,0	245	540	2,20	522/525
12,1	240	0,98	0,94	231	530	2,21	513/520

значно указывает на эффективную генерацию акустических колебаний, лежащих в области гиперзвука в среде. Частотный диапазон данного возбуждения определяется как геометрическими размерами наносфер опаловых матриц, так и акустическими характеристиками сред, используемых для заполнения образцов. Увеличение эффективности преобразования волны накачки в рассеянную волну и существенное понижение порога возбуждения ВР при переходе от комнатных температур к температуре 80 К, наблюдаемое в эксперименте, связано с сильным уменьшением затухания гиперзвука при понижении температуры образцов до указанной температуры.

При исследовании спектрального состава рассеянного излучения образцов нанокомпозитов с различным заполнением были реализованы условия генерации вынужденного комбинационного рассеяния. В случае заполнения межсферических нанополостей опаловой матрицы нитробензолом (контраст показателя преломления, т. е. отношение  $n$  среды, заполняющей нанополости опаловой матрицы, к значению  $n$  плавленого кварца,  $n/n_{\text{SiO}_2} = 1,06$ ) в образце возбуждалось КР в направлении "назад" с высокой эффективностью преобразования лазерного излучения в КР. В нанокомпозите с нитробензолом порог возникновения КР был в 20 раз ниже, чем в чистом нитробензоле. Высокая эффективность КР в наноструктурированной жидкости обусловлена свойствами запрещенной фотонной зоны. Другой причиной усиления КР в данном случае может быть эффективная генерация ВР, которая может служить накачкой для КР в направлении "назад".

Экспериментальные результаты, полученные при исследовании эффекта длительного свечения в видимом диапазоне [8, 9], также являются свидетельством возбуждения в опаловой матрице интенсивных акустических колебаний. Эффект заключается в возникновении на поверхности опаловой матрицы свечения в сине-зеленой области спектра длительностью несколько секунд при облучении образца лазерными импульсами наносекундной длительности. Указанный эффект наблюдался при температуре 90—120 К как в незаполненных опаловых матрицах, так и в нанокомпозитах. Пороговое значение плотности мощности накачки определялось типом нелинейной среды, заполняющей нанополости образца. Для незаполненной опаловой матрицы данная величина составляла 0,12 ГВт/см<sup>2</sup>, для опаловых матриц, межсферические нанополости которых заполнены этанолом или ацетоном, соответственно 0,05 и 0,03 ГВт/см<sup>2</sup>. Возбуждение могло передаваться от образца, облученного лазерным импульсом, к другим образцам, расположенным на той же подложке (расстояние между образцами составляло несколько сантиметров). Линейная зависимость длительности свечения от температуры (в области 80—350 К) лишний раз свидетельствует о его акустолуминесцентной природе.

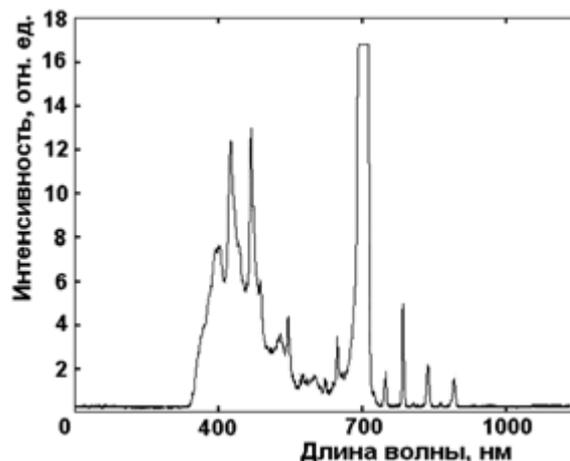


Рис. 5. Спектр свечения опаловой матрицы, межсферические нанополости которой заполнены глицерином

Был исследован спектральный состав интенсивного и длительного (до 6—8 с) свечения опаловых матриц при возбуждении рубиновым лазером. Спектр свечения расположен в основном в сине-зеленой области спектра (антистоксовая область), но при значительном превышении порога наблюдаются также линии в стоксовой области. На рис. 5 представлен спектр свечения в опаловой матрице, межсферические нанополости которой заполнены глицерином. Увеличение интенсивности возбуждающего излучения приводит к возрастанию интенсивности свечения и к появлению дополнительных компонент в антистоксовой области спектра. Порог возникновения компонент в стоксовой области гораздо выше, чем в антистоксовой. Заполнение нанополостей опаловых матриц жидкостями не приводит к изменению спектрального распределения, но может влиять на порог эффекта. Так, заполнение матриц жидкостями с  $n$ , большим чем  $n_{\text{SiO}_2}$ , понижает порог возникновения линий в стоксовой области спектра. Длины волн наиболее характерных линий в спектре излучения при акустолуминесценции в антистоксовой области составляют 398, 408, 429, 440, 453, 464, 483, 500, 518 и 660 нм; в стоксовой области — 747, 777, 796, 824, 846, 930 и 1013 нм. Происходящие при этом процессы имеют много общего с триблюминесценцией. Возникающие в образцах под действием световых импульсов напряжения настолько велики, что в некоторых случаях образцы перемещаются на расстояние нескольких сантиметров, иногда раскалываются, причем образовавшиеся осколки продолжают светиться.

Акустолуминесценция в рассматриваемом случае относится к оптоакустическим эффектам, обусловленным воздействием интенсивного излучения оптического диапазона на акустические характери-

стики среды, включая так называемый фотоакустический эффект, связанный с модуляцией светового потока в области частот, характеризующих его взаимодействие со средой, что приводит к возбуждению акустических колебаний. Следует отметить, что наряду с собственно дефектной акустолюминесценцией, обусловленной наличием в материалах различных типов структурных дефектов, различают триболюминесценцию, возникающую при механических нагрузках, близких или превышающих реальные пределы прочности среды. Последнее происходит при накоплении дефектов и электрического заряда в областях частичного нарушения сплошности с последующим образованием микротрещин и внутренним пробоем. О наличии гиперзвука свидетельствуют также результаты по передаче акустических колебаний (с возбуждением акустолюминесценции) от опаловой матрицы к другим материалам (рис. 6, см. вторую сторону обложки). При этом, если наблюдаемое свечение образцов рубина и кварца (рис. 6) относится к акустолюминесценции, свечение опаловых матриц, скорее, можно описать термином неразрушающей триболюминесценции, обязанной особенностями строения опаловых матриц и когерентностью акустических колебаний. Интенсивное вторичное свечение имеет место при пониженных температурах (менее 200 К), а при комнатных температурах не только слабее, но и менее продолжительно, аналогична ситуация и для плохо упорядоченных образцов. Возбуждение от облучаемого лазером образца к другим хорошо распространяется по меди, серебру, проводящему германию как на воздухе, так и в вакууме.

О наличии гиперзвука свидетельствуют также результаты проведенных экспериментов с одновременным использованием кристаллов (в виде пластин заданной ориентации) сильного (SBN—барий—стронций ниобат) и слабого (кварц) пьезоэлектриков. Наличие между параллельно расположенными пластинами возбуждаемой лазерным лучом опаловой матрицы приводило к большой разнице в приповерхностных зарядах для сильного и слабого пьезоэлектриков, вплоть до искрения и пробоя на расстояниях до 3 мм между пластинами. Последнее невозможно без воздействия на пьезоэлектрики гиперзвуковыми колебаниями. Если вместо рубина использовать кварц, свечение в нем лежит в синей области спектра, а как известно, триболюминесценция в кварце (кристаллическом и плавленом) легко возбуждается (при высоком уровне ударного воздействия). В отличие от стандартной триболюминесценции, наблюдаемой в кварце, данное свечение гораздо более интенсивное и длительное, что обусловлено особенностями генерации гиперзвукового возбуждения опаловой матрицей, обладающей значительной лучевой прочностью.

## Обсуждение результатов

Как следует из приведенных результатов по исследованию процессов, возникающих при взаимодействии мощного лазерного излучения с опаловыми матрицами, существенную роль в таких процессах играет акустическое возбуждение исследуемых сред. Именно возбуждение гиперзвука является причиной возникновения описанных выше нелинейно-оптических эффектов. Соответственно, опаловые матрицы могут быть использованы для генерации гиперзвука в диапазоне от нескольких единиц до нескольких десятков гигагерц. В упрощенном виде возбуждение акустических колебаний в опаловых матрицах при лазерном воздействии можно описать в рамках следующего рассмотрения. Одной из особенностей динамического нагружения, имеющего место при импульсном лазерном воздействии на любое тело, является образование внутри него конечных областей (в рассматриваемом случае — наносферы кремнезема) возмущения напряженно-деформированного состояния. Спецификой опаловых матриц как многосвязной системы является наличие (рис. 7) межсферических нанополостей (играющих роль резонаторов и связывающих их полостей) волноводов (заполнение полостей жидкостями или частичное заполнение их твердым веществом общей картины существенно не меняют, необходимо в расчетах заменить  $\omega$  на  $\omega\sqrt{\epsilon\mu}$ , где  $\epsilon$  и  $\mu$  — диэлектрическая и магнитная проницаемости). В определенном смысле окружающие полости наносферы играют роль стенок резонатора с вставленными в него расширяющимися "раструбами". В любом случае скорости звука в нанополостях, на поверхности, внутри и вдоль цепочек наносфер существенно разные, что и создает эффекты, характерные для акустических метаматериалов [1].

Для понимания общей картины образования и распространения акустических колебаний в опаловых матрицах можно также использовать рассмотрение общих, не зависящих от природы волн, особенностей волновых процессов и свойств резонаторов и волноводов. В случае электромагнитных волн частоты собственных колебаний в резонаторе (без учета потерь в стенках), собственные колебания (стоячие волны) имеют нижнюю границу  $\omega \approx c/b$ , где  $c$  — скорость распространения колебаний,  $b$  — поперечный размер резонатора. Собственные частоты таких резонаторов в области  $\omega \gg c/b$  характеризуются функцией плотности состояний, зависящей от объема ( $V$ ), но не от формы резонатора (вида  $V\omega^2/2\pi c^3$ , что при нормировке на единицу приведет к обратной зависимости от  $V$ ). В случае односвязных волноводов (типа полой трубки) такие волны являются стоячими в поперечном направлении и бегущими вдоль оси трубки. Наличие затухания ( $\zeta''$ ) приводит к сдвигу частот, при этом при  $\zeta'' < 0$  собственная частота уменьшается, а при  $\zeta'' > 0$  — увеличивается. Разница в частотах ( $\omega - \omega_0$ ) с учетом затухания ( $\omega$ ) и без учета тако-

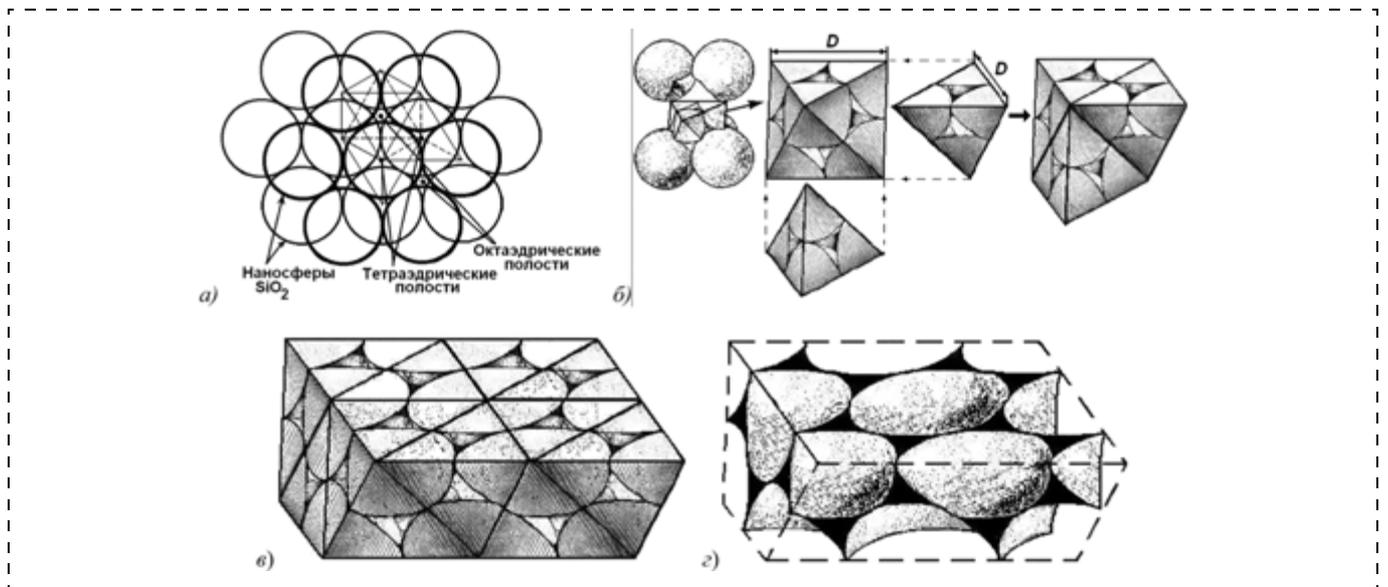


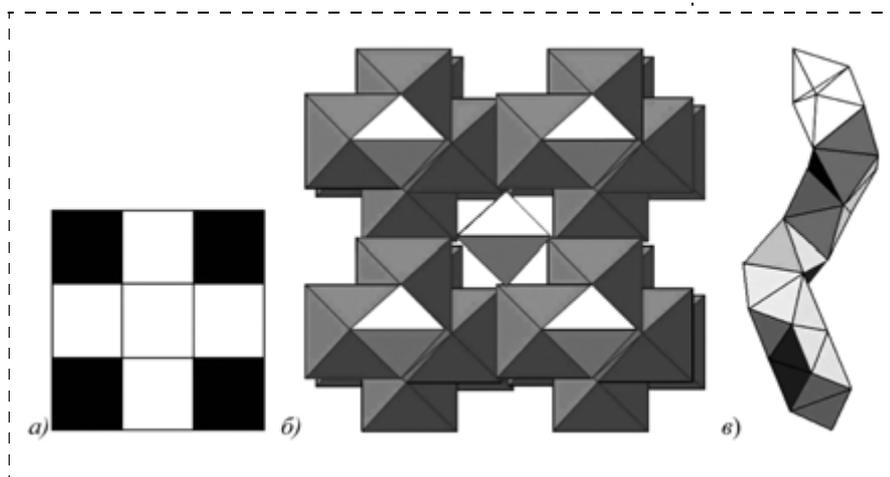
Рис. 7. Тетраэдрические и октаэдрические полости (по числу формирующих полость сфер) (а); структурные особенности опаловой матрицы, представленные октаэдрами и тетраэдрами, вершины которых соответствуют центрам сфер SiO<sub>2</sub> (б, в); объемное строение нанополостей, играющих роль резонаторов и связывающих их полостей — волноводов (з)

вого ( $\omega_0$ ) определяется, в основном, указанной диссипацией энергии колебаний.

Образование фотонных зон в опаловых матрицах намного усложняет методы описания, поскольку колебательная система не может "перескочить" состояния  $d\omega/dk = 0$ ; последнее приводит (при определенных условиях) к появлению разрывов для функции плотности и, соответственно, для экспериментально наблюдаемых частот ( $\omega_3$ ) и амплитуд колебаний. Стоит отметить, что хотя зависимость частот акустических колебаний от  $D$  и близко к обратной кубической зависимости (см. рис. 4), подобная зависимость описывается и формулой вида  $\omega_3 = \omega_c/D - \omega_0$ , где  $\omega_c = 5200$  ГГц · нм (постоянная),  $\omega_0 = 11,5$  ГГц (в определенном смысле характеризует ширину запрещенной зоны). Обращенность знаков не удивительна, поскольку при лазерном воздействии система оказывается в зоне, отвечающей значению  $d\omega/dk < 0$ , так что размер "перескока" будет определяться величиной  $\omega_3 + \omega_0$ , а  $\omega_3$  — размером наносфер и внутренним трением (положением различных зон и потерями, включая потери, связанные с возникающими эффектами акустолюминесценции). Упомянутые выше различия в скоростях для различных областей опаловых матриц, что является одним из условий их существования как акустического метаматериала с дисперсией упругих характеристик в наноразмерном масштабе, реализуемой наличием решетчатой упаковки, приводят и к новой (отличной от той, что используется, например, для кристаллических сред) классификации акустических колебаний.

В ряде работ обсуждается применение метаматериалов для эффективного уменьшения групповой

скорости распространения сигнала за счет гиротропных эффектов в метаматериалах, обладающих свойством хиральности с реализацией условий, при которых получаем отрицательные значения коэффициента преломления для определенного диапазона частот. Теоретическое рассмотрение подобных эффектов, проведенное в ряде работ [13—15], показало, что в хиральной (гиротропной) среде отрицательной групповой скоростью обладает только одна из двух возможных поляризаций, тогда как вторая — имеет положительную групповую скорость. Материал рассматривается как обладающий свойством хиральности, если в нем отсутствуют плоскости зеркального отражения [15]. В случае электромагнитных волн хиральные материалы характеризуются сильным кросс-связыванием электрических и магнитных моментов для выделенного направления. Последнее обусловлено снятием вырождения для двух волн с круговой поляризацией, так что коэффициент преломления (индекс отражения) для одной волны возрастает, а для другой — уменьшается. Снятие вырождений в хиральных системах (поляризации как следствия нарушения осевой симметрии) приводит к разделению подобных поперечных волн с разной поляризацией. При больших значениях коэффициентов хиральности такая неэквивалентность может приводить к отрицательным значениям коэффициента преломления для волн одной поляризации при сохранении его положительности для волн другой поляризации. Рассматриваемые свойства сред, предсказанные ранее для хиральных материалов [13] и фотонных кристаллов в области резонансов (см. обзор в [16]), позволили экспериментально реализовать и наблюдать в искусственно изготовленных хиральных материалах волны с положительными



**Рис. 8. Возможные разбиения ГЦК-структуры на геликоидальные цепочки (полиэдрическое изображение):**

*a* — схема шахматной доски, в которой все вершины охватываются изолированными друг от друга черными квадратами; *б* — ГЦК-решетка как объединение геликоидов; *в* — геликоид с кристаллографической винтовой осью  $4_1$ , образованный полиэдрами в ГЦК-структуре

и отрицательными (относительно направления волнового вектора) групповыми скоростями для диапазона 0,2—3 ТГц [14, 15].

На рис. 8 для иллюстрации приведено полиэдрическое изображение геликоидальности таких структур, но если в вершины полиэдров поставить шары, то структуры похожи на опаловую матрицу. Частицы феррита находятся в межсферических полостях и также "крутятся" по спирали, как и все остальные элементы, при этом использование другого направления (по винтовой оси  $3_1$ , перпендикулярной плоскости (111)) не должно менять рассмотрения.

Опаловые матрицы, относящиеся к решетчатым (ГЦК) упаковкам с двойникованием обладают своеобразными хиральными свойствами, поскольку наличие значительного числа случайно распределенных дефектов упаковки приводит к отсутствию плоскостей отражения между слоями. Экспериментально установлено [17], что отклонения участков конечных размеров (как правило, доли кубического миллиметра по объему — доменов) в такой регулярной ГЦК-структуре, относительно условной нормали к поверхности формирования (плоскость (111), как правило) находятся в диапазоне  $\pm 5^0$ . Указанная ГЦК-структура может быть разбита на геликоидальные цепочки, которые не имеют общих атомов и охватывают все атомы структуры (центры сфер в нашем случае); пояснения для варианта полиэдрического изображения дано на рис. 8, где приведен геликоид  $4_1$ .

Необходимо также отметить возможную роль хиральности для подобных систем. Среди фрактальных геометрий обычно рассматриваются самоаффинные (мандельбротовы) геометрии, относящиеся к масштабно-инвариантным. Подобные многообразия не относятся к группам движения евклидова пространства, не характеризуются трансляционной инвари-

антностью и связаны с ненулевыми значениями тензора деформаций, описывающего изменение метрики при введении указанных преобразований. Фрактальная (хаусдорфова) размерность  $d$  агрегата в виде наночастицы — фрактала из более мелких частиц или минимальных (по размеру) кластеров (условно называемые мономерами) — определяется соотношением между числом  $N$  таких частиц в нем и размером (для сфероподобных, в частности, коллоидных частиц — гирскопическим радиусом) агрегата  $R_c$  в виде формулы

$$N = (R_c/R_0)^d,$$

где  $R_0$  — константа, определяющая минимальное расстояние между мономерами (частицами). Введенная фрактальная размерность (в общем случае — размерности) описывает зависимость объема или площади поверхности (или границы) от линейных размеров агрегата. Существенно, что в отличие от периодических систем, среды с фрактальной геометрией имеют  $d < 3$  (например,  $d = 1,78$  для агрегатов типа кластер—кластер и  $d = 2,5$  — для агрегатов типа частица—кластер [18, 19]) или  $d < 2$  для объемных и поверхностных характеристик соответственно.

Опаловые матрицы с заполненными межсферическими нанополостями определяются как наноконпозицы, как и многие другие материалы (тонкие пленки, пористые среды, коллоидные агрегаты, нерешетчатые упаковки и др.), во многих случаях имеют нерегулярную структуру, которая не описывается кристаллографическими группами [20—22]. Тем не менее, как правило, подобные материалы обладают другими типами упорядочения, в частности, фрактального типа, когда в системе протекают процессы самоорганизации геометрических структур с самоподдержанием формы.

Таким образом, качественно картина преобразований в акустические колебания оптического воздействия на опаловую матрицу внешнего импульсного источника энергии — лазера может быть рассмотрена в следующем виде. Роль нелинейного ограничителя, устанавливающего стационарный режим периодических колебаний, выполняет собственно опаловая матрица как фотонный и фононный кристалл (материал с запрещенными фононными зонами в изучаемом диапазоне), в котором вследствие эффекта "накачки" возникает режим, характерный для состояний с отрицательным коэффициентом преломления, присущий в общем случае подобным метаматериалам. Возникшая среда с отрицательным индексом для определенного диапазона акустических волн переводит режим (можно сказать катаст-

рофический) нарастания амплитуды колебаний в стационарный [10]. Длительность этого процесса определяется затуханием — потерями запасенной энергии, переведенной (до 56—60 %) нелинейными свойствами системы в энергию периодических акустических колебаний. Частоты колебаний определяются периодичностью структуры вещества, особенностями скорости распространения акустических колебаний в среде и упругими характеристиками опаловых матриц. Рассмотренные эффекты могут иметь место в классе фотонно-фононных метаматериалов, к которым относятся опаловые матрицы, при условии установления в таких средах определенного режима колебаний за счет взаимодействий между фотонной и фононной подсистемами (как это имеет место в рассматриваемом случае).

Существенным фактором при любом сценарии перекачки энергии оптического импульса в энергию акустических колебаний является фиксированность длин таких волн в зависимости от размера наносфер (или, возможно, от связанной с ней периодичностью в такой решетчатой упаковке). При этом скорость распространения фононов будет определяться материалом наносфер, а также упругостью и неупругостью контактов между ними. Действительно, необходимо учитывать, что наносферы  $\text{SiO}_2$  (каждая сфера окружена 12 подобными, а межсферические полости двух типов образуют подрешетки полостей) в опаловых матрицах имеют подструктуру, так что каждая наносфера состоит из нескольких сотен более мелких сфер диаметрами 5—10 нм (рис. 9). Роль межсферической области выполняют небольшие площадки, по которым наносферы скрепляются между собой в опаловых матрицах при операциях упрочнения, когда происходит срастание наносфер (при их полигонизации с образованием площадок неболь-

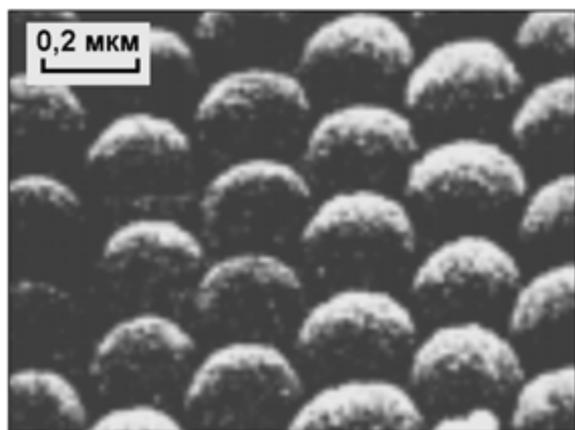


Рис. 9. Поверхность {111} образца опаловой матрицы (растровая электронная микроскопия, снимок сделан под углом  $45^\circ$  к поверхности)

ших размеров) без существенного изменения их первоначального размера, а само упрочнение опалового материала возникает при переносе кремнезема в зону контакта с образованием прочных силоксановых связей.

Особый интерес к эффектам возбуждения акустических колебаний в метаматериалах с использованием оптических лазеров обусловлен заметной ролью эффектов возникновения описанных выше состояний и особенности взаимодействия состояний (зон) фононной и фотонной подсистем. В таких системах важную роль должны иметь процессы теплообмена между элементами метаматериала, в частности, между наносферами (при использовании опаловых матриц), поскольку в таких системах соотношения времени релаксации процесса теплопереноса и периодов колебаний значительно отличаются от аналогичных параметров в сплошных (кристаллических) средах, что приводит к существенно иным зависимостям коэффициентов затухания звука. Как рассмотрено в [23] на примере поликристаллических сред, наряду с областью, в которой коэффициент затухания звука  $\sim \omega^2$ , имеется область, в которой затухание  $\sim \sqrt{\omega}$  для диапазона частот, определяемого, с одной стороны, величиной  $v/a$ , где  $v$  — скорость звука,  $a$  — характерный масштабный параметр (например, длина пробега фононов или период), а с другой —  $\chi/a^2$ , где  $\chi$  — теплоемкость (теплопроводность, нормированная на теплоемкость единицы объема). Последний случай относится [23] к условиям для поликристаллических систем вида  $\chi/a^2 \ll \omega \ll v/a$ . Таким образом, область частот с "благоприятными" условиями по затуханию должна определяться значением  $\chi/D^2 \ll \omega \ll v/D$ , что сводится к области от единиц до десятка гигагерц для характерных величин теплоемкости (теплопроводности [22]) и диаметров наносфер опаловых матриц.

В книге Л. Д. Ландау и И. М. Лифшица "Электродинамика сплошных сред" [24] отмечается, что формально закон возрастания энтропии при действии, например, электромагнитного поля в условиях термодинамической неравновесности может реализовываться не только под действием электромагнитного излучения, но и через возбужденные состояния элементов, образующих среду. Показано, что в условиях  $\epsilon < 0$  может иметь место "неистинная" диссипация (не связанная с поглощением излучения), обусловленная наличием возбужденных состояний, не относящихся к электромагнитным модам. Поскольку нестационарные процессы всегда относятся (в различной степени) к термодинамически необратимым процессам, наличие произвольной дисперсии делает невозможным последовательное задание электромагнитной энергии как термодинамической величины [24]. Косвенным подтверждением наличия подобного механизма является рассматриваемая ниже высокая лучевая прочность опаловых матриц,

выдерживающих импульсное оптическое воздействие с большой интенсивностью (мощностью).

Поскольку опаловые матрицы относятся к новому классу некристаллических нанокомпозитов, а именно — к метаматериалам (которые по аналогии можно назвать фотонно-фононными кристаллами), являющимися одновременно материалами с запрещенными (и разрешенными) фотонными и фононными зонами, представляло особый интерес изучить особенности механизма возникновения повышенной лучевой прочности таких материалов. Действительно, многие характерные их свойства могут быть обусловлены как наличием периодичности наноразмерного масштаба, так и особенностями статистики Бозе—Эйнштейна (например, возможностью получения 100 %-ной инверсии в двухуровневых системах), которой подчиняются указанные квазичастицы (фотоны и фононы). Для исследования лучевой прочности (при комнатной температуре) кристаллических материалов (кварца, рубина), плавленого кварца и опаловых матриц (упорядоченных, а именно, решетчатых упаковок наносфер  $\text{SiO}_2$ ) в качестве источника возбуждающего излучения использовался твердотельный лазер на рубине ( $\lambda = 694,3$  нм,  $E_{\max} = 0,4 \dots 0,5$  Дж,  $\tau = 20$  нс;  $\gamma = 3,5 \cdot 10^{-4}$  рад;  $m = 0,015 \text{ см}^{-1}$ ), позволяющий получить без фокусировки до  $2 \text{ ГВт/см}^2$ , а при использовании фокусировки — до  $1000 \text{ ГВт/см}^2$  (при площади пятна пучка  $0,2 \text{ мм}^2$ ). Аналогичные результаты получены при использовании в качестве источника возбуждения излучения импульсного Nd—Yag-лазера (длины волн для первой и второй гармоники —  $1,06$  и  $0,53$  мкм соответственно,  $\tau = 20$  нс). Пороговое значение энергии лазерного импульса при  $\lambda = 1,06$  мкм примерно в 2 раза выше, чем для излучения лазера на рубине или для второй гармоники Nd—Yag-лазера.

Оказалось, что при использовании кристаллических материалов или кварцевого стекла разрушение образцов, в том числе в виде прожигания отверстий или внутреннего пробоя, имело место при мощностях  $15\text{--}40 \text{ ГВт/см}^2$  (здесь и далее в зависимости от качества материала), а с применением фокусировки на поверхности — при  $5\text{--}20 \text{ ГВт/см}^2$  (при использовании одного импульса) или  $1\text{--}5 \text{ ГВт/см}^2$  (при воздействии  $5\text{--}10$  импульсами). В случае опаловых матриц (при аналогичных размерах и условиях воздействия лазерного излучения) необходимые параметры воздействия для разрушения следующие:  $20\text{--}40$  импульсов с использованием мощностей в диапазоне  $40\text{--}20 \text{ ГВт/см}^2$ , не менее 100 импульсов при мощности  $5 \text{ ГВт/см}^2$  и свыше  $450\text{--}800 \text{ ГВт/см}^2$  (в зависимости от качества образца) при воздействии одним импульсом. Приведенные данные наглядно показывают особенности превращения энергии оптических возбуждений в энергию автоколебательных акустических мод.

## Заключение

Рассматриваемые системы в общем случае относятся к ангармоническим решеткам, характеризующимся нелинейным взаимодействием нормальных мод гармонических осцилляторов. В таком случае для неэргодических систем нормальные моды определяются как движения с почти постоянной амплитудой и с заданной частотой для каждого осциллятора. Подобные нелинейные моды, как периодические решения для нелинейных систем, возможны различных типов, в частности, в форме солитонов, например, для одномерных цепочек [25]. Неэргодичность систем означает, что функция распределения вдоль фазовой траектории непостоянна, а следовательно, соотношение энергии и статистического состояния становится неоднозначным [24]. Наличие (протекание) в системе различных областей приводит к состояниям неполного равновесия [24], когда каждая "малая" подсистема описывается своей функцией распределения, а термодинамические функции не обязательно являются аддитивными интегралами движения. Как и в случае вырожденных состояний, энергия не составляет в отдельности полной системы физических величин, а произвольно выбранные собственные функции вырожденного уровня энергии не обязательно образуют ортогональную систему. На языке алгебраических конструкций данные утверждения можно сформулировать следующим образом: для однородных (например, периодических структур) пространств и поверхностей вращения (например, геликоидальных структур) метрика многообразия имеет нетривиальные группы движений, а потоки (множества) геодезических допускают наличие "лишних" интегралов движений [26].

Акустические метаматериалы разделяются, достаточно условно, на три класса [1, 3, 27], а именно: фотонные кристаллы — регулярно упорядоченные материалы с запрещенными фотонными зонами; упорядоченные материалы, чьи акустические характеристики определяются внутренним дизайном (*intrinsic*), и так называемые *inertial* материалы, образованные локальными резонансными "составными" или композитными элементами с существенно различными акустическими свойствами (плотностью или фазовыми скоростями). Для акустических метаматериалов можно ввести условные акустические характеристики (по аналогии с фотонными кристаллами [1, 27]):

- отрицательные объемные модули ( $B$ ), когда частоты локального резонанса выше формальных собственных частот элементов (обычно тело объема  $V$  сжимается под действием приложенного давления ( $p$ ) и  $B = -V\partial p/\partial V$ , но локально может и расширяться, с учетом, что в среднем по телу  $B > 0$ );
- отрицательная плотность (массовая) — направление действия силы и ускорения противоположны

(аналог отрицательной групповой скорости); формальный коэффициент (индекс) преломления  $n = (B_0\rho/B\rho_0)^{1/2}$ , где  $B$  и  $B_0$ ,  $\rho$  и  $\rho_0$  — объемные модули и плотности различных фаз. Для описания акустических метаматериалов также удобно использовать [1, 27] такой параметр, как акустический импеданс  $Z = \rho_i c_i / \cos\theta'$ , где  $\theta'$  — угол между волновым вектором и нормалью к слою (плоскости) для материалов с разными скоростями ( $c_i$ ) акустических волн (одного типа). Таким образом, акустические метаматериалы определяются как материалы с пространственной дисперсией импеданса.

