

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 8 (121) ✧ 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.
Чаплыгин 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

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

- Белоус А. И., Гасенкова И. В., Дрозд С. Е., Коннов Е. В., Мухуров Н. И., Белоус В. А.** Технологический вариант реализации конструкции БИС-преобразователя емкость—напряжение для микроэлектромеханических датчиков 2
- Аникин Ю. А., Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Черемисин Ф. Г.** Компьютерное моделирование и анализ эксперимента Кнудсена 1910 года 6

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

- Петров В. В., Назарова Т. Н., Копылова Н. Ф., Заблуда О. В., Кисилев И., Брунс М.** Исследование физико-химических и электрофизических свойств, газочувствительных характеристик нанокompозитных пленок состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ 15
- Глухова О. Е., Слепченков М. М.** Электронные и упругие свойства графана — нового материала электроники: квантово-химическое и эмпирическое исследования 22
- Малышев А. В.** Особенности поляризационных свойств литий-титановой ферритовой керамики 24
- Штенников В. Н.** Проблемы и перспективы использования бессвинцовых материалов в военной и космической технике. 27

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

- Косцов Э. Г., Соколов А. А.** Микроэлектромеханические инжекторы топлива для дизельных двигателей 30
- Бобров А. А., Попков А. Ф., Дюжев Н. А., Кулагин Н. Е., Махиборода М. А., Медников А. М.** Расчет терморезистивного анемометрического преобразователя на мембране 34
- Драгунов В. П., Остертак Д. И.** Электростатические взаимодействия в МЭМС с плоскопараллельными электродами. Часть II. Расчет электростатических сил 40
- Боронахин А. М., Подгорная Л. Н.** Применение микромеханических датчиков для диагностики рельсового пути 47

- ИНФОРМАЦИЯ** 51
- Contents** 55

Аннотации на русском и английском языках с 1999 г. по настоящее время находятся в свободном доступе на сайтах журнала (<http://novtex.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

УДК 621.382.001.63

А. И. Белоус¹, д-р техн. наук, зам. директора,
И. В. Гасенкова², д-р физ.-мат. наук, вед. науч.
сотрудник,
С. Е. Дрозд¹, нач. отделения,
Е. В. Коннов¹, вед. конструктор,
Н. И. Мухуров², д-р техн. наук, зав. лаб.,
В. А. Белоус³, инженер,
e-mail: Belous@bms.by; gasenkova@inel.bas-net.by;
office@bms.ru,

¹ Научно-технический центр "Белмикросистемы"
унитарного предприятия "Завод
полупроводниковых приборов", г. Минск

² Государственное научное учреждение "Институт
физики им. Б. И. Степанова Национальной
академии наук Беларуси", г. Минск

³ Белорусский государственный университет,
г. Минск

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ВАРИАНТ РЕАЛИЗАЦИИ КОНСТРУКЦИИ БИС ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ ЕМКОСТЬ—НАПРЯЖЕНИЕ ДЛЯ МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ ДАТЧИКОВ

Рассмотрен один из вариантов конструктивно-технологического построения и создания БИС преобразователя емкость—напряжение для электронной схемы миниатюрных микроэлектромеханических датчиков с емкостным выходом. Предлагаемая БИС может быть использована для построения широкой номенклатуры МЭМС с емкостным выходом от чувствительного элемента на основе анодного оксида алюминия.

Ключевые слова: конструкция и технология построения, микроэлектромеханические датчики, преобразователь емкость—напряжение, интегральные схемы

Введение

Современные микроэлектромеханические системы (МЭМС), выполненные наподобие ИС, представляют собой сформированные на единой подложке датчики, актюаторы, схемы управления с размерами элементов от нескольких сотен до нескольких единиц микрометров [1, 2]. Но, в отличие от микросхем, МЭМС, как правило, имеют трехмерную структуру. Для их изготовления используют как соответствующим образом адаптированные технологические операции, позаимствованные у микро-

электроники (окисление, фотолитографию, травление, легирование, металлизацию, создание контактов, резку и т. п.), так и специально разработанные (например, сухое химическое анизотропное и селективное травление, метод анодной сварки или плавления для соединения пластин кремния). Базовым материалом для микромеханических приборов служит кремний, имеющий отличные механические характеристики и позволяющий относительно просто создавать единое устройство с электронными схемами управления и обработки данных. В групповой технологии изготовления МЭМС используются и другие материалы. Область применений изделий микросистемной техники (МСТ), а также методов и средств, которыми она оперирует, непрерывно расширяется, и границы этой области на современном этапе очертить достаточно трудно [3—5].

Исходные схемотехнические данные

В основу схемотехнического решения БИС с функцией измерения изменений емкостей дифференциального конденсатора (ДК) и преобразования их в постоянное напряжение были положены следующие основные требования:

- изменение выходного напряжения прямо пропорционально изменению емкостей обкладок чувствительных элементов (ЧЭ) от внешнего воздействия;
- отклонение от опорного напряжения в "+" или "-" в зависимости от знака направления воздействия;
- напряжение питания — однополярное $U_{CC} = 5V \pm 10\%$;
- диапазон рабочих температур от -40 до $+85$ °С;
- номинальная емкость обкладок ДК в пределах $1...100$ пФ;
- типовое изменение емкостей — до $\pm 30\%$ на обкладку в момент максимальных воздействий [6].

Исходя из этого предложена обобщенная структурная схема БИС ПЕН двухканального микромеханического сенсора с внешними опорным напряжением и интегрирующими емкостями в составе дифференциальных конденсаторов, включающая два идентичных канала, содержащих блоки формирования стабильного напряжения накачки, опорного напряжения, универсальный интегрирующий блок, выборки и хранения, выходного усилителя с изменяемым коэффициентом усиления и фильтром верхних частот, сервисных функций. Структурная схема двухканального микромеханического сенсора и условное графическое обозначение БИС ПЕН представлены на рис. 1, а в табл. 1, 2 приведены назначения выводов БИС ПЕН по обобщенной структурной схеме и вы-

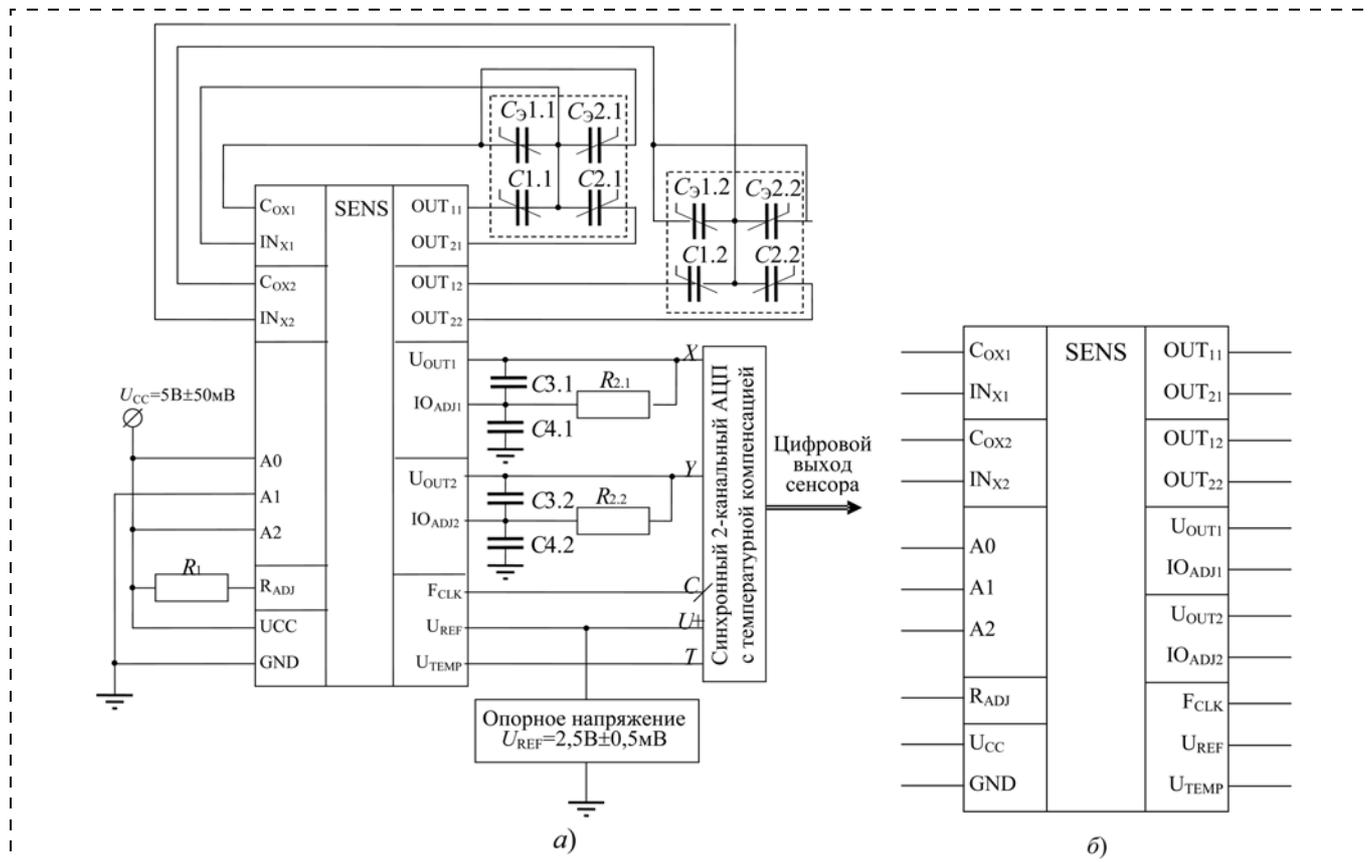


Рис. 1. Структурная схема двухканального микромеханического сенсора (а) и условное графическое обозначение БИС ПЕН (б)

Электрическое напряжение U^* в торсионных системах со ступенчатыми электродами ($m_0 = 0,2$)

Таблица 1

Наименование вывода	Назначение вывода
1	C_{OX1} Вход подключения внешней интегрирующей емкости 1-го канала
2	C_{OX2} Вход подключения внешней интегрирующей емкости 2-го канала
3	IN_{X1} Вход 1-го канала дифференциального конденсатора
4	IN_{X2} Вход 2-го канала дифференциального конденсатора
5	OUT_{11} Выход 1 накачки дифференциального конденсатора 1-го канала
6	OUT_{12} Выход 1 накачки дифференциального конденсатора 2-го канала
7	OUT_{21} Выход 2 накачки дифференциального конденсатора 1-го канала
8	OUT_{22} Выход 2 накачки дифференциального конденсатора 2-го канала
9	U_{OUT1} Вывод выходного напряжения 1-го канала
10	U_{OUT2} Вывод выходного напряжения 2-го канала
11	IO_{ADJ1} Вывод подключения резистора регулировки усиления 1-го канала
12	IO_{ADJ2} Вывод подключения резистора регулировки усиления 2-го канала
13	R_{ADJ} Вход подключения резистора регулировки тактовой частоты
14	$A0$ Вход 0-го разряда кода блока управления
15	$A1$ Вход 1-го разряда кода блока управления
16	$A2$ Вход 2-го разряда кода блока управления
17	F_{CLK} Вывод тактовой частоты для синхронизации внешних устройств
18	U_{REF} Вход-выход опорного напряжения
19	U_{TEMP} Вывод напряжения температурного датчика
20	U_{CC} Вывод напряжения питания
21	GND Общий вывод

Выполняемые БИМ ПЕН функции

Таблица 2

Входы блока управления			Выполняемые функции БИС
A0	A1	A2	
0	0	0	Режим с пониженным энергопотреблением
1	0	0	Нормальный режим работы (внутренние U_{REF} и C_0)
0	1	0	Работа в режиме с внешним U_{REF}
1	1	0	Резервный код
0	0	1	Работа в режиме с внешним C_0
1	0	1	Работа в режиме с внешним U_{REF} и C_0
0	1	1	Резервный код
1	1	1	Режим тестирования

полняемые функции в зависимости от кода по входам блока управления соответственно.

Для реализации предложенного схмотехнического решения был разработан конструктивно-технологический вариант БИС ПЕН.

Выбор технологии изготовления БИС преобразователя емкость—напряжение

При выборе технологии изготовления БИС ПЕН основное внимание уделяется ее функциональному назначению и электрическим параметрам. Исходя из структурной схемы микросхема должна выполнять функцию измерения весьма малых изменений емкости обкладок дифференциального конденсатора,

Таблица 3

Размеры основных топологических слоев БИС ПЕН

Топологический слой	Элемент, мкм	Зазор, мкм	Шаг, мкм
Активная область	4,0	2,0	6,0
Затвор (поликремний первого уровня)	2,5	2,0	4,5
Резистор (поликремний второго уровня)	6,0	2,0	8,0
Контакты	2,2	2,3	4,5
Металл	6,2	2,3	8,5

выделения, усиления и преобразования в постоянное напряжение полезного сигнала с использованием интегральной схемотехники, рассчитанной на электрическое напряжение 5В. Для решения поставленной задачи вполне подходит соответствующий технологический КМОП-процесс.

Требования к вольт-амперным характеристикам (ВАХ) элементной базы для микросхемы можно

ются проектные нормы с размерами 2,0 мкм. Разработаны правила проектирования топологии. За основу взяты требования на проектирование топологии микросхем серии НС/НСТ производства НПО "Интеграл". Дополнительные слои "конденсатор" и "резистор", выполненные в поликристаллическом кремнии (ПКК) второго уровня, позволяют формировать емкости, постоянные в диапазоне электрических напряжений между первым и вторым уровнями поликремния и поликремниевого резистора p -типа с низким значением температурного коэффициента сопротивления. В элементную базу введен биполярный $n-p-n$ -транзистор, формируемый на КМОП-слоях, эмиттером служит n^+ -сток, базой — p -карман, коллектором — подложка n -типа, запитанная n -стоком. Размеры и зазоры основных топологических слоев БИС ПЕН представлены в табл. 3. Требования к основным ВАХ активной элементной базы микросхемы приведены в табл. 4. Особенности технологии и последовательность технологических операций изготовления микросхемы представлены в табл. 5.

Таблица 4

Требования к основным ВАХ элементной базы микросхемы

Параметр, единица измерения	n -канальный транзистор (2,5 × 50) мкм	p -канальный транзистор (2,5 × 50) мкм	n -канальный выходной транзистор (2,7 × 300) мкм	p -канальный выходной транзистор (2,7 × 300) мкм	Резистор ПКК-2, p -типа	Конденсатор ПКК1-ПКК2 на диэлектрике $SiO_2 + Si_3N_4$	Биполярный $n-p-n$ -транзистор
Пороговое напряжение, В ($I_c = 100$ нА)	0,4–0,8	0,5–0,9	0,4–0,8	0,5–0,9	—	—	—
Ток стока, мА (при $U_c = U_z = 5$ В)	5–10	1,8–3,2	≥30	≥9	—	—	—
Пробивное напряжение, В ($I = 10$ мкА)	12–18	12–20	12–20	12–20	—	—	—
Поверхностное сопротивление, Ом/кв	—	—	—	—	1200–1600	—	—
Удельная емкость, 10^{-4} пФ/мкм ²	—	—	—	—	—	5,6–5,8	—
Коэффициент усиления ($I_6 = 10$ мкА)	—	—	—	—	—	—	≥10

сформулировать исходя из особенностей ее функционального назначения, таких как:

- возможность построения аналоговых операционных усилителей (ОУ) в микроомном и мощном исполнении с полосой пропускания не хуже 5 МГц;
- высокие крутизна ВАХ и допороговые характеристики МОП-транзисторов в аналоговом применении;
- наличие высокоомных резисторов с низким температурным уходом сопротивления;
- наличие конденсаторов, постоянных в диапазоне напряжений;
- возможность создания биполярных $n-p-n$ -транзисторов для построения датчика температуры кристалла;
- устойчивость к току защелкивания;
- обеспечение воспроизводимости и стабильности технологических параметров изготавливаемых микросхем.

Для построения элементной базы с требуемыми ВАХ транзисторов вполне приемлемыми оказыва-

Таблица 5

Особенности технологии изготовления микросхемы

Параметр	Особенности технологии
Технология	2-карманный самосовмещенный КМОП-процесс
Проектная норма	2,0 мкм
Подложка	n -тип, концентрация примеси $N = 10^{15}$ см ⁻³
Изоляция	Locos
Подзатворный диэлектрик	SiO_2 , $d = (42,5 \pm 2,5)$ нм
Затвор (поликремний первого уровня)	ПКК-1, n -типа
Транзисторы	Классический n -МОП Классический p -МОП Мощный выходной n -МОП Мощный выходной p -МОП
Резистор (поликремний второго уровня)	ПКК-2, p -типа
Конденсаторный диэлектрик	$SiO_2 + Si_3N_4$
Межслойный диэлектрик	Борофосфорное силикатное стекло (БФСС)
Металлизация	Al + Si + Cu + Ti
Пассивация	Плазмохимический оксид (ПХО)

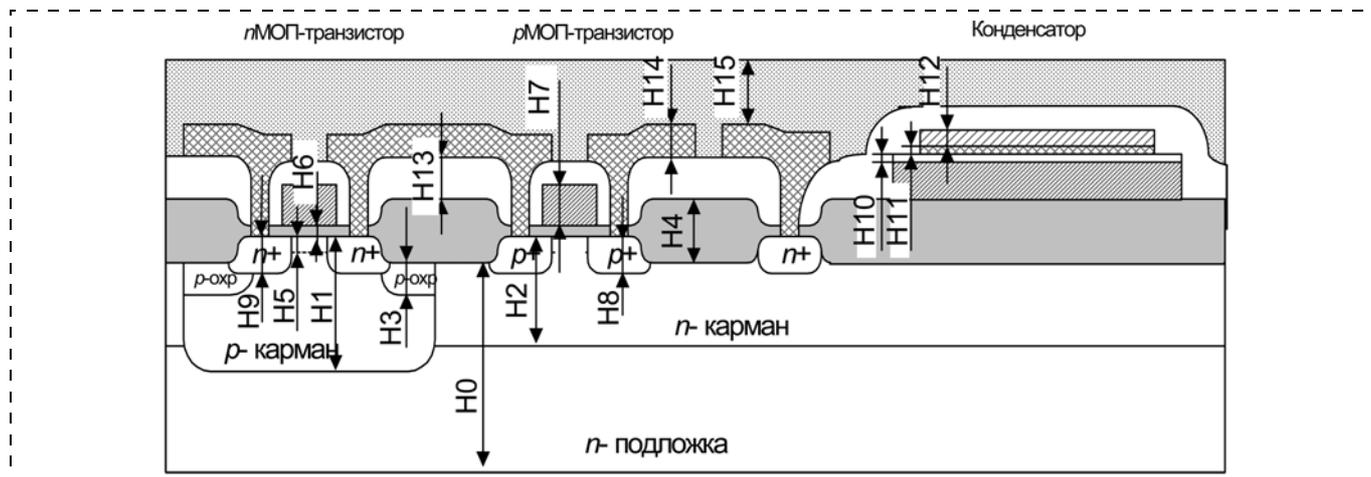


Рис. 2. Конечные параметры структуры микросхемы БИС ПЕН

Таблица 6

Конечные параметры структуры микросхемы

Элементы структуры		Обозначение	Толщина, мкм	Тип проводимости	Поверхностное сопротивление R_s , Ом/кв	Предельное отклонение вскрытых областей, мкм
Название						
Подложка		H0	460 ± 20	<i>n</i>	—	—
<i>p</i> -карман		H1	$7,0 \pm 1,4^{1)}$	<i>p</i>	$2000 \pm 400^{1)}$	$\pm 0,25$
<i>n</i> -карман		H2	$6,5 \pm 1,3^{2)}$	<i>n</i>	$1000 \pm 200^{2)}$	—
Охрана <i>p</i> ⁺		H3	$1,2 \pm 0,24^{1)}$	<i>p</i>	$2500 \pm 500^{1)}$	$\pm 0,2^{3)}$
Оксид локальный		H4	$0,8 \pm 0,05^{4)}$	—	—	—
Подлегирование канала		H5	—	<i>p</i>	—	$\pm 0,2^{3)}$
Оксид подзатворный		H6	$0,0425 \pm 0,0025$	—	—	—
Затвор (ПКК-1)		H7	$0,43 \pm 0,05$	<i>n</i>	$18 \pm 8^{1)}$	$\pm 0,2$
<i>p</i> -стоки		H8	$0,45 \pm 0,09^{1)}$	<i>p</i>	$200 \pm 40^{1)}$	$\pm 0,2^{3)}$
<i>n</i> -стоки		H9	$0,45 \pm 0,09^{1)}$	<i>n</i>	$25 \pm 10^{1)}$	$\pm 0,2^{3)}$
Конденсаторный диэлектрик	SiO ₂	H10	$0,015 \pm 0,003^{2)}$	—	—	—
	Si ₃ N ₄	H11	$0,045 \pm 0,05$	—	—	—
Конденсатор (ПКК-2)		H12	$0,27 \pm 0,02$	<i>p</i>	1400 ± 200	$\pm 0,2$
Оксид межслойный		H13	$0,8 \pm 0,08^{4)}$	—	—	—
Металлизация		H14	$1,1 \pm 0,1$	—	—	$\pm 0,4$
Пассивация		H15	$1,5 \pm 0,25$	—	—	—

¹⁾ Значения параметров обеспечиваются инструментом. ²⁾ Значения параметров контролируют на этапе формирования (на спутниках). ³⁾ Предельные отклонения вскрытых областей указаны для операции "Контроль проявления". ⁴⁾ Толщина после наращивания, конечная толщина: H4-*d* SiO₂ > 0,55 мкм, H13-*d* БФСС > 0,65 мкм.