Наличие промежуточных состояний с фрактальной размерностью относится к процессам самоорганизации, связанным с переходом от упорядоченных состояний в пределах малых областей к упорядоченным периодическим наноструктурированным системам. Однако, не касаясь проблем математического описания [28], отметим, что наличие локальных характеристик (периодичности) позволяет сохранять индивидуальные свойства отдельных элементов системы, а фрактальность — соотносить определенные свойства малых областей со всей системой. Чтобы оценить эффекты фрактальности, необходимо построить зависимость частоты акустических колебаний ( $\omega$ ) от размера морфологических однородностей, тогда степенная зависимость, точнее ее отклонение от 3 ( $\omega \sim D^{-t}$ ) и будет одним из фрактальных параметров ( $t$ ). Собственно, весь набор данных позволяет рассчитать такие параметры, как фрактальная размерность или, при фиксированном характеристическом параметре, — скорость распространения акустических колебаний при лазерном возбуждении.

Результаты, полученные в настоящей работе, демонстрируют возможность эффективного преобразования энергии импульсного светового излучения в акустические колебания наносфер, образующих опаловую матрицу, с частотами, расположенными в гигагерцовом диапазоне. Частоту колебаний можно целенаправленно изменять, варьируя свойства образцов (например, меняя размер сфер, образующих матрицу, заполняя пустоты между сферами различными веществами). Заполняя пустоты различными нелинейными жидкостями и материалами, активными в ВР и КР, и подбирая, таким образом, положение запрещенной фотонной зоны, можно получать в таком наноконпозите (на основе опаловой матрицы с нелинейным наполнителем) вынужденное рассеяние, во много раз более эффективное, чем в сплошной среде, что открывает перспективы использования опаловых матриц и разнообразных наноматериалов на их основе [1–3]. Следует специально подчеркнуть, что отрицательные значения эффективных акустических характеристик метаматериалов не только дисперсионные, но и динамические по своей природе [1]. Однако сами динамические коле-

бательные системы и режимы более устойчивы, чем статические, а нестационарные колебания за промежутки, превышающие период колебаний, при определенных условиях приближаются к стационарным [10].

Среди необычных свойств акустических метаматериалов следует отметить их способность фокусировать акустические волны, селективность частот, определяемых их внутренним строением, и наличие новых типов упругих колебаний, в частности, определяемых дисперсией (в наноразмерном масштабе) плотности или упругих характеристик. К этому следует добавить, что при определенных условиях в подобных системах имеет место необычно большое взаимодействие между фононными и фотонными подсистемами, а также образование поверхностных плазмонов в неоптической области частот при такого рода взаимодействиях.

*Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку (гранты: № 07-02-00873, 08-02-13500-офи\_ц, 09-02-13531-офи\_ц).*

#### Список литературы

1. Lee Fok, Muralidhar Ambati, and Xiang Zhang. Acoustic Metamaterials // MRS Bulletin. 2008. V. 33. 931.
2. **Наноматериалы**. III. Фотонные кристаллы и наноконпозиты на основе опаловых матриц / Ред. М. И. Самойлович. М.: ЦНИТИ "Техномаш", 2007. 303 с.
3. Кудрявцева А. Д., Самойлович М. И., Чернега Н. В. Оптико-акустические эффекты в фотонных кристаллах (опаловые матрицы как метаматериал) // Высокие технологии в промышленности России. Матер. XV Междунар. научно-техн. конф. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2009. С. 91–101.
4. Чернега Н. В., Самойлович М. И., Кудрявцева А. Д., Белянин А. Ф., Пашенко П. В., Дзбановский Н. Н. Морфологически зависимый акустический резонанс в тонких пленках: лазерная генерация акустических колебаний // Высокие технологии в промышленности России. Матер. XV Междунар. научно-техн. конф. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2009. С. 376–382.
5. Богомолов В. Н., Парфеньева Л. С., Смирнов И. А., Мисиорек Ч., Ежовский А. Прохождение фононов через фотонные кристаллы — среды с пространственной модуляцией акустических свойств // ФТГ. 2002. Т. 44. Вып. 1. С. 170–175.
6. Горелик В. С., Кудрявцева А. Д., Тареева М. В., Чернега Н. В. Спектральные характеристики излучения кристаллов искусственного опала при эффекте фотонного пламени // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 84. Вып. 9. С. 575–578.
7. Tcherniega N. V., Kudryavtseva A. D. Photonic flame effect // Journal of Russian Laser Research. 2006. V. 27. № 5. P. 400–409.
8. Кудрявцева А. Д., Самойлович М. И., Чернега Н. В. Фотонные кристаллы — новые материалы для нелинейной оптики и фотоники // Высокие технологии в промышленности России. Матер. XIV Междунар. научно-техн. конф. М.: ЦНИТИ "Техномаш". 2008. С. 44–49.
9. Pezeri T., Ruello P., Gougon S. Generation and detection of plane coherent shear picosecond acoustic pulse by lasers: experiment and theory // Physical Rev. 2007. V. 75. 174307 — 1–9.
10. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: ГИФМЛ, 1958. 408 с.
11. Tamura A., Higeta K., Ichinokawa T. Lattice vibrations and specific heat of a small particle // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. V. 15. P. 4975–4991.
12. Kuok M. H., Lim H. S., Ng S. C., Liu N. N. and Wang Z. K. Brillouine Study of the Quantization of Acoustic Modes in

Nanospheres // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. P. 255502-1—255502-4.

13. **Tretyakov S., Nefedov I., Sihvola A., Maslovsky S., Simovsky C.** Waves and energy in hiral nihility, Journal of Electromagnetic Waves and Applications // J. Electromagn. Waves. Appl. 2003. Vol. 17. P. 695—702.

14. **Shuang Zhang, Yong-Shik Park, Jensen Li, Xinchao Lu, Weili Zhang, Xiang Zhang.** Negative refractive index in chiral metamaterials // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. 023901.

15. **Plum E., Zhou J., Dong J., Fedotov V., Koschny T., Soukoulis C., Zheludev N.** Metamaterial with negative index due to chirality // Phys. Rev. 2009. V 79. 035407.

16. **Агранович В. М., Горштейн Ю. Н.** Пространственная дисперсия и отрицательное преломление волн // УФН. 2006. Т. 176. № 10. С. 1051—1068.

17. **Барышев А. В., Каплянский А. А., Кособукин В. А., Лимонов М. Ф., Самусев К. Б., Усвят Д. Е.** Брэгговская дифракция света в искусственных опалах // ФТТ. 2003. Т. 45. Вып. 3. С. 434—445.

18. **Shalaev V. M. and Kawata S.** (Editors). Nanophotonics with Surface Plasmons // Advances in Nano-Optics and Nano-Photonics. Elsevier, 2007.

19. **Shalaev V. M.** Nonlinear Optics of Random Media: Fractal Composites and Metal-Dielectric Films // Springer Tracts in Modern Physics. Springer, Berlin Heidelberg 2000. Vol. 158.

20. **Shalaev V. M.** (Editor). Optical Properties of Random Nanostructures, Springer Verlag // Topics in Applied Physics. Berlin Heidelberg 2002. Vol. 82.

21. **Sarychev A. K., Shalaev V. M.** Electrodynamics of Metamaterials. Word Scientific. 2007. 240 p.

22. **Белянин А. Ф., Самойлович М. И.** Наноматериалы. IV. Тонкие пленки как наноструктурированные системы. М.: Техномаш, 2008. 254 с.

23. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория упругости. М.: Наука, 1964. 267 с.

24. **Ландау Л. Д., Лифшиц И. М.** Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1964. 567 с.

25. **Солитоны** / Под ред. С. П. Новикова. Новокузнецк: НФМИ, 1999. 406 с.

26. **Дубровин Б. Л., Новиков С. П., Фоменко А. Т.** Современная геометрия. М.: Изд. Эдиториал УРСС, 2001. Т. 2. 268 с.

27. **Fokin V., Ambati M., Sun C., Zhang X.** Method for retrieving effective properties of locally resonant acoustic metamaterials // Physical Review B. 2007. Vol. 76. 144302.

28. **Mandelbrot B.** The fractal geometry of nature. New York and Oxford UK: W. Freeman & Co. 1982. 240 p.

УДК 543.67

**И. А. Богинская**<sup>1</sup>, аспирант, инж.,  
**А. В. Гусев**<sup>1</sup>, аспирант, мл. науч. сотр.,  
**К. А. Маилян**<sup>1</sup>, канд. хим. наук, ст. науч. сотр.,  
**А. С. Мешков**<sup>1</sup>, инж.-иссл.,  
**А. В. Пибалк**<sup>2</sup>, д-р хим. наук, зав. лаб.,  
**И. А. Рыжиков**<sup>1</sup>, канд. техн. наук, зав. лаб.,  
**С. Н. Чвалун**, д-р хим. наук, зав. отделом,  
e-mail: 4839356@mail.ru

<sup>1</sup> Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,

<sup>2</sup> Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л. Я. Карпова

## ПОЛИМЕРНЫЕ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-П-КСИЛИЛЕНА ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МИКРО- И ОПТОЭЛЕКТРОНИКЕ

*Разработана технология получения полимерных покрытий на основе поли-п-ксилилена и полихлор-п-ксилилена на подложках со сложным рельефом поверхности. Покрытия толщиной в диапазоне от 50 нм до 50 мкм формируются на подложках из газовой фазы в условиях вакуума. Показано, что эти покрытия являются влагостойкими, оптически прозрачными материалами, химически инертными к большинству органических растворителей, растворам кислот и щелочей, имеют высокую механическую прочность и высокие диэлектрические характеристики. Полученные температурные зависимости электрического сопротивления в тонких пленках поли-п-ксилилена имеют сильно выраженный нелинейный характер, что делает их перспективным материалом для создания термодатчиков. Пленки полихлор-п-ксилилена могут применяться в качестве эффективных защитных влагостойких покрытий для элементов электронных и оптических систем.*

*Ключевые слова: полимерные пленки, поли-п-ксилилен, защитные покрытия, температурная зависимость, термодатчик*

### Введение

В современном приборостроении и микросистемной технике одной из актуальных проблем прикладного характера является создание универсального, долговечного, легкого и сравнительно недорогого защитного покрытия. В настоящее время остро стоит проблема получения полимерного материала, который одновременно имел бы высокие физико-механические, диэлектрические и эксплуатационные свойства, химическую стойкость и мог быть использован в качестве оптического материала.

Перспективным тонкопленочным материалом, в котором в определенной степени сочетаются эти свойства, является поли-п-ксилилен (далее ППК) и его производные. Впервые поли-п-ксилилен был получен в конце 40-х годов XX века при изучении стойкости процесса пиролиза п-ксилола в вакууме [1, 2]. Позднее Вильям Горхэм разработал процесс получения поли-п-ксилилена пиролизом в вакууме циклически напряженных молекул [2.2] парациклофана [3]. Полимер получали в виде тонких пленок, осажденных из газовой фазы на твердых подложках.

В данной работе нами показана возможность применения этой технологии в приборостроении.

### 1. Технология получения ППК

Поли-п-ксилиленовые покрытия наносят на поверхности из газовой фазы при низком давлении (1...10 Па) и в широком диапазоне температур. При температуре поверхности ниже 30 °С формирование покрытия происходит с заметной скоростью, что

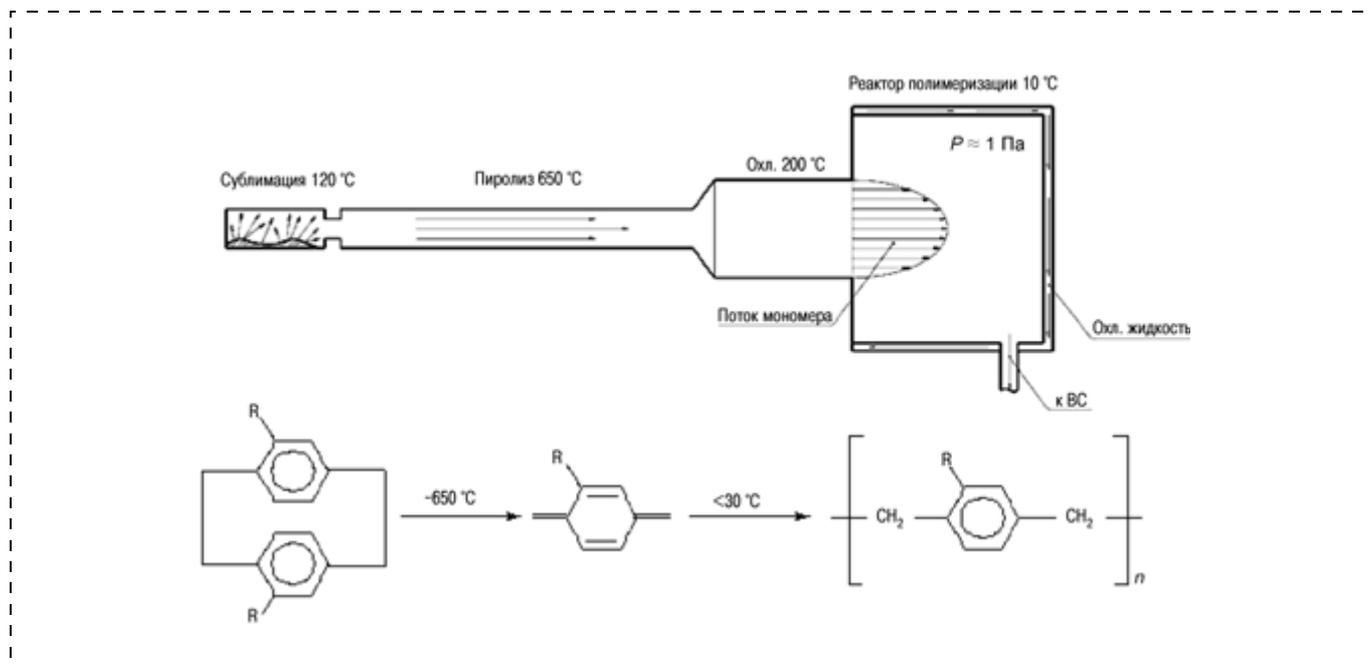


Рис. 1. Схема установки напыления ППК покрытий:  $R = \text{H, Cl, Br, -CN, C}_2\text{H}_5, \text{COCH}_3$  и др.

имеет практическое значение. В основе метода синтеза ППК покрытий лежит способность определенных органических молекул селективно распадаться при высоких температурах (600...700 °C) в вакууме с образованием высокореакционноспособных соединений — интермедиатов. Последующая конденсация интермедиатов на охлажденных поверхностях сопровождается их полимеризацией и формированием полимерного покрытия. В отечественной научной литературе этот метод синтеза получил назва-

ние газофазной полимеризации на поверхности (ГПП), в англоязычной литературе используется термин *vapor deposition polymerization (VDP)*. На рис. 1 приведена схема синтеза ППК покрытий методом газофазной полимеризации на поверхности.

Вакуумная установка для получения ППК покрытий включает в себя несколько последовательно соединенных температурных зон. В зоне сублимации происходит возгонка в вакууме исходного мономера [2.2] парациклофана. В зоне пиролиза моле-

Таблица 1

Физико-механические свойства поли-*p*-ксилилена и его хлорзамещенных производных

Показатель	Поли- <i>p</i> -ксилилен	Полихлор- <i>p</i> -ксилилен	Полидихлор- <i>p</i> -ксилилен
Механические свойства			
Предел прочности при растяжении, МПа	45...60	70	75
Модуль Юнга при 20 °C, МПа	2400	3200	2800
Относительное удлинение при разрыве, %	10...200		
Плотность, г/см <sup>3</sup>	1,1	1,20	1,41
Термические свойства			
Температура длительной (10 лет) эксплуатации, °C • в инертной среде и склейке,	62	80	100
Допустимая температура кратковременного нагрева на воздухе, °C • в инертной среде и склейке, °C	220		
Хладостойкость, °C	270		
	320		
	-185		
Газопроницаемость при 23 °C			
По азоту (кислороду), моль/Па·с·м	15,4 (78,4)	2,0 (14,4)	9,0 (64,0)
Влагопроницаемость, 10 <sup>-12</sup> г/Па·с·м	1,2	0,4	0,2
Влагопоглощение, %	Менее 0,1		
Электрические свойства (23 °C)			
Диэлектрическая проницаемость (50 Гц—1 МГц)	2,65	3,1	2,8
Удельное объемное сопротивление, Ом·см	1,4·10 <sup>17</sup>	9·10 <sup>16</sup>	2·10 <sup>16</sup>
Удельное поверхностное сопротивление, Ом	1·10 <sup>13</sup>	1·10 <sup>14</sup>	5·10 <sup>16</sup>
Электрическая прочность (толщина 25 мкм), МВ/м	240	190	180

кула мономера термолитзуется с распадом на две реакционноспособные молекулы п-ксилилена (интермедиат). В реакторе полимеризации (камера осаждения) молекулы п-ксилилена адсорбируются на подложках с последующей их полимеризацией и образованием полимерного пленочного покрытия ППК.

Преимущество данного метода нанесения покрытий по сравнению с традиционными методами нанесения полимерных покрытий (макание, полив из раствора, разбрызгивание из пульверизатора и др.) заключается в том, что полимерная пленка одновременно образуется на всей поверхности образца, включая и труднодоступные места (поры, узкие зазоры, щели, капилляры и др.). Таким образом, в результате на поверхности образца формируется так называемое конформное покрытие (*conformal coating*), полностью повторяющее рельеф поверхности образца. Процесс осуществляется в вакууме без применения каких-либо растворителей и катализаторов отверждения.

Полимерные покрытия на основе ППК и процесс их формирования характеризуются:

- высокой сплошностью и однородностью покрытия;
- высокими барьерными (защитными) свойствами;
- инертностью к большинству органических растворителей и растворам кислот, щелочей и солей;
- формирование покрытия не требует высоких температур, что исключает перегрев защищаемого изделия;
- исходный мономер (циклический димер) практически количественно осаждается в виде полимерного покрытия;
- экологической чистотой, высокой пожарной безопасностью, низкой материалоемкостью;
- в покрытии отсутствуют внутренние напряжения;
- метод позволяет одновременно наносить покрытие на большое число мелких объектов, произвольно размещенных в объеме реактора полимеризации.

Различные свойства ППК покрытий и области их практического применения подробно рассмотрены в обзорах [4–7]. Некоторые свойства поли-п-ксилилена и его хлорзамещенных производных приведены в табл. 1.

## 2. Электрофизические свойства пленок поли-п-ксилилена

Для измерения температурной зависимости электрического сопротивления пленок ППК нами были приготовлены образцы ППК на специальных подложках. Подложки представляли собой стеклянную пластинку, на которую с помощью вакуумного напыления наносили медную пленку, затем с помощью фотолитографии формировали на ней встречно-штыревой преобразователь, к контактным площадкам которого припаивали два электрода. Фотография фрагмента такой подложки, сделанная под микроскопом (увеличение в 400 раз), приведена на рис. 2. Ширина медных электродов — 50 мкм, расстояние между ними — 100 мкм.



Рис. 2. Микрофотография фрагмента подложки для измерения электрофизических характеристик пленок

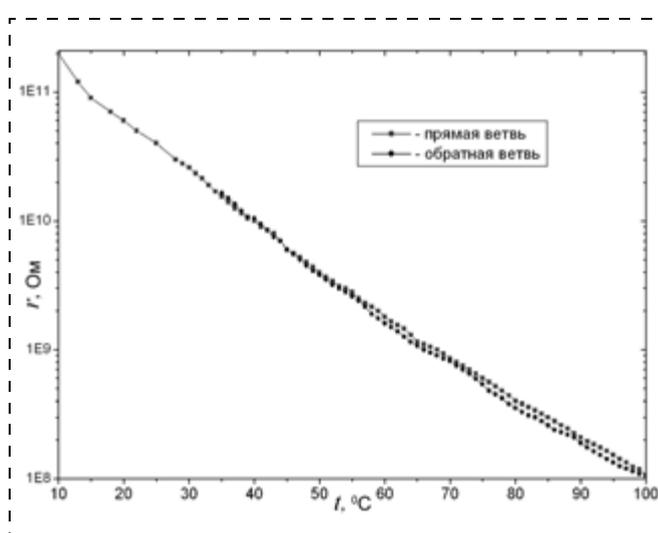


Рис. 3. Температурная зависимость электросопротивления пленки ППК

На подложку напыляли пленку ППК толщиной ~0,5 мкм и измеряли зависимость электрического сопротивления пленки ППК от температуры. Полученная температурная зависимость приведена на рис. 3.

Как видно, изменение электрического сопротивления пленки ППК от температуры описывается нелинейной (экспоненциальной) зависимостью. Необходимо подчеркнуть, что сопротивление полимера в температурном диапазоне измерений (25...100 °С) меняется на два с половиной порядка. Таким образом, на основе ППК может быть изготовлен термодатчик (термочувствительный элемент). Абсолютное значение электрического сопротивления такого прибора можно уменьшить, меняя геометрию электродов и расстояние между ними.

Известно, что точное измерение температуры в диапазоне 0...100 °С является технической пробле-

мой, в частности, для биологических и медицинских исследований. При этом определяющими требованиями являются биосовместимость используемых материалов и максимально малые размеры. Существующие термодатчики имеют либо низкую точность (терморезисторы), либо высокую стоимость (полупроводниковые матрицы, резисторы на основе драгметаллов). На основе ППК можно создать высокоточный (с погрешностью  $0,1^\circ\text{C}$ ) цифровой датчик для диапазона температур  $25\text{...}100^\circ\text{C}$ . Биосовместимость подтверждена экспериментальными исследованиями [8]. Высокая однородность разработанного материала в сочетании с устойчивой температурной зависимостью и высоким электросопротивлением позволяет создать пленочные термодатчики с характерными размерами чувствительной области  $1 \times 1$  мм.

### 3. Оптические свойства поли-п-ксилиленовых покрытий

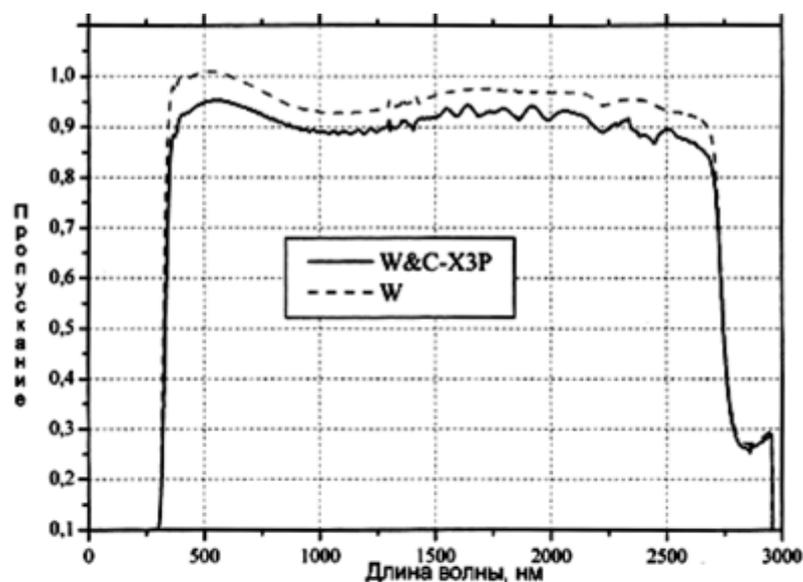
Защитные покрытия для светопропускающих элементов различных конструкций и оптических систем должны иметь высокий коэффициент пропускания в видимой и ближней ИК-областях спектра, а также низкое значение коэффициента диффузного рассеяния. Варьируя параметры процесса ГПП, можно получать покрытия с заданными оптическими характеристиками.

Исследовали спектры отражения и пропускания пленок полихлор-п-ксилилена (ППК-С1), полученных при различных параметрах его синтеза. Спектр пропускания пленки ППК-С1 для видимой и ближней ИК-области спектра (от  $7000$  до  $299\text{ см}^{-1}$ ) приведен на рис. 4.

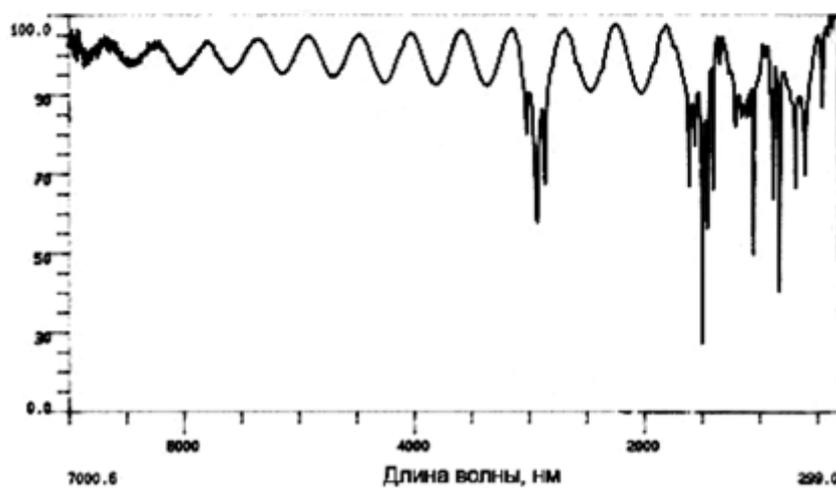
Из спектра следует, что в видимой и ближней ИК-областях коэффициент пропускания для синтезированной пленки полихлор-п-ксилилена равен  $95\%$ , а коэффициент диффузионного рассеяния —  $1,6$  (в видимой области).

Достигнутые нами оптические свойства пленок полихлор-п-ксилилена делают возможным их применение в качестве защитного покрытия для элементов оптических систем. Особенно это актуально для различных изделий полимерной оптики, практическое применение которых возрастает в последнее время.

Традиционно применяемые оптические фильтры и защитные пленки на основе неорганических соединений не обладают достаточной адгезией к поли-



а)



б)

Рис. 4. Спектр пропускания пленки ППК-С1 в видимой области (а); ИК-спектр пропускания пленки ППК (б)

мерным материалам, что в значительной степени уменьшает их влагозащитные свойства и износостойкость.

Другой проблемой для неорганических покрытий, применяемых для защиты полимерной оптики, является значительная разница в коэффициентах термического расширения. Даже незначительное изменение температуры может приводить к растрескиванию и отслоению защитной неорганической пленки. Разработанное нами защитное покрытие на основе полихлор-п-ксилилена лишено этих недостатков.

Для отработки технологии получения защитных полихлор-п-ксилиленовых покрытий объектов полимерной оптики нами были приготовлены специальные образцы, которые представляли собой многослойную конструкцию: на пластинки органического стекла марки "ИСО-120" методом вакуумного напыления наносили тонкую (полупрозрачную)

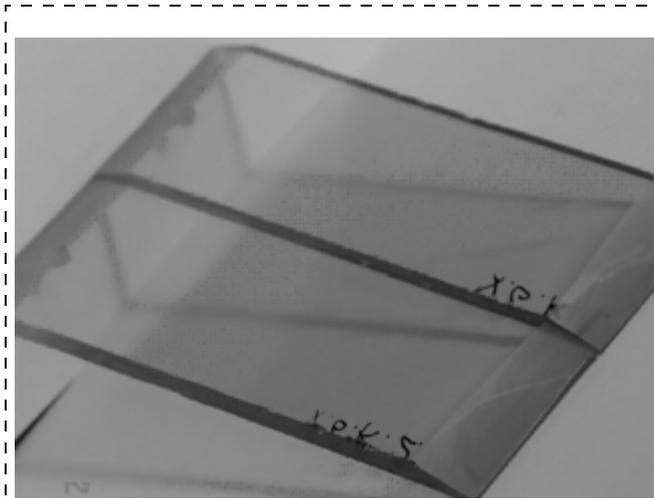


Рис. 5. Фотография образцов покрытия

пленку золота, а поверх нее методом газофазной полимеризации на поверхности наносили пленку полихлор-п-ксилилена толщиной 20...25 мкм (рис. 5).

Образцы подвергали климатическим испытаниям по методике ИТПЭ РАН. Методика включала в себя термоциклирование, ускоренные климатические испытания и длительные климатические испытания в естественных условиях. Ускоренные испытания проводили на установке искусственной светопогоды XENOTEST ALPHA производства фирмы ATLAS. Установка позволяла воссоздавать различные климатические условия: имитировать солнечное излуче-

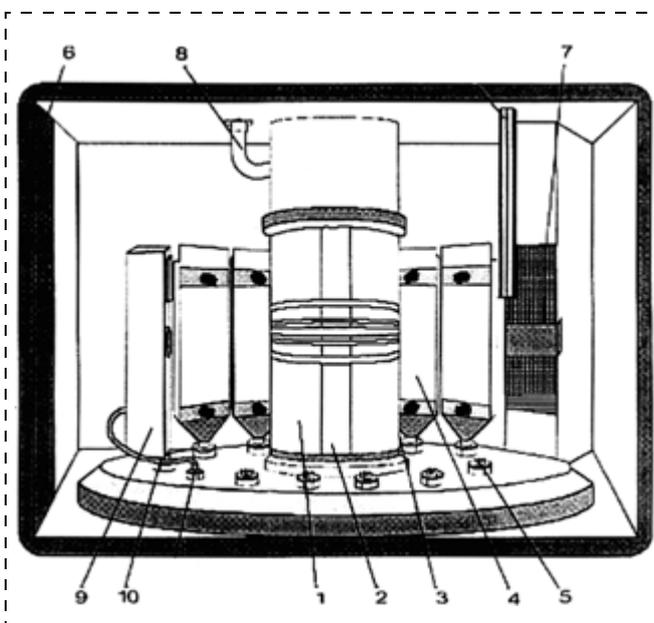


Рис. 6. Схема испытательной камеры установки светопогоды XENOTEST ALPHA:

1 — фонарь фильтра; 2 — держатель образца; 3 — ксеноновая лампа; 4 — испытуемые образцы; 5 — крепеж держателя образца; 6 — рукав отвода воздуха; 7 — соединительная розетка; 8 — датчик температуры и влажности; 9 — рукав подачи воздуха; 10 — адаптер

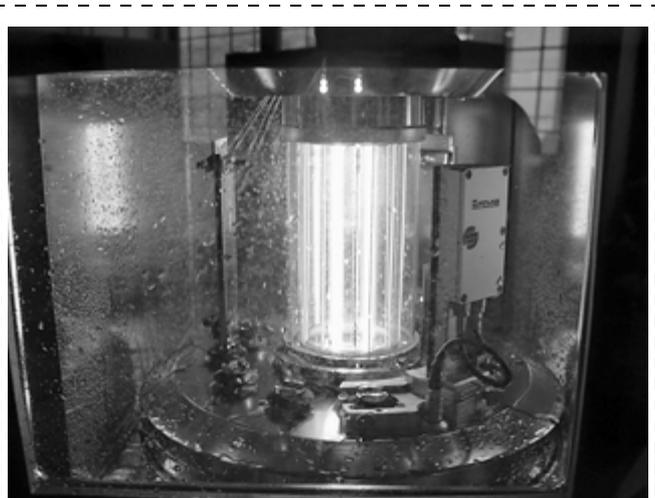


Рис. 7. Фотография испытательной камеры установки светопогоды XENOTEST ALPHA

Таблица 2  
Программа ускоренных климатических испытаний на установке искусственной светопогоды XENOTEST ALPHA

Параметры программы испытаний	Этап 1	Этап 2	Этап 3	Этап 4	Этап 5
Функция дождя	Выкл.	Вкл.	Выкл.	Вкл.	Выкл.
Поверхностная плотность потока излучения, Вт/м <sup>2</sup>	110	110	110	110	0
Относительная влажность, %	95	50	95	50	95
Температура воздуха в испытательной камере, °С	35	35	35	35	20
Время этапа, мин	650	10	650	10	120

ние, дождь, выпадение росы. В качестве источника излучения применяли ксеноновую лампу в сочетании с различными оптическими фильтрами. В результате получали несколько вариантов энергетических спектров излучения. Схема и фотография испытательной камеры установки приведены на рис. 6, 7.

Проводили непрерывно девять циклов климатических испытаний, продолжительность каждого цикла равнялась 24 ч. В течение каждого цикла испытания проводили в пять этапов по программе, приведенной в табл. 2.

В результате проведенных испытаний было установлено, что оптические характеристики полихлор-п-ксилиленового покрытия не изменились, видимых дефектов обнаружено не было, растрескивание, вздутие или отслаивание покрытия не произошло.

## Выводы

1. Разработана технология получения универсального полимерного пленочного материала с уникальными оптическими и электрофизическими свойствами.

2. Температурная зависимость сопротивления пленок полихлор-п-ксилилена в диапазоне температур 0...100 °С имеет сильно выраженный нелинейный характер и может быть использована для создания тонкопленочных, оптически прозрачных, биосовместимых микродатчиков температуры.

3. Климатические испытания показали, что пленки полихлор-п-ксилилена могут применяться в качестве защитных влагостойких покрытий для элементов электронных и оптических систем.

#### Список литературы

1. **Szwarc M.** // Disc. Faraday Soc. 1947. Vol. 2. P. 46—49.

2. **Park S.-Y., Blackwell J., Chvalun S. N.** et al. // Macromolecules. 1999. V. 32, № 23. P. 7845.

3. **Gorham W. F.** // J. Polymer Sci. A-1. 1966. V. 4, № 12. P. 3027.

4. **Bieng K. W.** // J. Vac. Sci. Technol. 1981. V. 18, № 3. P. 1231.

5. **Григорьев Е. И., Завьялов С. А., Чвалун С. Н.** Российские нанотехнологии. 2006. Т. 1, № 1—2. С. 58.

6. **Кардаш И. Е., Пебалк А. В., Праведников А. Н.** // Итоги науки и техники. Сер. Химия и технология высокомолек. соед. М.: ВИНТИ АН СССР, 1984. Т. 19. С. 66.

7. **Beach W. F.** // Macromolecules. 1978. V. 11, N 1. P. 72.

8. **Маилян К. А.** Структура и свойства поли-п-ксилилена и их зависимость от параметров пиролитической полимеризации: дис. ... канд. хим. наук. М., 1995.

УДК 541.64:536.6

**Б. Ж. Джангуразов**, канд. эк. наук, ст. науч. сотр.,  
**Г. В. Козлов**, ст. науч. сотр.,  
e-mail: i\_dolbin@mail.ru,

**А. К. Микитаев**, д-р хим. наук, зав. каф.,  
Кабардино-Балкарский государственный  
университет, г. Нальчик, Россия

## ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ "ЭФФЕКТИВНОЙ ЧАСТИЦЫ" ОРГАНОГЛИНЫ В ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ

*Предложена простая и физически наглядная модель "эффективной частицы" в нанокompозитах полимер/органоглина. Хотя указанная модель дает такие же количественные характеристики, как и разработанные ранее трактовки, но она учитывает уровень межфазной адгезии полимер—органоглина и не использует устаревших микромеханических моделей.*

**Ключевые слова:** нанокompозит, органоглина, полиэтилен, "эффективная частица", межфазная адгезия

Оценка одного из основных параметров — степени наполнения — очень различается для нано- и микрокомпозитов, т. е. композитов с наполнителем микрометровых размеров [1]. В случае нанокompозитов вообще и особенно нанокompозитов полимер/органоглина использование в расчетах номинальной объемной степени наполнения  $\varphi_n$ , как правило, не дает корректных результатов [2, 3]. Поэтому было введено понятие "эффективной частицы" органоглины, включающей как собственно силикат, так и прилегающие к поверхности его пластин слою полимера. Авторы [1] предложили мультимасштабную микромеханическую модель структуры нанокompозитов полимер/органоглина, основанную на представлении "эффективной частицы" органоглины. Несмотря на очевидную необходимость такого представления модель [1] имеет ряд существенных

и часто принципиальных недостатков. К ним следует отнести высокую сложность модели, наличие большого числа параметров, необходимых для ее применения (причем часть этих параметров экспериментально определить весьма затруднительно, а иногда и невозможно), использование исчерпавших свои возможности микромеханических моделей и т. д. К тому же указанная модель не учитывает такие ключевые для полимерных нанокompозитов факторы, как реальный уровень межфазной адгезии нанонаполнитель—полимерная матрица и гибкость цепи последней [2, 3]. Исходя из сказанного выше, в настоящей работе будет предложена гораздо более простая и физически наглядная трактовка "эффективной частицы" органоглины и, соответственно, эффективной степени наполнения и их связь со свойствами нанокompозитов полимер/органоглина.

### Эксперимент

В качестве матричного полимера использовали промышленный полиэтилен высокой плотности марки В-У456 со средневесовой молекулярной массой  $M_w = 3 \cdot 10^5$  производства фирмы ШГХК, Узбекистан (зарубежный аналог отечественного ПЭВП-276-73).

Нанонаполнитель (природную глину) модифицировали согласно патенту RU2007128379. Содержание органоглины для всех исследуемых нанокompозитов составляло 5 масс. %.

Образцы для испытаний были получены методом литья под давлением на машине Test Sample Injection Molding Apparates RR/TS MP фирмы Ray-Ran при температуре материального цилиндра 473 К, температуре формы 333 К и давлении запыриания 8 МПа.

Механические свойства нанокompозитов в испытаниях на одноосное растяжение определяли на универсальной испытательной машине Gotech Testing Machines СТ-TCS2000. Были использованы

образцы в форме двухсторонней лопатки с размерами согласно ГОСТ 11262—80. Испытания выполнены при температуре 293 К и скорости деформации  $\sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ .

## Результаты и обсуждение

В работе [4] было предложено следующее перколяционное соотношение, которое дает зависимость степени усиления нанокompозитов  $E_H/E_M$  от объемного содержания наполнителя  $\varphi_H$ :

$$\frac{E_H}{E_M} = 1 + 11(\varphi_H)^{1,7}, \quad (1)$$

где  $E_H$  и  $E_M$  — модули упругости нанокompозита и матричного полимера соответственно.

Величина  $\varphi_H$  была оценена следующим образом. Сначала была рассчитана плотность  $\rho_H$  пластины органоглины согласно уравнению [4]

$$\rho_H = \frac{6}{S_H D_q}, \quad (2)$$

где  $S_H$  — удельная поверхность органоглины;  $D_q$  — размер ее частицы.

Величина  $S_H$  для органоглины равна  $\sim 74 \cdot 10^3 \text{ м}^2/\text{кг}$  [5], а в качестве  $D_q$  принят среднеарифметический размер пластины силиката в предположении, что она имеет длину 100 нм, ширину 35 нм и толщину 1 нм [2]. В этом случае расчет согласно уравнению (2) дает  $\rho_H = 1790 \text{ кг/м}^3$ . Далее можно рассчитать величину  $\varphi_H$  согласно известному уравнению [4]

$$\varphi_H = \frac{W_H}{\rho_H}, \quad (3)$$

где  $W_H$  — массовое содержание нанонаполнителя (органоглины).

Поскольку для всех исследуемых нанокompозитов  $W_H = 5 \text{ масс. \%}$ , то величина  $\varphi_H$  для них постоянна и равна 0,0279.

Расчет согласно уравнению (1) дает величины  $\varphi_H$  (далее обозначаемые как эффективная объемная степень наполнения  $\varphi_H^{\text{эф}}$ ) в интервале 0,083...0,177, что гораздо выше номинальной степени наполнения  $\varphi_H$  (примерно в 3,0...6,3 раза). Авторы [2, 3] объяснили это расхождение тем, что армирующим элементом в нанокompозитах является не только собственно нанонаполнитель, но и формируемые им межфазные области с относительной долей  $\varphi_{\text{мф}}$ , т. е.

$$\varphi_H^{\text{эф}} = \varphi_H + \varphi_{\text{мф}}. \quad (4)$$

Основанием для рассмотрения межфазных областей в качестве армирующего элемента структуры нанокompозитов служит тот факт, что при контакте с поверхностью нанонаполнителя молекулярная подвижность в прилегающем к ней слое полимера подавляется, что и является структурным отличием межфазного слоя от объемной полимерной матрицы [3]. Кроме того, для кристаллизирующихся полимеров, к которым относится и ПЭВП, возможна эпитаксиальная кристаллизация полимерных цепей на поверхности пластин органоглины [6]. Поэтому жесткость межфазного слоя выше, чем объемной полимерной матрицы. Таким образом, настоящая модель предполагает, что "эффективная частица" органоглины представляет собой набор из нескольких пластин силиката, соединенных между собой полимерными прослойками (галереями), в которых молекулярная подвижность заморожена в силу контакта с поверхностью пластин силиката, и поэтому эти прослойки являются межфазными слоями.

По существу такое же определение "эффективной частицы" дано и в работе [1] с тем отличием, что указанные выше прослойки называются "галереями". Относительную долю силикатных пластин  $\chi$  в такой "эффективной частице" можно рассчитать по формуле [1]

$$\chi = \frac{0,41 W_H}{\varphi_H^{\text{эф}}}. \quad (5)$$

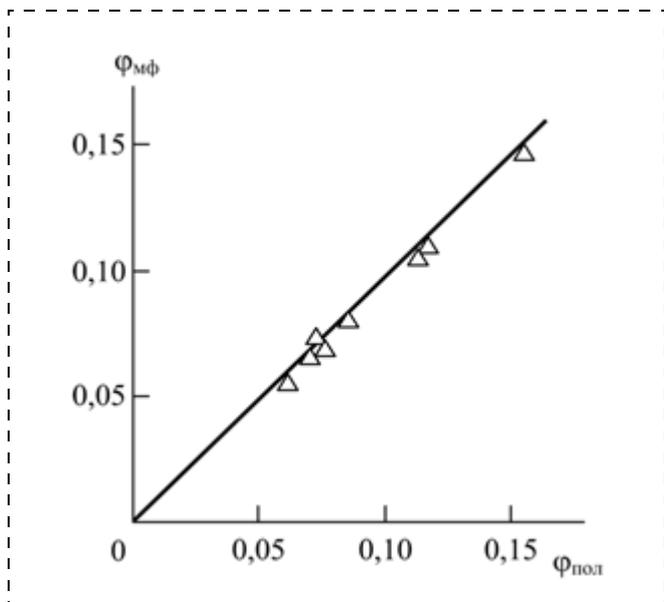
Тогда очевидно, что относительная доля полимерного материала в "галереях"  $\varphi_{\text{пол}}$  определяется формулой

$$\varphi_{\text{пол}} = \varphi_H^{\text{эф}} (1 - \chi) \quad (6)$$

и будет соответствовать по своему физическому смыслу относительной доле межфазных областей в настоящей модели.

На рисунке приведено соотношение полученных указанными выше методами величин  $\varphi_{\text{мф}}$  и  $\varphi_{\text{пол}}$  для восьми исследуемых нанокompозитов ПЭВП/органоглина. Как можно видеть, между указанными структурными параметрами получено соотношение 1 : 1 с погрешностью  $\sim 8 \%$ . Иначе говоря, данные рисунка предполагают условие  $\varphi_{\text{мф}} \approx \varphi_{\text{пол}}$ , что указывает на эквивалентность трактовки "эффективной частицы" органоглины в настоящем сообщении и работе [1].

Тем не менее, упомянутые трактовки имеют и ряд существенных различий. Во-первых, предложенная в настоящей работе модель не учитывает модуля упругости нанонаполнителя, равно как и работа [4]. Это связано с принципиально новой трактовкой механизма усиления композитов [7]: предполагается, что свойства композитов (нанокompозитов) определяются только структурой полимерной матрицы, а роль наполнителя (нанонаполнителя) сводится



Соотношение между относительной долей межфазных областей  $\varphi_{\text{мф}}$  и относительной долей полимера в "эффективной частице"  $\varphi_{\text{пол}}$  согласно модели [1] для нанокompозитов ПЭВП/органоглина

к видоизменению структуры матричного полимера и ее фиксации. В рассматриваемом случае роль органоглины сводится к формированию межфазных областей. Таким образом, предложенная трактовка не использует основные положения микромеханических моделей. Во-вторых, предложенная модель учитывает как степень анизотропии частиц нанонаполнителя (точнее, их форму), так и степень диспергирования органоглины. Для эсфолиированных слоистых силикатов получено следующее соотношение между  $\varphi_{\text{мф}}$  и  $\varphi_{\text{н}}$  [3]:

$$\varphi_{\text{мф}} = 1,910\varphi_{\text{н}}b \quad (7)$$

с учетом толщины силиката 1 нм, а для интеркалированных [3]

$$\varphi_{\text{мф}} = 0,955\varphi_{\text{н}}b. \quad (8)$$

В то же время для дисперсных частиц нанонаполнителя соотношение между  $\varphi_{\text{мф}}$  и  $\varphi_{\text{н}}$  имеет вид [3]

$$\varphi_{\text{мф}} = 0,102\varphi_{\text{н}}b. \quad (9)$$

В третьих, в уравнениях (7)–(9) параметр  $b$  характеризует реальный уровень межфазной адгезии,

тогда как в работе [1] принято условие совершенной адгезии ( $b = 1$ ), хотя на практике величина  $b$  может варьироваться в пределах 0...15 и даже быть отрицательной [3]. В четвертых, параметры  $\varphi_{\text{мф}}$  и  $b$  могут быть оценены независимыми экспериментальными методиками [2, 3] в отличие от ряда характеристик, используемых в модели [1] (например, модуля упругости полимера в "галлереях").

## Выводы

Таким образом, в настоящей работе предложена количественная модель "эффективной частицы" органоглины в полимерных нанокompозитах, физически эквивалентная предложенным ранее аналогичным моделям. Однако между двумя указанными трактовками существует ряд принципиальных различий. Так, предложенная в настоящей работе трактовка "эффективной частицы" органоглины является гораздо более простой и физически наглядной, не использует представлений микромеханических моделей, учитывает реальный уровень межфазной адгезии и позволяет определение входящих в нее параметров независимыми экспериментальными методами.

## Список литературы

1. Маламатов А. Х., Козлов Г. В., Микитаев М. А. Механизмы упрочнения полимерных нанокompозитов. М.: Изд-во РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2006. 240 с.
2. Mikitaev A. K., Kozlov G. V., Zaikov G. E. Polymer Nanocomposites: Variety of Structural Forms and Applications. New York: Nova Science Publishers, Inc., 2008. 318 p.
3. Sheng N., Boyce M. C., Parks P. M., Rutledge G. C., Abes J. I., Cohen R. E. Multiscale micromechanical modeling of polymer/clay nanocomposites and the effective clay particle // Polymer. 2004. V. 45. N 2. P. 487–506.
4. Бобрышев А. Н., Козомазов В. Н., Бабин Л. О., Соломатов В. И. Синергетика композитных материалов. Липецк: НПО ОРИУС, 1994. 154 с.
5. Pernyeszi T., Dekany I. Surface fractal and structural properties of layered clay minerals monitored by small-angle X-ray scattering and low-temperature nitrogen adsorption experiments // Colloid Polymer Sci. 2003. V. 281. N 1. P. 73–78.
6. Антипов Е. М., Баранников А. А., Герасин В. А., Шклярчук Б. Ф., Цамалашвили Л. А., Fisher Н. R., Разумовская И. В. Структура и деформационное поведение нанокompозитов на основе полипропилена и модифицированных глин // Высокомолек. соед. Сер. А. 2003. Т. 45. № 11. С. 1885–1899.
7. Новиков В. У., Козлов Г. В. Фрактальная параметризация структуры наполненных полимеров // Механика композитных материалов. 1999. Т. 35. № 3. С. 269–290.

С. М. Афонин, канд. техн. наук, доц.,  
Московский государственный институт  
электронной техники, тел. (499) 71-06-674

## АБСОЛЮТНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ДЕФОРМАЦИЕЙ ЭЛЕКТРОУПРУГОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ НАНО- И МИКРОПЕРЕМЕЩЕНИЙ

*Определено множество положений равновесия в системе управления деформацией электроупругого преобразователя нано- и микроперемещений. Получены условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией электроупругого преобразователя для детерминированных и случайных воздействий.*

**Ключевые слова:** электроупругий преобразователь, система управления деформацией, условия абсолютной устойчивости, нано- и микроперемещения

### Введение

Применение прецизионного пьезопривода нано- и микроперемещений перспективно в оборудовании нанотехнологии, нанобиологии, микроэлектроники и астрономии. Пьезопреобразователь такого пьезопривода работает на основе обратного пьезоэффекта, перемещение достигается за счет деформации пьезопреобразователя при приложении электрического напряжения. Использование пьезопреобразователя для наноперемещений перспективно в оборудовании нанотехнологии, микроэлектроники и астрономии для прецизионного совмещения, компенсации температурных и гравитационных деформаций, а также атмосферной турбулентности путем коррекции волнового фронта. Пьезопреобразователи имеют диапазон перемещения от нескольких нанометров до десятков микрометров, нагрузочную способность до 1000 Н, мощность на выходном валу до 100 Вт и полюсу пропускания порядка нескольких десятков герц. При использовании системы управления деформацией пьезопреобразователя в сканирующем туннельном микроскопе имеется нанометрический рабочий зазор между пьезопреобразователем и подложкой. В системах адаптивной оптики на пьезопреобразователе действует инерционная или упругоинерционная нагрузка [1–4].

Наряду с преимуществами пьезопреобразователей, такими как высокая точность, большая нагрузочная способность, широкая полоса пропускания, имеется существенный недостаток в виде нелинейной гистерезисной статической характеристики. Наличие гистерезиса усложняет проектирование систем управления деформацией пьезопреобразователя для наноперемещений.

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

### Передаточные функции пьезопреобразователя

Динамические характеристики и передаточные функции пьезопреобразователя рассчитываются на основе совместного решения волнового уравнения, уравнения пьезоэффекта при нулевых начальных и соответствующих граничных условиях.

Линейное уравнение обратного продольного пьезоэффекта [7] при управлении пьезопреобразователя по напряжению имеет вид

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

где  $S_3 = \frac{\partial \xi(x, t)}{\partial x}$  — относительное смещение сечения пьезопреобразователя по оси 3;  $\xi$  — абсолютное смещение сечения пьезопреобразователя;  $d_{33}$  — пьезомодуль при продольном пьезоэффекте;  $E_3(t) = \frac{U(t)}{\delta}$  — напряженность электрического поля по оси 3;  $U(t)$  — напряжение на электродах пластины;  $s_{33}^E$  — упругая податливость по оси 3 при  $E = \text{const}$ ;  $T_3(x, t)$  — механическое напряжение по оси 3;  $\delta$  — толщина пьезопластины.

Например, при закрепленном торце пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте и упругоинерционной нагрузке при  $x = l = n\delta$  имеем уравнение сил, действующих на торце пьезопреобразователя, в следующем виде:

$$T_3 S_0 = -M \partial^2 \xi(x, t) / \partial t^2 - (C_a + C_e) \xi(x, t), \quad (2)$$

где  $M$  — перемещаемая масса;  $C_a, C_e$  — жесткости армирующего элемента и упругой нагрузки;  $S_0$  — площадь поперечного сечения пьезопреобразователя.

Из уравнения обратного продольного пьезоэффекта (1) с учетом действующих сил на торец пьезопреобразователя получаем

$$\left. \frac{d\Xi(x, p)}{dx} \right|_{x=l} = d_{33}E_3(p) - \frac{s_{33}^E M p^2 \Xi(p)}{S_0} - \frac{s_{33}^E (C_a - C_e) \Xi(p)}{S_0}, \quad (3)$$

где  $p$  — оператор Лапласа;  $\Xi(x, p)$  — преобразование Лапласа смещения сечения пьезопреобразователя с координатой  $x$ . Следовательно, с учетом волнового уравнения [3] получаем выражение для пьезопреобразователя, закрепленного одним торцем, при про-

дольном пьезоэффекте и упругоинерционной нагрузке:

$$\frac{\Xi(p)\gamma}{\text{th}(l\gamma)} + \frac{\Xi(p)s_{33}^E M p^2}{S_0} + \frac{\Xi(p)s_{33}^E (C_a + C_e)}{S_0} = d_{33} E_3(p), \quad \gamma = p/c^E + \alpha, \quad (4)$$

где  $c^E$  — скорость звука при  $E = \text{const}$ ;  $\alpha$  — коэффициент затухания.

Из выражения (4) определяем передаточную функцию составного пьезопреобразователя в виде

$$W_{21}(p) = \frac{\Xi(p)}{E_3(p)} = \frac{d_{33}}{s_{33}^E M p^2 / S_0 + \gamma / \text{th}(l\gamma) + s_{33}^E (C_a + C_e) / S_0}. \quad (5)$$

Обозначим  $C_c = S_0 / (s_{33}^E l)$  — жесткость составного пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте, тогда с учетом (5) передаточные функции пьезопреобразователя, закрепленного одним торцем, при продольном пьезоэффекте и упругоинерционной нагрузке принимают вид

$$W_{21}(p) = \frac{\Xi(p)}{E_3(p)} = \frac{d_{33} l}{M p^2 / C_c + l\gamma \text{th}(l\gamma) + (C_a + C_e) / C_c}; \quad (6)$$

$$W_2(p) = \frac{\Xi(p)}{U(p)} = \frac{d_{33} n}{M p^2 / C_c + l\gamma \text{th}(l\gamma) + (C_a + C_e) / C_c}, \quad (7)$$

где  $\Xi(p)$  — преобразование Лапласа перемещения торца составного пьезопреобразователя по оси 3 и  $U(p)$  — преобразование Лапласа напряжения на обкладках составного пьезопреобразователя при нулевых начальных условиях.

Следовательно, получаем выражение для статического перемещения  $\xi(l, \infty)$  армированного составного пьезопреобразователя в установившемся режиме при подаче напряжения  $U(t) = U_m \cdot 1(t)$  при упругоинерционной нагрузке, где  $U_m$  — максимальная величина (амплитуда) напряжения

$$\xi(l, \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \xi(l, t) = \lim_{p \rightarrow 0} p W_2(p) U_m / p, \quad (8)$$

откуда следует

$$\xi(l, \infty) = d_{33} n U_m / [1 + (C_a + C_e) / C_c]. \quad (9)$$

Соответственно передаточная функция  $W_2(p)$  составного пьезопреобразователя на рабочих частотах

при упругоинерционной нагрузке в диапазоне рабочих частот  $0 < \omega < 0,01 c^E / l$  записывается в виде

$$W_2(p) = \Xi(p) / U(p) = \{d_{33} n / [1 + (C_a + C_e) / C_c]\} / (T_t^2 p^2 + 2T_t \xi_t p + 1);$$

$$T_t = \sqrt{M / (C_a + C_e + C_c)},$$

$$\xi_t = \alpha l^2 C_c / [3c^E \sqrt{M(C_a + C_e + C_c)}],$$

где  $T_t$ ,  $\xi_t$  — соответственно постоянная времени и коэффициент затухания колебательного звена для составного пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте и упругоинерционной нагрузке.

### Абсолютная устойчивость системы управления деформацией электроупругого преобразователя при детерминированных воздействиях

Исследование абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезопреобразователя при детерминированных воздействиях проведем на основе критерия Якубовича [6], являющегося развитием критерия абсолютной устойчивости Попова. При рассмотрении системы управления деформацией, например, в сканирующем туннельном микроскопе с рабочим нанометрическим зазором между пьезопреобразователем и подложкой определяем устойчивость системы управления с учетом гистерезиса деформации в зависимости от напряженности электрического поля. При описании деформационного гистерезиса используем общепринятую классическую модель Прейзаха [8–10], следовательно, для системы управления деформацией электроупругого преобразователя (рис. 1) имеем передаточную функцию линейной части системы  $W(p)$  и гистерезисную функцию  $S_3$  или  $S_1$  пьезопреобразователя.

Описание гистерезисной нелинейности пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте (уравнение нелинейного пьезоэффекта) в виде

$$S_3 = F[E_3|_0^t, t, S_3(0), \text{sign } \dot{E}_3] \quad (10)$$

означает, что значение функции  $S_3$  в каждый момент времени  $t$  зависит от поведения напряженности электрического поля  $E_3$  на промежутке  $[0, t]$ , от  $t$ , от начального значения  $S_3(0)$  и знака скорости  $\dot{E}_3$  из-

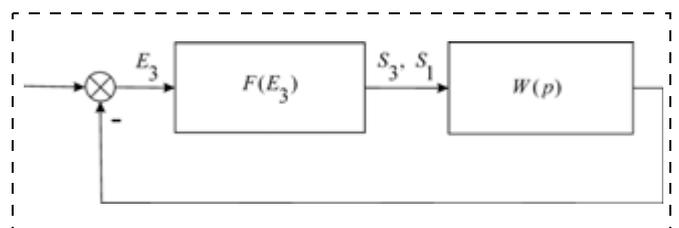


Рис. 1. Обобщенная структурная схема системы управления деформацией электроупругого преобразователя

менения напряженности поля. При этом  $S_3(0)$  должно принадлежать некоторому дополнительно заданному множеству  $L[E_3(0)]$ , зависящему в общем случае от  $E_3(0)$ .

Рассмотрим гистерезисную характеристику пьезопреобразователя. Множеством  $L[E_3(0)]$  является

вертикальный отрезок  $[S_3^0, -S_3^0]$  — пересечение оси ординат с петлей гистерезиса, снятой при максимально допустимой напряженности поля в пьезопреобразователе.

Найдем стационарное множество системы управления деформацией пьезопреобразователя при устойчивой линейной части системы управления. На плоскости  $(E_3, S_3)$  проведем прямую  $A$  с уравнением  $E_3 + W(0)S_3 = 0$ , где  $W(0)$  — значение передаточной функции линейной части системы управления при  $p \rightarrow 0$ . Множество точек  $M$  пересечения этой прямой с гистерезисной характеристикой представляет собой отрезок прямой, выделенный на рис. 2.

Пусть  $E_{30}, S_{30}$  — стационарное решение системы. Следовательно, получаем

$$E_{30} + W(0)S_{30} = 0. \quad (11)$$

Таким образом, стационарным множеством  $M$  системы будет выделенный отрезок прямой  $A$  множеством пар  $(E_{30}, S_{30})$ . Каждой точке пересечения гистерезисной нелинейности с частными циклами и прямой  $A$  соответствует одно положение равновесия с координатами  $(E_{30}, S_{30})$ .

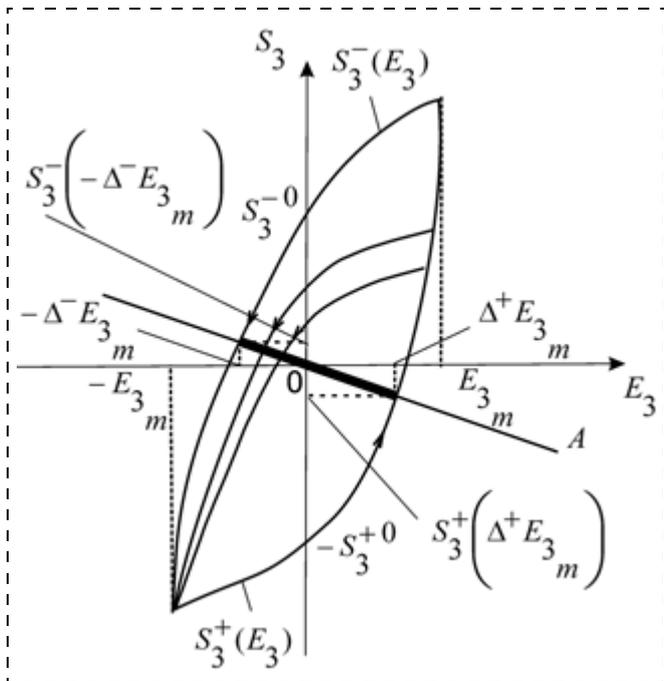


Рис. 2. Асимметричная гистерезисная петлевая характеристика деформации электроупругого преобразователя при пьезоэлектрическом эффекте

Определим проекцию стационарного множества положений равновесия торца пьезопреобразователя на ось  $X$ , где координата  $x = E_3/E_{3m}$  (рис. 2). Подставим в уравнение прямой (11) аналитическое описание симметричной основной гистерезисной петли пьезопреобразователя для продольного пьезоэффекта [4] в виде

$$S_3 = d_{33}E_3 - \gamma_{33}E_{3m} \left(1 - \frac{E_3^2}{E_{3m}^2}\right)^{n_{33}} \text{sign } \dot{E}_3, \quad (12)$$

где  $E_{3m}$  — амплитуда напряженности электрического поля в пьезопреобразователе;  $E_{3m}$  — максимальное относительное перемещение пьезопреобразователя по оси 3;  $\gamma_{33} = S_3^0/E_{3m}$  — остаточный гистерезис при продольном пьезоэффекте по оси 3;  $S_3^0$  — остаточная относительная величина статической гистерезисной характеристики по оси 3 при  $E_3 = 0$ ;  $n_{33}$  — степенной коэффициент, определяемый формой гистерезисной кривой при продольном пьезоэффекте, например, для ЦТС-19 коэффициент  $n_{33} = 1$ .

Найдем ширину зоны покоя  $2\Delta$  для системы управления деформацией пьезопреобразователя при симметричной петле гистерезиса. Подставляя значение  $E_{30} = \Delta E_{3m}$  в выражение (12), для ширины зоны покоя получим

$$\Delta E_{3m} + W(0)S_3^+(\Delta E_{3m}) = 0, \quad (13)$$

где  $\Delta$  — относительное значение напряженности электрического поля от амплитуды напряженности в крайней точке равновесия системы управления деформацией пьезопреобразователя;  $S_3^+(\Delta E_{3m})$  — значение относительной деформации  $S_3$  на восходящей ветви гистерезисной характеристики при  $\dot{E}_3 > 0$  и  $E_{30} = \Delta E_{3m}$ ,  $S_3^-(\Delta E_{3m})$  — значение относительной деформации  $S_3$  на нисходящей ветви гистерезисной характеристики при  $\dot{E}_3 < 0$  и  $E_{30} = -\Delta E_{3m}$  (рис. 2). Соответственно имеем

$$S_3^+(\Delta E_{3m}) = d_{33}\Delta E_{3m} - \gamma_{33}E_{3m} \left(1 - \frac{(\Delta E_{3m})^2}{E_{3m}^2}\right)^{n_{33}}, \quad (14)$$

после сокращения в (14) получаем выражение

$$S_3^+(\Delta E_{3m}) = d_{33}\Delta E_{3m} - \gamma_{33}E_{3m}(1 - \Delta^2). \quad (15)$$

Подставляя (15) в уравнение (13), получаем выражение

$$\Delta E_{3m} + W(0)E_{3m}[d_{33}\Delta - \gamma_{33}(1 - \Delta^2)] = 0. \quad (16)$$

После сокращения в (16) имеем

$$\Delta + W(0) \left[ d_{33} \Delta - \gamma_{33} (1 - \Delta^2) \right] = 0. \quad (17)$$

Из выражения (17) получаем квадратное уравнение для определения ширины зоны покоя  $2\Delta$  пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте в виде

$$\Delta^2 + \frac{(1 + W(0)d_{33})}{W(0)\gamma_{33}} \Delta - 1 = 0. \quad (18)$$

Следовательно, ширина зоны покоя при продольном пьезоэффекте для симметричной петлевой характеристики

$$2\Delta = -\frac{(1 + W(0)d_{33})}{W(0)\gamma_{33}} + \sqrt{\frac{(1 + W(0)d_{33})^2}{W^2(0)\gamma_{33}^2} + 4}. \quad (19)$$

Соответственно для асимметричной петлевой характеристики (рис. 2) при  $\gamma_{33} = \gamma_{33}^+$  для восходящей ветви гистерезиса при  $\text{sign } \dot{E}_3 = +1$  и  $\gamma_{33} = \gamma_{33}^-$  для нисходящей ветви гистерезиса при  $\text{sign } \dot{E}_3 = -1$  (где верхние индексы "+" для восходящей ветви и "-" для нисходящей ветви) отрезок покоя  $\Delta^+ + \Delta^-$  находится и для асимметричной петлевой характеристики при продольном пьезоэффекте по формуле

$$\Delta^+ + \Delta^- = -\frac{(1 + W(0)d_{33})}{2W(0)} \left( \frac{1}{\gamma_{33}^+} + \frac{1}{\gamma_{33}^-} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(1 + W(0)d_{33})^2}{W^2(0)(\gamma_{33}^+)^2} + 4} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(1 + W(0)d_{33})^2}{W^2(0)(\gamma_{33}^-)^2} + 4}. \quad (20)$$

Продольная и поперечная деформации по отношению к направлению электрического поля описываются перевернутыми кривыми, так как практически  $d_{31} = -0,5d_{33}$  или  $S_1 = -0,5S_3$ . То есть продольная деформация направлена в положительном направлении по отношению к положительному направлению координатной оси 3 и поперечная деформация направлена в противоположном направлении по отношению к положительному направлению координатной оси 1 при положительной напряженности электрического поля по оси 3. Вид гистерезисной петли при продольной и поперечной деформации аналогичен для образцов из пьезокерамики ЦТС-19. Существенным является наличие гистерезиса петли при продольном и поперечном пьезоэффекте, знак деформации учитывается выбором соответствующего положительного направления оси координаты в системе управления.