Технологический маршрут изготовления БИС ПЕН содержит 12 фотолитографических процессов, и типовая длительность изготовления пластин составляет 30 рабочих дней в производстве завода № 20 УП "Завод полупроводниковых приборов" НПО "Интеграл".

Конечные параметры структуры БИС ПЕН представлены на рис. 2 и в табл. 6. В табл. 6 отражены толщины пленок, глубины залегания примесей, поверхностные сопротивления технологических слоев.

Также должны учитываться возможности имеющегося парка технологического оборудования, наличие разработанных и освоенных технологических процессов и рентабельность производства.

Перспективные области применения микромеханических сенсоров с чувствительным элементом в виде дифференциального конденсатора

Применение технологии на основе пленок анодного оксида алюминия позволяет создавать чувствительный элемент в виде дифференциального конденсатора с различными конструктивными особенностями. Возможность целенаправленно варьировать массу подвижного элемента и упругость держателей в широких диапазонах, изменять зазоры между обкладками и проектировать планарно-объемные конструкции дифференциальных конденсаторов позволяет создавать различные датчики: ускорений, вибрации, угла наклона, 3D-акселерометры.

Области применения микромеханических сенсоров ускорений с подвижным чувствительным элементом в виде дифференциального конденсатора можно, в общем виде, распределить по диапазонам контролируемых ускорений:

- до $2g$ — контроль углов наклона зданий и промышленных объектов, плоскостность железнодорожных путей, мостов и т. п.
- до $10g$ — автомобильная техника, разнообразные подушки безопасности, плавность хода железнодорожного транспорта;
- до $15g$ — авиационная техника;
- $100g$ — датчики детонации в двигателях внутреннего сгорания и сейсмодатчики;
- $1000g$ — военная техника.

Наличие в БИС ПЕН двух идентичных каналов позволяет реализовать двухкоординатные (X/Y) датчики угла наклона и курсовертикали.

То обстоятельство, что дифференциальный конденсатор может выполняться не как классический с центральным подвижным элементом, а в виде двух раздельных конденсаторов как "зонд — эталон" с различными диэлектриками между обкладками, позволяет на основе рассматриваемого микромеханического сенсора общего назначения создать эффективные датчики влажности.

При выполнении центрального элемента дифференциального конденсатора в виде мембраны возможно создание датчиков давления.

Заключение

Предложен один из конструктивно-технологических вариантов напряжения для построения БИС-преобразователя емкость—напряжение для микроэлектромеханических датчиков общего назначения с чувствительным элементом в виде дифференциального конденсатора. Разработанный вариант может послужить прототипом для построения разнообразных микромеханических сенсоров с чувствительными элементами емкостного типа.

Список литературы

1. **Нано-** и микросистемная техника. От исследований к разработкам. Сб. статей / Под ред. П. П. Мальцева. М.: Техносфера, 2005. 592 с.
2. **Нанотехнологии.** Наноматериалы. Наносистемная техника-2008 / Под ред. П. П. Мальцева. М.: Техносфера, 2008. 432 с.
3. **Кононов В.** MEMS-технологии — главный локомотив рынка сенсоров // 3D News. Daily Digital Digest. 01.04.2008.
4. **Иванов А. А., Мальцев П. П., Телец В. А.** О направлениях развития микросистемной техники // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 1. С. 2—12.
5. **Мухуров Н. И.** Алюмооксидные микро- и наноструктуры для микроэлектромеханических систем. Минск: УП "Бестпринт", 2004. 166 с.
6. **Белоус А. И., Емельянов В. Е., Дрозд С. Е., Коннов Е. В., Мухуров Н. И., Плебанович В. А.** Схемотехническое конструирование БИС преобразователя емкость — напряжение для микроэлектромеханических датчиков // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 8. С. 15—19.

УДК 533.561

Ю. А. Аникин^{1, 2}, вед. программист,
Ю. Ю. Клосс^{1, 2}, д-р физ.-мат. наук, нач. лаб.,
Д. В. Мартынов^{1, 2}, студент,
e-mail: mart1989@list.ru,
Ф. Г. Черемисин^{1, 3}, д-р физ.-мат. наук,
гл. науч. сотр.,

¹ Московский физико-технический институт,
г. Долгопрудный, Московская область

² Российский научный центр "Курчатовский институт", Москва

³ Вычислительный центр им. А. А. Дородницына
РАН, Москва

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТА КНУДСЕНА 1910 ГОДА

В 1910 г. Мартин Кнудсен изучал явление теплового скольжения газа вдоль стенок цилиндрической трубки с приложенным градиентом температуры. Исследователь создал устройство, которое при определенных условиях может работать как насос. Изобретение Кнудсена получило практический интерес в современных нано- и микротехнологиях. В данной работе с помощью компьютерного моделирования кинетического уравнения Больцмана повторяется эксперимент Кнудсена и сравниваются полученные результаты.

Ключевые слова: насос Кнудсена, моделирование, кинетическое уравнение Больцмана, неструктурированные сетки, проекционный метод

Введение

В 1910 г. М. Кнудсен исследовал разность давлений на концах устройства, состоящего из последовательно соединенных цилиндрических капиллярных и широких трубок [1]. Вдоль капиллярных трубок, диаметр которых был равен приблизительно 0,5 мм, температура линейно возрастала от некоторого значения T_1 до $T_2 > T_1$. Вдоль широких трубок, диаметр которых составлял 10—15 мм, температура линейно убывала до значения T_1 . Основной целью исследователя было создание водородного термометра. Однако по ходу эксперимента Кнудсен заметил, что при некоторых условиях отношение давлений на концах устройства достигало 10, т. е. такое устройство могло работать как насос. В то время такой насос не получил практического применения, потому что мог работать только при давлениях 0,001—100 мм рт. ст. при диаметре капиллярных трубок порядка 0,5 мм.

Кнудсен 100 лет назад экспериментально продемонстрировали явление теплового скольжения газа вдоль стенок с приложенным градиентом температуры. Этот эффект в настоящее время используется для работы некоторых микромасштабных устройств, таких как масс-спектрометр [2], оптический спектрометр [3], газовый анализатор [4], для которых не-

обходимы высоковакуумные насосы нано- и микро-масштаба. В этой области насосы Кнудсена находят практическое применение, потому что у них нет движущихся механических частей, и они могут работать вплоть до атмосферного давления.

В данной работе проводится компьютерное моделирование экспериментов Кнудсена [1] на основе численного решения обобщенного кинетического уравнения Больцмана для двухатомного газа. Вращательные степени свободы молекул учитываются приближенно с помощью двухуровневой модели [5]. Кинетическое уравнение решается методом расщепления, который разделяет процесс решения на три этапа:

- свободно молекулярное течение;
- упругие столкновения молекул;
- вращательно-поступательная релаксация.

Оператор переноса кинетического уравнения аппроксимируется методом конечных объемов. Схема является консервативной и имеет первый порядок точности. Используются тетраэдрические пространственные сетки, построенные с помощью пакета GMSH [6]. Основная сложность заключается в вычислении интеграла упругих столкновений. Для ее преодоления применяется проекционный метод [7–9], который обеспечивает точное выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии и обращает интеграл столкновений в нуль при термодинамическом равновесии (когда функция распределения является максвелловской). Последнее свойство выполняется для сколь угодно грубых кубатурных сеток, применяемых для вычисления интеграла столкновений. Для рассматриваемых течений, в которых решение мало отличается от локально-максвелловской функции, оно особенно важно, так как основной вклад в интеграл столкновений вычисляется точно.

Основными вычислительными свойствами используемого метода являются:

- полная консервативность;
- сохранение положительности решения;
- отсутствие возмущения термодинамического равновесия;
- отсутствие статистического шума;
- легкое распараллеливание.

Построена математическая модель работы многокаскадного насоса Кнудсена на основе численного исследования макропараметров в цилиндрической трубке с приложенным градиентом температуры, которая позволяет оценить распределение давления и плотности газа в насосе. Результаты, полученные с помощью математической модели и численного моделирования насоса, сравниваются с экспериментальными результатами Кнудсена.

Метод решения обобщенного уравнения Больцмана для двухатомного газа

Перейдем к безразмерным переменным и безразмерной функции распределения:

$$\xi^* = \frac{\xi}{v_0}, t^* = \frac{t}{\tau_0}, b^* = \frac{b}{\sigma_{eff}}, x^* = \frac{x}{\lambda}, T^* = \frac{T}{T_0},$$

$$n^* = \frac{n}{n_0}, f^* = \frac{f}{n_0 v_0}, v_0 = \sqrt{kT_0/m},$$

$$\lambda = 1/\left(\sqrt{2} \pi n_0 \sigma_{eff}^2\right), \tau_0 = \lambda/v_0,$$

где b — прицельное расстояние сталкивающихся молекул; ξ — скорость молекулы; v_0 — нормировочная скорость; τ_0 — нормировочное время; t — время; k — постоянная Больцмана; m — масса молекул газа; x — координата молекулы; λ — длина свободного пробега молекулы газа; σ_{eff} — эффективный диаметр молекул, T — температура газа; T_0 — нормировочная температурагаза; n — числовая плотность газа; n_0 — нормировочная числовая плотность газа; f — функция распределения по скоростям.

При решении задачи использовался потенциал Ленарда—Джонса, где σ_{eff} определяется следующим образом:

$$\sigma_{LJ,eff} = \sigma \sqrt{\Omega^{(2,2)}},$$

где σ — диаметр молекулы, значения интегралов $\Omega^{(2,2)}$ табулированы в [10] и мало отличаются от 1. Опустим знак * и вернемся к прежним обозначениям.

Запишем обобщенное уравнение Больцмана для функции распределения f_i на уровне i вращательной энергии в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \xi \frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \sum_{j,k,l} p_{i,j}^{k,l} (f_k f_l - f_i f_j) g_{i,j} b \delta b d \varphi d \xi_* \equiv Q_i. (1)$$

Здесь обозначено $f_k \equiv f_k(\xi'_*)$; $f_l \equiv f_l(\xi')$; $f_i \equiv f_i(\xi_*)$; $f_j \equiv f_j(\xi)$; $g_{i,j} = \xi_j - \xi_i$; $p_{i,j}^{k,l}$ — вероятность перехода $(i, j) \rightarrow (k, l)$; b и φ — параметры бинарного столкновения; ξ'_* , ξ' — скорости молекул после столкновения; ξ_* , ξ — скорости молекул до столкновения.

Представим оператор столкновений Q_i как сумму оператора упругих столкновений Q_i^{ell} и оператора неупругих столкновений Q_i^r . Для молекул водорода вероятность переноса энергии между вращательными и поступательными степенями свободы приблизительно равна 0,01. На этом основании можно приближенно включить все столкновения в оператор Q_i^{ell} , а процесс вращательно-поступательного переноса энергии (RT-процесс) представить в форме релаксационного оператора.

Оператор упругих столкновений запишется в виде оператора столкновений для смеси газов:

$$Q_i^{ell} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \sum_j \left[(f'_i f'_j - f_i f_j) g_{i,j} b \delta b d \varphi d \xi_j, \right] (2)$$

где $f'_i \equiv f'_i(\xi'_*)$; $f'_j \equiv f'_j(\xi')$; $f_i \equiv f_i(\xi_*)$; $f_j \equiv f_j(\xi)$.

Оператор неупругих столкновений запишем в релаксационной форме:

$$Q_i^r = -\nu_r (f_i - f_{i,M}). (3)$$

Для решения уравнений (1)–(3) будем использовать модель [5], состоящую из двух уровней: основного уровня с вращательной энергией $\varepsilon_1 = 0$ и возбужденного уровня с энергией $\varepsilon_2 > T_{\max}$, где T_{\max} — максимальная температура газа, достигаемая в рассматриваемом течении (температура измеряется в энергетических единицах и постоянная Больцмана равна 1). Газ представляется как двухкомпонентная смесь молекул, находящихся на одном из данных уровней с плотностями n_1 и n_2 , а функция распределения состоит из двух частей: f_1 и f_2 . Тогда в уравнениях (1)–(3) $i = (1, 2)$, $j = (1, 2)$.

В качестве $f_{i,M}^*$ берется эллиптическая функция распределения, определяемая диагональными элементами тензора температур:

$$f_{i,M}^* = n_{i,eq} (T_{xx}^* T_{yy}^* T_{zz}^*)^{-1/2} \exp\left(-\frac{c_x^2}{2T_{xx}^*} - \frac{c_y^2}{2T_{yy}^*} - \frac{c_z^2}{2T_{zz}^*}\right), \quad (4)$$

где $c_x = \xi_x - u$; $c_y = \xi_y - v$; $c_z = \xi_z - w$; u, v, w — компоненты вектора массовой скорости газа.

Компоненты T_{aa}^* определяются как подобные преобразования компонент T_{aa} , вычисленных по формуле

$$T_{aa}^* = T_{aa} \left(\frac{T_{eq}}{K_{kin}} \right),$$

где $T_{eq} = \frac{2(E_{kin} + E_{rot})}{5n}$ — равновесная температура;

T_{kin} — кинетическая температура; $E_{rot} = \varepsilon_2 n_2$;

$$E_{kin} = \frac{3}{2} T_{kin}.$$

Частота неупругой релаксации ν_r определяется как доля частоты столкновений ν релаксационного уравнения Крука:

$$\nu_r = a^{(1)} \nu,$$

где $a^{(1)}$ — постоянная, причем $0 < a^{(1)} < 1$.

Несмотря на выбранный вид $f_{i,M}^*$ (4) оператор неупругих столкновений также вносит вклад в изменение функции распределения в скоростном пространстве в направлении к равновесному состоянию. Для учета этого влияния следует уменьшить величину упругого оператора множителем $(1 - a^{(2)} \nu_r)$, где $a^{(2)}$ — постоянная, $0 < a^{(2)} < 1$, однако в рассматриваемом случае такая поправка не существенна.

Получим

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \xi \frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j \int (f_i' f_j' - f_i f_j) g_{i,j} b db d\varphi d\xi_j + a^{(1)} \nu (f_i - f_{i,M}^*). \quad (5)$$

Для численного решения уравнения (5) необходимо перейти от непрерывной функции распределения к дискретной. Для этого введем скоростную сетку, построение которой осуществляется следующим образом. Вначале определяется куб в пространстве скоростей и в нем строится равномерная сетка узлов. Выбор равномерной сетки узлов обусловлен методом вычисления интеграла столкновений. Ребро куба равно $4,8 \sqrt{T_{\max}}$. Затем в куб вписывается сфера и исключаются все внешние узлы. Число узлов сетки сокращается примерно вдвое. Далее уравнение (5) решается в каждом из N_0 равноотстоящих скоростных узлов ξ_γ в каждой ячейке пространственной тетраэдрической сетки.

В скоростном пространстве функция распределения и интеграл столкновений могут быть представлены на базисе δ -функций в виде

$$f(\xi, x, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} f_\gamma(x, t) \delta(\xi - \xi_\gamma);$$

$$Q_i^{ell,*}(\xi, x, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} Q_{i,\gamma}^{ell,*}(x, t) \delta(\xi - \xi_\gamma);$$

$$Q_i^r(\xi, x, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} Q_\gamma^r(x, t) \delta(\xi - \xi_\gamma).$$

Задача свелась к решению конечно-разностным методом системы уравнений

$$\frac{\partial f_{i,\gamma}}{\partial t} + \xi_\gamma \frac{\partial f_{i,\gamma}}{\partial x} = Q_{i,\gamma}^{ell,*} + Q_{i,\gamma}^r. \quad (6)$$

В уравнении (6) индекс i обозначает номер тетраэдра. Неравномерная тетраэдрическая сетка строится с помощью программы GMSH [6]. Ребро тетраэдра зависит от его местоположения в насосе. В капиллярной трубке ребра тетраэдров меньше, чем ребра тетраэдров в широкой трубке. На рис. 1 (см. вторую сторону обложки) представлена тетраэдрическая сетка в широкой и узкой трубках. Ребра тетраэдров вблизи оси симметрии трубок задавались в 1,3–1,6 раза больше, чем ребра у стенок трубки.

Для сокращения времени счета моделируются четверти трубок. Плоскости, проходящие через ось симметрии трубок и ограничивающие моделируемую систему, называются плоскостями симметрии.

Эффективным методом решения системы уравнений (6) является метод расщепления по физическим процессам. На малом по сравнению со средним временем свободного пробега молекул шаге по времени τ осуществляется расщепление на три стадии:

- расчет переноса молекул без столкновений;
- расчет упругих столкновений;
- расчет вращательно-поступательной релаксации.

Обозначив функцию распределения после первого этапа f_i^* , после второго f_i^{**} , после заключительного третьего этапа f_i , а решение на предыдущем

временном слое как $f_i^{t-\tau}$, получим последовательность уравнений:

$$\frac{f_{i,\gamma}^* - f_{i,\gamma}^{t-\tau}}{\tau} + \xi \frac{\partial f_{i,\gamma}^{t-\tau}}{\partial x} = 0; \quad (7)$$

$$\frac{f_{i,\gamma}^{**} - f_{i,\gamma}^*}{\tau} = Q_{i,\gamma}^{ell,*}; \quad (8)$$

$$\frac{f_{i,\gamma} - f_{i,\gamma}^{**}}{\tau} = Q_{i,\gamma}^r. \quad (9)$$

Для аппроксимации производных по физическим координатам на стадии а) для каждой из компонент применяется консервативная по потокам явная схема первого порядка точности:

$$\frac{f_{i,\gamma}^* - f_{i,\gamma}^{t-\tau}}{\tau} = \frac{1}{V} \left(\Phi_{1,\gamma}^i + \Phi_{2,\gamma}^i + \Phi_{3,\gamma}^i + \Phi_{4,\gamma}^i \right),$$

где Φ_k — потоки функции распределения через k -ю грань тетраэдра в уравнении (7); V — объем тетраэдра.

Определим Φ_k для всех тетраэдров. Через n_k обозначим нормаль к k -й грани, направленной внутрь тетраэдра. Возможны три случая.

1. Рассматриваемый тетраэдр под номером p граничит с другим тетраэдром под номером m . Тогда справедлива формула

$$\Phi_k = \begin{cases} S_k f(t, p, \xi)(\xi, n_k), & (\xi, n_k) < 0; \\ S_k f(t, m, \xi)(\xi, n_k), & (\xi, n_k) > 0, \end{cases}$$

где S_k — площадь k -й грани тетраэдра.

Условие $(\xi, n_k) < 0$ означает, что газ вытекает из тетраэдра, второе условие отвечает втеканию газа в тетраэдр.

2. Грань тетраэдра граничит со стенкой трубки, тогда имеет место диффузное отражение:

$$\Phi_k^1 = \begin{cases} \frac{\left(1 - \frac{\alpha T_{wall}}{\varepsilon_2}\right) \sum_{i=1, 2} \int_{(\xi, n) < 0} |f_i(t, p, \xi)|(\xi, n_k) d\xi - (1 - \alpha) \int_{(\xi, n) < 0} f_2(t, p, \xi)|(\xi, n_k) d\xi}{\int_{(\xi, n) > 0} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_{wall}}\right)(\xi, n_k) d\xi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_{wall}}\right) S_k, & (\xi, n_k) > 0; \\ S_k f_1(t, p, \xi)(\xi, n_k), & (\xi, n_k) < 0; \end{cases}$$

$$\Phi_k^2 = \begin{cases} \frac{\frac{\alpha T_{wall}}{\varepsilon_2} \sum_{i=1, 2} \int_{(\xi, n) < 0} f_i(t, p, \xi)|(\xi, n_k) d\xi - (1 - \alpha) \int_{(\xi, n) < 0} f_2(t, p, \xi)|(\xi, n_k) d\xi}{\int_{(\xi, n) > 0} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_{wall}}\right)(\xi, n_k) d\xi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_{wall}}\right) S_k, & (\xi, n_k) > 0; \\ S_k f_2(t, p, \xi)(\xi, n_k), & (\xi, n_k) < 0, \end{cases}$$

где T_{wall} — температура стенки; α — коэффициент аккумуляции внутренней энергии, $0 \leq \alpha \leq 1$.

3. Грань тетраэдра лежит на плоскости симметрии, тогда имеет место зеркальное отражение:

$$\Phi_k = \begin{cases} S_k f(t, p, \xi)(\xi, n_k), & (\xi, n_k) < 0; \\ S_k f(t, p, \xi - 2n_k(\xi, n_k))(\xi, n_k), & (\xi, n_k) > 0. \end{cases}$$

Уравнение (8) решается с помощью проекционного метода [7–9]. Решение релаксационного уравнения (9) на заключительном этапе требует коррекции для того, чтобы обеспечить точное выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии.

Функция $f_{i,M}^{**}$ имеет вид (4) и определяется по параметрам $n_{i,eq}$ и T_{aa}^* , вычисленным после этапа б).

Построение математической модели работы насоса Кнудсена

Схема насоса Кнудсена представлена на рис. 2. Капиллярные и широкие трубки одинаковой длины были соединены последовательно, каждый второй стык нагревался. Радиус широкой трубки равен R ,

а капиллярной трубки r . В результате на концах каждого каскада образовывалась разность давлений так, как это показано на рис. 2.

Основными частями насоса Кнудсена являются цилиндрические трубки с приложенным градиентом температуры, поэтому важно исследовать, какой вклад в работу насоса вносит каждая трубка. Целью этого раздела статьи является создание теоретической модели работы насоса Кнудсена на основе ис-

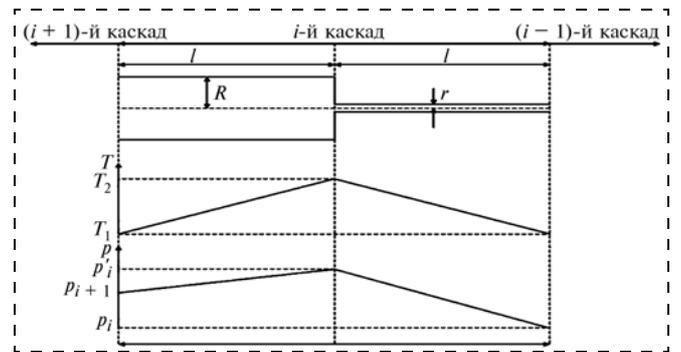


Рис. 2. Схема i -го каскада насоса Кнудсена

Число Кнудсена	Отношение длины трубки к радиусу l/r				
	1	5	10	50	100
0,1	1,037	1,035	1,035	1,036	1,035
0,5	1,099	1,130	1,135	1,134	1,135
1,0	1,115	1,165	1,183	1,186	1,184
2,5	1,127	1,203	1,219	1,220	1,221
5,0	1,136	1,216	1,235	1,236	1,237
10,0	1,150	1,227	1,248	1,248	1,249

следования цилиндрических трубок с приложенным градиентом температуры.

Во время первой серии экспериментов Кнудсен нагревал один из концов трубки до 623 К, температура противоположного конца трубки оказалась около 373 К. При описании второй серии экспериментов, где рассматривался многокаскадный насос, Кнудсен не привел температуры горячих и холодных концов трубок, указав лишь разницу этих температур, которая была равна 500 К. С учетом того, что стекло начинает плавиться при 1000 К, а температура окружающей среды была около 300 К, при моделировании будем считать, что температура горячего конца трубки была равна 900 К, а холодного 400 К.

Рассмотрим цилиндрическую трубку радиуса r и длины L , вдоль которой приложен градиент температуры, так что температура левого конца трубки равна T_1 , а правого $T_2 > T_1$.

В начальный момент времени водород с функцией распределения Максвелла плотностью n_0 при температуре $T_0 = T_1$ заполнял объем трубки. Будем обозначать давление и плотность у левого края трубки соответственно p_1 и n_1 , а у правого — p_2 и n_2 , а отношение давлений $a = \frac{p_2}{p_1}$.

На рис. 3 представлены зависимости температуры, плотности и давления от продольной координаты трубки $T(z)$, $n(z)$, $p(z)$ при $\frac{l}{r} = 10$ и числах Кнудсена $\text{Kn} = 0,1; 1,0; 10,0$. Температуры концов трубок были взяты такими же, как в первом эксперименте Кнудсена, и в безразмерных переменных были равны $T_0 = T_1 = 1$, $T_2 = 1,67$. Эти результаты получены с помощью численного моделирования обобщенного уравнения Больцмана. Использовался потенциал Леннарда—Джонса с параметрами $\epsilon = 38$ К, $\sigma = 2,915$ Å, взятыми из [10], значение интеграла $\Omega^{(2,2)} = 0,80$ [10], отношение времен вращательной к поступательной ре-

лаксации взято из [11] и равно 100, коэффициент accommodations вращательной энергии полагается $\alpha = 0,5$.

При других отношениях l/r распределения давления, плотности и температуры аналогичны. В табл. 1 отражены результаты моделирования цилиндрической трубки с приложенным градиентом температуры, приведена зависимость отношения давлений у правого и левого краев трубки в установившемся режиме от отношения l/r .

Исходя из полученных данных можно сделать вывод, что в установившемся режиме отношение давлений $a = \frac{p_2}{p_1}$ не зависит от длины трубки, если вы-

полнено условие $\frac{l}{\chi} > 5$, где $\chi = \min\{r, \lambda\}$, а λ — длина свободного пробега молекулы газа. Физически это означает, что молекула должна много раз столкнуться с другими молекулами или стенками трубки, прежде чем пройти путь от одного конца трубки к другому.

На рис. 4 представлена зависимость отношения давлений $a = \frac{p_2}{p_1}$ от числа Кнудсена Kn при $l/r = 10$. Вверху представлен график при $T_2 = 1,67T_1$, соответствующий первой серии экспериментов Кнудсена, внизу — при $T_2 = 2,25T_1$, соответствующий второй серии.

Монотонность кривой $a(\text{Kn})$ объясняет работу насоса Кнудсена. Число Кнудсена больше в капиллярной трубке, чем в широкой трубке, поэтому на концах каждого каскада создается разность давлений.

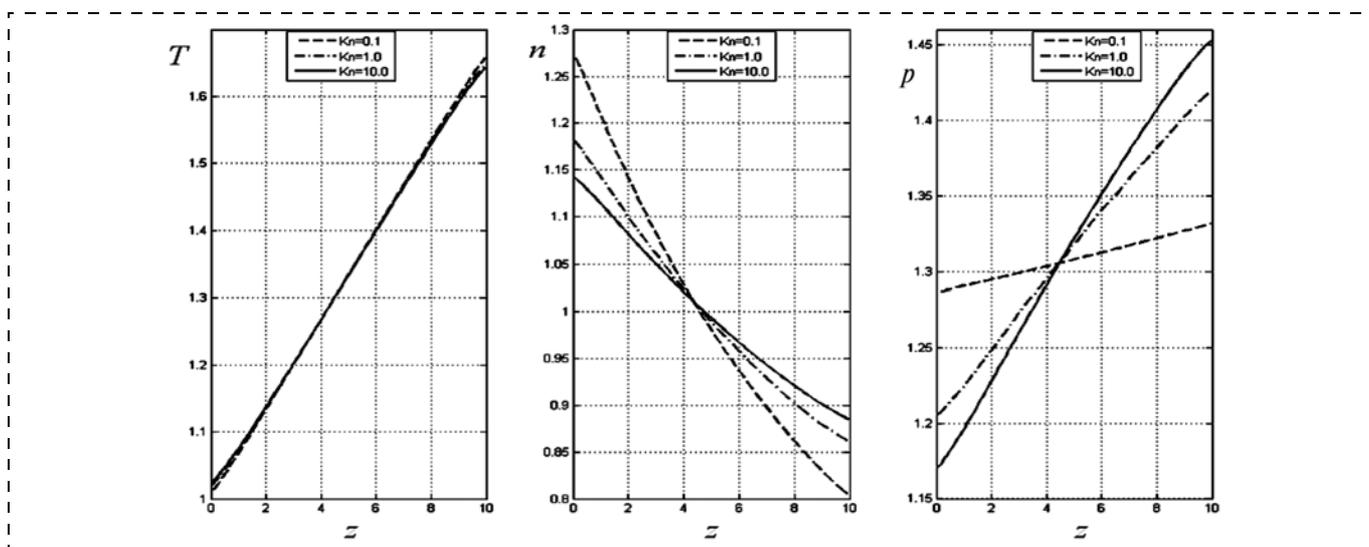


Рис. 3. Зависимости температуры, плотности и давления от продольной координаты

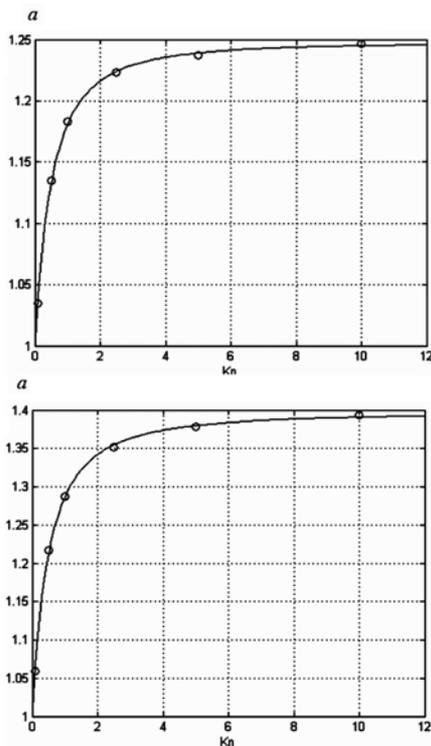


Рис. 4. Зависимость отношения давлений на концах трубки от числа Кнудсена

Рассмотрим многокаскадный насос Кнудсена. Обозначим давление на входе k -го каскада p_k , на стыке трубок p'_k , а на выходе p_{k+1} . Это давление является входным для $(k+1)$ -го каскада.

Направим ось z для каждой трубки вдоль градиента температуры. Изображенные на рис. 3 зависимости позволяют сделать вывод, что давление и температура изменяются линейно вдоль каждой из трубок. Для широкой и капиллярной трубок имеем уравнения:

$$\begin{cases} p(z) = p_k + (p'_k - p_k)z/l, \\ T(z) = T_1 + (T_2 - T_1)z/l & \text{для капиллярной трубки;} \\ p(z) = p_{k+1} + (p'_k - p_{k+1})z/l, \\ T(z) = T_1 + (T_2 - T_1)z/l & \text{для широкой трубки.} \end{cases} \quad (10)$$

Из формул (10) получаем выражение для плотности:

$$\begin{cases} n(z) = \frac{p_k + (p'_k - p_k)z/l}{T_1 + (T_2 - T_1)z/l} & \text{для капиллярной трубки;} \\ n(z) = \frac{p_{k+1} + (p'_k - p_{k+1})z/l}{T_1 + (T_2 - T_1)z/l} & \text{для широкой трубки.} \end{cases} \quad (11)$$

С учетом формул (11) уравнение сохранения числа молекул в системе запишется в виде

$$Ap_1 + B \sum_{k=1}^M p'_k (1 + \alpha^2) + A \sum_{k=2}^M p_k (1 + \alpha^2) + A(1 + \alpha^2)p_{k+1} = (1 + \alpha^2)Mn_0,$$

где M — число каскадов;

$$A = A(T_1, T_2) = \frac{T_2}{(T_2 - T_1)^2} \ln \frac{T_2}{T_1} - \frac{1}{T_2 - T_1};$$

$$B = B(T_1, T_2) = \frac{1}{T_2 - T_1} - \frac{T_1}{(T_2 - T_1)^2} \ln \frac{T_2}{T_1}.$$

Исходя из представленной на рис. 3 зависимости $a(\text{Kn})$ имеем еще $2k$ уравнений:

$$p'_k = p_k a(\text{Kn}_{k,1}), \quad k = 1, \dots, M;$$

$$p'_k = p_{k+1} a(\text{Kn}_{k,2}), \quad k = 1, \dots, M,$$

где $\text{Kn}_{k,1}$ — число Кнудсена в капиллярной трубке; $\text{Kn}_{k,2}$ — число Кнудсена в широкой трубке.

В силу того, что $\text{Kn} = (2\sqrt{2}\pi\sigma_{\text{eff}}^2 nr)^{-1}$, получаем

$$\text{Kn}_{k,1} = n_0 \text{Kn}_0 / (Ap_k + Bp'_k);$$

$$\text{Kn}_{k,2} = n_0 \text{Kn}_0 / \beta (Ap_{k+1} + Bp'_k);$$

где β — отношение радиусов широкой и капиллярной трубок; $\text{Kn}_0 = (2\sqrt{2}\pi\sigma_{\text{eff}}^2 n_0 r)^{-1}$ — число Кнудсена в узкой трубке в начальный момент времени.

Итого, нелинейную систему из $(2k+1)$ уравнений запишем в виде

$$\begin{cases} Ap_1 + \sum_{k=1}^M p'_k (1 + \alpha^2) + \sum_{k=2}^M p_k (1 + \alpha^2) + A(1 + \alpha^2)p_{k+1} - (1 + \alpha^2)Mn_0 = 0; \\ p'_1 - p_1 a(n_0 \text{Kn}_0 / (Ap_1 + Bp'_1)) = 0; \\ p'_1 - p_2 a(n_0 \text{Kn}_0 / \beta (Ap_2 + Bp'_1)) = 0; \\ \dots \\ p'_M - p_M a(n_0 \text{Kn}_0 / (Ap_M + Bp'_M)) = 0; \\ p'_M - p_{M+1} a(n_0 \text{Kn}_0 / \beta (Ap_{M+1} + Bp'_M)) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Эту нелинейную систему уравнений будем решать итерационным методом Ньютона с итерационным параметром $\kappa = 0,01$:

$$p^{k+1} = p^k - \kappa G^{-1} f(p^k), \quad (13)$$

где $f(p^k)$ — невязка;

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \dots \\ f_4 \\ f_5 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{cases} Ap_1 + \sum_{k=1}^M p'_k (1 + \alpha^2) + \sum_{k=2}^M p_k (1 + \alpha^2) + A(1 + \alpha^2)p_{k+1} - (1 + \alpha^2)Mn_0 = 0; \\ p'_1 - p_1 a(n_0 \text{Kn}_0 / (Ap_1 + Bp'_1)) = 0; \\ p'_1 - p_2 a(n_0 \text{Kn}_0 / \beta (Ap_2 + Bp'_1)) = 0; \\ \dots \\ p'_M - p_M a(n_0 \text{Kn}_0 / (Ap_M + Bp'_M)) = 0; \\ p'_M - p_{M+1} a(n_0 \text{Kn}_0 / \beta (Ap_{M+1} + Bp'_M)) = 0; \end{cases} \quad (14)$$

G — матрица Якоби системы

$$G = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial p_{M+1}} \\ \dots & \ddots & \dots \\ \frac{\partial f_{2k+1}}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial f_{2k+1}}{\partial p_{M+1}} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

В качестве нулевого приближения берутся значения давлений в начальный момент времени $(p_1, p'_1, \dots, p_M, p'_M, p_{M+1})^T = (1, 1, \dots, 1, 1, 1)^T$. Далее по формуле (13) с учетом формул (14)—(15) находим первое, второе и т. д. приближения решения системы (12) до тех пор, пока не будет достигнута точность 10^{-6} .

Функции $a(\text{Kn})$, изображенные на рис. 4, для вычисления матрицы Якоби и невязки при $T_2 = 1,67T_1$ аппроксимируем функцией $a(\text{Kn}) = 1,248 - 0,2183(\text{Kn} + 0,9283)^{-1,7876}$, а при $T_2 = 2,25T_1$ — функцией $a(\text{Kn}) = 1,39784 - 0,2789(\text{Kn} + 0,7965)^{-1,561}$.

Рассмотренная выше математическая модель работы насоса Кнудсена предполагает отсутствие потоков между широкой и капиллярной трубками в установившемся режиме. Для оценки потоков через сечение, соединяющее широкую и капиллярную трубку, был смоделирован один каскад насоса Кнудсена с геометрическими размерами, близкими к размерам реального устройства Кнудсена. На рис. 5 представлены потоки газа в широкой и узкой трубках при $\text{Kn} = 1$.

Исходя из распределения потоков, представленного на рис. 5, можно сделать вывод, что в широкой трубке образуется вихрь. Вдоль стенок газ движется по направлению градиента температуры, а в центре трубки движется в противоположном направлении. Видно, что потоком из узкой трубки можно пренебречь. В капиллярной трубке $\text{Kn} = 1$ и газ не циркулирует по трубке, так как эффект теплового скольжения компенсируется движением газа против градиента температуры. Потоки в капиллярной трубке имеют характер случайных флуктуаций. На рис. 5 показано, что поток в капиллярную трубку из широкой трубки практически отсутствует.

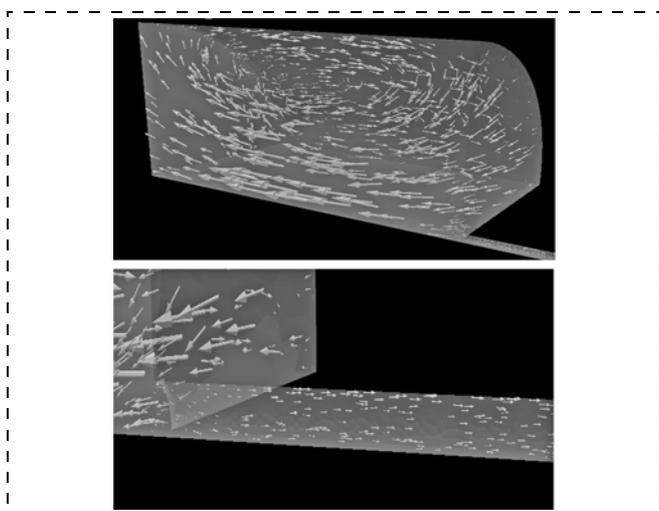


Рис. 5. Распределение потоков в широкой (вверху) и узкой (внизу) трубках

Результаты компьютерного моделирования

Во время первой серии экспериментов Кнудсеном была задействована только одна капиллярная трубка с диаметром примерно 0,6 мм, в то время как диаметр широкой трубки был около 14 мм. Рассматривался однокаскадный насос. Длина узкой трубки была равна 9 см. Соединение трубок было нагрето до 350 °С. Температура противоположного конца узкой трубки оказалась около 100 °С. В табл. 2 сведены экспериментальные результаты Кнудсена, результаты численного моделирования устройства, а также результаты, полученные с помощью построенной выше теоретической модели работы насоса Кнудсена. Давления p_1 и p_2 даны в миллиметрах ртутного столба. Численное моделирование проводилось при длинах капиллярной и широкой трубок, равных 3 см. Диаметры брались те же, что в эксперименте Кнудсена. Эти геометрические параметры трубок удовлетворяют условию $l/\chi > 5$, следовательно, уменьшение длины трубки не влияет на распределение давления в системе.