Следовательно, получаем описание симметричной гистерезисной характеристики деформации пьезопреобразователя при поперечном пьезоэффекте в виде

$$S_1 = d_{31} E_3 - \gamma_{31} E_{3m} \left( 1 - \frac{E_3^2}{E_{3m}^2} \right)^{n_{31}} \text{sign } \dot{E}_3, \quad (21)$$

где  $\gamma_{31} = S_1^0 / E_{3m}$  — остаточный гистерезис при поперечном пьезоэффекте по оси 1;  $S_1^0$  — остаточная относительная величина статической гистерезисной характеристики по оси 1 при  $E_3 = 0$ ;  $n_{31}$  — степенной коэффициент, определяемый формой гистерезисной кривой при поперечном пьезоэффекте, например, для ЦТС-19 коэффициент  $n_{31} = 1$ .

Аналогично ширина зоны покоя при поперечном пьезоэффекте при  $n_{31} = 1$  имеет вид

$$2\Delta = -\frac{(1 + W(0)d_{31})}{W(0)\gamma_{31}} + \sqrt{\frac{(1 + W(0)d_{31})^2}{W^2(0)\gamma_{31}^2} + 4}. \quad (22)$$

В общем виде деформационный гистерезис пьезоэлектриков при знакопеременном напряжении на обкладках пьезопреобразователя (при знакопеременной напряженности электрического поля) описывается зависимостями типа петля или бабочка. Вид зависимости петля или бабочка определяется составом пьезокерамики [9–12].

Для пьезокерамики ЦТС-19 (например, пьезопреобразователей ПП-4, ПЗ, П6) зависимость имеет вид петли (рис. 2), при электромеханической деформации преобладает пьезоэлектрический эффект [1, 4].

Для пьезокерамики 8/65/35 PLZT зависимость имеет вид бабочки (рис. 3), при электромеханической деформации преобладает электрострикционный эффект, причем на крыльях бабочки характеристики деформации для однополярного изменения напряженности электрического поля наблюдаем частный цикл гистерезисной петли

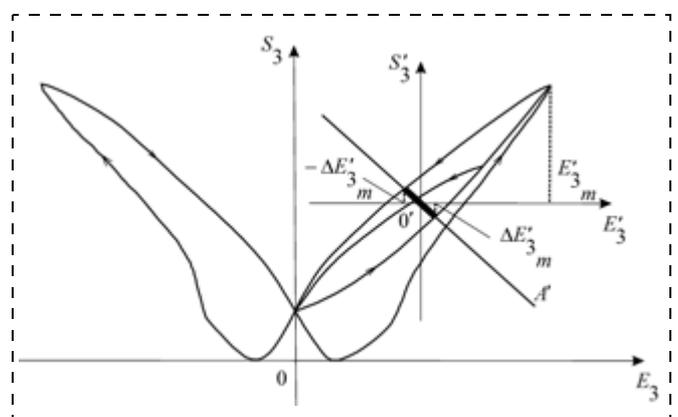


Рис. 3. Характеристика типа бабочка деформации электроупругого преобразователя при электрострикционном эффекте

[11, 12]. Этот режим часто используется в системах управления нано- и микроперемещениями, когда начало координат переносится в точку ноль со штрихом  $0'$  и рассмотрение деформации электроупругого преобразователя проводится в новой со штрихом системе координат. Для оценки устойчивости системы справедлив критерий Якубовича.

Функция  $S_3$  гистерезисной нелинейности пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте непрерывна, причем

$$v_{133}, v_{233} \in [0, v_{33}], v_{33} = \max[dS_3/dE_3]. \quad (23)$$

Величины  $v_{133}$  и  $v_{233}$  определяем по гистерезисной статической характеристике (см. рис. 2), измеренной при максимально допустимой напряженности электрического поля в пьезопреобразователе, где и  $v_{133} = 0$  и  $v_{233} = v_{33}$  — соответственно минимальное и максимальное значения тангенса угла наклона касательной к гистерезисной нелинейности пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте.

Гистерезисная петля (см. рис. 2) пьезопреобразователя обходится против часовой стрелки. Отношение тангенсов угла наклона касательной к гистерезисной нелинейности пьезопреобразователя при продольном и поперечном пьезоэффектах пропорционально отношению соответствующих пьезомодулей:

$$v_{33} : v_{31} = d_{33} : d_{31}. \quad (24)$$

Обозначим величину  $v$ , соответствующую максимальному значению тангенса угла наклона касательной к нелинейной характеристике пьезопреобразователя,  $v_{33}$  или  $v_{31}$  при продольном и поперечном пьезоэффектах, т. е.  $v = v_{33}, v_{31}$ .

Соответственно достаточные условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией электроупругого преобразователя (рис. 4) имеют вид

$$\operatorname{Re} v W(j\omega) \geq -1, \quad (25)$$

где в круглой скобке  $j$  — мнимая единица,  $\omega$  — частота.

На рис. 4 на комплексной плоскости приведены амплитудно-фазовые частотные характеристики для частотной передаточной функции  $vW(j\omega)$  для двух видов кривых: 1 — выполняются условия и 2 — не выполняются условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией электроупругого преобразователя. На рис. 4 заштрихована запретная область для амплитудно-фазовых частотных характеристик. Частотный критерий абсолютной устойчивости (25) прост и удобен для синтеза корректирующих устройств систем управления деформацией электроупругого преобразователя. Например, для пьезопреобразователя из пьезокерамики ЦТС-19 при продольном пьезоэффекте максимальное значение

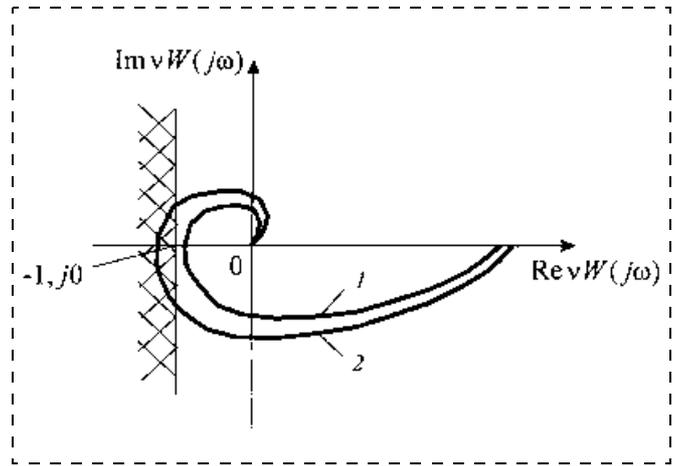


Рис. 4. Иллюстрация условий абсолютной устойчивости системы управления деформацией электроупругого преобразователя; для систем 1 — выполняются условия и 2 — не выполняются условия абсолютной устойчивости

тангенса угла наклона касательной к нелинейности составляет  $v_{33} = 1$  нм/В, а при поперечном пьезоэффекте  $v_{31} = 0,5$  нм/В.

#### Условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией электроупругого преобразователя при случайных воздействиях

Определим условия абсолютной устойчивости системы автоматического управления деформацией электроупругого преобразователя при случайных воздействиях на основе критерия Якубовича [5, 6].

Критерий для системы управления деформацией пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте с гистерезисной характеристикой (см. рис. 1 и 2) имеет формулировку: для того чтобы нелинейная система автоматического управления, на которую действует внешнее воздействие, содержащее случайную составляющую

$$f(t) = m_f(t) + f^0(t), \quad (26)$$

причем

$$|m_f(t)| \leq R_f, \quad (27)$$

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

$$\operatorname{Re} v_{33} W(j\omega) + 1 \geq 0 \quad (28)$$

и производная нелинейной характеристики удовлетворяла неравенству

$$0 < \frac{\partial m_{S_3}(m_{E_3}, \sigma_{E_3})}{\partial m_{E_3}} < v_{33}. \quad (29)$$

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

$$\sigma_{E_3}^2 \leq k_{\sigma}^2 \sigma_f^2, \quad (30)$$

где  $k_{\sigma}$  — взаимная корреляционная функция  $f$  и  $E_3$ . Если среднеквадратичное отклонение  $\sigma_{E_3}$  заменить его верхним значением, то двойное неравенство переписывается в виде

$$0 < \frac{\partial m_{S_3}(m_{E_3}, k_{\sigma} \sigma_f)}{\partial m_{E_3}} < v_{33}; \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = & \frac{1}{2\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) \left[ S_3^+(E_3) + S_3^-(E_3) \right] \times \\ & \times \frac{1}{\sigma_{E_3} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E_3 - m_{E_3})^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3, \end{aligned} \quad (32)$$

где  $S_3^+(E_3)$ ,  $S_3^-(E_3)$  — восходящая и нисходящая кривые (см. рис. 2) гистерезисной петли.

Для пьезопреобразователя при продольном пьезоэффекте вершины основных гистерезисных петель находятся на начальной кривой  $S_3 = F_1(E_3)$ , причем  $S_{3_m} = d_{33_m} E_{3_m}$ , где  $d_{33_m}$  — максимальное значение продольного пьезомодуля для каждой основной гистерезисной кривой пьезопреобразователя, следовательно, выражение для производной нелинейной характеристики (32) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = & \frac{1}{2\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) F_1(E_3) \times \\ & \times \frac{1}{\sigma_{E_3} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E_3 - m_{E_3})^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3. \end{aligned} \quad (33)$$

Начальная кривая пьезопреобразователя из ЦТС-19 при обратном пьезоэффекте определяется выражением

$$F_1(E_3) = d_{33}^0 E_{33} + a_{33} E_{33}^3, \quad (34)$$

причем максимальное значение пьезомодуля имеет вид

$$d_{33_m} = d_{33}^0 + a_{33} E_{3_m}^2, \quad (35)$$

где  $d_{33}^0$  — начальное значение продольного пьезомодуля;  $a_{33}$  — коэффициент степенного полинома при продольном пьезоэффекте.

Для пьезопреобразователей из пьезокерамики ЦТС-19 при продольном пьезоэффекте имеем следующие значения:  $d_{33}^0 = 4 \cdot 10^{-10}$  м/В,  $a_{33} = 3,1 \cdot 10^{-22}$  м<sup>3</sup>/В<sup>3</sup>. Учитывая зависимости (34), (35), получаем производную нелинейной характеристики в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = & \frac{1}{2\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) d_{33_m} E_3 \times \\ & \times \frac{1}{\sigma_{E_3} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E_3 - m_{E_3})^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3. \end{aligned} \quad (36)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{S_3}}{\partial m_{E_3}} = & \frac{1}{2\sigma_{E_3}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d_{33_m} E_3^2 \frac{1}{\sigma_{E_3} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{E_3^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3 = \\ = & \frac{4d_{33_m}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} r^2 e^{-r^2} dr = d_{33_m}, \end{aligned} \quad (37)$$

$$0 < d_{33_m} < v_{33},$$

где  $r = \frac{E_3}{\sqrt{2\sigma_{E_3}}}$  — переменная интегрирования.

Аналогично начальная кривая пьезопреобразователя при поперечном пьезоэффекте имеет вид

$$F_1(E_3) = d_{31}^0 E_3 + a_{31} E_3^3, \quad (38)$$

где  $d_{31}^0$  — начальное значение поперечного пьезомодуля;  $a_{31}$  — коэффициент степенного полинома при поперечном пьезоэффекте.

Для пьезопреобразователей из пьезокерамики ЦТС-19 при поперечном пьезоэффекте имеем следующие значения:  $d_{31}^0 = 2 \cdot 10^{-10}$  м/В,  $a_{31} = 1,4 \cdot 10^{-22}$  м<sup>3</sup>/В<sup>3</sup>.

Так как вершины основных гистерезисных петель находятся на начальной кривой  $S_1 = F_1(E_3)$ , причем  $S_{1_m} = d_{31_m} E_{3_m}$ , где  $d_{31_m}$  — максимальное значение пьезомодуля при поперечном пьезоэффекте для каждой основной гистерезисной кривой, по-

лучаем выражение для максимального значения соответствующего пьезомодуля

$$d_{31_m} = d_{31}^0 + a_{31} E_{3_m}^2. \quad (39)$$

Выражение для производной нелинейной характеристики преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{S_1}}{\partial m_{E_3}} &= \frac{1}{\sigma_{E_3}} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_3 - m_{E_3}) F_1(E_3) \times \\ &\times \frac{1}{\sigma_{E_3} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E_3 - m_{E_3})^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3. \end{aligned} \quad (40)$$

Аналогично для пьезопреобразователя при поперечном пьезоэффекте в системе автоматического управления при  $m_{E_3} = 0$  с учетом максимального значения пьезомодуля частная производная преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{S_1}}{\partial m_{E_3}} &= \frac{1}{\sigma_{E_3}} \int_{-\infty}^{+\infty} d_{31_m} E_3^2 \frac{1}{\sigma_{E_3} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{E_3^2}{2\sigma_{E_3}^2}} dE_3 = \\ &= \frac{4d_{31_m}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} r^2 e^{-r^2} dr = d_{31_m}; \end{aligned} \quad (41)$$

$$0 < d_{31_m} < v_{31}.$$

Рассмотрим геометрическую интерпретацию критерия (25) для системы управления деформацией электроупругого преобразователя. Амплитудно-фазовая характеристика разомкнутой системы  $vW(j\omega)$  должна быть для всех  $\omega \geq 0$  расположена правее прямой  $\text{Re}vW(j\omega) = -1$  (см. рис. 4). Критерий абсолютной устойчивости системы на плоскости логарифмической амплитудной частотной характеристики и фазовой частотной характеристики разомкнутой системы  $vW(j\omega)$  в декартовой системе координат  $L(\omega) = Q[\varphi(\omega)]$ , где  $L(\omega) = 20 \lg|vW(j\omega)|$  — логарифмическая амплитудная частотная характеристика;  $\varphi(\omega)$  — фазовая частотная характеристика, формулируется следующим образом: для абсолютной устойчивости системы достаточно, чтобы логарифмическая амплитудная частотная характеристика  $L(\omega) = Q[\varphi(\omega)]$  разомкнутой системы управления электромагнитоупругим преобразователем (заштрихованная характеристика) для всех  $\omega \geq 0$  располагалась ниже граничной кривой  $L(\omega) = 20 \lg|\cos\varphi|$  (рис. 5). Заштрихованная область на рис. 5 для скорректированной характеристики  $L(\omega)$  соответствует скорректированной амплитудно-фазовой частотной характеристике для частотной передаточной функции  $vW(j\omega)$  на рис. 4, которая не пересекает на ком-

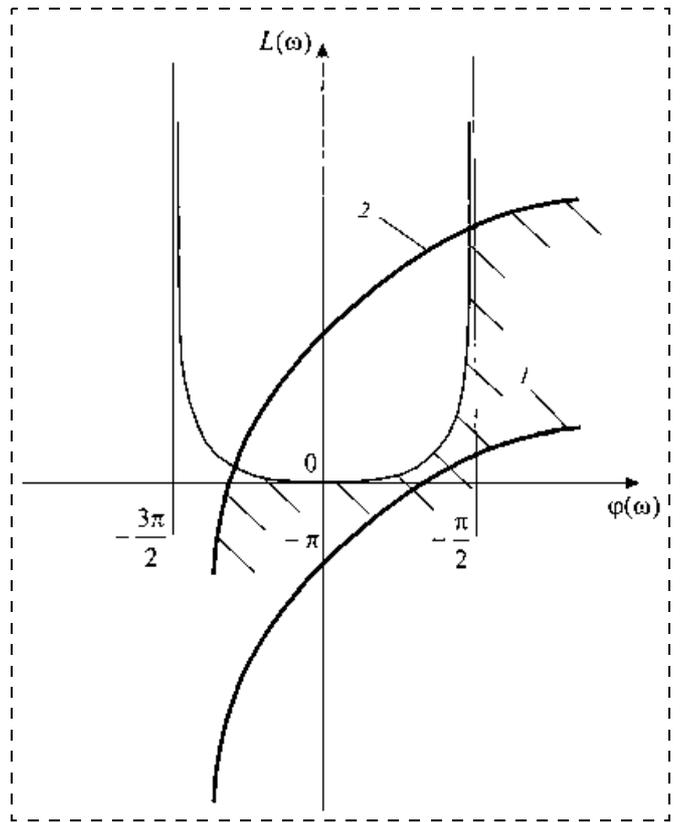


Рис. 5. Иллюстрация условий абсолютной устойчивости системы управления деформацией электроупругого преобразователя на плоскости логарифмической амплитудной частотной характеристики и фазовой частотной характеристики разомкнутой системы; для систем 1 — выполняются условия и 2 — не выполняются условия абсолютной устойчивости, заштрихована скорректированная логарифмическая амплитудно-фазовая частотная характеристика разомкнутой системы

плексной плоскости вертикальную линию  $\text{Re}vW(j\omega) = -1$ . При введении в систему корректирующего устройства, надлежащим образом деформирующего амплитудную частотную характеристику линейной части системы управления деформацией электроупругого преобразователя, частотный критерий абсолютной устойчивости будет выполняться.

## Заключение

Множество положений равновесия системы управления деформацией электроупругого преобразователя устойчиво относительно математических ожиданий, если выполняются полученные условия на производную нелинейной гистерезисной характеристики. Определены условия абсолютной устойчивости системы управления деформацией пьезопреобразователя при продольном и поперечном пьезоэффекте при детерминированных и случайных воздействиях. Полученные зависимости позволяют проводить синтез корректирующих устройств системы управления деформацией электроупругого преобразователя.

## Список литературы

1. **Миронов В. Л.** Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера, 2004. 144 с.
2. **Акопьян В. А., Панин А. Е., Соловьев А. Н., Шевцов С. Н.** Некоторые физико-механические проблемы пьезоэлектрических актюаторов и области их применения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 10. С. 35—40.
3. **Афонин С. М.** Обобщенная структурно-параметрическая модель электромагнитоупругого преобразователя для систем управления нано- и микроперемещениями. II. Об обобщенной структурно-параметрической модели составного электромагнитоупругого преобразователя // Изв. РАН. ТиСУ. 2005. № 4. С. 108—111.
4. **Афонин С. М.** Абсолютная устойчивость системы управления деформацией пьезоактюатора нано- и микроперемещений // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 11. С. 47—52.
5. **Наумов Б. Н.** Теория нелинейных автоматических систем. Частотные методы. М.: Наука, 1972. 544 с.
6. **Барабанов Н. Е., Якубович В. А.** Абсолютная устойчивость систем регулирования с одной гистерезисной нели-

нейностью // Автоматика и телемеханика. 1979. № 12. С. 5—12.

7. **Физическая акустика.** Т. 1. Ч. А. Методы и приборы ультразвуковых исследований / Под ред. У. Мэзона. М.: Мир, 1966. 592 с.

8. **Preisach A.** Über die magnetische Nachwirkung // Zeitschrift für Physik. Berlin: Verlag von Julius Springer. 1935. В. 94. № 5, 6. S. 277—302.

9. **Турик А. В.** К теории поляризации и гистерезиса сегнетоэлектриков // Физика твердого тела. 1963. Т. 5. № 4. С. 1213—1215.

10. **Турик А. В., Резниченко Л. А.** Сегнетокерамика в сильных электрических полях: электромеханический гистерезис, пьезоэффект и электрострикция. Обзор // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы. Ростов-на-Дону: Ростовский университет. 2008. № 1. С. 1—4.

11. **Lynch C. S.** The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT//Acta materialia. 1996. V. 44. № 10. P. 4137—4148.

12. **Панич А. Е., Смотраков В. Г., Еремкин В. В., Вусевкер Ю. А.** Перспективы применения электрострикционных материалов // Микросистемная техника. 2002. № 2. С. 21—24.

УДК 536.424.1

**В. А. Непочатенко**, канд. физ.-мат. наук, доц.,  
**В. Т. Розумнюк**, канд. физ.-мат. наук, доц.,  
**И. А. Непочатенко**, ассистент,  
Белоцерковский национальный аграрный университет, Белая Церковь, Киевская обл., Украина, e-mail: aaa@btsau.kiev.ua

## ПРЕДЕЛЬНАЯ ФАЗОВАЯ ГРАНИЦА ПРИ СТРУКТУРНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ ВТОРОГО РОДА

*Предложена модель предельной фазовой границы при структурном фазовом переходе второго рода, которая соответствует границе раздела фаз с бесконечно малыми изменениями параметров кристаллической решетки. На примере сегнетоэластика  $\text{BiVO}_4$  получены уравнения предельных фазовых границ, которые формируют четыре ориентационных состояния.*

**Ключевые слова:** уравнение фазовой границы, фазовый переход второго рода,  $\text{BiVO}_4$

### Введение

Впервые задача определения ориентации фазовых границ при фазовых переходах первого рода в мартенситах была рассмотрена в работах Ройтбурда Е. Л. и Хачатурияна А. Г. [1—3]. Согласно предложенной ими теории, на фазовых границах должно выполняться условие согласования тензора дисторсий, поэтому плоские когерентные фазовые границы возможны в кристаллах, у которых собственная деформация диссимметричной фазы соответствует деформации с инвариантной плоскостью. Когда собственная деформация не соответствует этому условию, определение уравнений межфазных границ является довольно сложной задачей, которая решена только для некоторых фазовых переходов [4—6].

В работах [7, 8] предложены модели плоских бесструктурных фазовых границ (БФГ) для полиморфных фазовых переходов первого рода и определены условия их формирования. Показано, что если диссимметричная фаза имеет симметрию не ниже орторомбической, то БФГ возможна в кристалле, когда один из параметров решетки не изменяется при фазовом переходе. Если меняются все параметры решетки, то БФГ реализуется в кристалле, когда одна из фаз имеет более низкую симметрию.

Для случая, когда условия формирования БФГ не выполняются, предложена модель сложной фазовой границы (СФГ), состоящей из прослойки индуцированной фазы, которая может иметь две структуры [9, 10]. Одна из этих структур формируется при прямом, а другая при обратном фазовых переходах.

В работах [7—10] показано, что при формировании как БФГ, так и СФГ возможны две плоские фазовые границы, которые формируют близкие (субориентационные) состояния, отличающиеся знаком спонтанного поворота кристаллографических осей относительно более симметричной фазы. А это приводит к удвоению числа возможных ориентационных состояний (ОС) в кристалле по сравнению с их числом, полученным из отношения порядков точечных групп двух фаз [11]. Аналогичное удвоение числа возможных ОС наблюдалось и при фазовом переходе второго рода [12, 13].

Поскольку при фазовом переходе симметрия изменяется скачком, то нами предложено рассматривать структурный фазовый переход второго рода как предельный случай фазового перехода первого рода, когда один параметр решетки (который не определяет изменение симметрии) не меняется, а остальные параметры двух фаз отличаются на бесконечно малую величину. Назовем границу раздела фаз, соответствующую этому структурному фазовому переходу, *предельной фазовой границей* (ПФГ). ПФГ соответствует условию формирования БФГ, поэтому ее

уравнения можно получить из модели этой фазовой границы, если известны предельные значения отношения соответствующих параметров решетки при фазовом переходе второго рода. На целом ряде кристаллов ( $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$ ,  $\text{Pb}_3(\text{VO}_4)_2$ ,  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{KNbO}_3$ ,  $\text{BiVO}_4$ ) нами обнаружено существование линейных зависимостей между параметрами решетки в пределах фазы [14], из которых можно определить эти предельные отношения параметров. Получим уравнения ПФГ на примере сегнетоэластика  $\text{BiVO}_4$ , в котором наблюдается фазовый переход второго рода  $4/mF2/m$ .

### Уравнения предельных фазовых границ в $\text{BiVO}_4$

Согласно данным работы [7], уравнение БФГ, разделяющей тетрагональную фазу (с кристаллографическими параметрами  $a_1$ ,  $c_1$ ) и моноклинную фазу (с параметрами  $a_2$ ,  $b_2$ ,  $c_2$ ,  $\varphi_2 = \gamma_2 - 90^\circ$ ) имеет вид в СК первой фазы (ось  $X_1$  параллельна оси  $a_1$ ; ось  $Z_1$  — оси  $c_1$ )

$$X_1^2 A_{11} + Y_1^2 A_{22} + Z_1^2 A_{33} + 2X_1 Y_1 A_{12} = 0, \quad (1)$$

где  $A_{11} = 1 - \left(\frac{a_2}{a_1}\right)^2$ ;  $A_{22} = 1 - \left(\frac{b_2}{a_1}\right)^2$ ;  $A_{33} = 1 - \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2$ ;

$A_{12} = \frac{a_2 b_2 \sin(\varphi_2)}{a_1^2}$ , а в СК второй фазы (ось  $X_2$  параллельна оси  $a_2$ ; ось  $Z_2$  — оси  $c_2$ )

$$X_2^2 B_{11} + Y_2^2 B_{22} + Z_2^2 B_{33} + 2X_2 Y_2 B_{12} = 0, \quad (2)$$

где  $B_{11} = 1 - \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2$ ;  $B_{22} = 1 - \left(\frac{a_1}{b_2}\right)^2 - a_1^2 \text{tg}^2(\varphi_2) \times$

$\times \left(\frac{1}{b_2^2} + \frac{1}{a_2^2}\right)$ ;  $B_{33} = 1 - \left(\frac{c_1}{c_2}\right)^2$ ;  $B_{12} = \frac{a_1^2 \text{tg}(\varphi_2)}{a_2^2}$ .

Уравнение (1) при условии

$$\det|A_{ij}| = A_{33}(A_{11}A_{22} - A_{12}^2) = 0 \quad (3)$$

соответствует уравнению двух пересекающихся плоскостей. Возможны два варианта:

$$A_{33} = 0; \quad (4)$$

$$A_{11}A_{22} - A_{12}^2 = 0. \quad (5)$$

Модели ПФГ соответствует уравнение (4), поскольку при этом условии не изменяется при фазовом переходе параметр решетки, который не определяет изменение симметрии ( $c_2 = c_1$ ). Из уравнения (1) с учетом (4) получаем следующие уравнения двух БФГ в СК тетрагональной  $\beta$ -фазы:

$$X_1 + B_1 Y_1 = 0; \quad (6)$$

$$X_1 + N_1 Y_1 = 0, \quad (7)$$

где  $B_1 = D_{12} + \sqrt{D_{12}^2 - D_{22}}$ ;  $N_1 = D_{12} - \sqrt{D_{12}^2 - D_{22}}$ ;  $D_{12} = A_{12}/A_{11}$ ;  $D_{22} = A_{22}/A_{11}$ .

Уравнения этих БФГ можно получить в СК моноклинной  $\alpha$ -фазы, если вместо уравнения (1) использовать уравнение (2):

$$X_2 + B_2 Y_2 = 0; \quad (8)$$

$$X_2 + N_2 Y_2 = 0, \quad (9)$$

где  $B_2 = C_{12} + \sqrt{C_{12}^2 - C_{22}}$ ;  $N_2 = C_{12} - \sqrt{C_{12}^2 - C_{22}}$ ;  $C_{12} = \frac{B_{12}}{B_{11}}$ ;  $C_{22} = \frac{B_{22}}{B_{11}}$ .

Из уравнений БФГ, полученных в двух системах координат, можно определить вектор Гиббса, соответствующий повороту СК  $\alpha$ -фазы относительно  $\beta$ -фазы:

$$\mathbf{G}_{fi} = g_1 \mathbf{e}_1 + g_2 \mathbf{e}_2 + g_3 \mathbf{e}_3, \quad (10)$$

где  $g_1 = s_1 \text{tg}(\delta/2)$ ;  $g_2 = s_2 \text{tg}(\delta/2)$ ;  $g_3 = s_3 \text{tg}(\delta/2)$ ;  $s_i$  — направляющие косинусы положительной оси вращения;  $\delta$  — угол поворота. Ориентацию оси находим из векторного произведения, а угол поворота из скалярного произведения нормалей к плоскостям БФГ. Из уравнений (6) и (8) получаем координаты  $\mathbf{G}_{f1}$ , соответствующего одному из субориентационных состояний

$$g_1 = 0; g_2 = 0; g_3 = \text{tg}(\delta_1/2), \quad \delta_1 = -\arccos(S_1), \quad (11)$$

где  $S_1 = (1 + B_1 B_2) / \sqrt{(1 + B_1^2)(1 + B_2^2)}$ .

Аналогично из уравнений (7) и (9) можно получить координаты  $\mathbf{G}_{f2}$ , который соответствует второму субориентационному состоянию:

$$g_1 = 0; g_2 = 0; g_3 = \text{tg}(\delta_2/2), \quad \delta_2 = \arccos(S_2), \quad (12)$$

где  $S_2 = (1 + N_1 N_2) / \sqrt{(1 + N_1^2)(1 + N_2^2)}$ .

Из анализа температурной зависимости параметров решетки в  $\text{BiVO}_4$  нами получено, что наблюдаются линейные зависимости параметра  $a_2$  и  $\sin(\varphi_2)$  от величины  $b_2$  (см. рисунок). Точки на рисунке соответствуют экспериментальным данным [15], прямые — линейным регрессиям. Получены следующие уравнения регрессий:

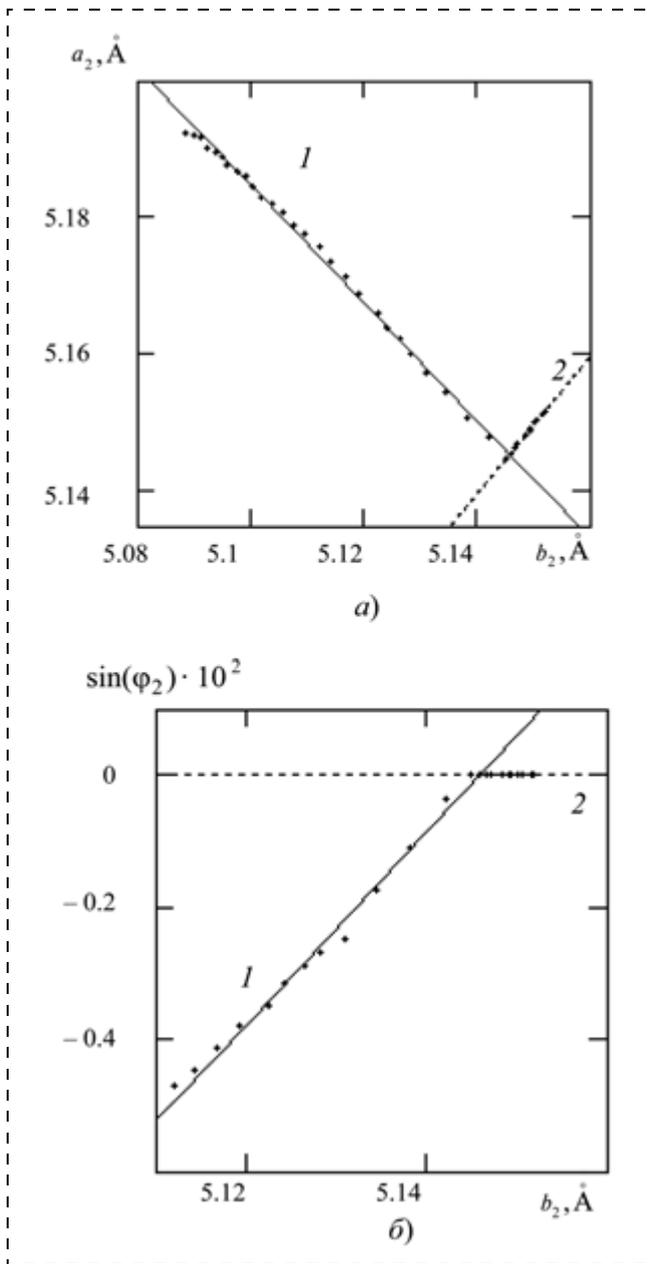
$$a_2 = k_1 b_2 + d_1; \quad (13)$$

$$\sin(\varphi_2) = k_2 b_2 + d_2, \quad (14)$$

где  $k_1 = -0,855$ ;  $d_1 = 9,545$ ;  $k_2 = 0,146$ ;  $d_2 = -0,753$ .