На рис. 6 представлены распределения давления в трубках в зависимости от продольной координаты для каждого из четырех экспериментов Кнудсена с однокаскадным насосом, результаты которых сведены в табл. 2.

На рис. 7—9 (см. вторую сторону обложки) представлены распределения температуры, плотности и давления в однокаскадном насосе Кнудсена при $\frac{p_1 + p_2}{2} = 0,262$ мм рт. ст. За единицу температуры принималось значение 373 К, за единицу давления 0,215 мм рт. ст., за единицу плотности $5,76 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$.

Таблица 2

Источник результатов	p_2	p_1	$\frac{p_1 + p_2}{2}$	$\frac{p_2 - p_1}{p_1}$	$\frac{p_2}{p_1}$
Эксперимент Кнудсена	0,0223	0,0211		0,0012	1,057
Численное моделирование	0,02265	0,02075	0,0217	0,0019	1,086
Теоретическая модель	0,0227	0,0207		0,0020	1,096
Эксперимент Кнудсена	0,282	0,241		0,041	1,170
Численное моделирование	0,2795	0,2445	0,262	0,035	1,170
Теоретическая модель	0,282	0,242		0,040	1,168
Эксперимент Кнудсена	1,424	1,315		0,109	1,083
Численное моделирование	1,418	1,322	1,370	0,096	1,075
Теоретическая модель	1,430	1,310		0,120	1,092
Эксперимент Кнудсена	5,268	5,175		0,093	1,018
Численное моделирование	5,277	5,173	5,225	0,104	1,018
Теоретическая модель	5,280	5,170		0,110	1,020

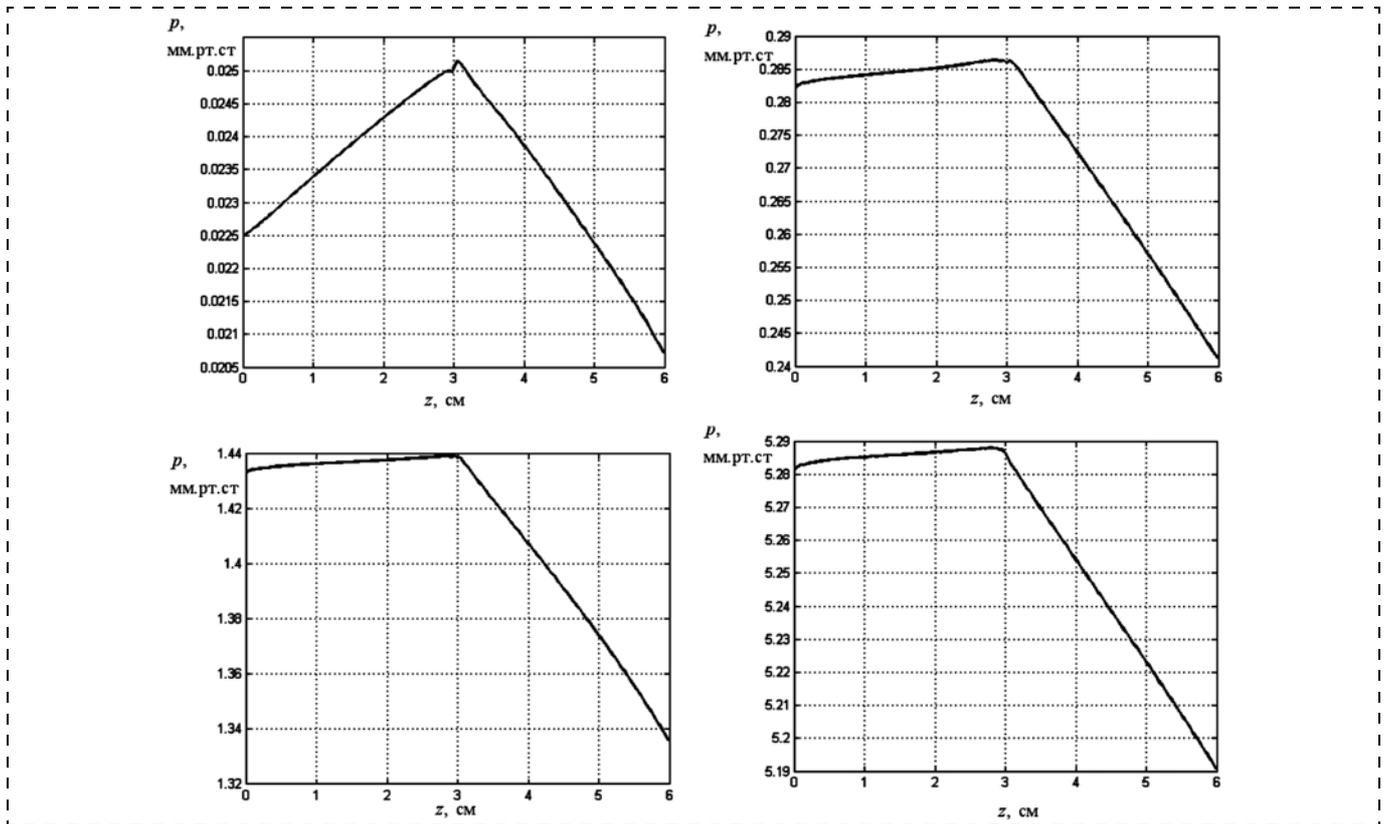


Рис. 6. Распределение давления в трубках



Рис. 10. Устройство Кнудсена

Кнудсен пытался увеличить отношение давлений на концах устройства за счет последовательного соединения капиллярных и широких трубок и использования более высоких разниц в температурах. Схема устройства представлена на рис. 10.

Толстые линии показывают широкие трубки, а тонкие линии — капиллярные трубки. Как широкие, так и узкие трубки имели длину 5 см. У широких трубок внутренний диаметр составлял 10,2 мм, у капиллярных — в среднем 0,374 мм. Последние величины были определены посредством их взвешивания с ртутью. Разница между диаметрами различных частей капиллярной трубки была крайне малой. Четырехугольниками обозначены стеклянные резервуары, покрытые асбестом, а вокруг асбеста намотана платиновая проволока, которая, в свою очередь, была покрыта асбестом. Платиновая проволока поддерживалась раскаленной под действием электрического тока и, таким образом, передавала каждому второму месту стыка трубок такую высокую температуру, которую по ожиданиям исследователя стекло может выдерживать долгое время. Разница в температурах между нагретыми и не нагретыми местами стыка трубок определялась термопарой и была равна 500 К. Термопара была введена в стакан извне, отчего температура на внутренней стороне стакана была опре-

делена не вполне точно. При численном моделировании температура не нагреваемых стыков бралась 400 К, а нагреваемых — 900 К.

В табл. 3 сведены результаты второй серии экспериментов Кнудсена, результаты численного моделирования устройства, а также результаты, полученные с помощью построенной выше теоретической модели работы насоса Кнудсена. Давления на концах насоса p_1 и p_{11} даны в миллиметрах ртутного столба. Численное моделирование проводилось при длинах капиллярной и широкой трубок, равных 75 мм. Диаметры брались те же, что в эксперименте Кнудсена. Эти геометрические параметры трубок удовлетворяют условию $l/\chi > 5$, следовательно, уменьшение длины трубки не влияет на распределение давления в системе. Численное моделирование проводилось для трех экспериментов, в результате

Таблица 3

p_{11}	p_1	$p_{11} - p_1$	$\frac{p_{11}}{p_1}$	$\frac{p_{11}}{p_1}$	$\frac{p_{11}}{p_1}$
Эксперимент Кнудсена			Численное моделирование	Модель работы насоса Кнудсена	
0,00978	0,00419	0,00559	2,33	1,97	
0,278	0,0314	0,247	8,85	8,41	
0,475	0,0476	0,427	9,98	10,06	
3,601	1,169	2,432	3,09	3,39	
4,834	2,058	2,776	2,35	2,27	
16,5	15,1	1,4	1,09	1,15	

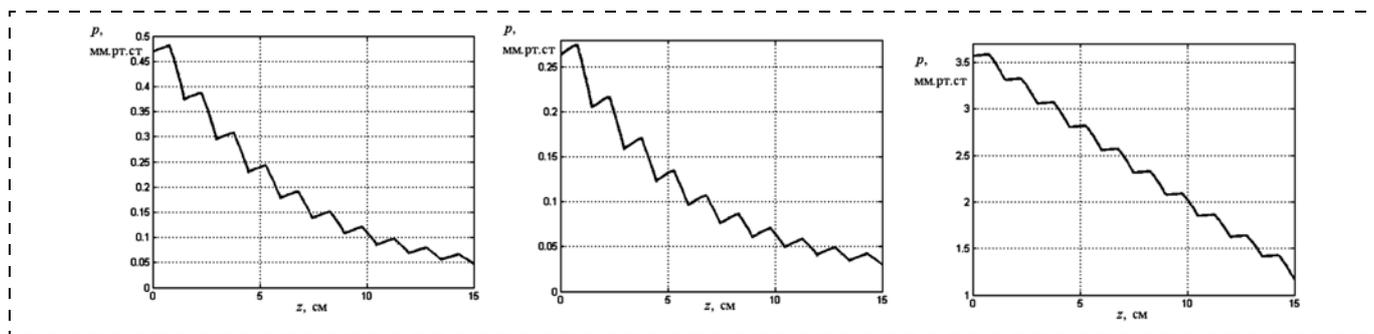


Рис. 11. Распределение давления в десятикаскадном насосе

которых Кнудсен получил наибольшие отношения давлений на концах устройства.

На рис. 11 представлены распределения давления в трубках в зависимости от продольной координаты для трех смоделированных случаев работы многокаскадного насоса.

На рис. 12 (см. вторую сторону обложки) приведено распределение давления в десятикаскадном насосе Кнудсена при $p_{11} = 0,475$ мм рт. ст. и $p_1 = 0,0476$ мм рт. ст. За единицу давления принималось значение 0,142 мм рт. ст.

Табл. 2 и 3 показывают, что как результаты численного моделирования, так и результаты, полученные на основе построенной теоретической модели, близки к экспериментальным результатам Кнудсена.

Заключение

В ходе работы был проведен компьютерный эксперимент работы насоса Кнудсена. Результаты сравнивались с экспериментальными результатами Кнудсена, взятыми из работы [1]. Моделирование проводилось на основе решения обобщенного уравнения Больцмана, вращательные степени свободы оценивались с помощью двухуровневой модели [5].

На основе численного исследования распределения макропараметров в цилиндрических трубках с приложенным градиентом температуры была предложена математическая модель работы насоса Кнудсена. Применимость этой модели доказана с помощью численного моделирования одного каскада насоса Кнудсена, в ходе которого были построены потоки газа в насосе. Потоки газа через сечение, соединяющее широкую и капиллярную трубки, малы и носят флуктуационный характер. Результаты, полученные с помощью расчета по этой модели, сравнивались с экспериментальными результатами Кнудсена.

Отклонение результатов компьютерного моделирования и эксперимента Кнудсена могло возникнуть как вследствие того, что использовалась разностная схема первого порядка точности при аппроксимации оператора переноса, так и того, что в первой серии экспериментов Кнудсен указывает приблизительные температуры нагретых и холодных концов трубок, а во второй серии вообще их не указывает, приводя лишь их разность. Однако полученные результаты близки к экспериментальным ре-

зультатам Кнудсена, что в целом подтверждает пригодность метода [7–9] для расчета медленных течений в насосах Кнудсена.

Все расчеты проведены на кластере МФТИ-60. Для моделирования однокаскадного насоса использовались пространственная сетка из 20 000–25 000 тетраэдров и скоростная кубатурная сетка из 4200 узлов. Однокаскадный насос моделировался на четырех узлах по четыре CPU на каждом. Время, затраченное на моделирование, в среднем составляло 20 ч. Для моделирования однокаскадного насоса использовались пространственная сетка из 150 000 тетраэдров и скоростная кубатурная сетка из 3000 узлов. Многокаскадный насос моделировался на 20 узлах по четыре CPU на каждом. Время, затраченное на моделирование, в среднем составляло 50 ч.

Список литературы

1. Knudsen M. Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularströmung // Ann. der Phys. 1910. Bd. 31, N 9. S. 205–229.
2. Nathanson H. C., Liberman L., Freidhoff C. Novel functionality using micro-gaseous devices // Proceedings of IEEE Int. Conf. on MEMS. 1995. P. 72–76.
3. Blomberg B., Rusanen O., Keranen K., Lehto A. A silicon microsystem-mminiaturized infrared spectrom // Proceedings of IEEE Int. Conf. on Solid-State Sensors and Actuators. 1997. V. 2. — P. 1257–1258.
4. Terry S. C., Jerman J. H., Angell J. B. A gas chromatographic air analyzer fabricated on a silicon wafer // IEEE Trans. on Electron Devices. 1979. V. 26, I. 12. P. 1880–1886.
5. Черемисин Ф. Г. Двухуровневая кинетическая модель вращательно-поступательных переходов в разреженном газе // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2007. № 10. URL: <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2007-10-22-001.pdf>
6. www.geuz.or/g/gmsh/.
7. Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.
8. Черемисин Ф. Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // ЖВМ и МФ. 2006. Т. 46, № 2. С. 329–343.
9. Tcheremissine G. G. Solution of the Boltzmann Kinetic Equation for Low Speed Flows // Transport Theory and Statistical Physics. 2008. Vol. 37, N 5. P. 564–575.
10. Hirschfelder J. O., Curtiss Ch. F., Birt R. B. Molecular theory of gases and liquids. New York: John Wiley and sons, Inc. London : Chapman and Hall, Lim. 1954.
11. Богданов А. В., Дубровский Г. В., Осипов А. И. Вращательная релаксация в плазме и газах. М.: Энергоатомиздат, 1991.

УДК 539.217.554.628

В. В. Петров¹, канд. техн. наук, доц.,
Т. Н. Назарова¹, канд. техн. наук, доц.,
Н. Ф. Копылова¹, канд. техн. наук, ассист.,
О. В. Заблуда¹, студентка,
И. Кисилев², канд. техн. наук, инж.,
М. Брунс², инж.

¹ Технологический институт Южного федерального университета в г. Таганроге, e-mail: vvpetrov@tsure.ru

² Институт микроструктурной техники (г. Карлсруэ, Германия)

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ, ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК СОСТАВА $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$

Приведены результаты изучения формирования тонких пленок газочувствительного материала состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ золь-гель-методом. Было проведено исследование их физико-химических и электрофизических свойств, а также изучены газочувствительные характеристики. Определено, что сенсор газа, изготовленный на основе пленок газочувствительного материала состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$, проявляет селективную чувствительность к диоксиду азота в диапазоне рабочих температур 100...200 °С.

Ключевые слова: золь-гель-метод, газочувствительный материал, диоксид азота

Введение

Сенсоры газов, построенные на основе изменения удельной электропроводности полупроводниковых металлоксидных тонкопленочных материалов, находят широкое применение для детектирования газов-поллютантов, технологических и горючих газов. Однако существующие сенсоры требуют оптимизации их параметров: газовой чувствительности, быстродействия и селективности. Одним из путей оптимизации является разработка для сенсоров многокомпонентных оксидных материалов сложного состава.

В работе [1] показано, что пленки, полученные по золь-гель-технологии, в результате тщательного

подбора состава газочувствительного материала (ГЧМ) могут быть селективными. В частности, при нанесении на пленку SnO_2 , легированную гадолинием, пленки оксида кремния, полученной по золь-гель-технологии и легированной палладием и платиной, получаем сенсор, обладающий селективной чувствительностью к оксиду азота (IV) на воздухе.

Ранее нами в работах [2, 3] были исследованы свойства ГЧМ на основе оксидов кремния, олова и серебра, получаемого по золь-гель-технологии из спиртовых растворов тетраэтоксисилана (ТЭОС), модифицированных добавками соединений олова и серебра. Сенсоры, изготовленные на основе тонких пленок указанного ГЧМ, проявляли чувствительность по отношению к аммиаку в диапазоне концентраций 1...200 ppm при рабочих температурах, близких к комнатной.

Особенностью пленок, получаемых по золь-гель-технологии, является то, что их электрические свойства, в частности сопротивление, мало зависят от влажности окружающей среды [1–3]. Такая незначительная чувствительность ГЧМ к парам воды объясняется тем, что для силикагелей, к которым можно отнести и полученные из золь-гель-растворов пленки ГЧМ, при уменьшении размеров частиц (кристаллитов) на несколько порядков снижается степень их гидратации, т. е. способность адсорбировать молекулы воды из воздуха [4].

В данной работе исследуются электрофизические свойства и газочувствительные характеристики ГЧМ на основе оксидов кремния, олова и меди, полученные из спиртовых растворов ТЭОС и проявляющие селективную чувствительность к диоксиду азота в диапазоне рабочих температур 100...200 °С.

Методы исследований

Тонкие пленки образцов ГЧМ (толщиной 0,22 мкм) получали путем центрифугирования спиртового раствора ТЭОС с добавками хлорида олова (IV) и нитрата меди (II) на подготовленные кремниевые пластины и кварцевые подложки [1, 2, 5]. Соотношение атомов олова и меди (Sn/Cu) в растворах было от 3,2 до 131. Сформированные пленки отжигали при температурах 773 и 873 К [6]. В итоге из растворов с различным соотношением Sn/Cu, были получены 10 образцов пленок исследуемого ГЧМ (табл. 1).

Исследование морфологии поверхности образцов проводили методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на микроскопе Solver P47 Pro в полуконтактном режиме. Статистические параметры морфологии поверхности (средние значения параметров пор и выступов, а также их долю (в процентах) по площади измеряемого участка) определяли с помощью программы *Image Analysis*.

Таблица 1

Влияние соотношения элементов в исходном растворе и температуры отжига на состав и морфологию пленки

Температура отжига, К	Атомарное соотношение Sn/Cu в растворе	Доля выступов, %	Средняя высота, нм	Доля пор, %	Средняя глубина, нм
773	131	—	—	18,1	472
	65	—	—	13,6	124
	6,5	0,6	54	1,2	5
	6	14,4	5	5,8	5
	3,2	31,5	20	2,3	248
873	131	—	—	4,9	633
	65	37,8	95	36,5	207
	6,5	28,6	79	12,8	150
	6	2,5	8	8,9	5
	3,2	29,2	58	18,0	213

Рентгенофазовый анализ проводили на установке ДРОН-3 ($C_0(K_\alpha) = 0,17903$ нм). Элементный состав полученного материала исследовали с помощью рентгенофотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и энергодисперсионного анализа, проведенного на электронном микроскопе с ионной колонной Nova 600 NanoLab и микрорентгеновским энергодисперсионным анализатором EDAX Genesis.

Исследования электрофизических свойств и газочувствительных характеристик образцов пленок ГЧМ проводили на автоматизированном стенде [7]. Для этого на поверхности образцов пленок ГЧМ на расстоянии 5 мм друг от друга вжиганием серебро-содержащей пасты формировали контактные площадки. С помощью стенда измеряли температурные зависимости поверхностного сопротивления пленок, по результатам которых проводили расчет энергии активации проводимости E_a , концентрации носителей заряда n и ширины запрещенной зоны материала E_g . Для изучения чувствительности сенсоров к различным газам и влажности воздуха в газовом блоке автоматизированного стенда формировали газовую смесь с необходимой концентрацией измеряемого газа или паров воды, которую вводили в измерительную камеру. Кроме этого, ширину запрещенной зоны рассчитывали по результатам измере-

ния коэффициента оптического поглощения пленок ГЧМ на спектрофотометре СФ-26 в диапазоне длин волн 200...600 нм [8]. Для этого использовали образцы пленок, нанесенные на кварцевую подложку.

Результаты и обсуждение

Результаты рентгенофазового анализа полученных пленок, представленные на рис. 1, показали, что образование кристаллитов оксидов олова и меди наблюдается при более высокой температуре отжига (кривые 2, 4 на рис. 1). Однако приведение соответствия пиков рентгенограммы конкретному соединению затруднено в связи с большим уширением пиков за исключением ярко выраженных пиков кристаллического кремния. Уширение пиков может быть связано как с маленьким размером кристаллитов искомого соединения, так и с накладывающимися друг на друга близкорасположенными пиками соединений одного типа, например, наложением друг на друга близко расположенных пиков оксидов олова и меди или смешанных оксидов олова и кремния (SnO , SnO_2 , Sn_2O_3 , Sn_3O_4 , Cu_2O , CuO , $SnSiO_3$). В пользу последнего предположения выступает сглаженный вид вершин пиков. Сравнение рентгенограмм с карточками рентгеновской картотеки JCPDS позволило подтвердить это предположение. На рис. 2 указано, к каким соединениям могут быть отнесены те или иные пики. Были идентифицированы кристаллические модификации оксидов олова (SnO , SnO_2 , Sn_2O_3 , Sn_3O_4), меди (CuO , Cu_2O), а также силикаты олова ($SnSiO_3$).

Оценочный расчет размеров кристаллитов SnO_x и CuO_y по уравнению Шерера показывает, что они растут при увеличении температуры отжига с 773 до 873 К от 10...13 нм до 14...22 нм, соответственно. Такой результат согласуется с известными в литературе данными [9]. Отсутствие пиков оксида кремния SiO_2 объясняется тем, что при температуре отжига ниже 800 °С он находится в аморфном состоянии [10], хотя присутствие второго легирующего компонента может способствовать кристаллизации оксидов кремния в силикатах [11].

На рис. 2 показана морфология поверхности исследуемых методом АСМ пленок, а в табл. 1 представлены результаты морфологических исследований. Из рис. 2 и табл. 1 видно, что поверхность пле-

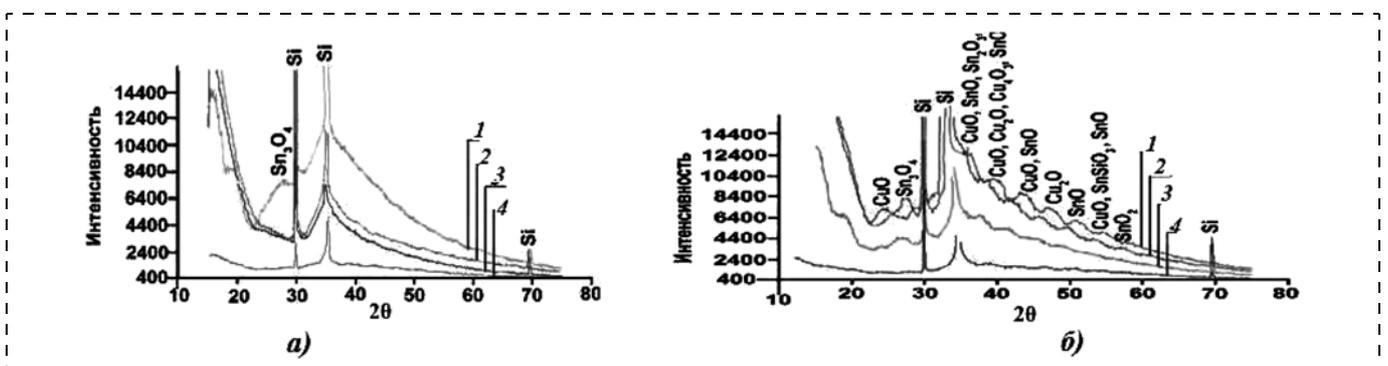


Рис. 1. Дифрактограммы пленок состава $SiO_2/SnO_x/CuO_y$, отожженных при 773 К (а) и 873 К (б) с соотношением Sn/Cu равным: кривая 1 — 3,2; 2 — 6,5; 3 — 65, 4 — 131

нок ГЧМ содержит в основном поры. Характерные выступы образуются при малых соотношениях Sn/Cu. Значительное влияние на характер и появление пор и выступов оказывает температура отжига пленки ГЧМ.

Для образцов, отожженных при температуре 773 К, при уменьшении соотношения Sn/Cu наблюдается

снижение доли пор и рост доли выступов. Образцы, отожженные при температуре 873 К, имеют в среднем более глубокие "кратеровидные" поры и более высокие выступы, чем образцы, отожженные при 773 К. У образцов пленок с высокими значениями Sn/Cu выступы образуются за счет большой высоты краев "кратеровидной" поры (см. рис. 1). Как известно,

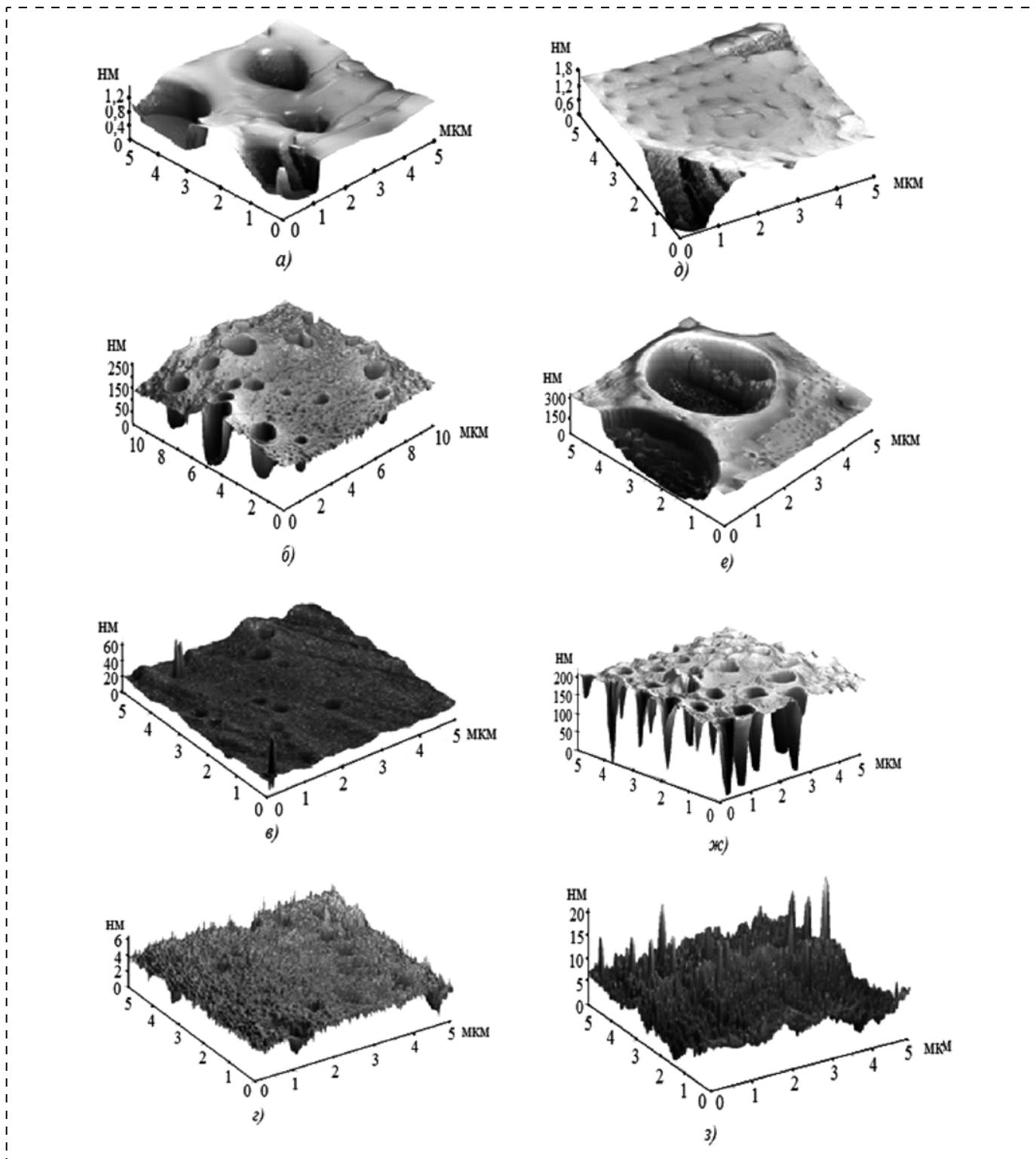


Рис. 2. Морфология поверхности пленок $\text{SiO}_2\text{-SnO}_x\text{-CuO}_y$ с соотношением Sn/Cu = 131 (а, д) (II-1, II-7) Sn/Cu = 65,6 (б, е) (I-1, I-4); Sn/Cu = 6,5 (в, ж) (I-2, I-5); Sn/Cu = 6 (г, з) (II-3, II-9); при $T_{\text{отж}} = 500\text{ }^\circ\text{C}$ (а-г) и $T_{\text{отж}} = 600\text{ }^\circ\text{C}$ (д-з)

Таблица 2

Параметры спектров атомов элементов
в пленке $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$

Параметры	Электронный уровень			
	Si 2p	Sn 3d _{5/2}	Cu 2p	O 1s
Энергия связи, эВ	104,0	487,5	931,8 933,9	526,8 530,7 532,4
Электроотрицательность относительная	1,74—2,44	1,72—1,92	1,9	3,17—3,50
Сродство к электрону, эВ	1,4—2,0	1,8	2,4	0,30—0,87
Q _{3,4} структура [15, 16]	102	—	—	532,2

образование пор в материалах, полученных по золь-гель-технологии из спиртовых растворов ТЭОС, связано с удалением продуктов гидролиза, органических остатков и растворителя из геля и полимеризацией кислород-кремниевой структуры. Так как результаты рентгенофазового анализа и АСМ поверхности показывают, что поры и выступы занимают большую долю поверхности образцов пленок ГЧМ, полученных из растворов с высокими значениями Sn/Cu, то можно сделать следующий вывод: большая концентрация хлорида олова в растворе приводит к образованию пор большого размера. Увеличение содержания оксидов меди приводит к появлению выступов.

Элементный анализ пленок состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$, полученных из растворов с соотношением Sn/Cu = 3,2 показал наличие оксидных соединений (SiO_2 , SnO_x , CuO), а также органических компонентов раствора, которые не улетучились (связи С-Н), их концентрация невелика (не более 9 %). Анализ содержания элементов в пленке показывает, что атомов меди — 2,4 %, олова — 7,1 %, а соотношение в пленке Sn/Cu равно 3, это соответствует соотношению Sn/Cu в растворе (рис. 3, табл.2) [12, 13].

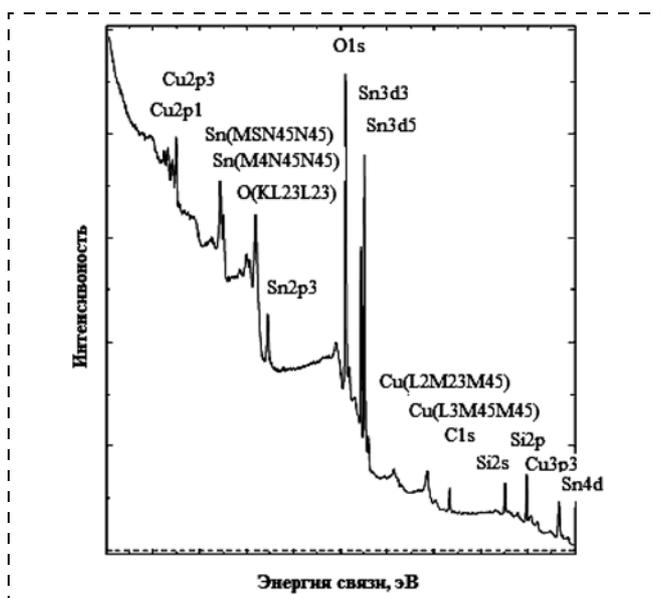


Рис. 3. РФЭС спектрограмма пленок состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$, полученных из растворов с соотношением Sn/Cu = 3,2

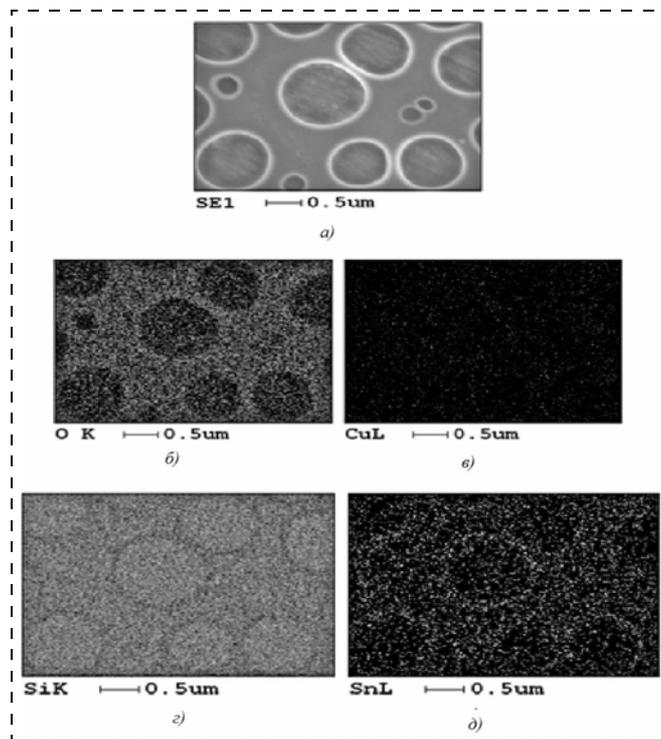


Рис. 4. Распределение атомов кислорода (б), меди (в), кремния (г), олова (д) по участку пленки ГЧМ (а) (Sn/Cu = 6,5; $T_{\text{отж}}$ = 873 К)

Сравнивая данные по O 1s- и Si 2p-уровням энергии из табл. 2 для пленки $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$, отожженной при 873 К (Sn/Cu = 3,2) с результатами РФЭС-измерений, полученных для золь-гель силикатных пленок, легированных платиной [14, 15], можно заметить, что для наших пленок характерно наличие 3,4-членных кислородно-кремниевых кольцевых структур $\text{O}_{3,4}$ (энергия связи O 1s — 532,4 эВ). Однако энергия связи Si 2p (104,0 эВ) соответствует соединению SiO_2 [16]. Атомам в оксидах меди соответствуют энергии связи Cu 2p 933,9 и 931,8 эВ, а также O 1s — 526,8 эВ. При этом атомы меди заряжены положительно, а атомы кислорода — отрицательно. Атомам в оксидах олова соответствуют энергии связи Sn 3d_{5/2} 487,5 эВ и O 1s — 530,7 эВ [16].

На рис. 4 приведены результаты энергодисперсионного анализа пленки ГЧМ, полученной из растворов с соотношением Sn/Cu = 6,5 и отожженной при 873 К. Более высокая концентрация атома элемента на рис. 4 показана точкой более высокой яркости, цвет которой соответствовал атому определенного элемента. Результаты показали равномерное распределение атомов меди по участку пленки размером 4 × 4 мкм. Атомы кремния имели большую концентрацию в порах, а атомы кислорода и олова большую концентрацию имели за пределами пор. Аналогичное распределение атомов было и на участках большего размера.

Расчитанные из спектрограмм значения соотношения Sn/Cu изменяются от 2,4 до 8,1. На спектрограмме, полученной с помощью энергодисперсионного анализа, кроме указанных элементов в пленке также присутствует углерод. Его содержание колеблется от 6,1 до 11,1 ат. % по площади образца, что соответствует результатам РФЭС измерений.

Таблица 3

Рассчитанные значения энергии активации, ширины запрещенной зоны и концентрации носителей заряда пленки состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$

Соотношение Sn/Cu в растворе	Энергия активации проводимости E_a , эВ	Ширина запрещенной зоны E_g , эВ	Концентрация носителей заряда n_i , см^{-3} $T = 25^\circ\text{C}$
131	0,17	0,34	$6 \cdot 10^{15}$
6,5	0,15	0,44	$7 \cdot 10^{15}$

Для исследования электрофизических свойств образцы пленок ГЧМ со сформированными контактами помещали в измерительную камеру, оснащенную столиком с керамическим нагревателем, обеспечивающим нагрев до 300°C . На рис. 5 представлены типичные зависимости логарифма сопротивления пленок ГЧМ от обратной температуры. Из графика зависимости $\lg(R) - 1000/T$ видно, что сопротивление пленок уменьшается с повышением температуры по экспоненциальному закону $R = R_0 \exp(-\Delta E/2kT)$. Это говорит о полупроводниковом характере проводимости материала пленки. Увеличение концентрации меди в пленкообразующем растворе приводит к более сильной зависимости сопротивления пленки от температуры.

В табл. 3 представлены значения энергии активации E_a и ширины запрещенной зоны E_g , рассчитанные, согласно [8], по углу наклона касательной в точке. Величина E_g также была оценена по краю оптического поглощения [13]. Значения E_g для образца с соотношением Sn/Cu = 6,5, рассчитанные из температурных (0,44 эВ) и оптических измерений (0,5 эВ) близки.

Также был проведен расчет концентрации свободных носителей заряда при температуре 25°C [8]. Результаты расчетов также приведены в табл. 3.

Поверхностная концентрация носителей заряда, рассчитанная из данных табл. 3, соответствует $(3,3...3,6)10^{10} \text{ см}^{-2}$. Повышение концентрации оксида олова в пленках приводит к некоторому снижению концентрации свободных носителей заряда. Кроме этого, расчеты показали, что повышение температуры до $200...250^\circ\text{C}$ приводит к увеличению концентрации носителей заряда в 5–10 раз.

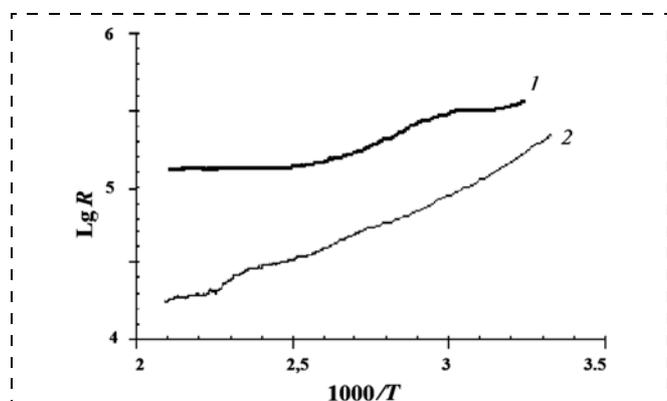


Рис. 5. Температурные зависимости сопротивления пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ с соотношением Sn/Cu в исходном растворе: кривая 1 — Sn/Cu = 131; кривая 2 — Sn/Cu = 6,5 ($T_{\text{отж}} = 600^\circ\text{C}$)

Газочувствительные характеристики образцов пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ исследовали по отношению к диоксиду азота, сероводороду, аммиаку и хлороводороду. Газочувствительность пленок характеризовали коэффициентом чувствительности S_k , который для взаимодействия газов-доноров с оксидными полупроводниками n -типа проводимости (или газов-акцепторов с оксидными полупроводниками p -типа проводимости) определяется формулой

$$S_k = \frac{\sigma_{\text{gas}} - \sigma_0}{\sigma_0}, \quad (1)$$

где σ_{gas} — электрическая проводимость пленки ГЧМ при воздействии газа заданной концентрации; σ_0 — электрическая проводимость пленки ГЧМ в воздухе при отсутствии газа (соответствует значению проводимости пленки при концентрации 0 ppm).

Исследования на воздействие сероводорода в диапазоне концентраций 1500...3500 ppm и температуре нагрева $50...200^\circ\text{C}$ показали, что при его воздействии пленка ГЧМ необратимо теряет свойство газочувствительности.

Исследования на воздействие хлороводорода в диапазоне концентраций 100...1000 ppm и температуре нагрева $50...200^\circ\text{C}$ показали, что только при температурах нагрева 50°C образцы пленок ГЧМ с соотношением Sn/Cu = 6,5 ($T_{\text{отж}} = 773 \text{ K}$) имеют чувствительность, равную 0,08 отн. ед. Однако отклик сенсора является нестабильным.