Поскольку в районе фазового перехода второго рода  $b_2 = a_2 = a_1$ ,  $\varphi_2 = 0$ , то из уравнения (13) определяем значение  $a_1$ :

$$a_1 = d_1 / (1 - k_1), \quad (15)$$



Зависимость параметра  $a_2$  (а) и  $\sin(\varphi_2)$  (б) от значения кристаллографического параметра  $b_2$ :

1 —  $\alpha$ -фаза; 2 —  $\beta$ -фаза

а из уравнения (14) получаем второе значение  $a_1$  (обозначим его  $a_1^*$ )

$$a_1^* = -d_2/k_2, \quad (16)$$

которое отличается от  $a_1$  в четвертом знаке после запятой. Так как  $a_1^*$  и  $a_1$  должны быть равными, то проведем коррекцию  $k_2$ . Из уравнения (16) получаем

$$k_2 = -d_2/a_1. \quad (17)$$

Подставляя в (6)–(9) полученные линейные зависимости параметров решетки (13), (14) с учетом

поправки (17) и переходя к предельному значению  $b_2$ , получаем уравнения двух ПФГ в СК  $\beta$ - и  $\alpha$ -фаз:

$$X_1 + B_1^* Y_1 = 0; \quad (18)$$

$$X_1 + N_1^* Y_1 = 0; \quad (19)$$

$$X_2 + B_2^* Y_2 = 0, X_2 + N_2^* Y_2 = 0, \quad (20)$$

где

$$B_1^* = \lim_{b_2 \rightarrow a_1} B_1 = B_2^* = \lim_{b_2 \rightarrow a_1} B_2 = \frac{a_1 d_2 - \sqrt{(a_1 d_2)^2 - 4a_1(a_1 - d_1)}}{2(a_1 - d_1)} = 1,608;$$

$$N_1^* = \lim_{b_2 \rightarrow a_1} N_1 = N_2^* = \lim_{b_2 \rightarrow a_1} N_2 = \frac{a_1 d_2 + \sqrt{(a_1 d_2)^2 - 4a_1(a_1 - d_1)}}{2(a_1 - d_1)} = -0,728.$$

Можно показать, что  $B_2^* > B_1^* > 0$ ,  $N_2^* < N_1^* < 0$ . Следовательно, уравнениям ПФГ (18) и (19) соответствуют разные по знаку векторы Гиббса ( $G_{f1} < 0$ ,  $G_{f2} > 0$ ) с бесконечно малыми значениями модулей.

Таким образом, ПФГ (18) и (19) формируют два субориентационных состояния, СК которых повернуты вокруг оси  $Z_1$   $\beta$ -фазы на малые углы  $\delta_1 < 0$  и  $\delta_2 > 0$ . Обозначим эти субориентационные состояния  $S_{11}$  и  $S_{12}$ . Применяя к фазовым границам операцию симметрии  $\beta$ -фазы (поворот вокруг  $Z_1$  на  $90^\circ$ ), получаем еще два уравнения ПФГ:

$$X_1 + B_3^* Y_1 = 0; X_1 + N_3^* Y_1 = 0, \quad (21)$$

где  $B_3^* = -1/B_1^* = -0,622$ ;  $N_3^* = -1/N_1^* = 1,375$ .

Предельные фазовые границы (21) формируют субориентационные состояния  $S_{21}$  и  $S_{22}$ . Следовательно, в  $\text{ViVO}_4$  формируются четыре ориентационных состояния, что соответствует экспериментальным данным [12, 13]. ПФГ образуют малые углы ( $\sim 2^\circ$ ) с соответствующими доменными стенками.

Из экспериментальных исследований влияния неизотермических условий на формирование доменной структуры в  $\text{ViVO}_4$  нами получено, что, если в кристалле создать градиент температуры с изотермой, параллельной одной из возможных ПФГ, то формируется при фазовом переходе одно ориентационное состояние, соответствующее этой фазовой границе.

## Выводы

Таким образом, из предложенной модели предельной фазовой границы следует, что, рассматривая структурный фазовый переход второго рода как предельный случай фазового перехода первого рода с бесконечно малыми изменениями кристаллографических параметров решеток, можно объяснить

образование в  $\text{BiVO}_4$  четырех ориентационных состояний. Субориентационные состояния соответствуют двум возможным решениям уравнения бесструктурной границы раздела двух фаз. Каждая из четырех возможных предельных фазовых границ формирует только одно ориентационное состояние, которому соответствует однокомпонентный вектор Гиббса. Предельные фазовые границы образуют малые углы с соответствующими равновесными доменными стенками. Создавая неизотермические условия в кристалле, можно управлять формированием доменной структуры при фазовом переходе второго рода.

*Выражаем благодарность Дудник Е. Ф. за помощь в работе и ценные замечания.*

#### Список литературы

1. Ройтбурд А. Л. Теория формирования гетерофазных структур при фазовых превращениях в твердом состоянии // УФН. 1974. Т. 113. № 1. С. 69—104.
2. Ройтбурд А. Л. Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения. М.: Наука, 1972. С. 7—31.
3. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений. М.: Наука, 1974.
4. Wechsler M. S., Lieberman D. S., Read T. A. On the theory of the formation of martensite // Trans. AIME. 1953. V. 197. N 11. P. 1503—1515.
5. Metrat G. Theoretical determination of domain structure at transitions from twinned phase: application to the tetragonal-

orthorhombic transition of  $\text{KNbO}_3$  // Ferroelectrics. 1980. V. 26, N 1—4. P. 801—804.

6. Лободюк В. А. Межфазные границы при мартенситном превращении // ФММ. 2003. Т. 96, № 6. С. 46—64.

7. Непочатенко В. А., Непочатенко И. А. Тонкі фазові межі при поліморфних фазових переходах для фаз із симетрією, не нижчою за моноклінну // Укр. физ. журн. 2005. Т. 50, № 1. С. 64—67.

8. Непочатенко В. А. Тонкі фазові межі між триклинними фазами // Укр. физ. журн. 2005. Т. 50, № 5. С. 483—485.

9. Непочатенко В. А. Складна фазова межа між двома моноклінними фазами // Укр. физ. журн. 2008. Т. 53, № 11. С. 1087—1093.

10. Непочатенко В. А., Дуда В. М., Непочатенко И. А. Плоская сложная фазовая граница в  $\text{BaTiO}_3$  // ФТТ. 2009. Т. 51, № 7. С. 1287—1291.

11. Шувалов Л. А. Сегнетоэластики // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1979. Т. 43, № 8. С. 1554—1560.

12. Wainer L. S., Baggio R. F., Dussel H. L., Benyacar M. A. R. Study of domain walls in ferroelastic  $\text{BiVO}_4$  // Ferroelectrics. 1981. V. 31. P. 121—126.

13. David W. I. F., Wood L. G. Ferroelastic phase transition in  $\text{BiVO}_4$ : VI. Some comments on the relationship between spontaneous deformation and domain walls in ferroelastics // J. Phys. C: Solid State Phys. 1983. V. 16. P. 5149—5166.

14. Непочатенко В. А. Линейная зависимость между величинами кристаллографических параметров решетки в пределах фазы в сегнетоэластике ортофосфате свинца // ПЖТФ. 2007. Т. 33, № 6. С. 70—75.

15. David W. I. F., Wood I. G. Ferroelastic phase transition in  $\text{BiVO}_4$ : V. Temperature dependence of  $\text{Bi}^{3+}$  displacement and spontaneous strains // J. Phys. C: Solid State Phys. 1983. Vol. 16. P. 5127—5148.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 519

Д. И. Иванников, аспирант,  
Московский педагогический государственный  
университет, e-mail: dimaiv@inbox.ru

### ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕОРИИ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ ПРИ КОНСТРУИРОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ МЕМБРАН

*Приведено теоретическое обоснование принципиальной применимости теории распознавания образов при конструировании химических мембран для моделей с пространственными и геометрическими ограничениями. Показаны методы построения распознающего оператора и решающего правила для исследуемых моделей.*

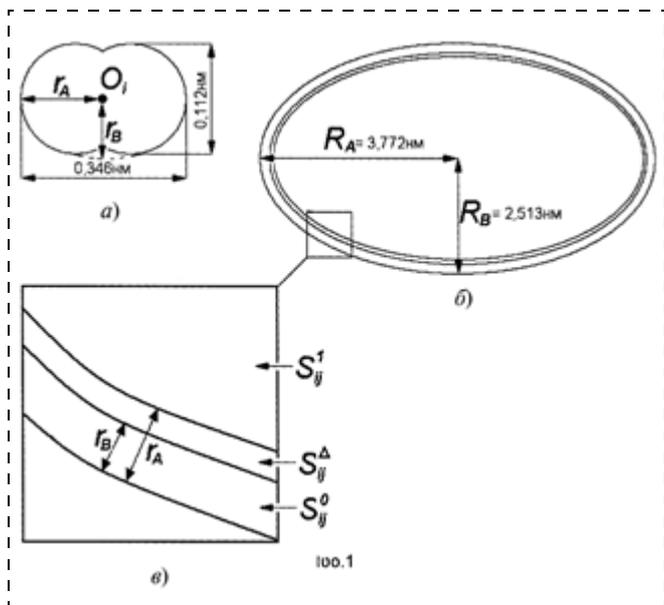
**Ключевые слова:** мембрана, теория распознавания, классификация

Химические (искусственные) мембраны активно используют во многих областях производства, в том числе при очистке газов для дальнейшего получения тонких пленок и в вакуумметрах. От качества используемой мембраны напрямую зависит качество результата технологического процесса. В свою очередь, получить качественную мембрану невозможно без предварительного анализа конкретной задачи и определенного набора теоретических и практических действий, направленных на выделение необходимых показателей.

Как было показано ранее, в терминах теории распознавания образов модели химических мембран могут рассматриваться как алгоритмы распознавания, а частицы, молекулы или ионы, траектории движения которых пересекают мембрану, — как объекты, подаваемые на распознавание [1—3]. Будем на такие мембраносодержащие модели накладывать следующие ограничения:

1°. Модель химической мембраны является ограниченной частью плоскости.

2°. Моделируется жидко- или твердокристаллическая пористая структура.



**Пример разбиения поры на области:**

*a* — схематичное представление молекулы азота  $N_2$ ; *b* — схематичное представление поры трековой мембраны; *в* — разбиение пространства поры на области

Канонически алгоритм распознавания представим в виде произведения оператора распознавания и решающего правила  $A = R_A \times r_A$ , представимых в виде матриц (далее КП — каноническое произведение) [4]. Формализация мембраны в качестве алгоритма распознавания достигается в результате обоснования возможности ее представления в виде упомянутого произведения.

В силу ограничения 1° возможно описать мембрану прямоугольной областью  $X \times Y$ , выбранной таким образом, что  $X \geq Y$  и каждая грань области пересекает хотя бы один раз границу мембраны. Рассмотрим случай пересечения траекторией объекта — частицы  $i$ -го типа поры  $j$ -го типа. Геометрически область поры на стенке модели мембраны может быть разделена на три области:  $S_{ij}^0$ ,  $S_{ij}^\Delta$ ,  $S_{ij}^1$ . Числовой индекс соответствует вероятности проникновения частицы сквозь пору в случае попадания ее геометрического центра в соответствующую область, для области  $S_{ij}^\Delta$  вероятность задается законом распределения  $\rho(r)$ , где в простых случаях  $r$  — расстояние от границы области  $S_{ij}^0$ . На рисунке приведен пример разбиения на указанные области возможной поры высокопористого поликарбоната (трековой мембраны) для молекулы азота, где  $O_j$  — геометрический центр.

Вероятность проникновения молекулы азота в области  $S_{ij}^\Delta$  зависит от ориентации молекулы  $N_2$  в пространстве в момент соударения.

Разобьем прямоугольную область  $X \times Y$  на  $N^2$  ячеек ( $N - 1$  — число линий разбиений) площадью  $S_N = XY/N^2$  таким образом, что линии разбиения па-

раллельны границам области  $X \times Y$ . В зависимости от проницаемостей областей  $S_{ij}$  каждому  $i$ -му типу частиц будет соответствовать свое представление прямоугольной области. Переведем такие представления в прямоугольные матрицы  $M_i^{N \times N}$  таким образом:

$$a_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } \sum S_{ij}^0 / S_N \geq \delta_0; \\ 1, & \text{если } \sum S_{ij}^1 / S_N \geq \delta_1; \\ \Delta, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1)$$

где  $0 \leq \delta_0, \delta_1 \leq 1$  и  $\delta_0 + \delta_1 > 1$ .

Далее будем рассматривать представление матрицы (1) для  $\delta_0 = \delta_1 = 1$ , т. е. будем считать, что частица проникает в области  $a_{ij}$  ( $a_{ij} = 1$ ), только если вся область  $a_{ij} \in S_{ij}^1$ , аналогично для случая  $a_{ij} \in S_{ij}^0$ , в остальных случаях, когда область содержит часть границы поры,  $a_{ij} = \Delta$  (обозначим через  $a_{ij}^\Delta$ ).

В силу ограничений 1° и 2° возможно рассчитать аналитически сумму площадей всех областей, при попадании центра частицы  $i$ -го типа в которые вероятность проникновения равна 1, обозначим такую сумму через  $S_i^1$ .

**Определение 1.**  $\epsilon$ -близким представлением химической мембраны для частиц  $i$ -го типа и  $\epsilon > 0$  в виде двумерной матрицы  $M_i^{N \times N} = \{a_{ij}\}$  будем называть такое представление, что

$$S_i^1 - \sum_{a_{ij}=1} S_N < \epsilon. \quad (2)$$

**Определение 2.**  $\epsilon$ -близким представлением химической мембраны для всех типов частиц и  $\epsilon > 0$  в виде набора двумерных матриц  $M_i^{N \times N}$  будем называть представление для такого  $N(\epsilon)$ , при котором условие (2) выполняется для всех типов частиц.

Опишем **алгоритм** нахождения верхней оценки  $N(\epsilon)$ .

**Шаг 0.** Вычислить аналитически  $S_i^1$  для всех типов частиц  $i = 1, \dots, k$ . Положить  $N = 1$ ,  $i = 1$ .

**Шаг 1.** Если для  $i$ -го типа частиц не выполняется неравенство (2), перейти на шаг 2, иначе перейти на шаг 3.

**Шаг 2.** Положить  $N = 2N$ , перейти на шаг 1.

**Шаг 3.** Положить значение  $i = i + 1$ . Если  $i \leq k$ , перейти на шаг 1, иначе окончить вычисления.

**Определение 3.**  $P_{ij}^\Delta$ -периметром поры  $j$  для  $i$ -го типа частиц в представлении  $M_i^{N \times N}$  будем называть сумму площадей  $a_{ij}^\Delta$ -областей, содержащих границу  $j$ -й поры в представлении  $M_i^{N \times N}$ .

**Теорема 1.** Для любой модели химической мембраны, удовлетворяющей ограничениям 1° и 2°, для любого значения  $\epsilon > 0$  указанный алгоритм конечен и сходится.

*Доказательство.* В силу ограничения 2° все поры ограничены ломаными кривыми или окружностями, в обоих случаях их длины ограничены снизу, а в силу ограничения 1° длины, ограничивающие поры кривых или окружностей, ограничены сверху.

Пусть алгоритм находится на шаге 1, при этом значение  $N = N^*$  таково, что граница ни одной  $j$ -й поры не принадлежит целиком области  $a_{ij}$ , что возможно в силу ограниченности снизу. Обозначим через  $P_{ij}^{\Delta, N^*}$  периметры пор для  $N^*$ . Например,  $N^*$  соответствует такому разбиению, при котором для каждого представления  $M_i^{N \times N}$  каждая  $j$ -я пора пересекается хотя бы по одному разу "горизонтальными" и "вертикальными" линиями разбиения, что соответствует выражениям

$$\begin{cases} \frac{X}{N} < \inf\{x_{ij}\}; \\ \frac{Y}{N} < \inf\{y_{ij}\}, \end{cases} \quad (3)$$

где  $x_{ij}$  и  $y_{ij}$  — соответственно длины проекций  $j$ -й поры на стороны прямоугольной области  $X \times Y$  в представлении  $M_i^{N \times N}$ . Каждое последующее применение шага 2 будет разбивать область  $a_{ij}$  на четыре равных подобласти, причем граница поры не будет проходить как минимум через одну из них, но обязательно будет принадлежать как минимум одной из них. То есть для  $j$ -й поры верна следующая оценка:

$$\left(\frac{1}{4}\right)^N \frac{XY}{N^2} P_{ij}^{\Delta, N^*} \leq \lim_{N \rightarrow \infty} P_{ij}^{\Delta} \leq \left(\frac{3}{4}\right)^N \frac{XY}{N^2} P_{ij}^{\Delta, N^*}. \quad (4)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{4}\right)^N \frac{XY}{N^2} \sum_i L_i P_{ij}^{\Delta, N^*} &\leq \lim_{N \rightarrow \infty} P \leq \\ &\leq \left(\frac{3}{4}\right)^N \frac{XY}{N^2} \sum_i L_i P_{ij}^{\Delta, N^*}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $L_i$  — число пор, соответствующее частицам  $i$ -го типа;  $P$  — сумма площадей всех периметров пор для всех типов частиц, причем  $P$  ограничивает сверху левую часть неравенства (2) по построению, т. е.

$$S_i^1 - \sum_{a_{ij}=1} S_N < P < \varepsilon. \quad (6)$$

Следовательно,  $\exists N_\varepsilon : \forall N > N_\varepsilon, \forall \varepsilon > 0 \Rightarrow P(N_\varepsilon) < \varepsilon$ . Доказательство завершено.

Таким образом, модель химической мембраны, удовлетворяющей ограничениям 1° и 2°, имеет  $\varepsilon$ -близкое представление для любого  $\varepsilon > 0$ .

*Следствие.* В силу существования  $N_\varepsilon$  представления  $M_i^{N \times N}$  являются конечномерными матрицами, а значит, для них существует базис, и если ввести над ними операции сложения и умножения, то их класс будет полным.

**Теорема 2.** Добавление в модель физического параметра для частицы, влияющего на ее проницаемость через мембрану, эквивалентно добавлению оси признакового пространства для объектов частиц, и в модели химической мембраны этот параметр влияет только на представление  $M_i^{N \times N}$ .

*Доказательство.* Оно следует из построения модели химической мембраны и представления  $M_i^{N \times N}$ . При этом не всегда изменения представления  $M_i^{N \times N}$  будут происходить только в виде аналога расширения или сужения областей проникновения из ранее существующих, возможны появления новых областей проникновения, что соответствует природе мембран.

Построим представления  $M_i^{N \times N}$  для конечного (обучающего) набора  $i$ -частиц  $(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m)$ . Рассмотрим объект-частицу  $\bar{x} = \bar{x}(k_1, \dots, k_l)$ , где  $k_j$  — величины, соответствующие физическим, в признаковом пространстве. Если ввести функцию близости между двумя объектами-признаками, например

$$F(\bar{x}, \bar{x}_i) = \sum_{j=1}^l \gamma_j |k_j - k_{ij}|, \quad (7)$$

где  $\gamma_j$  — веса соответствующих признаков [5], то можно принимать решение о применении представления  $M_i^{N \times N}$ , если  $F(\bar{x}, \bar{x}_i) = \max_{j=1, \dots, l} \{F(\bar{x}, \bar{x}_j)\}$ . Тогда применение функции близости соответствует применению распознающего оператора, а представление  $M_i^{N \times N}$  — решающему правилу, следовательно, построено каноническое произведение.

Теоретически обоснована принципиальная применимость теории распознавания образов при конструировании химических мембран, в силу следствия возможны методы поиска оптимальной по качеству мембраны, описанные, например, в работах [4, 6–7].

#### Список литературы

1. **Иванников Д. И.** Применение теории распознавания образов при конструировании химических мембран // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 11. С. 46–49.
2. **Матросов В. Л., Мардашев Ю. С., Иванников Д. И.** Иллюстрации к теории распознавания образов // Актуальные проблемы математики, информатики и образования. М.: МПГУ, 2007. С. 116–120.
3. **Trotta F., Baggiani C., Luda M. P., Drioli E., Massari T. J.** A molecular imprinted membrane for molecular discrimination of tetracycline hydrochloride // Membr. Sci. 2005. Vol. 254. № 1–2. P. 13–19.
4. **Журавлев Ю. И.** Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Проблемы кибернетики. М.: Наука, 1978. Вып. 33. С. 5–68.
5. **Матросов В. Л., Матросова О. В., Иванников Д. И.** Исследование признаков объектов-частиц при синтезе оптимальной разделяющей мембраны // Наука и школа. 2009. № 3. С. 61–63.
6. **Матросов В. Л.** Оптимальные алгебры в алгебраических замыканиях операторов вычисления оценок // Доклады академии наук СССР. 1982 Т. 262. № 4. С. 818–822.
7. **Матросов В. Л.** Синтез оптимальных алгоритмов в алгебраических замыканиях моделей алгоритмов распознавания // Распознавание, классификация, прогноз. М.: Наука, 1989. С. 149–176.

**В. Г. Спирин**, д-р техн. наук,  
Арзамасский политехнический институт, филиал  
Нижегородского технического университета  
им. Р. Е. Алексеева

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО РЕЗИСТОРА

*Разработана математическая модель сопротивления тонкопленочного резистора и его погрешности. Применение этой модели позволит проектировать тонкопленочные резисторы с топологическими размерами 10...50 мкм.*

**Ключевые слова:** тонкопленочный резистор, математическая модель, сопротивление, погрешность, микросборки, проектирование

Применение математической модели (1) сопротивления тонкопленочного резистора (ТПР), описанного в работе [1], при проектировании микросборок (МСБ) с размерами топологических элементов менее 0,2 мм характеризуется значительным снижением выхода годных:

$$R = \rho l/b + R_k = \rho K_{\phi} + R_k, \quad (1)$$

где  $l$ ,  $b$  — длина и ширина резистивного элемента;  $K_{\phi} = l/b$  — коэффициент формы резистора;  $R_k$  — контактное сопротивление.

Выход годных МСБ напрямую связан с попаданием сопротивлений тонкопленочного резистора (ТПР) в заданное поле допуска. Если рассмотреть реальное распределение сопротивлений резисторов, то нетрудно заметить, что даже в годных МСБ, практически все резисторы имеют отклонение сопротивлений от их номинального значения, причем некоторые сопротивления могут находиться на противоположных границах поля допуска. Однако в этих же МСБ можно найти хотя бы один резистор, сопротивление которого почти точно соответствует его номинальному значению. Это обусловлено тем, что на формирование сопротивления ТПР влияет большое количество погрешностей, все многообразие которых можно разделить на три класса:

1) инструментальные, т. е. погрешности, вносимые основным инструментом получения рисунка платы — фотошаблоном (ФС);

2) погрешности, вносимые конструктивными элементами ТПР;

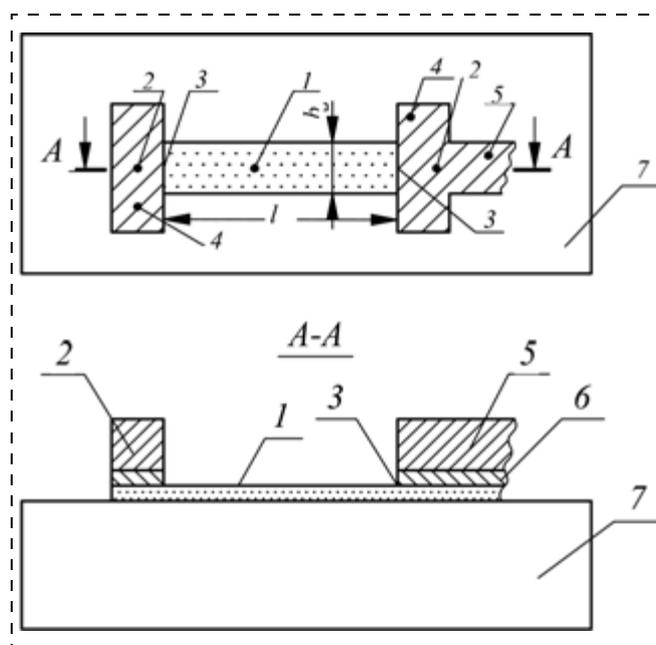
3) технологические или производственные, т. е. погрешности, формируемые при изготовлении ТПР под воздействием тех или иных технологических факторов или физико-химических явлений.

Целью настоящей работы является разработка математической модели сопротивления ТПР и его погрешности, которая учитывает влияние конструктивных элементов ТПР и технологических погрешностей.

В общем случае инструментальные погрешности можно разделить на методические, субъективные и производственные погрешности изготовления ФС. Методические погрешности возникают вследствие того, что применяемые математические модели расчета сопротивления ТПР и его погрешностей являются приближенными и не включают в себя особенностей конструкций ТПР, например сопротивления его электродов, а также систематические производственные погрешности, которые возникают в реальном технологическом процессе. Субъективные погрешности, в основном, связаны с невнимательностью проектировщиков МСБ. Ошибки такого рода приводят, как правило, к неверному определению числа квадратов резистора.

Конструкция ТПР (рис. 1) в самом простом случае содержит: резистивный элемент 1, два электрода 2, два контакта 3 между проводящей и резистивной пленками, четыре контактных площадки перекрытия (КПП) 4 резистивного и проводящего слоев. Современные методы расчета сопротивления ТПР в основном учитывают только сопротивление резистивного элемента. Однако все остальные элементы конструкции ТПР, например вследствие собственного сопротивления, вносят определенный вклад в общее сопротивление ТПР.

Под контактом между проводящей и резистивной пленками понимают участок ТПР, в котором ток переходит из резистивного слоя в проводящий или наоборот. Длина этих участков очень мала, в связи с чем этот элемент конструкции ТПР обозначен на рис. 1 линией 3. Необходимость выделения контакта как элемента конструкции ТПР вызвана тем, что ток, проходящий через контакт, имеет нелинейную траекторию. Кроме того, плотность тока в контакте неравномерна. Эти явления требуют разработки спе-



**Рис. 1. Элементы конструкции ТПР:**

1 — резистивный элемент; 2 — электрод; 3 — контакт между проводящей и резистивной пленками; 4 — КПП; 5 — проводник; 6 — адгезионный слой; 7 — подложка

Технологические погрешности сопротивления ТПР

Наименование погрешности	Обозначение	Характер погрешности
Погрешности удельного поверхностного сопротивления резистивной пленки: градиентная по оси Y многофакторная погрешность	$\delta\rho_c$ $\delta\rho$	Систематический Случайный
Погрешности топологических элементов из-за процессов фотолитографии и травления: погрешность длины ТПР	$\Delta l_c$ $\Delta l$	Систематический Случайный
погрешность ширины ТПР	$\Delta b_c$ $\Delta b$	Систематический Случайный
Погрешность контактного сопротивления	$\delta R_k$	Случайный
Погрешность сопротивления электродов	$\delta R_3$	Случайный
Погрешность сопротивления проводников	$\delta R_{\Pi}$	Случайный

циальной математической модели сопротивления контакта [2]. Контакты включены последовательно с резистивным элементом  $l$ , поэтому они увеличивают сопротивление ТПР. Последовательно с контактом включен электрод 2. Далее электрод соединяется с КПП 4 и с проводником 5. В частном случае роль электрода и КПП может выполнять контактная площадка (КП) для подключения выводов компонентов. Электроды выполнены из проводящей пленки, которая обладает конечным сопротивлением. При  $K_{\phi} > 0,1$  сопротивлением электродов, как правило, пренебрегают. Однако при малых коэффициентах формы ТПР сопротивление электродов становится сопоставимым с сопротивлением резистивного элемента и может значительно увеличивать номинальное сопротивление ТПР и ухудшать его стабильность, вследствие большого температурного коэффициента сопротивления проводящей пленки [3].

КПП предназначены для исключения погрешности сопротивления ТПР, вызванной несовмещением фотошаблона при второй фотолитографии с рисунком подложки. Однако введение этих конструктивных элементов уменьшает плотность межсоединений. Исключение КПП из конструкции ТПР приводит к дополнительной погрешности [4]. Погрешности, вносимые конструктивными элементами (табл. 1), носят систематический характер. Они увеличивают общее сопротивление ТПР. Под областью влияния в табл. 1 понимается диапазон изменения существенного параметра, в котором вносимая погрешность составляет более 1 %.

Вопросы качества и воспроизводимости тонкопленочных элементов рассмотрены в работах [5, 6]. Для того чтобы повысить воспроизводимость сопротивления ТПР, прежде всего следует рассмотреть основные виды технологических погрешностей и выяснить какой характер они носят — систематический или случайный. Подобная классификация поможет уточнить математическую модель сопротивления ТПР и его погрешности. Анализ технологических погрешностей проведен в работе [7]. На основании этого анализа составлена табл. 2.

Случайную погрешность за счет исключения КПП в технологические погрешности не включают, так как от нее легко можно избавиться путем введения КПП. Систематическое изменение размеров ТПР после проведения процессов фотолитографии и травления показано на рис. 2.

Таблица 1

Погрешности, вносимые конструктивными элементами

Наименование параметра	Обозначение	Область влияния
Контактное сопротивление	$R_k$	$l < 10$ мкм $K_{\phi} < 0,1$ $R_{\Pi}/R > 1$ % $\delta K_{\phi} < 1$ %
Сопротивление электродов	$R_3$	
Сопротивление проводников	$R_{\Pi}$	
Абсолютная погрешность за счет исключения контактных площадок перекрытия резистивного и проводящего слоев	$R_c$	

Примечание.  $\delta K_{\phi}$  — относительная погрешность коэффициента формы [4].

Наиболее просто в модели расчета сопротивления можно учесть те систематические погрешности, которые изменяют тот или иной размер резистора на постоянную величину. Таким образом, можно учесть все систематические погрешности, за исключением градиентной погрешности  $\rho$  по оси Y [7]. Эта погрешность будет учтена в допуске на сопротивление. Следовательно, математическая модель сопротивления резистора  $R$  должна содержать систематические погрешности длины  $\Delta l_c$  и ширины  $\Delta b_c$ , а также контактное сопротивление  $R_k$ , сопротивления электродов  $R_3$ , сопротивление проводников  $R_{\Pi}$ , соединяющих электроды резистора с КП, обкладками конденсаторов или электродами других ТПР, а также погрешность за счет исключения КПП  $R_c$ :

$$R = \rho \frac{l + \Delta l_c}{b - \Delta b_c} + R_k + R_3 + R_{\Pi} + R_c. \quad (2)$$

В формуле (2) учтено, что при выполнении операций фотолитографии и травления увеличивается длина и уменьшается ширина резистора, а его номинальное сопротивление возрастает за счет сопротивления электродов. Параметры  $R_k$ ,  $R_3$ ,  $R_{\Pi}$ ,  $R_c$  расчи-

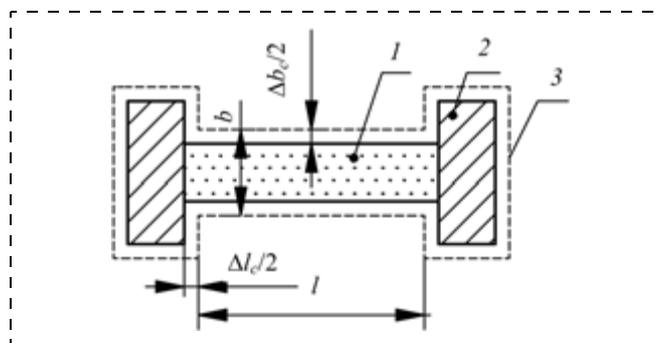


Рис. 2. Систематические погрешности длины и ширины ТПР: 1 — резистивный элемент; 2 — контактная площадка; 3 — электрод ТПР, формируемый комплектом фотошаблонов

тываются по алгоритмам, приведенным соответственно в работах [2–4]. В большинстве случаев существенные параметры конструктивных элементов ТПР находятся вне области влияния (см. табл. 1). Тогда сопротивлениями  $R_k$ ,  $R_{\Pi}$ ,  $R_c$  в формуле (2) можно пренебречь, при этом формула для расчета номинального значения сопротивления принимает более простой вид:

$$R = \rho \frac{l + \Delta l_c}{b - \Delta b_c} + R_3.$$

Проиллюстрируем влияние систематических погрешностей на относительное изменение  $\delta R_c$  номинального значения сопротивления прямоугольного резистора. Для чего рассчитаем сопротивления  $R_1$ ,  $R_2$  по формулам (1) и (2) соответственно при следующих данных:  $\rho = 1000$  Ом/□;  $\Delta l_c = 6$  мкм;  $\Delta b_c = 3$  мкм.