Исследования на воздействие аммиака в диапазоне концентраций 10...250 ppm и температуре нагрева $50...200^\circ\text{C}$ показали, что только при температурах нагрева $100...150^\circ\text{C}$ ГЧМ с соотношением Sn/Cu = 6,5 ($T_{\text{отж}} = 773 \text{ K}$) имеет стабильный отклик с чувствительностью, равной 0,04...0,06 отн. ед.

Исследования на воздействие диоксида азота в диапазоне концентраций 1,0...80 ppm и температуре нагрева $50...200^\circ\text{C}$ показали, что пленки ГЧМ с разным соотношением Sn/Cu, полученные при температурах отжига 773 и 873 K, имеют стабильный отклик с чувствительностью до 0,40 отн. ед. [8]. На рис. 6 представлен типичный вид отклика сенсорной структуры на основе пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ с соотношением Sn/Cu = 6.

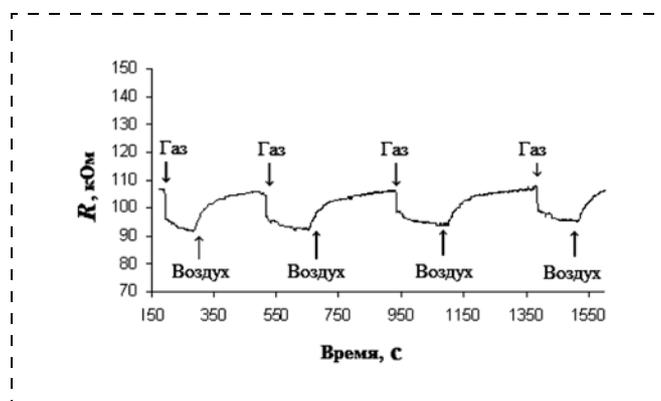


Рис. 6. Отклик пленки ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ ($T_{\text{отж}} = 773 \text{ K}$, Sn/Cu = 6, температура нагрева 100°C)

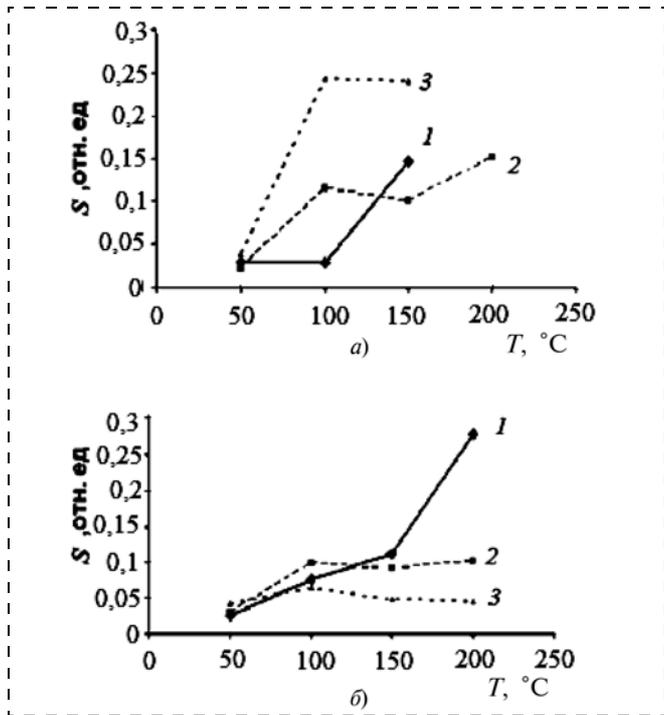


Рис. 7. Температурная зависимость отклика образцовых пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$. Соотношение в пленках Sn/Cu: кривая 1 — 131; кривая 2 — 13; кривая 3 — 6. Температура отжига пленок 500 °C (а) и 600 °C (б). Концентрация NO_2 — 73 ppm

На чувствительность сформированных сенсорных структур на основе пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ к NO_2 влияют температура отжига пленки, рабочая температура ее нагрева и содержание оксидов меди в исследуемых образцах. На рис. 7 представлены температурные зависимости чувствительности S сенсорных структур к NO_2 на основе пленок ГЧМ

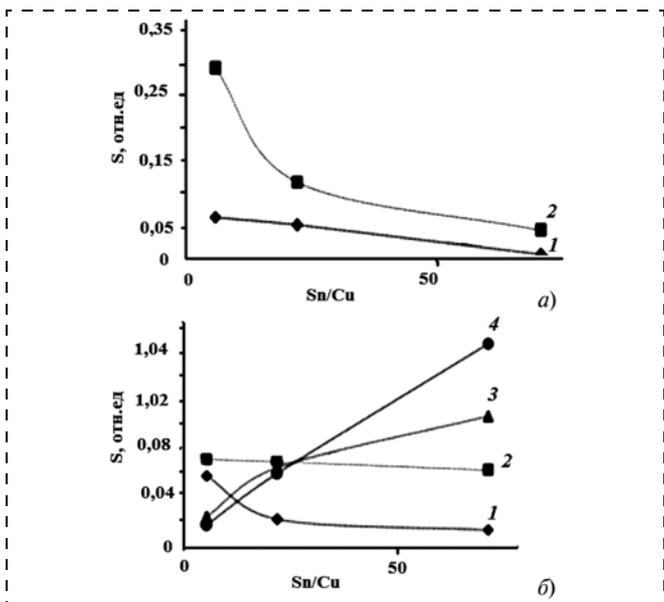


Рис. 8. Зависимость чувствительности пленок ГЧМ от соотношения в них Sn/Cu: а — $T_{\text{отж}} = 773$ К; б — $T_{\text{отж}} = 873$ К. Рабочая температура: кривая 1 — 50 °C; кривая 2 — 100 °C; кривая 3 — 150 °C; кривая 4 — 200 °C

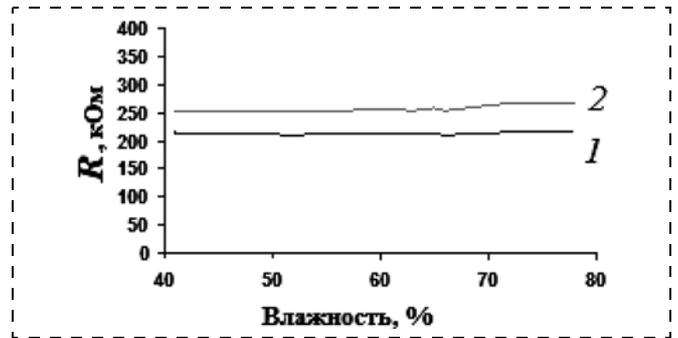


Рис. 9. Зависимость сопротивления пленок ГЧМ ($\text{Sn/Cu} = 6$; $T_{\text{отж}} = 773$ К) от влажности воздуха при рабочей температуре: 1 — $T_p = 25$ °C; $T_p = 100$ °C

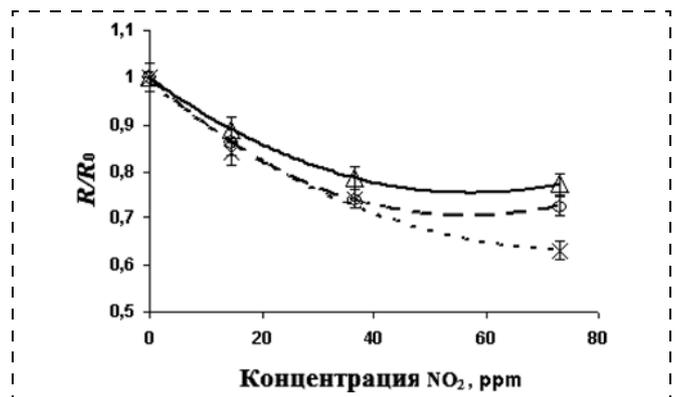


Рис. 10. Калибровочные графики образцов сенсоров: Sn/Cu = 6, $T_{\text{раб}} = 100$ °C (o); Sn/Cu = 6,5, $T_{\text{раб}} = 150$ °C (Δ); Sn/Cu = 131, $T_{\text{раб}} = 200$ °C (x)

с разным соотношением Sn/Cu. Анализ зависимостей показывает, что уменьшение соотношения Sn/Cu приводит к тому, что максимальная чувствительность наблюдается при меньшей температуре нагрева пленки ГЧМ (100 °C, рис. 7, а, кривая 3), а увеличение соотношения Sn/Cu в пленках приводит к тому, что максимальная чувствительность наблюдается при большей температуре нагрева пленок ГЧМ (200 °C, рис. 7, а, б, кривая 1).

Исследование чувствительности сенсоров в зависимости от соотношения Sn/Cu (рис. 8) показали, что для пленок ГЧМ, отожженных при $T = 773$ К, наблюдается уменьшение чувствительности сенсоров при увеличении соотношения Sn/Cu.

Для пленок ГЧМ, отожженных при $T = 873$ К, при их нагреве до рабочих температур 50...100 °C также наблюдается рост чувствительности пленок ГЧМ к NO_2 при уменьшении соотношения Sn/Cu. Однако при росте рабочих температур ГЧМ до 150 °C и выше, чувствительность при увеличении соотношения Sn/Cu также растет. Такое поведение зависимости чувствительности от соотношения Sn/Cu в сформированных пленках ГЧМ может являться следствием существования разных механизмов поверхностных реакций при низких и высоких температурах нагрева пленок ГЧМ [8].

Влияние влажности на поверхностное сопротивление пленки было исследовано на образце, приготовленном из раствора с соотношением Sn/Cu = 6,

$T_{отж} = 773 \text{ K}$ (рис. 9). Исследования проводили при значениях относительной влажности воздуха от 41 до 78 % и при температуре 25 и 100 °С и выяснили, что влажность не влияет на результаты измерений.

На рис. 10 приведены зависимости сопротивления R образцов пленок ГЧМ с контактами для трех образцов пленок ($\text{Sn}/\text{Cu} = 6; 6,5 \text{ и } 131$), имеющих лучшие газочувствительные характеристики к диоксиду азота, приведенные к сопротивлению пленок в отсутствие газа R_0 . Из этих зависимостей видно, что сенсоры диоксида азота, изготовленные на основе пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$, имеют динамический диапазон 0...50 ppm при рабочих температурах 100...150 °С и 0...70 ppm при рабочих температурах 200 °С.

Выводы

Таким образом, результаты исследований показали, что полученный ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ можно характеризовать как аморфный SiO_2 с равномерно распределенными в нем кристаллитами оксидов олова (SnO , SnO_2 , Sn_2O_3 , Sn_3O_4), меди (CuO , Cu_2O) и силикатов олова (SnSiO_3), размеры которых растут при увеличении температуры отжига с 773 до 873 К с 10...13 нм до 14...22 нм, соответственно. Пленка ГЧМ характеризуется наличием 3,4-членных кислородно-кремниевых кольцевых структур, а соотношение Sn/Cu при ее образовании из пленкообразующего золь-гель-раствора сохраняется. На поверхности пленки присутствуют, в основном, "кратеровидные" поры, определяющие ее развитость.

Полученный ГЧМ имеет полупроводниковый характер проводимости с энергией активации 0,15...0,17 эВ и шириной запрещенной зоны 0,34...0,5 эВ. Концентрация носителей заряда составляет $(6...7) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Газочувствительные характеристики при температурах нагрева 100...200 °С проявляются к диоксиду азота и зависят от атомарного соотношения Sn/Cu в пленке ГЧМ и от температуры ее отжига. Сенсоры диоксида азота, изготовленные на основе пленок ГЧМ состава $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$, будут иметь динамический диапазон 0...50 ppm при рабочих температурах 100, 150 °С и 0...70 ppm при рабочих температурах 200 °С. При этом наблюдается отсутствие влияния влаги на результаты измерений.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009—2013 годы", государственный контракт № 02.740.11.0122).

Список литературы

1. Шилова О. А. Силикатные наноразмерные пленки, получаемые золь-гель методом, для планарной технологии изготовления полупроводниковых газовых сенсоров // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31, № 2. С. 270—293.
2. Петров В. В., Королев А. Н., Назарова Т. Н., Козаков А. Т., Плутогаренко Н. К. Формирование тонких газочувствительных оксидных пленок смешанного состава, легированных серебром // ФизХОМ. 2005. № 3. С. 58—62.
3. Petrov V. V., Nazarova T. N., Korolev A. N., Kopilova N. F. Thin sol-gel $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—AgO}_y$ films for low temperature ammonia gas sensor // Sensors & Actuators: B. Chemical, B. 2008. V. 133. P. 291—295.
4. Кисилев В. Ф., Крылов О. В. Адсорбционные процессы на поверхности полупроводников и диэлектриков. М.: Наука, 1978. С. 256 с.
5. Петров В. В., Королев А. Н., Назарова Т. Н., Копылова Н. Ф. Способ получения газочувствительного материала для сенсора аммиака: Пат. № 2310833 Российская Федерация, заявл. 05.09.2006; опублик. 20.11.2007; Бюл. № 32.
6. Петров В. В., Копылова Н. Ф., Тарантеева Н. В., Александрова М. С. Исследование электрофизических свойств наноразмерных пленок $\text{SiO}_2(\text{SnO}_x\text{CuO})$, чувствительных к оксидам азота // Материалы VII Межд. науч. конф. "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии". Кисловодск: СевКавГТУ, 2007. С. 261—263.
7. Петров В. В. Автоматизированный стенд для калибровки сенсоров газа // Тезисы докл. Межд. науч.-техн. конф. "Сенсорная электроника и микросистемные технологии", Украина, Одесса: Астропринт", 2004. С. 288—289.
8. Зеегер К. Физика полупроводников / Под ред. Ю. К. Пожелы. М.: Мир, 1977. 616 с.
9. Румянцева М. Н., Сафонова О. В., Булова М. Н., Рябова Л. И., Гаськов А. М. Газочувствительные материалы на основе диоксидов олова // Сенсор. 2003. № 2. С. 8—33.
10. Технология СБИС. В 2 кн. Кн. 1 / Пер. с англ. под ред. С. Зи. М.: Мир, 1986. 404 с.
11. Сережкина С. В., Потапенко Л. Т., Бокшиц Ю. В., Шевченко Г. П., Свиридов В. В. Получение наночастиц серебра в оксидных матрицах, сформированных золь-гель методом // Физика и химия стекла. 2003. Т. 29, № 5. С. 673—680.
12. Петров В. В., Александрова М. С., Копылова Н. Ф., Bruns M., Назарова Т. Н., Королев А. Н. Исследование физико-химических и газочувствительных свойств наноразмерных пленок состава $\text{SiO}_2(\text{Sn}_x\text{O}_y, \text{CuO}_y)$ // Матер. VIII Междун. науч. конф. "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии". Кисловодск: СевКавГТУ, 2008. С. 155—158.
13. Петров В. В., Королев А. Н. Наноразмерные оксидные материалы для сенсоров газов. Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2008. 153 с.
14. Канунникова О. М., Михайлова С. С., Муравьев А. Е., Гончаров О. Ю., Шилова О. А., Бубнов Ю. З. Особенности строения золь-гель силикатных пленок, легированных Mn и Pt // Физика и химия стекла. 2006. Т. 32, № 2. С. 316—325.
15. Канунникова О. М., Ломаева С. Ф., Муравьев А. Е., Михайлова С. С. Строение тонких силикатных пленок, полученных методами золь-гель и ионного распыления // Матер. Межд. науч. конф. "Тонкие пленки и наноструктуры" (Пленки-2005), Москва. Ч. 1. С. 189—193.
16. Нефедов В. И. Рентгеноэлектронная спектроскопия химических соединений. М.: Химия, 1984. 255 с.

О. Е. Глухова, д-р физ.-мат. наук, проф.,
 М. М. Слепченко, студент,
 e-mail: glukhovaoe@info.sgu.ru,
 Саратовский государственный университет
 им. Н. Г. Чернышевского

ЭЛЕКТРОННЫЕ И УПРУГИЕ СВОЙСТВА ГРАФАНА — НОВОГО МАТЕРИАЛА ЭЛЕКТРОНИКИ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И ЭМПИРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

С помощью молекулярно-механического метода установлено, что насыщенная водородом наночастица графена (графан) является эластичным материалом. При этом модуль упругого сжатия графана зависит от его размеров, что позволяет определить линейные параметры графана с максимальным для этого материала модулем Юнга. Полуэмпирическим методом РМЗ исследована электронная структура графеновых наночастиц. Установлено, что графеновые наночастицы можно характеризовать как диэлектрик, у которого энергетическая щель электронного спектра уменьшается с наращиванием длины, стремясь к определенному значению. При этом также убывает и ионизационный потенциал. Проведен сравнительный анализ рассчитанных величин с аналогичными параметрами однослойных нанотрубок.

Ключевые слова: графеновая наночастица, продольное сжатие, псевдомодуль Юнга, энергетическая щель спектра

Введение

Принципиально новым материалом, перспективным в наноэлектронике, является графан. Графан был синтезирован недавно путем гидрирования графена — монослоя графита. Кристаллическая структура графана — двумерная гексагональная. При этом атомы водорода присоединяются по обе стороны от плоскости атомов углерода (рис. 1). По размерам графана следует различать графеновые наночастицы и наноленты. У наночастиц размеры в разных на-

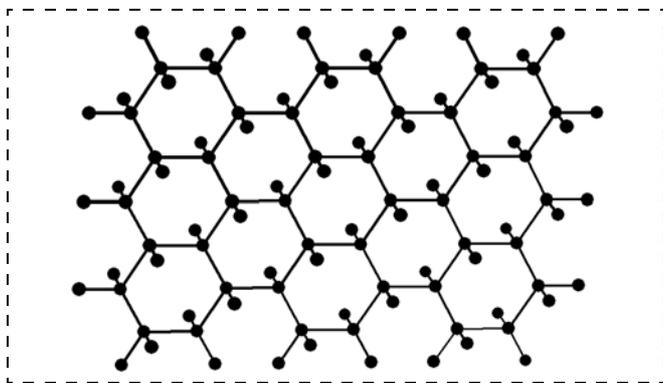


Рис. 1. Атомная структура графана

правлениях отличаются не более чем в 3 раза и не превышают 100 нм.

Открытие графана создало предпосылки для исследования его свойств и поиска возможного применения. В частности, этот новый материал может найти применение в водородной энергетике. Было установлено, что нагрев графана приводит к высвобождению атомарного водорода. Следовательно, графан можно рассматривать как один из эффективных способов хранения водорода [1]. Другим важным применением графана будет его использование в наноэлектронике в качестве основы для печатных схем с проводящими и непроводящими участками на одном листе графана [2].

Целью данной работы является теоретическое изучение с помощью квантово-химического и молекулярно-механического методов электронных и упругих свойств графеновых наночастиц.

Упругие свойства графеновых наночастиц

Упругие свойства графеновых наночастиц исследовались нами с помощью эмпирического метода AIREVO — адаптированный межмолекулярный потенциал Береннера [1]. Объектом исследования были графеновые наночастицы с диапазоном длин 1...5 нм и шириной 2,4 нм. В результате оптимизации эмпирическим методом AIREVO было установлено, что длина C—C связи составляет 0,155 нм, а длина C—H связи составляет 0,112 нм.

Предметом нашего изучения являлись процессы сжатия и растяжения. В ходе исследования графеновая наночастица подвергалась аксиальному (продольному) сжатию на 1, 2 и 3 %. При сжатии на 3 % наблюдалось изменение структуры с плоской на волнообразную (рис. 2). Изменение энергии деформации от осевого сжатия представлено на рис. 3. Из рисунка следует, что энергия деформации увеличивается по мере сжатия по квадратичному закону. Однако при сжатии структуры на 2,5 % происходит резкий спад энергии, что свидетельствует о переходе от упругой деформации к пластической.

Для исследуемой структуры графеновой наночастицы был рассчитан псевдомодуль Юнга. В качестве параметра упругости графана нами выбран именно псевдомодуль Юнга, который рассчитывается исходя не из площади, а длины края, на который действует деформирующая сила. Для нанопластины,

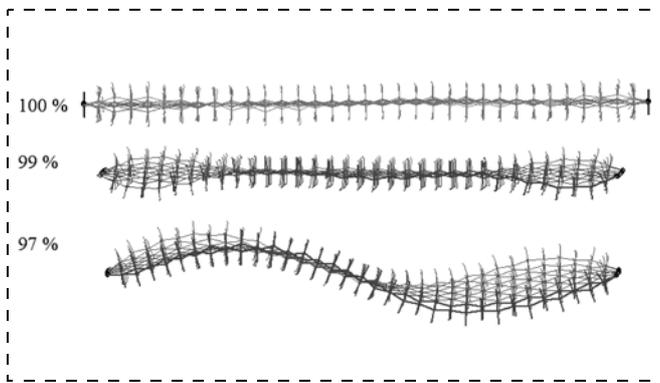


Рис. 2. Изменение структуры графеновой наночастицы при деформации

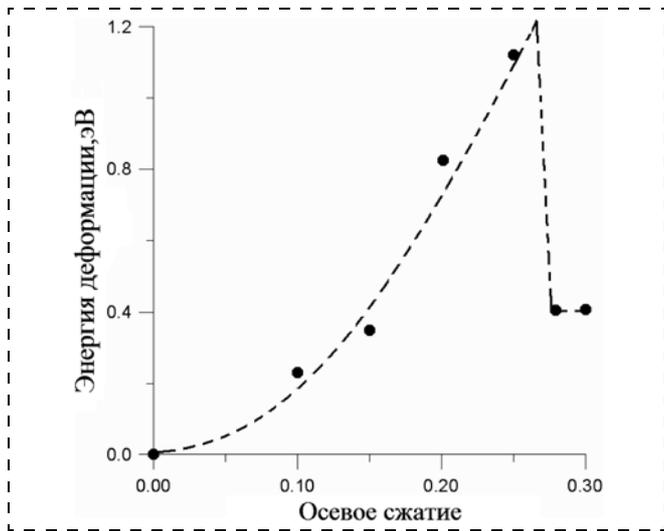


Рис. 3. Зависимость энергии деформации от осевого сжатия

которой является графан, такая оценка упругости физически более оправдана, чем классический модуль Юнга. Алгоритм вычисления псевдомодуля Юнга заключался в следующем.

1. На начальном этапе происходила оптимизация структуры путем минимизации полной энергии структуры по координатам.

2. Далее оптимизированная структура растягивалась на 1%. После этого концы структуры жестко фиксировались и структура снова оптимизировалась.

3. Псевдомодуль Юнга графеной наночастицы вычислялся по формуле

$$Y_p = \frac{F}{L_{кр}} \frac{L}{\Delta L}, \quad (1)$$

где L — длина графеной наночастицы; $L_{кр}$ — длина края графеной наночастицы; F — сила, необходимая для растяжения трубки, определяемая формулой

$$F = \frac{2\Delta E}{\Delta L}, \quad (2)$$

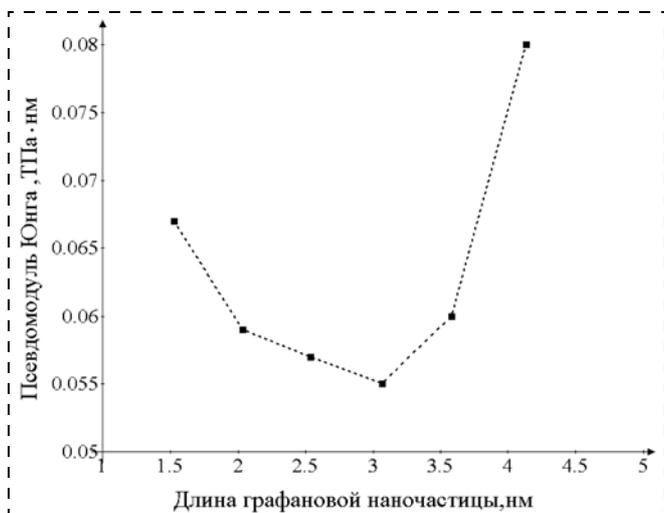


Рис. 4. Зависимость псевдомодуля Юнга от длины графеной наночастицы

где ΔE — энергия упругого растяжения; ΔL — удлинение структуры.

По представленному алгоритму псевдомодуль Юнга рассчитан для графеной наночастицы шириной 2,4 нм и длиной, наращиваемой от 1 до 5 нм. График изменения параметра упругости указан на рис. 4, из которого видно, что псевдомодуль Юнга ведет себя немонотонно. Начиная с 3 нм, он резко возрастает, что свидетельствует об увеличении упругости. Сравнивая упругие свойства графеной наночастиц с нанотрубками, можно заключить, что они заметно уступают нанотрубкам по упругости, а псевдомодуль Юнга графеной наночастицы меньше на ~72% (0,057...0,08 ТПа·нм — у наночастицы графана и 0,22...0,25 ТПа·нм [4] у нанотрубок типа zigzag и armchair). Им в большей степени присуща пластическая деформация.

Электронные свойства графеной наночастицы

Электронные свойства графеной наночастицы изучались с помощью полумпирического метода РМ3 [5]. В рамках этого метода атомная структура графеной наночастицы различных размеров сначала оптимизировалась (путем минимизации полной энергии по координатам атомов), а затем по электронному спектру рассчитывались потенциал ионизации и энергетическая щель спектра (энергетический интервал между последним заполненным уровнем и первым вакантным).

Как и при изучении упругих свойств, при исследовании электронной структуры нами был выполнен ряд расчетов потенциала ионизации и энергетической щели при последовательном наращивании атомного каркаса графеной частицы. На рис. 5 представлен график зависимости потенциала ионизации графеной наночастицы от ее длины. Наблюдается линейное убывание потенциала ионизации при увеличении размера структуры. Можно предположить, что при дальнейшем увеличении длины потенциал ионизации будет стремиться к работе выхода графана.

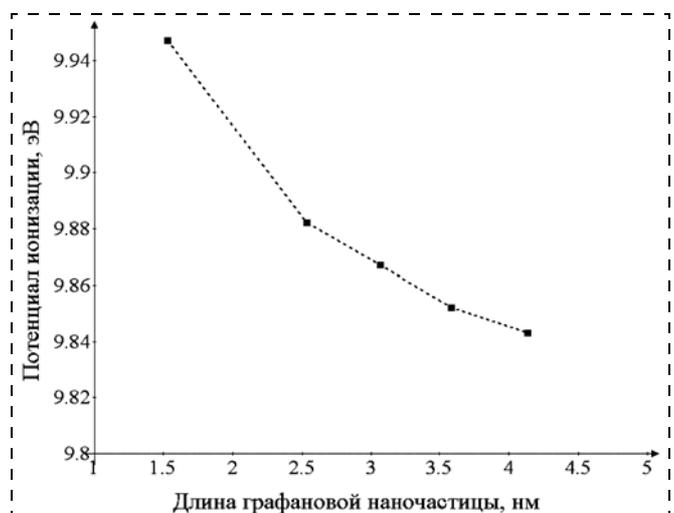


Рис. 5. Зависимость потенциала ионизации от длины графеной наночастицы

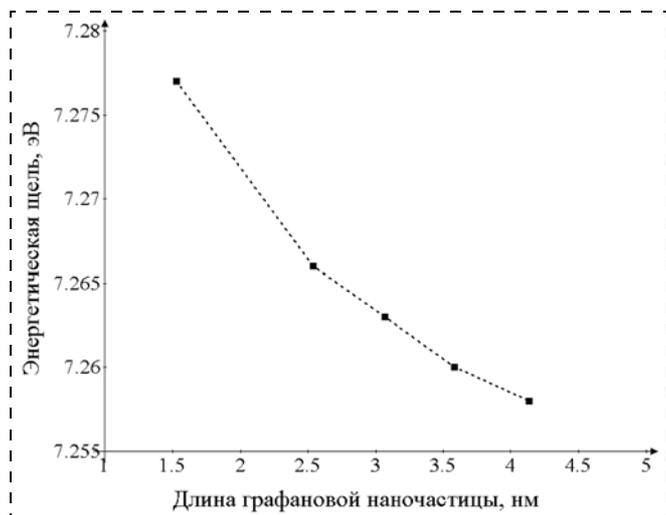


Рис. 6. Зависимость энергетической щели от длины графеновой наночастицы

С наращиванием атомного каркаса графеновой частицы энергетическая щель электронного спектра также уменьшается. На рис. 6 представлен график зависимости энергетической щели графеновой наночастицы от ее длины. Как видно из графика, энергетическая щель принимает значение порядка 7 эВ, на основании чего можно заключить, что графан является хорошим диэлектриком.

Выводы

Теоретическое изучение деформации графеновых наночастиц позволило установить, что графеновые

наночастицы не являются упругим материалом. Об этом свидетельствуют небольшие по сравнению с нанотрубками значения псевдомодуля Юнга и появление пластической деформации структуры уже при 3 % сжатия.

Также установлено, что графеновые наночастицы являются диэлектриком, отличающимся достаточно большой энергетической щелью электронного спектра. Следовательно, путем удаления атомов водорода с части поверхности графана можно получать контактные дорожки с электронной проводимостью необходимой конфигурации. Остальная часть поверхности при этом будет оставаться диэлектриком.

Список литературы

1. **Openov L. A., Podlivaev A. I.** Thermal desorption of hydrogen from graphane // *Technical Physics Letters*. 2010. V. 36. I. 1. P. 31–33.
2. **Elias D. C., Nair R. R., Mohiuddin T. M., Morozov S. V., Blak P., Halsall M. P., Ferrari A. C., Boukhvalov D. W., Katsnelson M. I., Geim A. K., Novoselov K. S.** Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane // *Science*. 2009. V. 323. P. 610–613.
3. **Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A.** A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // *Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 112, N 14. P. 6472–6486.
4. **Глухова О. Е., Терентьев О. А.** Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок типа zigzag и armchair от геометрических параметров // *ФТТ*. 2006. Т. 48. Вып. 7. С. 1329–1335.
5. **Gale J. D.** Semi-empirical methods as a tool in solid-state chemistry // *Faraday Discuss.* 1997. V. 106. P. 219–232.

УДК 537.226

А. В. Мальшев, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., Томский политехнический университет, e-mail: malyshev@tpu.ru

ОСОБЕННОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ЛИТИЙ-ТИТАНОВОЙ ФЕРРИТОВОЙ КЕРАМИКИ

Впервые для литий-титановой ферритовой керамики зарегистрированы петлеобразные зависимости значения электрической поляризации от напряженности электрического поля (диэлектрический гистерезис). Исследована температурная эволюция параметров петли гистерезиса для ферритовых образцов. Полученные результаты могут быть интерпретированы как с позиции релаксационной поляризации Максвелла—Вагнера, так и с точки зрения индуцирования сегнетоподобного состояния в электрической подсистеме феррита.

Ключевые слова: диэлектрическая релаксационная поляризация, диэлектрический гистерезис, сегнетоэлектричество, ферритовая керамика

Известно, что в современном материаловедении актуален поиск новых мультиферроиков, сочетающих в себе как ферромагнитные, так и сегнетоэлектрические свойства. Такой поиск представляет несомненный интерес как с практической, так и с фундаментальной точки зрения [1]. В предыдущих наших работах [2, 3] было показано, что керамика состава $\text{Li}_{0,649}\text{Fe}_{1,598}\text{Ti}_{0,5}\text{Zn}_{0,2}\text{Mn}_{0,051}\text{O}_4$ при определенных условиях проявляет закономерности диэлектрических характеристик, свойственные сегнетоэлектрическим материалам. А именно, были обнаружены аномально высокие значения действительной части комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon' \approx 10^3$ (на частоте 100 Гц при температуре феррита 400 К) с резким падением значений ϵ' при нагревании образцов до температуры порядка 550 К, а также зарегистрированы скачки в температурной зависимости ϵ' при измерении в постоянном электрическом поле смещения. Существуют работы [4–6], авторы которых указывают на возможность исследования сегнетоэлектрических свойств для магнитоупорядоченных материалов типа литиевых феррошпинелей. Поэтому и в нашем исследовании была выдвинута

гипотеза о формировании сегнетоэлектрического состояния в литий-титановом феррите.

Из физики сегнетоэлектричества известно [7, 8], что диэлектрический материал может быть отнесен к классу сегнетоэлектриков по ряду признаков, наиболее важным из которых является петля диэлектрического гистерезиса. Поэтому в настоящей работе были предприняты дальнейшие попытки исследования особенностей диэлектрической поляризации в литий-титановом феррите в целях получения данных о полевой зависимости значения электрической поляризации P от напряженности электрического поля E при различных температурах образцов, а также определения критериев применимости известных моделей релаксационной поляризации на основе анализа полученных результатов.

Технология спекания и приготовления образцов была такой же, как в работе [2]. Образцы готовились по обычной технологии для керамики из синтезированной в заводских условиях шихты марки ЗСЧ-18 путем термического спекания прессовок на воздухе в лабораторной печи при температуре спекания $T_{\text{сп}} = 1283$ К и времени спекания $t_{\text{сп}} = 2$ ч. Выбранные условия соответствуют технологии промышленного спекания ферритовой керамики этой марки.

Для удаления приповерхностных слоев феррита с неоднородным распределением по глубине электрических свойств проводилось двухстороннее шлифование с использованием порошка Al_2O_3 и эльборовой пасты. Образцы имели форму таблеток диаметром 13 мм и толщиной 0,24 мм, на поверхность которых термическим испарением в вакууме нанесли серебряные электроды диаметром 5 мм.

Вольт-амперные характеристики, исследованные на постоянном и переменном электрическом токе (диапазон частот $10^2 \dots 10^4$ Гц) в диапазоне температур образцов 300...620 К, имеют линейный характер, температурные зависимости удельной проводимости σ подчиняются закону Аррениуса и в диапазоне радиочастот σ не зависит от частоты внешнего электрического поля. Эти факты свидетельствуют об отсутствии влияния невыпрямляющего контакта электрод—феррит на результаты диэлектрических измерений.

Измерения температурной зависимости диэлектрической проницаемости литий-титанового феррита резонаторным методом (частота 1,4 ГГц, оборудование Научно-исследовательского физико-химического института им. Л. Я. Карпова) позволили определить, что в диапазоне температур 300...500 К значения ВЧ диэлектрической проницаемости (оптической) плавно растут от 23,5 до 24,5.

Методом рентгенофазового анализа (дифрактометр X'TRA) определены основные фазы и структурные параметры исследуемого феррита при комнатной температуре. Кристаллическая решетка имеет кубическую сингонию (параметр решетки $a = 0,8367$ нм) с пространственной группой симметрии типа $Fd\bar{3}m$. Метод дифференциальной сканирующей калометрии (термический анализатор STA 449C Jupiter Netzsch) не показал заметных экзо- или эндотермических реакций спеченной ферритовой керамики в диапазоне температур 300...525 К, кото-

рые бы указывали на фазовые структурные переходы в ферритовой керамике. При этом был зарегистрирован магнетокалорический эффект с магнитной температурой Кюри 550 К.

Экспериментальные исследования температурно-полевой зависимости поляризации ферритовой керамики проводили с использованием классической схемы Сойера—Тауэра [7].

Измерения полевых зависимостей поляризации проводились при варьировании частоты электрического поля от 20 Гц до 3 кГц и напряженности в диапазоне 0...8300 В/см, при температурах образцов феррита 25...335 °С. Индуцирование полевых зависимостей проводили с использованием электронного запоминающего осциллографа Tektronix TDS-2012B.

В ходе исследования удалось обнаружить петли диэлектрического гистерезиса классической формы в диапазоне температур 300...450 К и частот электрического поля $f = 300 \dots 800$ Гц (рис. 1). Форма полученных петель гистерезиса указывает на возможность индуцирования сегнетоэлектрического характера поляризации феррита при установившихся условиях. Следует отметить, что подобные петли гистерезиса наблюдаются лишь в образцах ферритовой керамики, подвергнутых охлаждению в постоянном электрическом поле напряженностью свыше 500 В/см от температуры 600 К до комнатной. При этом степень нагрева ограничена вероятностью теплового пробоя. Считалось, что при охлаждении ферритовых образцов в электрическом поле происходит процесс индуцирования поляризации при ориентировании электрических доменов в каждом кристаллите вдоль направления поля, а при его снятии сохраняется остаточная поляризация. Аналогичные процессы наблюдаются у диэлектриков с метастабильной электрической поляризацией [9]. Известно, что аналогичные по форме петли гистерезиса наблюдаются у ряда сегнетотвердых материалов, в которых внутренние поля являются серьезным препятствием для осуществления эффективной поляризации [10].

Вне указанного диапазона частот электрического поля и при температуре образцов свыше 450 К петлеобразные полевые зависимости превращались в "овало-

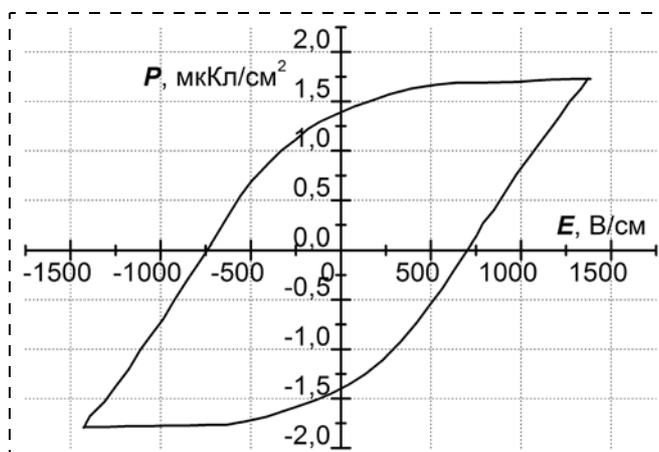


Рис. 1. Зависимость значения диэлектрической поляризации P от напряженности электрического поля E при комнатной температуре $T_{\text{комн}}$ образца феррита и частоте электрического поля $f = 300$ Гц

образные" или линейные зависимости. В этом случае, вероятно, диэлектрические потери на сквозную проводимость оказываются намного больше потерь на релаксационную поляризацию, вследствие чего и происходит маскирование петель.

Вместе с тем, аналогичная форма петель гистерезиса может наблюдаться и у нелинейных диэлектриков с потерями (релаксационная поляризация Максвелла—Вагнера) [11]. Узкий интервал частот $f = 300 \dots 800$ Гц, при которых удается наблюдать сегнетоподобные петли гистерезиса, свидетельствуют в пользу поляризации Максвелла—Вагнера. Однако из рассмотрения данного механизма поляризации следует, что процессы электропереноса и релаксационной поляризации тождественны. Следовательно, соответствующие значения энергий активации таких процессов будут близкими. Однако в нашей работе [3] было показано, что рассчитанное из температурных зависимостей проводимости на переменном токе значение энергии активации процесса электропереноса приблизительно в 2 раза больше значений энергии активации процесса поляризации, рассчитанных из соответствующих по измерительным параметрам температурных зависимостей ε' .

На рис. 2 представлены температурные зависимости параметров петли поляризации (значения напряженности коэрцитивного поля E_c и остаточной поляризации P_r), полученные на частоте электрического поля 300 Гц. Отметим, что их характер схож с аналогичными характеристиками, определенными для керамических сегнетоэлектриков, в которых плавные уменьшения значения P_r с ростом температуры ферритовых образцов обуславливаются неоднородностью и несовершенством структуры кристалла. Значение величины E_c падает с ростом температуры вследствие увеличения подвижности электрических доменов. Таким образом, характер полученных температурных зависимостей соответствует существующим понятиям о сегнетоэлектриках [8]. При этом экспериментальные данные о температурных зависимостях параметров петли гистерезиса гетерогенных материалов в случае трактовки результатов в рамках модели релаксационной поляризации Максвелла—Вагнера отсутствуют.