**Пример 1:**  $l = b = 100$  мкм;

$$\begin{aligned} R_1 &= 1000 \text{ Ом}; \\ R_2 &= 1000 (100 + 6)/(100 - 3) = 1093 \text{ Ом}; \\ \delta R_c &= 9,3 \%. \end{aligned}$$

**Пример 2:**  $l = 100$  мкм;  $b = 2000$  мкм;  $R_3 = 1,4$  Ом;  $R_k = R_{\Pi} = R_c = 0$ .

$$\begin{aligned} R_1 &= 50 \text{ Ом}; \\ R_2 &= (100 + 6)/(2000 - 3) + 1,4 = 54,4 \text{ Ом}; \\ \delta R_c &= 8,8 \%. \end{aligned}$$

Приведенные примеры показывают, что формула (1) дает существенные погрешности при уменьшении линейных размеров ТПР до 100 мкм и менее, а также не позволяет проектировать ТПР с  $K_{\phi} < 0,1$ .

Формирование случайных погрешностей сопротивления ТПР происходит на следующих операциях: напыления резистивного слоя ( $\delta\rho$ ); напыления проводящего слоя ( $\delta R_3$ ,  $\delta R_{\Pi}$ ); проведения первой фотолитографии и травления проводящей пленки ( $\delta l$ ); проведения второй фотолитографии и травления резистивной пленки ( $\delta b$ ). Эти события независимы друг от друга, поэтому для расчета случайной производственной погрешности может быть применен аппарат теории вероятностей.

В расчет половины поля допуска введем также систематическую градиентную погрешность  $\delta\rho_c = \delta\rho_{\text{ymax}}/2$ , где  $\delta\rho_{\text{ymax}}$  — максимальное значение градиентной погрешности по оси  $Y$  подложки [7]. Это вполне допустимо, если уменьшить величину  $\rho$  при напылении до значения  $\rho(1 - \delta\rho_c)$ . Математическая модель половины поля допуска  $\delta R$  производственной относительной погрешности имеет вид:

$$\delta R = \delta\rho_c + \sqrt{\delta\rho^2 + \delta b^2 + \left(1 + \frac{2mt_p}{l} + \frac{R_3 + R_{\Pi}}{R}\right)\delta l^2 + \left(\frac{R_3 + R_{\Pi}}{R}\right)\delta\rho_{\Pi}^2}. \quad (3)$$

В формуле (3) использованы следующие значения технологических погрешностей [2, 3]:

$$\begin{aligned} \delta R_k &= 2mt_p\delta l/l; \quad \delta R_3 = \frac{R_3\sqrt{\delta\rho_{\Pi}^2 + \delta l^2}}{R}; \\ \delta R_{\Pi} &= \frac{R_{\Pi}\sqrt{\delta\rho_{\Pi}^2 + \delta l^2}}{R}. \end{aligned}$$

Если существенные параметры конструктивных элементов ТПР находятся вне области их влияния, то погрешностями  $\delta R_k$ ,  $\delta R_3$ ,  $\delta R_{\Pi}$ , как правило, пренебрегают. Поэтому математическая модель половины поля допуска производственной относительной погрешности принимает более простой вид:

$$\delta R = \delta\rho_c + \sqrt{\delta\rho^2 + \delta b^2 + \delta l^2}. \quad (4)$$

Однако в некоторых случаях, например при проектировании высокостабильных резисторов, погрешностями, вносимыми конструктивными элементами, пренебрегать нельзя.

## Выводы

Разработана математическая модель сопротивления ТПР и его погрешности, применение которой позволит проектировать ТПР с топологическими размерами на порядок меньше, чем определено в работе [1], без изменения технологического процесса.

## Список литературы

1. Ефимов И. Е., Козырь И. Я., Горбунов Ю. И. Микроэлектроника. М.: Высш. шк., 1987. 416 с.
2. Спиринов В. Г. Контактное сопротивление тонкопленочного резистора // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 10. С. 56–60.
3. Спиринов В. Г. Сопротивление электродов тонкопленочного резистора // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 7. С. 19–24.
4. Спиринов В. Г. Исследование погрешности сопротивления тонкопленочного резистора, вызванной исключением контактных площадок перекрытия резистивного и проводящего слоя // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 11. С. 44–46.
5. Власов В. Е., Захаров В. П., Коробов А. И. Системы технологического обеспечения качества компонентов микроэлектронной аппаратуры. М.: Радио и связь, 1987. 158 с.
6. Гимпельсон В. Д., Радионов Ю. А. Тонкопленочные микросхемы для приборостроения и вычислительной техники. — М.: Машиностроение, 1976. 328 с.
7. Спиринов В. Г. Анализ технологических погрешностей сопротивления тонкопленочного резистора // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 9. С. 42–45.

УДК 621.382.323

**Н. В. Масальский**, канд. физ.-мат. наук, зав. сектором,  
Учреждение Российской Академии наук, Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, г. Москва,  
e-mail: volkov@niisi.ras.ru

## СИНТЕЗ ХАРАКТЕРИСТИК ЛОГИЧЕСКИХ ВЕНТИЛЕЙ НА ДВУХЗАТВОРНЫХ СУБ-25-НАНОМЕТРОВЫХ КНИ КМОП-ТРАНЗИСТОРАХ ДЛЯ МАЛОМОЩНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ

*Рассмотрены критерии выбора технологических параметров двухзатворных суб-25-нанометровых транзисторов со структурой "кремний на изоляторе" для мало-мощных применений. Численно исследованы характеристики однокаскадных вентилях на выбранном типе транзисторов с длиной канала 22 нм при напряжении питания меньше 1 В. Показана возможность создания мало-мощной схемотехники, функционирующей в диапазоне 100 ГГц.*

**Ключевые слова:** двухзатворный КНИ-нано-транзистор, логический вентиль, низкая потребляемая мощность

### Введение

В течение последних нескольких лет двухзатворные короткоканальные КНИ ("кремний на изоляторе") транзисторы с ультратонкой рабочей областью рассматриваются как возможные кандидаты для реализации характеристик, заявленных в последней редакции ITRS [1]. Подавления короткоканальных эффектов (ККЭ) в таких транзисторах предполагается достигать при оптимально выбранных параметрах растянутых областей стока/истока. Эта концепция "без перекрытия" затвор—сток/исток вытянутых областей, схематично представленная на рис. 1 и известная под названием "gate-underlap design", недавно предложена для объемных наноразмерных КМОП-транзисторов [2—4]. Данный подход, базирующийся на оптимальном выборе градиента концентрации легирования ( $g$ ) области стока/истока и продольного зазора ( $L_s$ ) между стоком/истоком и затвором, является альтернативой классическому подходу, при котором для подавления ККЭ используется метод повышения канального легирования и/или уменьше-

ния толщины кремниевой пленки (рабочей области транзистора). В "gate-underlap"-архитектуре профиль легирования стока/истока проектируется так, что у границы затвор—сток/исток уровень легирования будет ниже, чем пиковая концентрация примеси. Тогда канал и область сток/исток смыкаются при низком уровне легирования. Это позволяет формировать рабочую область слаболегированной или совсем не легированной. В свою очередь, для наноразмерных приборов достигается увеличение подвижности носителей в канале, исключается возможность пробоя стока—истока, когда области стока/истока высоко легированы для минимизации их сопротивления [3—5]. Это положительно скажется на уровне тока насыщения ( $I_{on}$ ) и является предпосылкой к снижению значения подпорогового тока ( $I_{off}$ ). Такая архитектура является более перспективной именно для ультратонких КНИ-транзисторов [2, 5, 6].

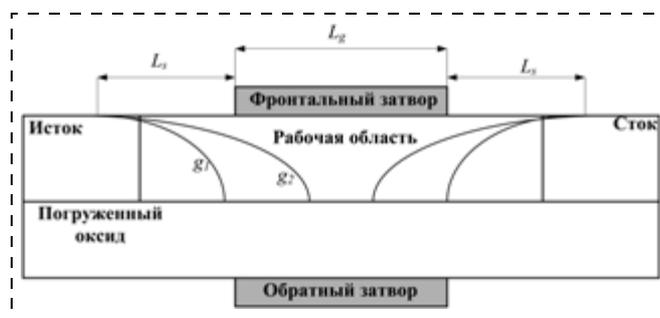
В предложенной концепции эффективная длина канала определяется следующим выражением [7]:

$$L_{eff} = L_g + 2 \left( L_s - \sqrt{2 L_s g \frac{\ln N_{SD_{eff}}}{\ln 10}} \right), \quad (1)$$

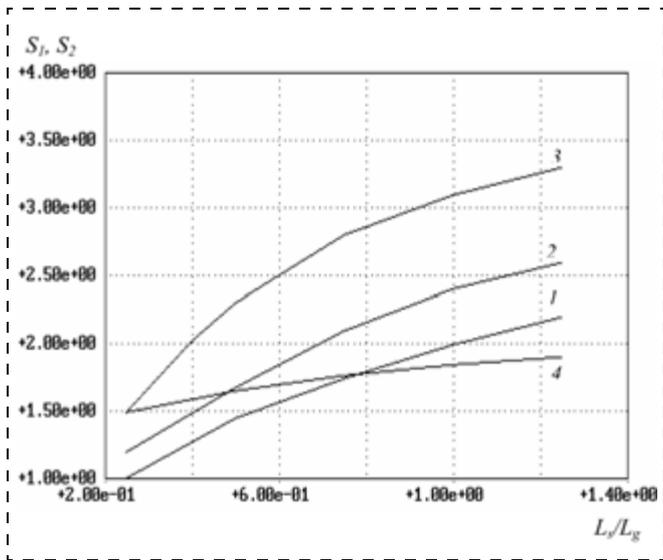
где  $L_g$  — длина затвора;  $N_{SD_{eff}}$  — относительный уровень легирования, при котором определяется (экстрагируется)  $L_{eff}$ . Параметр  $N_{SD_{eff}}$  есть функция отношения  $L_s/L_g$  и ее особенности подробно проанализированы в работах [7, 8].

Как видно из выражения (1), в наноразмерных приборах небольшие вариации значений градиента и зазора будут модулировать эффективную длину канала, что непосредственным образом будет отражаться на характеристиках транзисторов и схем.

Для того чтобы избежать возникновения области обеднения на границе смыкания сток/исток—рабочая область необходимо выполнение следующего ус-



**Рис. 1.** Схема транзисторной структуры. Кривыми линиями показаны профили концентрации легирования стока/истока, причем  $g_1 < g_2$



**Рис. 2.** Поведение множителей ( $S_1, S_2$ ) от отношения  $L_s/L_g$  для различных значений градиентов концентрации: кривая 1 —  $S_1$  и  $g = 7$  нм/дес.; 2 —  $S_1$  и  $g = 5$  нм/дес.; 3 —  $S_1$  и  $g = 3$  нм/дес.; 4 —  $S_2$

ловия:  $L_{eff} > L_g$ . Перепишем выражение для эффективной длины в виде:

$$\Delta L = 2L_s \left( 1 - \sqrt{\frac{2g}{L_s \ln 10} \sqrt{\ln N_{SD_{eff}}}} \right). \quad (2)$$

Очевидно, что для выполнения условия второй член в скобках должен быть меньше 1. На рис. 2 представлены зависимости значения "корней" от отношения  $L_s/L_g$  при разных значениях градиента. Из данных результатов видно, что, начиная со значения  $L_s/L_g > 0,75$ , неравенство  $L_{eff} > L_g$  выполняется для всех значений градиентов. Это может быть достаточным для выбора параметров  $L_s$  и  $g$  при фиксированной длине канала. Необходимо отметить, что значения толщин подзатворных оксидов не влияют на данный выбор.

Вместе с тем, как известно, в транзисторных структурах характеристическая длина  $l$  служит индикатором проявления ККЭ [9]. Она является функцией толщин пленок, формирующих канальную область транзистора. В идеальном случае для полного подавления ККЭ должно быть выполнено условие  $L_{eff}/l \gg 1$ . Как правило, значение характеристической длины определяют из анализа распределения потенциала в рабочей области транзистора, который, в свою очередь, является решением уравнения Пуассона.

Обобщая сказанное выше, можно утверждать следующее. Наилучший компромисс для минимизации ККЭ в данной структуре при фиксированных значениях толщин пленок фронтального ( $t_f$ ) и обратного ( $t_b$ ) затворов и толщины рабочей области ( $t_{Si}$ ) является модулирование длины канала путем варьирования градиента легирования стока/истока и зазора затвор—сток/исток с ограничением  $L_{eff}/l > 2$ , кото-

рое вполне приемлемо для схемотехнических задач [7, 8, 10].

"Gate-underlap"-архитектура для нанотранзисторов с полностью обедненной рабочей областью представляет практический интерес с позиции создания низковольтных СБИС с малой потребляемой мощностью. Отличительной особенностью этих транзисторов является эффективное управление пороговым напряжением ( $U_{th}$ ) путем изменения потенциала на обратном затворе транзистора ( $U_b$ ). Зависимость  $U_{th}$  от  $U_b$  в области регулировки имеет линейный характер и аппроксимируется выражением  $U_{th}^{(n,p)}(U_b) = U_{th}^{(n,p)}(0) - \gamma_{SOI} U_b$ , где  $U_{th}^{(n,p)}(0)$  — пороговое напряжение при нулевом уровне смещения  $U_b$ ;  $\gamma_{SOI}$  — безразмерный коэффициент, примерно равный отношению толщин подзатворных оксидов:  $\gamma_{SOI} = t_f/t_b$ . Для выбранных транзисторов, сформированных по технологическим нормам 32 нм, имеет особую важность исследование не только оптимального выбора их параметров транзисторов, но и как это проявится на характеристиках схем, выполненных на них.

## 1. Определение характеристической длины

Для определения характеристической длины рассмотрим 2D-уравнение Пуассона

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \frac{qN_A}{\epsilon_{Si}}, \quad (3)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{y=0} = \frac{C_f}{\epsilon_{Si}} (\phi - U_f + U_{Fb});$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{y=t_{Si}} = -\frac{C_b}{\epsilon_{Si}} (\phi - U_b + U_{Fb});$$

$$\phi(0, y) = U_{bi};$$

$$\phi(L_{eff}, y) = \phi(0, y) + U_{ds},$$

где  $\phi(x, y)$  — потенциал в рабочей области;  $q$  — заряд электрона;  $N_A$  — концентрация легирования рабочей области;  $\epsilon_{Si}$  — диэлектрическая проницаемость кремния;  $C_f$  — емкость фронтального затвора;  $C_b$  — емкость обратного затвора;  $U_f$  — напряжение на фронтальном затворе;  $U_{Fb}$  — напряжение плоских зон;  $U_{bi}$  — встроенная разность потенциалов;  $U_{ds}$  — напряжение сток-исток.

Решение уравнения Пуассона в общем случае аналитически невозможно. Одним из путей решения данной задачи является предположение о характере распределения потенциала в рабочей области. Для фиксированной длины канала это позволяет применить принцип суперпозиции для потенциала [7, 10]. Разделить истинный 2D-потенциал на два. Один соответствует длинноканальному случаю. Второй определяется короткоканальными эффектами. Распределение первого потенциала  $\phi^{(1D)}(y)$  является решение 1D-уравнения Пуассона. Распределение второго потенциала  $\phi^{(2D)}(x, y)$  вытекает из решения 2D-урав-

нения Лапласа. Тогда обобщенный потенциал можно представить в виде

$$\phi(x, y) = \phi^{(1D)}(y) + \phi^{(2D)}(x, y). \quad (4)$$

Методы решения уравнения (3) и с учетом выражения для потенциала (4) подробно рассмотрены в ряде работ (см., например [10]). Приведем окончательное решение (3) в рамках изложенных допущений:

$$\begin{aligned} \phi(x, y) = & \frac{qN_A}{\epsilon_{Si}} y^2 + \frac{C_f}{\epsilon_{Si}} \left( \phi_{sf}^{(1D)} - U_f + U_{Fb} \right) y - \phi_{sf}^{(1D)} + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \sin \left( \frac{\lambda_n y}{t_{Si}} \right) + \lambda_n \frac{C_{Si}}{C_b} \cos \left( \frac{\lambda_n y}{t_{Si}} \right) \right) \times \\ & \times \left( A_n e^{\lambda_n \frac{x-L_{eff}}{t_{Si}}} + B_n e^{-\lambda_n \frac{x-L_{eff}}{t_{Si}}} \right), \quad (5) \end{aligned}$$

где граничные условия для уравнения Лапласа можно представить в виде  $\phi^{(2D)}(0, y) = U_{bi} - \phi^{(1D)}(y)$  и  $\phi^{(2D)}(L_{eff}, y) = U_{bi} + U_{ds} - \phi^{(1D)}(y)$ ;  $\phi_{sf}^{(1D)}$  — поверхностный потенциал;  $A_n, B_n$  — нормировочные коэффициенты;  $\lambda_n$  — собственные значения.

Нас в большей степени интересует значение характеристической длины, которое связано с собственными значениями следующим выражением:

$$l_n = \frac{n\pi t_{Si}}{\lambda_n} \quad [11].$$

Характеристическое уравнение для собственных значений [11, 12] запишем, например, в виде:

$$\tan \lambda_n = \frac{C_{Si} C_f (1 + \gamma_{SOI}) \lambda_n}{(C_{Si}^2 \lambda_n^2 - \gamma_{SOI}) C_f^2}. \quad (6)$$

Следует отметить, что как собственные значения, так и характеристическая длина зависят от величины  $\gamma_{SOI}$ . Определить степень зависимости можно только исходя из результатов численного моделирования.

## 2. Выбор параметров транзисторов

Для иллюстрации приведенных выше рассуждений в качестве прототипа было решено использовать транзисторы с длиной канала 22 нм, отвечающих заявленным выше технологическим нормам. Обобщенные результаты решений уравнений (1) и (6) приведены на рис. 3. Здесь представлены зависимости отношения  $L_{eff}/l$  от градиента легирования для отношения  $L_s/L_g = 1$  при разных толщинах рабочей области и подзатворного оксида фронтального затвора. Из представленных данных необходимо выделить область, где значение отношения  $L_{eff}/l$  больше 2. Это определяет возможности выбора технологических параметров транзисторов.

При таком подходе необходимо учитывать, что основным критическим параметром полностью обедненных КНИ-нанотранзисторов является толщина рабочей области, которая влияет на все глав-

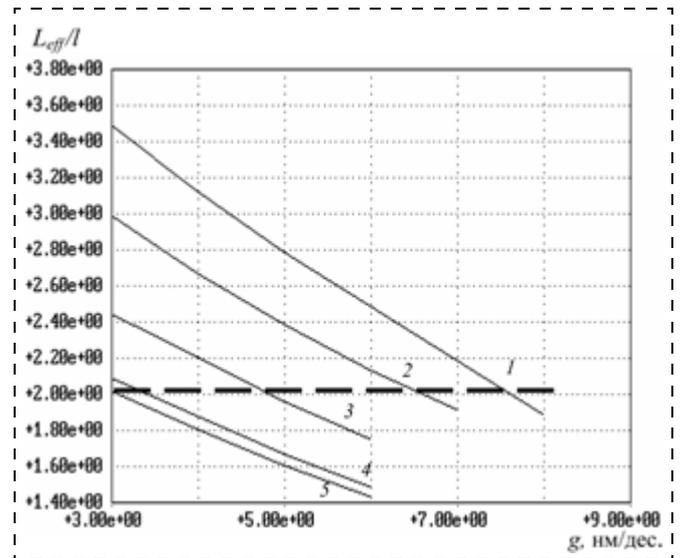


Рис. 3. Зависимость отношения  $L_{eff}/l$  от градиента концентрации  $g$  для транзистора с  $L_g = 22$  нм,

где кривая 1 —  $t_f = 1$  нм,  $t_{Si} = 5$  нм; 2 —  $t_f = 1$  нм,  $t_{Si} = 10$  нм; 3 —  $t_f = 2$  нм,  $t_{Si} = 5$  нм; 4 —  $t_f = 2$  нм,  $t_{Si} = 10$  нм; 5 —  $t_f = 3$  нм,  $t_{Si} = 5$  нм. Пунктирная линия  $L_{eff}/l = 2$

ные характеристики транзистора. При определении значения рабочей области, что является первым шагом при прогнозировании характеристик транзистора, необходимо учитывать ряд ограничений. К ним относятся проявления квантовых эффектов (например сдвига порогового напряжения), нескольких механизмов рассеяния на поверхности раздела кремний—оксид, увеличение сопротивления рабочей области и технологические ограничения при создании пленок без дефектов и т. д. Они подробно рассмотрены в работе [13]. Вместе с тем, большая толщина рабочей области нивелирует возможность регулировки порогового напряжения [9], а следовательно, и динамических характеристик транзистора [14]. Поэтому оптимальное значение толщины рабочей области лежит в диапазоне от 5 до 10 нм.

Как следует из рис. 3, толщина подзатворного диэлектрика из оксида кремния фронтального затвора не может превышать 3 нм, а квантовые эффекты, в частности туннельный ток через затвор, ограничивают толщину значением в 1 нм [15].

Протяженность зазора должна быть больше  $0,75L_g$ . Градиент легирования лежит в пределах от 3 до 5 нм/дес [13, 16]. Транзисторы с большой шириной зазора и крутым градиентом легирования обеспечивают достижения отношения  $L_{eff}/l > 2$  в широком диапазоне значений толщин оксидов. Однако следует учитывать, что рост параметра  $L_{eff}$  сопровождается пропорциональным снижением тока насыщения транзистора.

В результате уточненные параметры прототипа КМОП-транзисторов следующие: длина канала 22 нм;  $t_{Si}$ ,  $t_f$  и  $t_b$  равны 6, 2 и 50 нм, соответственно; параметр  $\gamma_{SOI} = 0,04$ ; максимальный уровень легирования стока/истока  $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ; низкополевая подвижность равна 380 и  $120 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  для  $n$ - и  $p$ -типов тран-

Динамические характеристики вентилях при напряжении питания 1 В

Вентиль	Параметры				
	$\tau_0$ , пс	$a_U$ , В <sup>-1</sup>	$\Delta\tau$ , пс	$P$ , мкВт при $f = 0,1$ ТГц	$\tau E$ , пс · фДж
Инвертор	2,8	0,33	1,3	15,5	0,43
2И-НЕ	5,8	0,51	2,4	31,0	1,86
2ИЛИ-НЕ	3,4	0,41	1,6	22,6	0,77

зисторов, соответственно. Остальные технологические параметры выбраны в соответствии с рекомендациями в работе [13]. С использованием модели полностью обедненного КНИ-нанотранзистора [17] в результате моделирования КМОП-транзисторы имеют следующие основные электрофизические параметры: ток  $I_{on} = 625$  мкА/мкм и  $537$  мкА/мкм; ток  $I_{off} = 50$  пА/мкм и  $23$  пА/мкм,  $U_{th} = 225$  мВ и  $-270$  мВ для  $n$ - и  $p$ -типа транзисторов, соответственно. Диапазон регулировки  $U_{th}$  в соответствии с работой [17] составляет  $160$  мВ и диапазон напряжений  $U_b$  равен  $-2...2$  В.

### 3. Временные задержки при переключениях

Проанализируем возможность управления задержкой вентилях путем изменения смещения обратного затвора транзисторов, входящих в их состав. Для идеального симметричного инвертора приемлемой оценкой его задержки является величина [9]

$$\tau = \frac{CU_{dd}}{I_{sat}}, \text{ где } C \text{ — полная эквивалентная емкость,}$$

заряжаемая и разряжаемая в тактовом цикле;  $U_{dd}$  — напряжение питания;  $I_{N_{sat}}$  — ток насыщения транзистора  $n$ -типа и  $p$ -типа. Тогда с учетом оценочного соотношения для тока насыщения транзистора, которое можно представить в виде [14]

$$I_{sat} = \frac{W\mu C_f}{2L_g(1+\gamma_{SOI})} (U_f - U_{th}^0 + \gamma_{SOI}U_b)^2, \text{ где } W \text{ —}$$

ширина канала транзистора,  $\mu$  — подвижность носителей в канале, выражение для задержки перепишем, например, в виде

$$\tau = \tau_0(1 - \alpha_U U_b), \quad (7)$$

где  $\tau_0 = \frac{L_g C U_{dd}}{2WC_f \mu (U_f - U_{th}^0)^2}$  — задержка при нулевом

смещении  $U_b$ ,  $\alpha_U = \gamma_{SOI} \frac{2}{U_f - U_{th}^0}$  — это крутизна ре-

гулировочной характеристики с размерностью В<sup>-1</sup>.

Из выражения (7) видно, что задержка инвертора будет обратно пропорционально зависеть от уровня смещения  $U_b$ , это определяет возможность синтеза динамических характеристик логических элементов. Диапазон управления задержкой будет определяться диапазоном регулировки  $U_{th}$ . Эффективность регулировки линейно зависит от значения параметра  $\gamma_{SOI}$  и, следовательно, определяется отношением технологических параметров как толщина оксидов фронтального и обратного затворов транзисторов.

### 4. Результаты численного моделирования

Вследствие сложного вида математических выражений, описывающих ток в данных нанотранзисторах, и зависимости их емкостей от напряжения  $U_b$ , модельные уравнения для данной цепи приходится решать численно с помощью программы HSPICE. В рамках настоящей работы рассчитаны динамиче-

ские характеристики логических элементов инверторов, схем 2И-НЕ и 2ИЛИ-НЕ, выполненных на выбранных транзисторах. В табл. 1 приведены основные характеристики вентилях при  $U_{dd} = 1$  В.

Проанализируем полученные результаты. В области напряжений  $U_b$  от  $-2$  до  $2$  В (где реализуется управление задержкой вентилях) зависимости задержки от напряжения  $U_b$  имеют линейный характер. Наибольшие крутизна  $\alpha_U$  и диапазон регулировки  $\Delta\tau$  присущ элементу 2И-НЕ, наименьшие — инвертору. При этом в процентном отношении задержку инвертора и элемента 2ИЛИ-НЕ можно уменьшить на  $25\%$ , в то время как элемента 2И-НЕ — на  $20\%$ . Активная мощность вентиля 2И-НЕ наибольшая из исследуемых вентилях и составляет  $31$  мкВт на частоте  $100$  ГГц.

На рис. 4 приведены зависимости задержки переключения инвертора от напряжения питания в диапазоне  $1...0,3$  В, рассчитанные с помощью программы HSPICE (кривая 1). Как видно из представленных данных, на участке  $U_{dd} > 0,6$  В значение задержки практически не зависит от значения напряжения питания. Уровень напряжения питания, с которого наблюдается резкий рост задержки, можно оценить, как напряжение насыщения транзистора. В диапазоне  $U_{dd} \leq 0,6$  В наблюдается резкий рост значения задержки. Аналогичные зависимости задержки, полученные из результатов моделирования, харак-

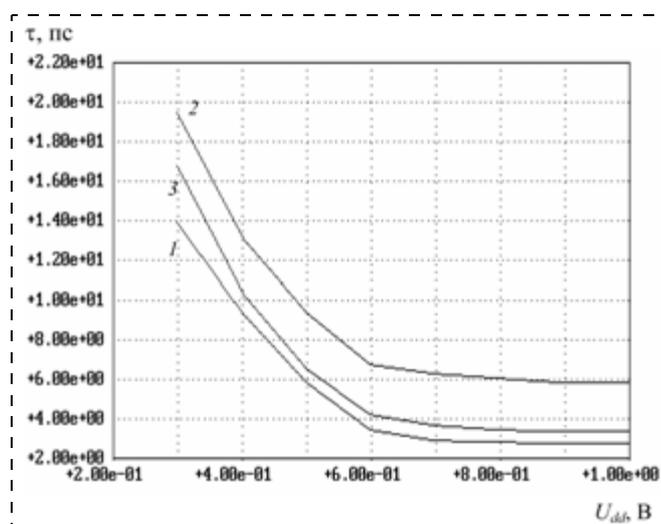


Рис. 4. Зависимость задержки вентилях от напряжения питания: кривая 1 — инвертор; 2 — 2ИЛИ-НЕ; 3 — 2И-НЕ

Динамические характеристики вентилях при напряжении питания 0,65 В

Вентиль	Параметры			
	$\tau_0$ , пс	$\tau_{min}$ , пс	$\Delta\tau$ , пс	$P$ , мкВт при $f = 0,1$ ТГц
Инвертор	3,0	2,4	1,27	2,8
2И-НЕ	6,5	5,4	2,23	4,5
2ИЛИ-НЕ	3,9	3,1	1,52	6,1

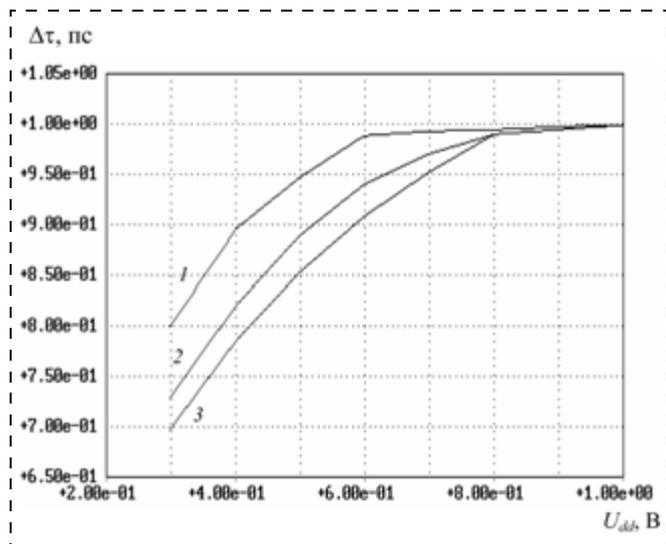


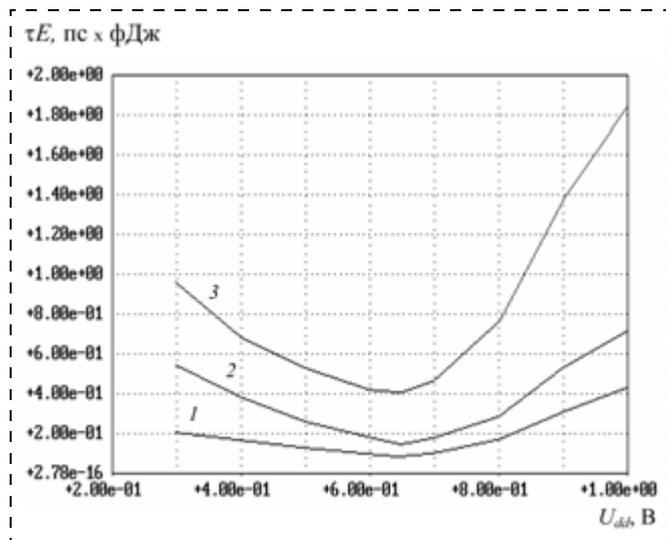
Рис. 5. Зависимость диапазона регулировки задержки вентилях от напряжения питания:

кривая 1 — инвертор; 2 — 2ИЛИ-НЕ; 3 — 2И-НЕ

терны и для двух других вентилях: 2И-НЕ (кривая 2) и 2ИЛИ-НЕ (кривая 3). При этом значение напряжения питания, при котором значение задержки начинает существенно возрастать, практически то же самое.

Зависимости диапазона изменения задержки от напряжения питания  $U_{dd}$  рассматриваемых вентилях приведены на рис. 5. В данном случае каждая зависимость нормирована относительно соответствующего значения при  $U_{dd} = 1$  В. При снижении напряжения питания уменьшается диапазон управления задержкой. При этом все зависимости имеют нелинейный характер. Наиболее чувствительным элементом является вентиль 2ИЛИ-НЕ (кривая 3), а самым устойчивым — инвертор (кривая 1), для которого параметр практически не изменяется до уровня напряжения питания 0,6 В.

На рис. 6 представлены зависимости произведения задержки на энергию переключения ( $\tau E$ ) от на-

Рис. 6. Зависимость произведения  $\tau E$  от напряжения питания:

кривая 1 — инвертор; 2 — 2ИЛИ-НЕ; 3 — 2И-НЕ

пряжения питания  $U_{dd}$  для тех же вентилях. Минимум исследуемого параметра для каждого вентиля достигается при напряжении питания 0,65 В, т. е. его положение не зависит от логической функции элемента. В табл. 2 приведены основные характеристики вентилях при данном уровне напряжения питания. Полученные данные позволяют сделать вывод о возможности разработки маломощной схемотехники с рабочей частотой 0,1 ТГц.

Изложенные результаты используются при разработке низковольтных СБИС на структурах КНИ. В общем случае, чтобы решить задачу о пригодности выбранной технологии для создания кристаллов, устойчиво работающих при малых напряжениях питания, необходимо на первоначальном этапе оценить возможности технологии по управлению эффективной длиной канала транзисторов путем, в большей степени, вариации градиента легирования стока/истока и в меньшей степени размера зазора. Таким образом, крутой градиент легирования стока/истока и оптимально выбранный размер зазора будут эффективно подавлять ККЭ. Эти данные могут служить руководством при разработке маломощной схемотехники. В случае, если технология не позволяет полностью реализовать требуемый уровень характеристик, следует на начальном этапе внести соответствующие коррективы в задание на типовые параметры транзисторов и изменения в схемотехническую реализацию схем.

## Заключение

В работе проанализирован один из возможных подходов разработки маломощной электроники применительно к полностью обедненным КМОП КНИ-нанотранзисторам, выполненным по технологическим нормам 32 нм. Рассмотрены критерии выбора технологических параметров транзисторов. Показана возможность синтеза динамических характеристик логических элементов. С помощью программы HSPICE численно исследованы динамические характеристики вентилях инвертор, 2И-НЕ, 2ИЛИ-НЕ в диапазоне напряжений питания от 0,3 до 1 В. Минимум параметра "энергия переключения × задержку" каждого вентиля соответствует напряжению питания 0,65 В. В диапазоне напряжений питания 1...0,65 В задержка переключения вентилях существенно меньше 10 пс. При этом активная мощность переключения на частоте 100 ГГц не превышает 50 мкВт. В совокупности это является предпосылкой для создания маломощной схемотехники, функционирующей в диапазоне 100 ГГц.

## Список литературы

1. **International** technology roadmap for semiconductor 2006 edition. Available from. URL: <http://public.itrs.net>.
2. **Luyken R. J., Schultz T., Hartwich J., Dreeskornfeld L., Stadle M., Risch L.** Design considerations for fully depleted SOI transistors in the 25–50 nm gate length regime // *Solid-State Electronics*. 2003. Vol. 47. P. 1199–1203.
3. **Kawamoto A., Sato S., Omura Y.** Engineering S/D diffusion for sub-100-nm channel SOI MOSFETs // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2004. Vol. 51. P. 907–913.
4. **Shenoy R. S., Saraswat K. C.** Optimisation of extrinsic source/drain resistance in ultrathin body double-gate FETs // *IEEE Trans. Nanotechnology*. 2003. Vol. 2. P. 265–270.
5. **Lim T. C., Armstrong G. A.** Parameter sensitivity for Optimal design of 65 nm node double gate SOI transistors // *Solid-State Electronics*. 2005. Vol. 49. P. 1034–1043.
6. **Kranti A., Armstrong G. A.** Performance assessment of nanoscale double and triple gate FinFETs // *Semiconductor Science and Technology*. 2006. Vol. 21. P. 409–421.
7. **Kranti A., Armstrong G. A.** Engineering source/drain extension regions in nanoscale double gate (DG) SOI MOSFETs: Analytical model and design considerations // *Solid-State Electronics*. 2006. Vol. 50. P. 437–447.
8. **Kranti A., Armstrong G. A.** Optimization of the source/drain extension region profile for suppression of short channel effects in sub-50 nm DG MOSFETs with high-k gate dielectrics // *Semiconductor Science and Technology*. 2006. Vol. 21. P. 1563–1572.
9. **Colinge J.-P.** *Silicon on Insulator Technology: Materials to VLSI*. Boston: Kluwer Acad. Publ., London: Dordrecht, 1977.
10. **Liang X., Taur Y.** A 2-D Analytical Solution for SCEs in DG MOSFETs // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2004. Vol. 51. P. 1385–1391.
11. **Frank D. J., Taur Y., Wong H. S. P.** Generalized scale length for two dimensional effects in MOSFETs // *IEEE Electron Device Letters*. 1998. Vol. 19. P. 385–387.
12. **Park J.-S., Lee S.-Y., Shin H., Dutton R. W.** Analytical analysis of short-channel effects in MOSFETs for sub-100 nm technology // *Electronics Letters*. 2002. Vol. 38. P. 1222–1223.
13. **Kranti A., Hao Y., Armstrong G. A.** Performance projections and design optimization of planar double gate SOI MOSFETs for logic technology applications // *Semiconductor Science and Technology*. 2008. Vol. 23. Article 045001.
14. **Масальский Н. В.** Полностью обедненные КНИ КМОП-нанотранзисторы для низковольтных применений // *Микроэлектроника*. 2008. Т. 38, № 6. С. 66–70.
15. **Taur Y.** Analytical solutions of charge and capacitance in symmetric double gate MOSFETs // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2001. Vol. 48. P. 2861–2869.
16. **Kranti A., Armstrong G. A.** Design and optimization of FinFETs for ultra-low-voltage analog applications // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2007. Vol. 54. N 12. P. 3308–3316.
17. **Захаров С. М., Масальский Н. В., Шафигуллин М. М.** Проблемы схемотехнического моделирования интегральных схем // *Успехи современной радиоэлектроники*. 2005. № 2. С. 43–50.

УДК 629.7.054

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

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАЗРАБОТКИ И СОЗДАНИЯ СУПЕРМИНИАТЮРНОГО МИКРОМЕХАНИЧЕСКОГО МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОГО ДАТЧИКА ИНЕРЦИАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ

*Рассмотрена возможность создания суперминиатюрного (объем < 1 мм<sup>3</sup>) микромеханического многофункционального (гироскоп + акселерометр) датчика инерциальной информации. Выведены и проанализированы уравнения движения датчика на произвольно движущемся основании с учетом температурных возмущений и технологических факторов. Предложены возможные конструктивные варианты упругого подвеса датчика. Получены с помощью построенных конечно-элементных моделей оценки напряженно-деформированного состояния датчика при механических и тепловых воздействиях. Проведена оценка эффективности функционирования датчика с учетом температурных и технологических погрешностей.*

**Ключевые слова:** суперминиатюрный микромеханический многофункциональный датчик инерциальной информации, уравнения движения, конечно-элементные модели, напряженно-деформированное состояние, температурные и технологические погрешности

### Введение и постановка задач

Известные конструкции [1–5] микромеханических гироскопов (ММГ) содержат дополнительные рамки и имеют сложную многокомпонентную структуру упругих элементов подвеса (некоторые схемы ММГ представлены на рис. 1), что приводит к высоким технологическим требованиям при изготовлении и дополнительным погрешностям прибора.

Поэтому представляется перспективной схема (рис. 2) суперминиатюрного "простого" микромеханического датчика инерциальной информации (одноосного гироскопа) без дополнительных рамок с поступательными малыми движениями чувствительного элемента (ЧЭ).

Эта же схема может служить основой не только ММГ, но и микромеханического акселерометра (ММА), т. е. основой суперминиатюрного (объем < 1 мм<sup>3</sup>) многофункционального датчика инерциальной информации (суперминиатюрный микромеханический гироскоп + акселерометр, сокращенно СММГА).

Конструкция такого осциллятора содержит ЧЭ 1, который крепится к корпусу 2 с помощью двух упругих элементов 5, 6 (двухсторонний подвес) или одного упругого элемента (консольный подвес). Наиболее простые формы упругих элементов подвеса —

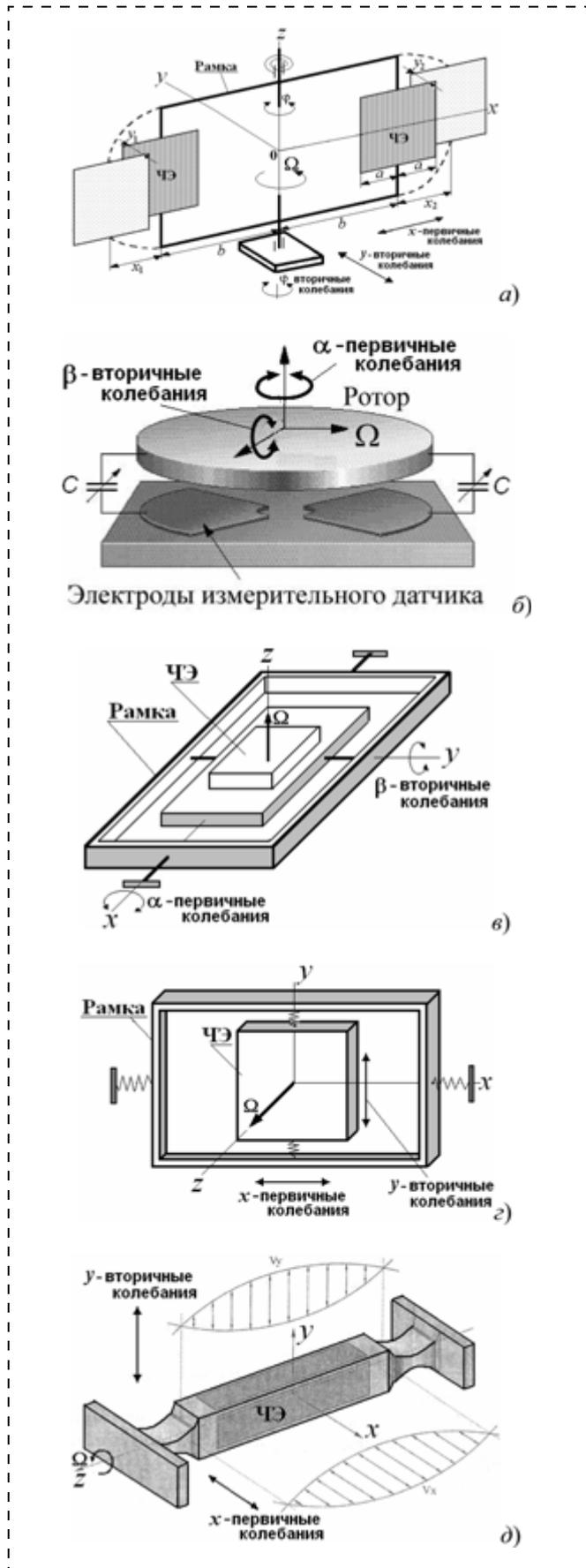


Рис. 1. Кинематические схемы микромеханических гироскопов: а — камертонный; б — роторный; в — карданный; г — планарный; д — стержневой

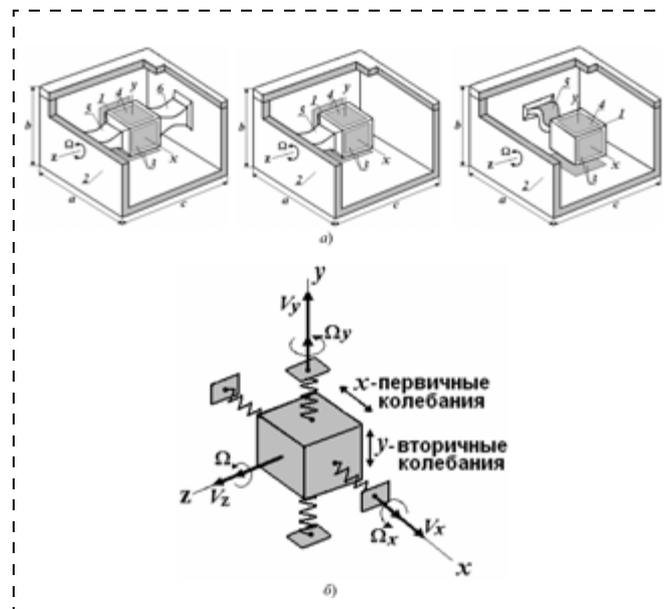


Рис. 2. Возможные конструктивные схемы (а) и кинематическая схема (б) СММГА:

1 — чувствительный элемент; 2 — корпус; 3, 4 — МЭМС-структуры для возбуждения первичных колебаний и съема выходной информации; 5, 6 — упругие элементы

прямолинейные стержни квадратного или круглого поперечного сечения, но могут быть и криволинейные формы элементов. Наиболее простая форма ЧЭ — это куб, но может быть и другой правильный многогранник.

*Принцип действия* такого "простого" ММГ традиционен. На противоположных гранях ЧЭ и корпусе располагают микроэлектромеханические (МЭМС) структуры для возбуждения первичных колебаний по оси  $x$  заданной амплитуды и частоты и для съема выходной информации — вторичных колебаний по оси  $y$ , обусловленных силами инерции Кориолиса при наличии измеряемой угловой скорости  $\Omega$ .

*Цель работы* — исследование с помощью построенной многокомпонентной математической модели возможности эффективного функционирования СММГА.

*Решаемые взаимосвязанные задачи.*

1. Вывод и анализ уравнений движения СММГА на произвольно движущемся основании, построение и исследование математической модели температурных и технологических погрешностей датчика.

2. Построение и исследование конечно-элементных моделей для расчета напряженно-деформированного состояния (НДС) датчика.

3. Оценка эффективности работы СММГА по точности измерений с учетом температурных и технологических погрешностей.

В процессе работы разработано поддерживающее алгоритмическое и программное обеспечение, использующее как созданные оригинальные программные комплексы, так и универсальные программы конечно-элементного анализа.

# 1. Уравнения движения и математическая модель температурных и технологических погрешностей СММГА

Для вывода уравнений движения температурно или технологически возмущенного датчика на подвижном основании воспользуемся формализмом Лагранжа.

Датчик будем рассматривать (см. рис. 2) как механическую систему, состоящую из ЧЭ, упруго связанного с корпусом, который жестко закреплен на подвижном объекте. Центр масс подвижного объекта перемещается со скоростью  $V(V_x, V_y, V_z)$  и объект вращается вокруг центра масс с угловой скоростью  $\Omega(\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$ . В общем случае составляющие скоростей и угловых скоростей — функции времени:  $V_x(t), V_y(t), V_z(t)$  и  $\Omega_x(t), \Omega_y(t), \Omega_z(t)$ . Полагаем, что измеряемая микромеханическим гироскопом угловая скорость в общем случае  $\Omega = \Omega_z(t)$ .

Измеряемые микромеханическим акселерометром ускорения  $\dot{V}_x, \dot{V}_y$ .

Полагаем, что в общем случае могут иметь место технологические или температурные смещения  $y_T, x_T, z_T$  центра масс ЧЭ. Обобщенные координаты будут  $x, y$ .

Выражение для кинетической энергии имеет следующий вид:

$$E = \frac{m}{2} [\dot{x} - \Omega(y + y_T) + \Omega_y z_T + V_x]^2 + \frac{m}{2} [\dot{y} + \Omega(x + x_T) - \Omega_x z_T + V_y]^2 + [\Omega_x(y + y_T) - \Omega_y(x + x_T) + V_z]^2;$$

обобщенные силы:  $Q_y = -cy - \mu\dot{y}$ ,  
 $Q_x = -cx - \mu\dot{x} + F^* \cos pt$ ,

где  $m$  — масса ЧЭ;  $c$  — жесткость упругих элементов;  $\mu$  — коэффициент демпфирования;  $F^*, p$  — амплитуда и частота вынуждающей силы.

Вычисляя составляющие уравнений Лагранжа 2-го рода на основе выражений для кинетической энергии и обобщенных сил, получим систему температурно или технологически возмущенных уравнений движения (математическую модель) многофункционального датчика инерциальной информации на подвижном основании:

$$\ddot{y} + \frac{\mu}{m} \dot{y} + (c/m - \Omega^2 - \Omega_x^2)y + 2\Omega\dot{x} + (\Omega_x\Omega_y + \dot{\Omega})(x + x_T) - (\Omega^2 + \Omega_x^2)y_T + (\Omega_y\Omega + \dot{\Omega}_x)z_T - \Omega_x V_z + \Omega V_x + \dot{V}_y = 0, \quad (1)$$

$$\ddot{x} + \frac{\mu}{m} \dot{x} + (c/m - \Omega^2 - \Omega_y^2)x - 2\Omega\dot{y} + (\Omega_x\Omega_y - \dot{\Omega})(y + y_T) - (\Omega^2 + \Omega_y^2)x_T + (\Omega_x\Omega + \dot{\Omega}_y)z_T + \Omega_y V_z - \Omega V_y + \dot{V}_x = F \cos pt, \quad (2)$$

где  $F = F^*/m, m = m_0 + m_T, \mu = \mu_0 + \mu_T, c = c_0 + c_T; m_0, m_T$  — номинальные и технологически измененные значения масс;  $\mu_0, c_0, \mu_T, c_T$  — номинальные и

возмущенные коэффициенты демпфирования и жесткости упругих элементов.

В этих уравнениях упругий подвес представляется как пружина с жесткостью  $c$  и сосредоточенной массой  $m$ . Жесткость  $c$  такой пружины выбирается из условия резонансной настройки  $k_2 = c/m = p^2$  осциллятора.

Построенную математическую модель (1), (2) и кинематическую схему, показанную на рис. 2, можно считать обобщенными для представленных на этом же рисунке конструктивных вариантов датчика с консольными и двухсторонними подвесами.

В самом деле, рассмотрим более детально датчик с криволинейной гармонической формой упругого элемента. Его конструктивная и кинематическая схема, учитывающая поступательные первичные колебания и угловые вторичные колебания, возникающие за счет сил инерции Кориолиса при наличии переносной угловой скорости  $\Omega$  основания, представлены на рис. 3.

Здесь обычная пружина имитирует упругость подвеса при поступательных первичных колебаниях, а спиральная пружина — упругость подвеса в угловом направлении вторичных колебаний.

Получим уравнения движения рассматриваемого осциллятора.

Полагаем, что имеем "идеальный" (без погрешностей) микромеханический датчик на основании, вращающемся только с постоянной измеряемой угловой скоростью  $\Omega = \text{const}$ .

Обобщенные координаты —  $s, \beta$ .

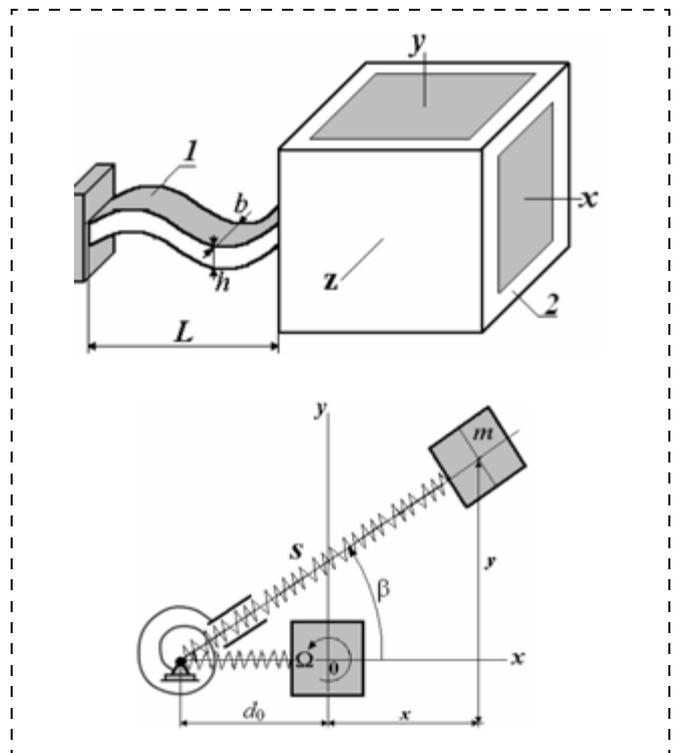


Рис. 3. Консольный подвес ЧЭ (2) с криволинейной гармонической формой упругого элемента (1) и его кинематическая схема

Выражения для кинетической энергии и обобщенных сил:

$$E = m[s\dot{\beta} + \Omega(s - d_0 \cos\beta)]^2/2 + m[\dot{s} - \Omega d_0 \sin\beta]^2/2,$$

$$Q_\beta = -c_\beta \beta - \mu s^2 \dot{\beta} - F^* s \cos pt \sin\beta, \\ Q_s = -c_s(s - d_0) - \mu \dot{s} + F^* \cos pt \cos\beta,$$

где  $m$  — масса ЧЭ;  $c_\beta$ ,  $c_s$  — жесткости пружин;  $\mu$  — коэффициент демпфирования;  $d_0$  — длина недеформированной пружины;  $F^*$ ,  $p$  — амплитуда и частота вынуждающей силы.

Вычисляя составляющие уравнений Лагранжа 2-го рода, получим уравнения движения рассматриваемого датчика инерциальной информации:

$$\ddot{\beta} + \frac{\mu}{m} \dot{\beta} + \frac{c_\beta}{ms^2} \beta + \frac{2\Omega}{s} \dot{s} + \frac{2}{s} \dot{\beta} - \frac{\Omega^2 d_0}{s} \sin\beta = \\ = -\frac{F^* \cos pt}{ms} \sin\beta;$$

$$\ddot{s} + \frac{\mu}{m} \dot{s} + \left(\frac{c_s}{m} - \Omega^2 - \dot{\beta}^2\right) s - 2\Omega s \dot{\beta} + \\ + d_0 \left(\Omega^2 \cos\beta - \frac{c_s}{m}\right) = \frac{F^* \cos pt}{m} \cos\beta.$$

Для малых  $\beta$ ,  $s$  и их производных получим линеаризованные уравнения:

$$\ddot{\beta} + \frac{\mu}{m} \dot{\beta} + \left(\frac{c_\beta}{ms^2} - \frac{\Omega^2 d_0}{s}\right) \beta + \frac{2\Omega}{s} \dot{s} + \\ + \frac{2}{s} \dot{\beta} = -\frac{F^* \cos pt}{ms} \beta;$$

$$\ddot{s} + \frac{\mu}{m} \dot{s} + \left(\frac{c_s}{m} - \Omega^2 - \dot{\beta}^2\right) s - 2\Omega s \dot{\beta} + \\ + d_0 \left(\Omega^2 - \frac{c_s}{m}\right) = \frac{F^* \cos pt}{m}.$$

Поскольку для малых  $\beta$ ,  $s$  и их производных можно принять

$$s = x + d_0 \approx d_0, \dot{s} = \dot{x}, \ddot{s} = \ddot{x}; \\ \beta = y/d_0, \dot{\beta} = \dot{y}/d_0, \ddot{\beta} = \ddot{y}/d_0,$$

то полученные уравнения можно привести к виду:

$$\ddot{y} + \frac{\mu}{m} \dot{y} + \left(\frac{c_\beta}{md_0^2} - \Omega^2\right) y + \\ + 2\Omega \dot{x} + \frac{2\dot{x}\dot{y}}{d_0} = -\frac{F^* y \cos pt}{md_0},$$

$$\ddot{x} + \frac{\mu}{m} \dot{x} + \left(\frac{c_s}{m} - \Omega^2 - \frac{\dot{y}^2}{d_0^2}\right) x - \\ - 2\Omega \dot{y} - \frac{2\Omega \dot{y}}{d_0} x = \frac{F^* \cos pt}{m}.$$

Эти уравнения отличаются от уравнений движения (1), (2), записанных для "идеального" датчика на вращающемся с постоянной угловой скоростью  $\Omega$  основании, только наличием подчеркнутых слагаемых.

Как видим, учет неперпендикулярности направлений первичных и вторичных колебаний в датчике с криволинейной гармонической формой упругого элемента приводит к дополнительным малым погрешностям второго порядка в левых частях уравнений первичных и вторичных колебаний. Особо отметим наличие в правой части информационного уравнения вторичных колебаний малой (по сравнению с вынуждающей силой в уравнении первичных колебаний) гармонически изменяющейся вынуждающей силы  $F^* y \cos pt / md_0$ , появляющейся за счет неперпендикулярности первичных и вторичных колебаний.

Далее рассмотрим более детально датчик с прямолинейной формой упругого элемента и консольно закрепленным чувствительным элементом.

Его конструктивная и кинематическая схема, учитывающая угловые первичные колебания по  $\alpha$  с заданной амплитудой и частотой, и вторичные колебания по  $\beta$ , возникающие за счет сил Кориолиса при наличии переносной угловой скорости  $\Omega$  основания, показаны на рис. 4.

Здесь спиральная пружина имитирует одинаковую упругость подвеса в угловых направлениях первичных и вторичных колебаний. Получим уравнения движения рассматриваемого осциллятора. Полагаем, что имеем "идеальный" датчик на основании, вращающемся с угловой скоростью  $\Omega = \text{const}$ . Обобщенные координаты  $\alpha$ ,  $\beta$ .

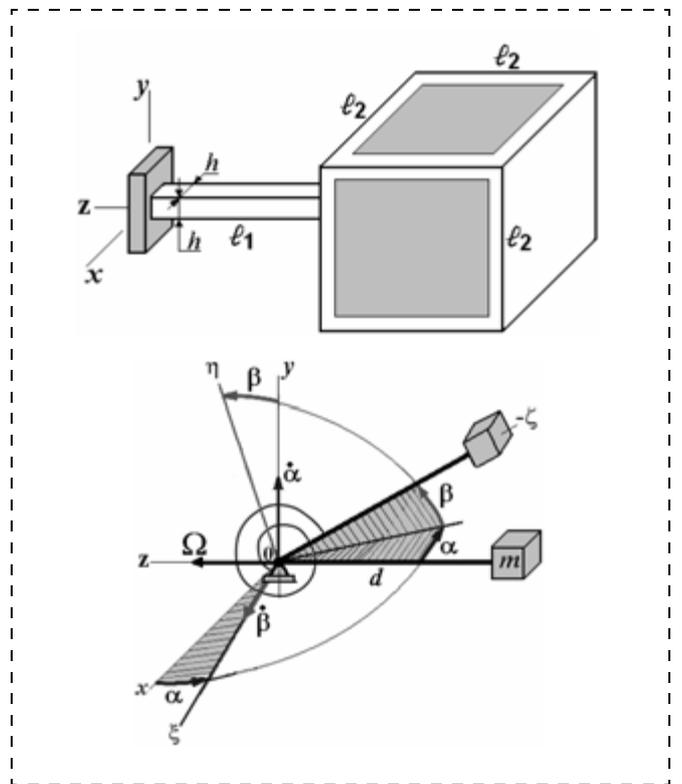


Рис. 4. Консольный подвес ЧЭ с прямолинейной формой упругого элемента и его кинематическая схема

Выражения для кинетической энергии и обобщенных сил:

$$E = md^2 [\dot{\beta} - \Omega \sin \alpha]^2 / 2 + md^2 [\dot{\alpha} \cos \beta + \Omega \sin \beta]^2 / 2;$$

$$Q_\beta = -c\dot{\beta} - \mu\ddot{\beta}; \quad Q_\alpha = -c\dot{\alpha} - \mu\ddot{\alpha} + M_0 \cos pt \cos \alpha,$$

где  $m$  — масса ЧЭ;  $c, \mu$  — коэффициенты жесткости и демпфирования;  $d$  — длина упругого элемента;  $M_0, p$  — амплитуда и частота вынуждающего момента.

Вычисляя составляющие уравнений Лагранжа 2-го рода, получим нелинейные уравнения движения рассматриваемого датчика инерциальной информации:

$$\begin{aligned} & \ddot{\beta} + \frac{\mu}{md^2} \dot{\beta} + \frac{c}{md^2} \beta - \\ & - \Omega \dot{\alpha} (\cos \alpha + \cos 2\beta) + \left( \frac{\dot{\alpha}^2 - \Omega^2}{2} \right) \sin 2\beta = 0, \\ & (\cos^2 \beta) \ddot{\alpha} + \frac{\mu}{md^2} \dot{\alpha} + \frac{c}{md^2} \alpha + \Omega \dot{\beta} (\cos \alpha + \cos 2\beta) - \\ & - \dot{\alpha} \dot{\beta} \sin 2\beta - \frac{\Omega^2}{2} \sin 2\alpha = \frac{M_0}{md^2} \cos pt \cos \alpha. \end{aligned}$$

Для малых  $\beta, \alpha$  и их производных получим линеаризованные уравнения:

$$\begin{aligned} & \ddot{\beta} + \frac{\mu}{md^2} \dot{\beta} + \left( \frac{c}{md^2} - \Omega^2 \right) \beta - 2\Omega \dot{\alpha} + \frac{\dot{\alpha}^2}{2} \beta = 0, \\ & \ddot{\alpha} + \frac{\mu}{md^2} \dot{\alpha} + \left( \frac{c}{md^2} - \Omega^2 \right) \alpha + 2\Omega \dot{\beta} - \\ & - \frac{2\dot{\alpha}\dot{\beta}}{md^2} = \frac{M_0}{md^2} \cos pt. \end{aligned}$$

Поскольку, для малых  $\beta, \alpha$  и их производных можно записать приближенные соотношения:  $\beta = y/d, \dot{\beta} = \dot{y}/d, \ddot{\beta} = \ddot{y}/d, \alpha = x/d, \dot{\alpha} = \dot{x}/d, \ddot{\alpha} = \ddot{x}/d$ , то полученные уравнения можно привести к виду:

$$\begin{aligned} & \ddot{y} + \frac{\mu}{md^2} \dot{y} + \left( \frac{c}{md^2} - \Omega^2 \right) y + 2\Omega \dot{x} - \frac{\dot{x}^2}{d^2} y = 0, \\ & \ddot{x} + \frac{\mu}{m} \dot{x} + \left( \frac{c}{md^2} - \Omega^2 \right) x - 2\Omega \dot{y} - \frac{2\dot{x}\dot{y}}{d^2} = \frac{M_0}{md} \cos pt. \end{aligned}$$

Эти уравнения отличаются от уравнений движения (1), (2), записанных для "идеального" датчика при  $\Omega = \text{const}$ , только наличием подчеркнутых слагаемых.

Как видим, учет неперпендикулярности направлений первичных и вторичных колебаний в датчике с прямолинейной формой упругого элемента и консольным подвесом ЧЭ приводит к дополнительным малым погрешностям второго и третьего порядка в левых частях уравнений первичных и вторичных колебаний.

Таким образом, модель (1), (2) и кинематическую схему СММГА на рис. 2 можно считать *обобщенными*

для представленных на этом же рисунке конструктивных вариантов датчика с консольными и двухсторонними подвесами и использовать для дальнейших исследований.

Важным является вопрос функционирования прибора в режиме гироскопа-акселерометра, т. е. одновременного измерения угловой скорости  $\Omega$  и ускорения, например  $\dot{V}_y$ , для случаев, когда эти величины постоянные или переменные.

Результаты численного интегрирования и фазовые портреты  $(y, \dot{y})$  системы (1), (2) для "идеального" датчика инерциальной информации (без погрешностей и перекрестных движений основания) в режиме измерения постоянной угловой скорости  $\Omega = 1 \text{ с}^{-1}$  (или изменяющейся по гармоническому закону  $\Omega = \Omega_0 \sin \omega t$ ) и постоянного ускорения  $w = \dot{V}_y = 10 \text{ м/с}^2$  (или изменяющегося по гармоническому закону  $w = V_y V_0 \omega \cos \omega t$ ) представлены на рис. 5.

Приняты следующие характеристики СММГА с резонансной настройкой  $c_0/m_0 = p^2$ , близкие к характеристикам планарного (см. рис. 1) ММГ [3]:

$$\begin{aligned} m_0 &= 10^{-8} \text{ кг}, \quad A_x = 20 \text{ мкм}, \quad p = 2\pi \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}, \\ F^* &= 1,256 \cdot 10^{-6} \text{ Н}, \quad \mu_0 = 10^{-5} \text{ кг/с}. \end{aligned}$$

При моделировании процессов с гармонически изменяющимися измеряемыми величинами выбраны следующие значения параметров. Амплитуда угловой скорости принята равной  $\Omega_0 = 4 \text{ с}^{-1}$ , амплитуда ускорения  $w_0 = V_0 \omega = 10 \text{ м/с}^2$ . Частота измеряемых величин принята существенно меньшей частоты колебаний осциллятора  $\omega = 0,1p \text{ с}^{-1}$ .

Как видим (рис. 5, а), установившиеся вторичные колебания ЧЭ по  $y$  имеют постоянную амплитуду  $A_y$ , служащую мерой постоянной измеряемой угловой скорости, и постоянное отклонение  $H_y$ , служащее мерой постоянного измеряемого ускорения.

В случае переменных измеряемых величин (рис. 5, б) вторичные колебания, пропорциональные измеряемой угловой скорости, имеют амплитуду  $A_y$  и частоту  $p$ . Вторичные колебания, пропорциональные измеряемому ускорению, имеют другие амплитуду  $H_y$  и частоту  $\omega$ .

Полученные результаты показывают *принципиальную возможность* измерений ускорений и угловых скоростей в одном датчике.

Рассмотрим задачу определения температурных (или технологических) погрешностей рассматриваемого датчика на основе уравнений (1), (2).

Первое (информационное) уравнение этой системы, определяющее поступательные колебания чувствительного элемента по  $y$ , содержит основную инерциальную информацию об измеряемой угловой скорости  $\Omega$ .

Индекс  $T$  у параметров и переменных системы (1), (2) означает, имеет место "температурная" (обусловленная температурными возмущениями) или "технологическая" (обусловленная технологическими несовершенствами) малая постоянная добавка

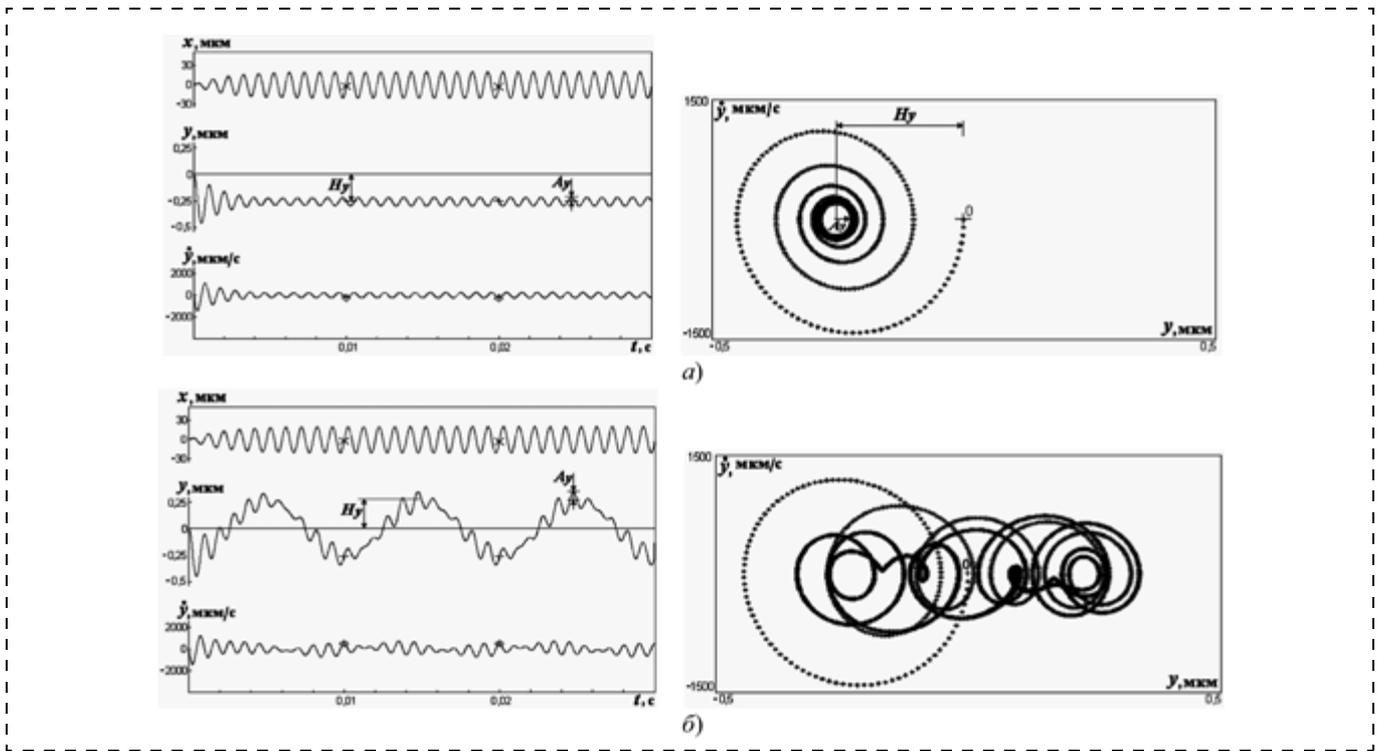


Рис. 5. Динамические характеристики и фазовые портреты "идеального" СММГА:

*a* — измеряются постоянная угловая скорость  $\Omega = 1 \text{ c}^{-1}$  и постоянное ускорение  $10 \text{ м/с}^2$ ; *б* — измеряются гармонически изменяющиеся угловая скорость  $\Omega = \Omega_0 \sin \omega t$  и ускорение  $w = w_0 \cos \omega t$

к номинальному значению. В случае исследования влияния температурных воздействий на точность датчика (температурный дрейф) необходимо [3] получить соответствующие данные о значениях параметров с индексом  $T$  на основе, например, изучения математических моделей тепловых процессов и построенных конечно-элементных моделей прибора.

При изучении влияния технологических изменений параметров датчика на его точность (технологический дрейф) значения этих параметров задаются как исходные данные в виде системы допусков со своими знаками на номинальные значения параметров.

Применим разработанную методику [3, 5] для качественных и количественных оценок температурного или технологического дрейфа рассматриваемого датчика на основе информационного уравнения (1). По этой методике записываются суммы сил для датчика на неподвижном основании при наличии погрешностей, затем записываются суммы сил для датчика на подвижном основании, но без учета погрешностей.

Приравнивая эти суммы и разрешая уравнение относительно  $\Omega$ , получим выражения для приближенной оценки угловой скорости дрейфа ВТГ:

$$\begin{aligned} \Omega_{dr} \approx & \frac{1}{2m_0 A_x p} (m_T \ddot{y} + \mu_T \dot{y} + c_T y) + \\ & + \frac{m_0 + m_T}{2m_0 A_x p} \left( -\Omega_x^2 y + \Omega_x \Omega_y x + \Omega_x \Omega_y x_T - \right. \\ & \left. - \Omega_x^2 y_T - \dot{\Omega}_x z_T - \Omega_x V_z + \dot{V}_y \right), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $A_x$  — заданная амплитуда возбуждаемых первичных колебаний ЧЭ.

Качественный анализ выражения (3) показывает следующее.

- Слагаемые в первой скобке определяют составляющие дрейфа за счет температурных или технологических отклонений демпфирования  $\mu_T$ , жесткости  $c_T$  упругих элементов или технологических изменений  $m_T$  массы ЧЭ от номинальных значений.
- Слагаемые во второй скобке определяют составляющие дрейфа за счет перекрестных угловых и поступательных скоростей и ускорений подвижного объекта, на котором установлен СММГА, при наличии и отсутствии температурных или технологических разбалансировок  $x_T, y_T, z_T$ .
- Наиболее существенным во второй скобке представляется влияние дополнительной составляющей силы инерции Кориолиса, определяемой слагаемым  $\Omega_x V_z$  (вращение объекта вокруг оси первичных колебаний  $x$  с одновременным поступательным движением по измерительной оси  $z$ ) при значительных скоростях  $V_z$  объекта.

Для количественной оценки температурных и технологических погрешностей СММГА будем искать частное решение системы (1), (2) при  $\Omega = \text{const}$ , и отсутствии перекрестных угловых и поступательных движений основания, в виде:

$$y = y_0 + G_1 \cos pt + G_2 \sin pt = y_0 + G \sin(pt + \delta), \quad (4)$$

$$x = x_0 + H_1 \cos pt + H_2 \sin pt = x_0 + H \sin(pt + \sigma), \quad (5)$$

где  $G = \sqrt{G_1^2 + G_2^2}$ ,  $H = \sqrt{H_1^2 + H_2^2}$ ,  $\text{tg} \delta = G_1/G_2$ ,  $\text{tg} \sigma = H_1/H_2$ .

Подставляя (4), (5) в (1), (2), получим следующие соотношения:

$$G_1 = \Delta_4/\Delta, G_2 = \Delta_3/\Delta, H_1 = \Delta_2/\Delta, H_2 = \Delta_1/\Delta,$$

$$y_0 = \Omega^2 y_T / (c/m - \Omega^2), x_0 = \Omega^2 x_T / (c/m - \Omega^2), \quad (6)$$

где  $\Delta_1 = (a_1^2 a_3 + a_2^2 a_3 + a_3^2)F$ ,  $\Delta_2 = (-a_1^2 a_2 + a_2^3 + a_3^2 a_2)F$ ,  $\Delta_3 = F(-a_1^3 + a_1 a_2^2 - a_1 a_3^2)$ ,  $\Delta_4 = -2a_1 \times a_2 a_3 F$ ,  $\Delta = a_1^4 - 2a_1^2 a_2^2 + 2a_1^2 a_3^2 + a_2^4 + 2a_2^2 a_3^2 + a_3^4$ ,  $a_1 = 2\Omega\rho$ ,  $a_2 = c/m - \Omega^2 - \rho^2$ ,  $a_3 = \mu\rho/m$ .

При наличии температурных или технологических погрешностей датчика имеем возмущенную амплитуду и фазу колебаний ЧЭ:

$$G_{yT} = y_0 + G_T, \text{tg} \delta_T = G_{1T}/G_{2T}. \quad (7)$$

При отсутствии этих погрешностей будем иметь

$$G_y = G, \text{tg} \delta = G_1/G_2. \quad (8)$$

Полагая амплитуду вторичных колебаний ЧЭ пропорциональной измеряемой угловой скорости, получим формулы для оценки погрешностей датчика по амплитуде и фазе:

$$\varepsilon_y = (G_y - G_{yT})100\%/G_y, \varepsilon_\delta = \delta_T - \delta. \quad (9)$$

Полученные формулы (3)–(9) и есть математическая модель температурных или технологических погрешностей СММГА. Для получения количественных оценок дрейфа численно интегрируется система (1), (2) и используются полученные формулы (3)–(9).

Влияние технологических допусков на амплитуду вторичных колебаний СММГА при различных измеряемых угловых скоростях показано на рис. 6.

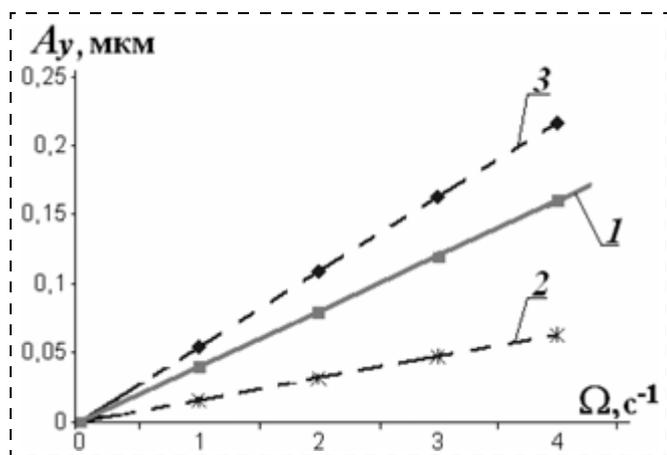


Рис. 6. Зависимости амплитуд вторичных колебаний ЧЭ от измеряемой угловой скорости:

1 — "идеальный" датчик; 2 — неблагоприятное сочетание допусков  $+10\% m_T, -10\% m_T, +10\% c_T$ ; 3 — благоприятное сочетание допусков  $-10\% m_T, +10\% m_T, +10\% c_T$

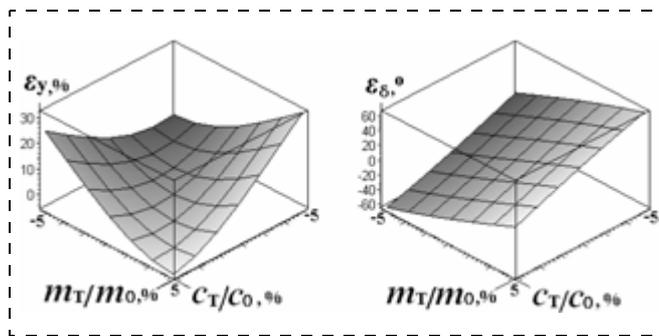


Рис. 7. Относительные погрешности СММГА по амплитуде  $\varepsilon_y$  и по фазе  $\varepsilon_\delta$

При неблагоприятном, в рассмотренном диапазоне, сочетании 10 %-ных допусков амплитуда вторичных колебаний ЧЭ уменьшается на 61 % от номинального значения. При благоприятном сочетании допусков, амплитуда вторичных колебаний увеличивается на 36 %.

Относительные технологические погрешности СММГА по амплитуде  $\varepsilon_y$  (%) и по фазе  $\varepsilon_\delta$  (угловые градусы) как функции относительных изменений массы ЧЭ и жесткости его подвеса, при измеряемой угловой скорости  $\Omega = 1 \text{ с}^{-1}$ , приведены на рис. 7.

Максимальное значение погрешности по амплитуде для СММГА  $\varepsilon_y = 32\%$ , погрешности по фазе  $\varepsilon_\delta = 64^\circ$ .

Технологические или температурные смещения  $y_T, x_T$  центра масс ЧЭ практически не влияют на выходные характеристики датчика, поскольку нормальные переносные силы инерции, обусловленные слагаемыми  $\Omega^2 y_T, \Omega^2 x_T$  в уравнениях (1), (2), при поступательных высокочастотных колебаниях ЧЭ существенно меньше (на порядки) остальных слагаемых (1), (2).

Сравнительные исследования погрешностей СММГА и наиболее близкого ему планарного ММГ [3] показали, что погрешности этих датчиков качественно и количественно совпадают.

Таким образом, согласно проведенному анализу, СММГА — датчик, *весьма чувствительный* к технологическим изменениям жесткости упругого подвеса и массы ЧЭ, как и планарный ММГ [3].

## 2. Конечно-элементные модели для расчета и анализа напряженно-деформированного состояния СММГА

Для решения задач расчета и исследования упругого и термоупругого напряженно-деформированного состояния (НДС) датчика использована универсальная система конечно-элементного анализа ANSYS, реализующая метод конечных элементов.

Конечно-элементные модели датчика с консольными и двусторонним подвесами без корпуса и в корпусе, сгенерированные с помощью пакета ANSYS, представлены на рис. 8 (см. третью сторону обложки).

Исследование характеристик НДС упругого подвеса, обеспечивающих заданные параметры колебаний СММГА и позволяющих оценить прочность рассматриваемых конструкций, проведено аналитически методами теории упругости и термоупругости и численно на построенных конечно-элементных моделях.

Полагалось, что на ЧЭ действует механическая нагрузка, соответствующая максимальной амплитуде вынуждающей силы, обеспечивающей первичные колебания ЧЭ.

На **первом этапе** решалась задача выбора жесткости консольного или двухстороннего подвеса и его геометрических параметров, обеспечивающих при механическом силовом воздействии заданную амплитуду первичных колебаний.

Исходные данные: материал — кремний,  $E = 190$  ГПа;  $\rho = 2228$  кг/м<sup>3</sup>; силовое воздействие  $F_{э\text{кв}} = 6,28F^* = 7,9 \cdot 10^{-6}$  Н; частота вынужденных колебаний  $p = 2\pi \cdot 10^3$  с<sup>-1</sup>; заданные геометрические параметры  $l_2 = l_1 = l = 165$  мкм; масса ЧЭ  $m = 10^{-8}$  кг. Датчик работает в резонансном режиме  $c/m = p^2$  с учетом сил вязкого сопротивления  $\mu = 10^{-5}$  кг/с.

Получены следующие результаты. Жесткость подвеса  $c = 0,394$  Н/м. Она обеспечивается прямолинейным стержневым упругим элементом квадратного сечения со стороной  $h \approx 3,7$  мкм или круглого поперечного сечения диаметром  $\approx 4,2$  мкм. Амплитуда вынужденных первичных колебаний ЧЭ составила  $\approx 20$  мкм. Максимальные главные нормальные напряжения для консольного упругого подвеса и статических нагрузок составляют  $\sigma_{\text{max}} = 0,24 \dots 0,28$  ГПа и имеют место в месте крепления упругого элемента. При динамических нагрузках эти напряжения в  $\sim 2\pi$  раз больше.

Для двухстороннего подвеса выбранная жесткость подвеса может быть обеспечена, например, двумя прямолинейными стержневыми упругими элементами квадратного сечения со стороной  $h \approx 1,8$  мкм. При этом напряжения для двухстороннего подвеса примерно в 2 раза превышают напряжения для консольного подвеса и имеют место в местах крепления упругих элементов к основанию и к ЧЭ.

Деформированное состояние ЧЭ в консольном или двухстороннем подвесе, с полученными характеристиками, представлено на рис. 9 (см. третью сторону обложки).

Рассчитанные значения геометрических параметров СММГА вполне реализуемы и обеспечивают минимальный объем датчика с учетом корпуса, но без учета сервисной электроники, на уровне  $< 1$  мм<sup>3</sup>.

Предел прочности рассмотренных упругих кремниевых элементов, работающих на изгиб,  $\leq 0,5$  ГПа [5, 6]. Как видим, полученные значения напряжений в датчике значительны, и необходимо принятие мер по обеспечению вибропрочности подвеса (например, изменение геометрических параметров упругих элементов, их формы и др.).

Одной из таких мер является [4] применение в СММГА упругого элемента с криволинейной гармонической формой (см. рис. 3). В этом случае уп-

ругий элемент при реализации вынужденных первичных колебаний работает на растяжение—сжатие и его предел прочности  $\leq 2,5$  ГПа, существенно больше, чем при изгибе.

Деформированное и напряженное состояние датчика в подвесе с гармонической формой упругого элемента при действии механической нагрузки на растяжение по оси первичных колебаний представлено на рис. 10 (см. четвертую сторону обложки). Черными линиями показано недеформированное состояние датчика.

Как видим, максимальные главные нормальные напряжения  $\sigma_{\text{max}} \leq 0,6$  ГПа существенно меньше допускаемых напряжений 2,5 ГПа и имеют место в местах наибольших изгибов криволинейного упругого элемента.

На **втором этапе** проведена оценка влияния температурных воздействий на НДС датчика и его погрешности.

Предполагаем, что механическая нагрузка на изгиб не действует и упругий подвес изготовлен "идеально", т. е. без технологических погрешностей.

Диапазон температурных воздействий на датчик может составить в предельном случае  $\Delta T = T - T_{\text{ном}} = (-70 \dots +70)$  °С, где  $T_{\text{ном}} = +20$  °С.

Решая задачу приближенной аналитической оценки термоупругого одноосного НДС консольного или двухстороннего упругого подвеса датчика [6, 7] при рассматриваемых температурных воздействиях, получим следующие результаты.

Пусть, для определенности, температура повысилась на  $\Delta T = +70$  °С.

Характеристики упругого подвеса:  $E = 190$  ГПа;  $l_2 = l_1 = l = 165$  мкм;  $h = 3,7$  мкм, максимальный коэффициент температурного расширения  $\alpha_T = 7 \cdot 10^{-6}$  °С<sup>-1</sup>.

При консольном подвесе максимальное удлинение составит  $\Delta l_T = \alpha_T \Delta T (l_1 + l_2) \approx 0,16$  мкм. Наряду с этим в консольном подвесе не возникнет.

Иная картина в двухстороннем симметричном подвесе.

Максимальные перемещения сечений подвеса и напряжения

$$\Delta z_{\text{max}} = \frac{(1 - h^2/l^2)}{2 + h^2/l^2} \alpha_T \Delta T l \approx 0,04 \text{ мкм};$$

$$\sigma_{\text{max}} = E \frac{2(1 - h^2/l^2)}{2 + h^2/l^2} \alpha_T \Delta T \approx 0,09 \text{ ГПа}.$$

Полученные данные вносят погрешности в выходные и прочностные характеристики СММГА, которые необходимо учитывать, если разрабатывается высокоточный и высоконадежный датчик. Например, длина  $l$  упругого элемента изменяется в пределах 0,1...0,024 % в зависимости от типа подвеса при рассмотренных температурных воздействиях. Это может привести к изменениям жесткости подвеса на 0,25...0,06 %, что, в свою очередь, может привести к изменениям выходного сигнала датчика на 1...0,3 %.

Такие изменения существенны для точных приборов.

Другой пример. Было получено максимальное главное нормальное напряжение для двухстороннего упругого подвеса механических силовых воздействий на уровне  $\sigma_{\max} = 0,48$  ГПа при отсутствии температурных воздействий. При действии температуры на упругий подвес могут возникнуть дополнительные температурные напряжения, достигающие 18 % от  $\sigma_{\max}$ , что также необходимо учитывать при разработке надежного датчика инерциальной информации.

Важно отметить, что полученные оценки носят приближенный характер. На самом деле будет иметь место сложная объемная упругая и термоупругая деформация датчика в условиях механических и температурных воздействий и при определенных граничных условиях закрепления. Поэтому необходим детальный тепловой и конечно-элементный анализ СММГА.

Для моделирования близкой к реальной ситуации полагаем, что кремниевый ЧЭ в двухстороннем подвесе расположен в корпусе также из кремния (рис. 11). Габаритные размеры жестко закрепленного на основании корпуса (см. рис. 2),  $a = b = 0,44$  мм;  $c \leq 0,64$  мм (объем  $< 0,2$  мм<sup>3</sup>). Толщина стенок корпуса 0,02 мм; размеры  $l_1 = l_2 = 0,165$  мм,  $h = 0,0037$  мм.

На рис. 11 (см. четвертую сторону обложки) показано деформированное состояние датчика в корпусе при его нагреве до температуры  $\Delta T = +70$  °С, и охлаждении до  $\Delta T = -70$  °С. Недеформированное состояние показано сплошными линиями. Штриховыми линиями выделено деформированное состояние упругого подвеса ЧЭ.

Максимальные перемещения ( $\sim 0,4$  мкм) достигаются при охлаждении и имеют место на корпусе в местах, наиболее удаленных от основания. Элементы упругого подвеса и ЧЭ также перемещаются при температурных воздействиях, что вызовет погрешности датчика.

## Заключение

Суперминиатюрный многофункциональный микромеханический датчик инерциальной информации, выполненный по рассмотренным конструктивным схемам, может быть **вполне работоспособным** при измерении угловых скоростей и ускорений подвижных объектов.

Вместе с тем, СММГА — прибор, **весьма чувствительный** к температурным и технологическим возмущениям. Технологические погрешности изготовления элементов прибора в *единицы процентов* от номинальных значений, могут приводить к погрешностям в *десятки процентов* в выходных характеристиках датчика.

Влияние технологических и температурных факторов на характеристики выходного сигнала датчика обусловлено действием возникающих дополнительных моментов инерционных, упругих сил и сил инерции Кориолиса относительно измерительной оси прибора, нарушениями условия резонансной настройки, температурными изменениями параметров датчика, термоупругими деформационными полями и другими причинами.

При создании рассматриваемого СММГА необходимо предусмотреть меры по обеспечению его термоинвариантности и точности изготовления его элементов.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ по проекту 08-08-00084а.*

## Список литературы

1. **Распопов В. Я.** Микромеханические приборы: учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. Тула: Гриф и К, 2004. 476 с.
2. **Пешехонов В. Г., Несенюк Л. П., Грязин Д. Г., Некрасов Я. А., Евстифеев М. И., Блажнов Б. А., Аксененко В. Д.** Инерциальные модули на микромеханических датчиках. Разработка и результаты испытаний // Труды Юбилейной XV С.-Петербургской Международной конференции по интегрированным навигационным системам. С.-Петербург: ЦНИИ "Электроприбор", 2008. С. 9—15.
3. **Джашитов В. Э., Панкратов В. М.** Датчики, приборы и системы авиакосмического и морского приборостроения в условиях тепловых воздействий / Под общей ред. В. Г. Пешехонова. С.-Петербург: ГНЦ РФ ЦНИИ "Электроприбор", 2005. 404 с.
4. **Джашитов В. Э., Панкратов В. М.** Выбор параметров упругого подвеса планарного микромеханического гироскопа на основе определения частот его собственных колебаний // Гироскопия и навигация. 2005. № 4. С. 42—56.
5. **Джашитов В. Э., Лестев А. М., Панкратов В. М., Попова И. В.** Расчет температурных и технологических погрешностей микромеханических гироскопов // Микросистемная техника. 2001. № 3. С. 23—34.
6. **Дарков А. В., Шпиро Г. С.** Сопrotивление материалов. М.: Высшая школа, 1969. 734 с.
7. **Бажанов В. А., Гольденблат И. И., Николаенко Н. А., Синуков А. М.** Расчет конструкций на тепловые воздействия. М.: Машиностроение, 1969. 600 с.

**Bobrinetskiy I. I., Nevolin V. K., Simunin M. M., Komarov I. A. *Role of Thin Film Catalysts Surface for Nanotube Growth in Tasks of Electronics and Sensing Technology* . . . . . 2**

In our work we have investigated some aspects of carbon nanotube growth on thin film catalysts for integrated nanoelectronics. We have analyzed how ultrathin film dispersion influence nanotube diameter when system is heated up to 650 °C. We have found out the dependence between thin film roughness and nanotube diameter. Also methods of planar nanotube synthesis on multilayer catalysts Cr—Ni—Cr were developed.

**Keywords:** nanotubes, catalyst, chemical deposition, thin films

**Samoylovich M. I., Tcherniega N. V., Kudryavtseva A. D., Belyanin A. F., Klescheva S. M. *Opal Matrices as Metamaterial: Optic Acoustic Effects in Lattice Packings* . . . . . 5**

Experimental results of the investigations of the photon-phonon interaction in orderly packed silica dioxide (opal matrices) and nanocomposites on their base are presented. Effective conversion of laser light into acoustic vibrations of nanospheres, composing matrix, is shown to exist in such structures. Frequency shifts of the scattered light components are shown to correspond to the nanospheres vibrations eigenvalues. Stimulated scatterings of light generation in opal matrices dependence on the band-gap position is investigated.

**Keywords:** opal matrices, nanocomposites, acoustic effects

**Boginskaya I. A., Gusev A. V. Mailian K. A., Meshkov A. S., Pebalk A. V., Ryzhikov I. A., Chvalun S. N. *Polymer Films on Based Poly-p-Ksylylene in Micro- and Optoelectronics*. . . . . 17**

Technology of creation of polymer coating on based poly-p-ksylylene and chlorine modified poly-p-ksylylene on uneven substrate surface is developed. Coating with thickness 50 nm — 50 μm is obtained by vapor deposition polymerisation (VDP) method. Poly-p-ksylylene coating possess by humidity resistance, optical transparent, mechanical and electric strength, chemically inertness for most solvents, acids, and other outstanding properties. In thin poly-p-ksylylene film is obtained temperature resistance dependence with violently nonlinear character; hence, it can be used as thermo sensor. Film of poly-p-ksylylene can well be used as humidity resistance coating for optical and electronic devices.

**Keywords:** polymer films, poly-p-ksylylene, protective coating, temperature resistance dependence, thermo sensor

**Dzhangurazov B. Zh., Kozlov G. V., Mikitaev A. K. *The Physical Significance of Organoclay "Effective Particle" in Polymer Nanocomposites*. . . . . 22**

The simple and physically clear "effective particle" model in nanocomposites polymer/organoclay was proposed. Although the indicated model gives the same characteristics as and elaborated earlier treatments, but it takes into consideration interfacial adhesion polymer-organoclay level and not uses old-fashioned micro-mechanical models.

**Keywords:** nanocomposite, organoclay, polyethylene, "effective particle", interfacial adhesion

**Afonin S. M. *Absolute Stability of Automatic Control System for Deformation Electroelastictransducer for Nano- and Microdisplacements* . . . . . 25**

Problems of using criteria absolute stability of automatic control systems for Deformation electroelastictransducer for nano- and microdisplacements are discussed. Main features and principles of absolute stability of these systems are given.

**Keywords:** electroelastictransducer, control systems for deformation, nano- and microdisplacements, absolute stability

**Nepochatenko V. A., Rozumnyuk V. T., Nepochatenko I. A. *Limit Phase Boundary in Structural Second-Order Phase Transition*. . . . . 32**

The model of limit phase boundary is offered as structural second-order phase transition, which corresponds to the border of section of phases with the infinitesimal changes of parameters of crystalline grate. On the example of ferroelastic BiVO<sub>4</sub> we obtained the equalizations of limit phases boundaries forming four orientation states are got.

**Keywords:** equalization of phase boundary, seconf-order phase transition, BiVO<sub>4</sub>

- Ivannikov D. I.** *Theoretical Substantiation of the Images Recognition Theory Application at Chemical Membranes Designing* . . . . . 35  
 The theoretical substantiation of basic applicability of the images recognition theory is resulted at designing of chemical membranes for models with spatial and geometrical restrictions. It is shown construction methods of the distinguishing operator and a solving rule for investigated models.  
**Keywords:** a membrane, the recognition theory, classification
- Spirin V. G.** *Mathematical Models of Thin-Film Resistor Impedance* . . . . . 38  
 The main kinds of errors and their effect on the thin-film resistor impedance are discussed. The model of the resistor nominal impedance includes additionally the systematic errors of its length and width as well as the impedance of the electrodes. The application of the above models makes it possible to design thin-film resistors with the size of 50  $\mu\text{m}$  and less without any change of the manufacturing process.  
**Keywords:** mathematical models, thin-film resistor
- Masalsky N. V.** *Design of Logic Gate Characteristics for Double Gate sub-25 nm SOI CMOS Transistors for Lower Power Applications*. . . . . 41  
 Criteria of a choice of technological parameters for sub-25 nm double gate transistors with structure silicon on isolator for low-power applications are considered. Characteristics of one-cascade logic gates on the chosen type of transistors with length of the channel 22 nm are numerically investigated at a supply voltage of less than 1 V. The opportunity for creation of low-power circuitry in 100 GHz a range is shown.  
**Keywords:** double gate SOI nanotransistor, logic gate, low power
- Dzhashitov V. E., Pankratov V. M., Barulina M. A.** *The Theoretical Bases of Development and Creation of the Superminiature Micromechanical Multifunction Sensor of the Inertial Information*. . . . . 46  
 The possibility of creation superminiature (volume  $< 1 \text{ mm}^3$ ) micromechanical multifunction (gyroscope + accelerometer) the sensor of the inertial information is considered and proved. The equations of motion of the sensor on any way moving basis in view of temperature disturbances and technology factors are injected and analyzed. Possible baseline designs elastic suspension of sensor are offered. Estimations of strained-deformed state of the sensor at mechanical and thermal effects are received, by means of the constructed finite-element models. The estimation of efficiency of functioning of the sensor in view of temperature and technological errors is received.  
**Keywords:** superminiature micromechanical multifunction the sensor of the inertial information, equations of motion, finite-element models, strained-deformed state, temperature and technological errors

**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 Е. В. Комиссарова

Сдано в набор 16.03.2010. Подписано в печать 19.04.2010. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.  
 Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,30. Заказ 376. Цена договорная

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