Итак, впервые для литий-титановой ферритовой керамики были обнаружены петли диэлектрического гистерезиса и получены температурные зависимости параметров петли поляризации. Полученные данные можно трактовать как с точки зрения механизма релаксационной поляризации Максвелла—Вагнера, так и механизма индуцирования при определенных условиях сегнетоэлектрического состояния в ферритовой керамике. Неоднозначность полученных данных не позволяет идентифицировать механизм релаксационной поляризации в ферритовой керамике и требует дальнейших исследований в области релаксационных явлений в твердых телах (пьезоэффекта, спонтанного электрокалорического

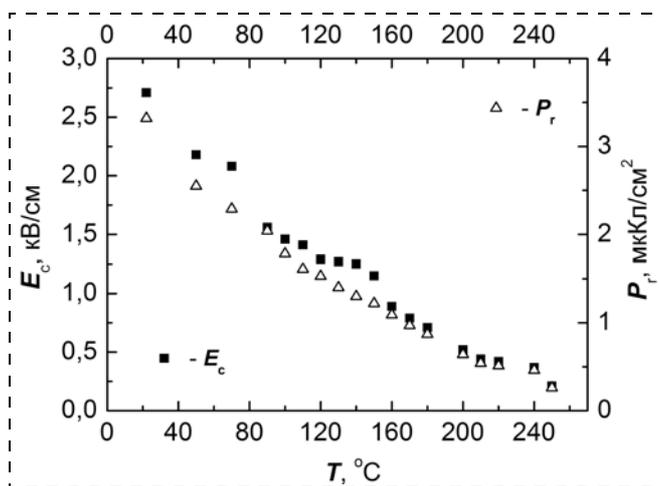


Рис. 2 Температурная зависимость значения напряженности коэрцитивного поля E_c и остаточной поляризации P_r при $f = 300$ Гц

го эффекта в поляризованной ферритовой керамике, температурных зависимостей значений параметра решетки) [8].

Полученные результаты возможно позволят расширить область технического применения литий-титанового феррита в современной электронике, а также расширить поле экспериментальных и теоретических исследований мультиферроиков.

Список литературы

1. Вевцев Ю. Н., Гагулин В. В., Любимов В. Н. Сегнетомагнетики. М.: Наука, 1982.
2. Malyshev A. V., Peshev V. V. Anomalies of dielectric properties in a polycrystalline lithium-titanium ferrite // Russian Physics Journal. 2007. V. 50, № 2. P. 161–164.
3. Мальшев А. В., Пешев В. В., Пригулов А. М. Температурные зависимости диэлектрических свойств литий-титановой ферритовой керамики // ФТТ. 2004. Т. 46, № 1. С. 185–188.
4. Белов К. П., Горяга А. М., Шереметьев В. Н. Об аномальном поведении диэлектрической проницаемости в системе $Fe_3 - xCr_xO_4$ // ФТТ. 1986. Т. 30, № 1. С. 314–318.
5. Данилькевич М. И., Аль-Шарр Д. Осциллографические исследования диэлектрического гистерезиса соединенный $Fe_3 - xCr_xO_4$ // Вести. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1992. № 3. С. 71–75.
6. Макоед И. И., Данилькевич М. И. Диэлектрические спектры и механизмы диэлектрической поляризации поликристаллического $BiFeO_3$ // Неорганические материалы. 1998. Т. 34, № 7. С. 883–886.
7. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир, 1981.
8. Желудев И. С. Физика кристаллических диэлектриков. М.: Наука, 1968.
9. Гриднев С. А. Диэлектрики с метастабильной электрической поляризацией // Соросовский образовательный журнал. 1997. № 5. С. 105–111.
10. Панич А. Е., Куприянов М. Ф. Физика и технология сегнетокерамики. Ростов-на-Дону: РГУ, 1989.
11. Иоффе А. Ф. Физика полупроводников. М.: АН СССР, 1957.

В. Н. Штенников, канд. техн. наук, зам. науч. упр.,
ФГУП УЭМЗ, г. Екатеринбург,
e-mail: shtennikov@uemz.ru

ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БЕССВИНЦОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В ВОЕННОЙ И КОСМИЧЕСКОЙ ТЕХНИКЕ

Применение бессвинцовых технологий монтажа электронных приборов породило ряд новых проблем. Отечественным предприятиям и организациям необходимо активизировать работы по ликвидации негативных последствий внедрения бессвинцовых технологий.

Ключевые слова: прибор, бессвинцовая технология, пайка, компонент, припой, печатная плата

Напомним, что с 01.06.2006 г. вступила в силу Директива RoHS Евросоюза по исключению применения ряда опасных веществ, к которым относится свинец, при производстве электронных изделий.

С одной стороны, упомянутая директива не распространяется на приборы оборонного и космического назначения [1]. А с другой стороны, не секрет, что практически каждое предприятие, выпускающее приборы оборонного и космического назначения, по ряду обстоятельств вынуждено производить и изделия гражданского назначения. В связи с этим встает вопрос об унификации технологий, так как в противном случае возможно банальное перепутывание исходных комплектующих, материалов или технологий с непредсказуемыми последствиями [2].

Необходимо также учитывать тот факт, что в настоящее время отсутствует отечественная элементная база, отвечающая всем требованиям, так называемой, технологии поверхностного монтажа. Это, в свою очередь, приводит к необходимости, не отказываясь от использования апробированных припоев типа ПОС61, ПОС63 и паяльных паст на их основе, применять электронные компоненты с бессвинцовым покрытием выводов.

Кроме того, многие российские предприятия планируют экспортировать свою продукцию, поэтому им необходимо соблюдать упомянутые директивы.

Из сроков реализации ФЦП "Развитие электронной компонентной базы и радиоэлектроники" на 2008—2015 годы, утвержденной постановлением правительства РФ 26.11.2007 г. № 807 следует, что в ближайшем будущем мы будем полностью зависеть от поставок импортных электронных компонентов, так как именно в упомянутые сроки планируется решить комплекс проблем, включая следующие вопросы:

- разработка импортозамещающих специальных конструкционных и технологических материалов, обеспечивающих процессы бессвинцовой и комбинированной пайки, изготовления коммутационных плат;

- освоение технологий нанесения новых финишных покрытий (никель—золото, иммерсионное олово), обеспечивающих повышение надежности бессвинцовой пайки компонентов, сборку аппаратуры из электронной компонентной базы в малогабаритных корпусах различного типа, в том числе с матричным расположением выводов;
- развитие новых методов присоединения, сварки, пайки, в том числе с применением бессвинцовых припоев.

Таким образом, налицо актуальность анализа ситуации, возникшей после вступления в силу упомянутой Директивы RoHS, поэтому необходимы:

- оценка возможности обеспечения достаточного качества приборов гражданского назначения, производимых по бессвинцовой технологии, при сохранении или снижении издержек производства;
- прогнозирование последствий использования смешанной технологии (применение импортных компонентов с бессвинцовым покрытием, с одной стороны, и одновременное использование апробированных припоев, содержащих свинец, — с другой) для производства приборов оборонного и космического назначения;
- оценка ближайших перспектив использования бессвинцовой и смешанной технологии в приборах оборонного и космического назначения в целях унификации технологий, повышения их надежности.

К сожалению, публикуемые материалы на эту тему мало обнадеживают.

Действительно, по данным источника [3], основная причина допущения использования свинца — отсутствие надежных данных, подтверждающих возможность изготовления качественной военной и космической техники при использовании только бессвинцовых материалов.

Основные последствия введения бессвинцовых припоев по данным источника [4] следующие.

Температура плавления и, следовательно, температура пайки для бессвинцовых припоев, как правило, выше, чем у припоя ПОС61 (ПОС63) примерно на 30...40 °С. Последнее обстоятельство предполагает большую термостойкость электронных компонентов, печатных плат, сохранение активности флюса при более высоких температурах, сохранение работоспособности оборудования. Бессвинцовые припои имеют худшие механические и химические характеристики по сравнению с содержащими свинец припоями. Использование бессвинцовых припоев предъявляет повышенные требования к влажностоустойчивости монтируемых материалов и компонентов и, следовательно, к герметичности упаковки до монтажа, предполагает введение операции сушки. Критерии оценки качества паяных соединений претерпевают изменения, что должно отразиться на обучении персонала. Внедрение бессвинцовых припоев предполагает повышение цен на комплектующие. Стоимость припоя растет уже потому, что свинец — один из наиболее дешевых металлов, используемых для низкотемпературной пайки. Повышение

температуры пайки предопределяет повышение энергопотребления.

Автор статьи [5] приводит следующие данные, связанные с применением бессвинцовых технологий.

Бессвинцовые соединения характеризуются более низкой ударопрочностью, оловянными дендритами, ускоренной кристаллизацией за счет повышения температуры пайки, повышенным образованием пустот в паяном соединении, эрозией меди. При тестовых испытаниях пайкой волной припоя при одинаковой температуре и времени воздействия в бессвинцовых соединениях пустот гораздо больше, чем в содержащих свинец припоях. Кроме того, бессвинцовые припои с высоким содержанием олова способны частично или полностью растворять медь с окантовки металлизированных отверстий при пайке волной припоя, которая происходит в течение 4...7 с.

Автор публикации [6] сообщает, что при использовании бессвинцовых технологий снижается ремонтпригодность изделий. Кроме этого, сообщается о росте ряда дефектов, связанных с использованием обсуждаемой технологии: повышенное гидротермическое расширение и, как следствие, образование трещин в корпусах компонентов во время пайки; повышенное коробление компонентов и печатной платы (ПП); расслоение компонентов и ПП при монтаже и ремонте; менее надежное соединение между компонентом и финишным покрытием ПП; непредсказуемое качество соединения между выводом и контактными площадками ПП; повышенная опасность образования интерметаллидов вследствие более высокой температуры оплавления, большего содержания олова в припое, отсутствия свинца, сдерживающего их рост; образование оловянных "усов"; меньшая долговечность паяных соединений.

Необходимо отметить негативные последствия от использования бессвинцовых припоев и в случае применения ручной контактной пайки: разбрызгивание флюса; недостаточное смачивание соединяемых поверхностей; повышенная эрозия паяльного стержня, обусловленная, как более высокой температурой пайки, так и большим содержанием олова в припое; повышенная опасность перегрева электронных компонентов; образование "пиков" или "флажков" припоя в паяном соединении [7–9].

Использование висмута в бессвинцовых припоях снижает температуру его плавления, а следовательно, и температуру пайки. Стоимость припоя не увеличивается. Однако сплавы на основе висмута чрезмерно хрупкие, имеют недостаточную прочность на отрыв вследствие низкой усталостной прочности, более низкую рабочую температуру эксплуатации прибора. То же самое можно сказать о припоях на основе индия, кроме того, индий значительно дороже висмута [10].

Хорошие свойства имеет эвтектический сплав Sn96Ag4 с температурой плавления 221 °С. При термоциклировании он показывает даже лучшую надежность по сравнению с припоем SnPb. Припой многие годы успешно использовали в изделиях специального назначения. Основной недостаток — большая температура пайки, достигающая 260 °С.

Эвтектический сплав Sn95,5Ag3,8Cu0,7 (SAC4) с температурой плавления 217 °С имеет лучшую смачиваемость и прочность паяных соединений, чем Sn96Ag4 [10].

Полное отсутствие свинца и увеличение олова примерно на 50 % существенно увеличивает поверхностное натяжение бессвинцового сплава. Если для Sn60Pb40 оно составляет 481 мН/м, то для SAC4 — 548 мН/м. Это исключает действие механизма самовыравнивания компонента относительно контактных площадок при оплавлении паяльной пасты, что, в свою очередь, увеличивает потребность в использовании более точного, а значит более дорогого оборудования для установки компонентов. Время смачивания сплава SnPbAg при температуре 245 °С составляет 8 мс, при 260 °С — 7 мс. Время смачивания припоя SAC4 при температуре 245 °С составляет 460 мс, при 260 °С — 10 мс. Поэтому необходимо использовать более мощные печи, более длительный нагрев, подвергать воздействию более высокой температурой печатные платы и компоненты. При этом необходимо помнить, что верхним пределом для большинства электронных компонентов является температура 250 °С [10].

Таким образом, для оплавления бессвинцовых паст требуются печи с существенно меньшей погрешностью поддержания температуры теплоносителя.

Для исключения чрезмерного окисления пайку бессвинцовыми припоями рекомендуется осуществлять в азотной среде.

Использование бессвинцовых материалов отражается и на технологии контроля качества паяных соединений. Исходные причины и последствия следующие [11]: повышение вязкости паяльных паст, приводящих к повышению вероятности засорения отверстий в трафарете; ухудшение условий для формирования столбиков паяльной пасты, приводящие к необходимости введения контроля не только заполнения отверстий трафарет, но и контроля всего столбика паяльной пасты; повышение трудоемкости устранения технологических дефектов; увеличение вероятности повреждения печатного узла при ремонте; разрушение переходных металлизированных отверстий под воздействием более высокой температуры пайки; образование микротрещин по границе раздела вывод—галтель припоя; для выводов типа "крыло чайки" характерны пустоты на границе вывод—галтель припоя.

Все перечисленные дефекты, как правило, не обнаруживаются при простом визуальном контроле, являются скрытыми, не допустимы для продукции ответственного назначения.

Таковы основные проблемы, связанные с технологией чисто бессвинцовой пайки.

Однако, как было сказано выше, на ряде предприятий уже возникает комплекс вопросов, связанных с применением, так называемой, смешанной технологии, при которой наряду с пастами на основе SnPb или SnPbAg припоев, применяют электронные компоненты и печатные платы, свободные от свинца.

В работе [12] сообщается, что пайка бессвинцовыми припоями компонентов с покрытием SnPb

приводит к образованию пустот в паяных соединениях. Кроме этого, образуются области, в лучшем случае содержащие эвтектический сплав SnAgPb с температурой плавления 179 °С вместо 221 °С, в худшем случае — эвтектический сплав SnPbBi с температурой плавления 96 °С. Области с пониженной температурой плавления проявляются менее, чем через 400 температурных циклов. Образцы припоев SnAg4Cu0,5, с примесью свинца 0,5...1 % выдерживают 3252 (Pb1 %) или 6320 (Pb0,5 %) температурных циклов вместо 13 400 для чистого сплава [12].

Пайка бессвинцовыми припоями покрытий, содержащих свинец, уменьшает надежность паяных соединений, что выявлено при пайке, например, BGA-корпусов. Пайка оловянно-свинцовых шариковых выводов пастой без свинца, например состава SnAgCu, приводит к снижению качества паяных соединений по сравнению с полностью свинцовой или бессвинцовой технологией. Кроме ранее перечисленных недостатков, автор статьи [2] указывает на реальную возможность образования сплава с температурой плавления 220 °С при использовании покрытия типа SnBi с температурой плавления 139 °С и одновременного применения припоя вида SnPb [12].

Вполне уместно в рамках данной публикации напомнить об эффекте роста так называемых оловянных "усов" при использовании бессвинцовых припоев, который известен уже около 50 лет. Так, по данным автора статьи [13], проблему стали усиленно изучать в течение последних 10 лет в связи с использованием именно бессвинцовых технологий.

Известно, что оловянные "усы" — это монокристаллы, имеющие длину до нескольких миллиметров с поперечником от 1 до 10 мкм. Инкубационный период и скорость роста зависят от вида нанесения олова, основного материала, условий хранения (влажность, наличие кислорода, температура), наличия легирующих примесей, толщины осаждения [14].

Испытания показывают, что при содержании свинца от 5 до 40 % "усы" не возникают, хотя механизмы предотвращения их образования при различных концентрациях свинца различны. Именно по этой причине в Директиву RoHS ввели поправку о допущении 15 % свинца в покрытия выводов компонентов с шагом менее 0,65 мм [15]. Справедливо ради следует отметить, что образование "усов" возможно при определенных условиях и на других материалах [16].

По некоторым данным препятствует образованию оловянных "усов" добавление в чистое олово золота и индия. Однако такие покрытия и припои дороги и имеют другие недостатки, влияющие на качество паяных соединений.

Большинство производителей проводят тестирование на "усы" по следующей методике [16]:

- детали с покрытием изгибают и подвергают старению (6 месяцев при комнатной температуре; 6 месяцев при температуре 50 °С; 6 месяцев при температуре 52 °С и относительной влажности 90 %);
- подвергают термоциклированию (1000 термических циклов от -40 до +80 °С);
- проводят поиск "усов" длиннее 50 мкм на сканирующем электронном микроскопе.

Выводы

1. В настоящее время использование бессвинцовых технологий монтажа электронных приборов приводит к необходимости решения ряда проблем, сопровождающихся повышением производственных расходов и снижением надежности изделий. В случае поставки электронных приборов в Европу применение бессвинцовых материалов — вынужденная мера.

2. Смешанная технология монтажа электронных приборов, применение которой обусловлено отсутствием отечественной элементной базы, как правило, приводит к снижению качества паяных соединений по сравнению с традиционной свинцовой или полностью бессвинцовой технологии.

3. Применение бессвинцовых и смешанных технологий для производства электронных приборов военного и космического назначения в ближайшей перспективе не оправдано по причине отсутствия механизма гарантированного исключения роста оловянных "усов" и низкой надежности паяных соединений, соответственно.

Список литературы

1. **Пилипко К.** Конференция "Подготовка к введению европейских директив RoHS и WEEE // Производство электроники. 2006. № 2. С. 9—10.
2. **Парфенов А.** Еще раз о европейской "бессвинцовщине" // Технологии в электронной промышленности. 2006. № 5. С. 60—61.
3. **Шапиро Л.** Внедрение европейской директивы RoHS // Производство электроники. 2006. № 2. С. 15—18.
4. **Шапиро Л.** Новые европейские директивы для изделий электроники // Производство электроники. 2006. № 2. С. 11—12.
5. **Ши К., Браун С.** Бессвинцовая сборка — первые результаты // Производство электроники. 2007. № 5. С. 31—36.
6. **Вотинцев А.** Современные материалы для бессвинцовой технологии // Производство электроники. 2006. № 2. 2006. С. 22—25.
7. **Компания Koki** помогает сократить расходы производителей бессвинцовых сборок. URL: http://elinform.ru/news_1077.htm.
8. **Штенников В. Н.** Тепловые характеристики современных паяльных станций // Компоненты и технологии. 2004. № 9. С. 180—182.
9. **Штенников В. Н.** Форсированный разогрев паяльного инструмента // Компоненты и технологии. 2004. № 9. С. 198—199.
10. **Левданский А.** Изменение технологического процесса при переходе на бессвинцовую пайку // Технологии в электронной промышленности. 2006. № 1. С. 76—78.
11. **Гафт С., Матов Е.** Выбор стратегии контроля в условиях перехода к бессвинцовым технологиям // Поверхностный монтаж. 2005. № 6—7. С. 4—8.
12. **Щеголева И.** Компания AIM решает проблемы перехода на бессвинцовую пайку // Производство электроники. 2006. № 2. С. 42—44.
13. **Ван Жанг, Нварер Ф.** Функция свинца для предотвращения образования "усов" в покрытиях из олова // Технологии в электронной промышленности. 2007. № 8. С. 36—41.
14. **Whitlaw K., Crosby J.** Proceedings of the 2002 Aexf Sur / Fin Conference. 2002.
15. **Ран А., Дием Р.** Бессвинцовое производство — компоненты и покрытия // Производство электроники. 2006. № 2. С. 34—37.
16. **Chudnovsky B. H.** Degradation of power contact in industrial atmosphere: silver corrosion and whiskers // Proc. 48th IEEE Holm Conference on Electrical Contacts, 2002.

УДК 532.5; 532.527

Э. Г. Косцов, д-р физ. мат. наук, зав. лаб.,
А. А. Соколов, канд. физ.-мат. наук, науч. сотр.,
Институт автоматизации и электротехники СО РАН,
г. Новосибирск,
e-mail: kostsov@iae.nsk.su

МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЕ ИНЖЕКТОРЫ ТОПЛИВА ДЛЯ ДИЗЕЛЬНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Проведено исследование возможностей построения эффективных электростатических актюаторов — приводов, создаваемых по технологии микроэлектроники, для форсунок топлива дизельного двигателя. Принцип работы актюаторов с высокой удельной энергоемкостью (до $0,3...3$ Дж/м²) основан на электромеханическом преобразовании энергии в нанометровых зазорах протяженностью $5...200$ нм, разделяющих поверхности подвижного электрода и слоя сегнетоэлектрика. Форсунки способны подавать топливо под большим давлением — свыше 100 МПа и за короткое время — сотни микросекунд и менее. Они по сравнению с современными пьезоэлектрическими форсунками обладают значительно меньшими размерами и массой, а также возможностью сокращения времени впрыска.

Ключевые слова: дизельный двигатель, инжектор топлива, МЭМС, электростатический микродвигатель, высокая энергоемкость, электромеханическое преобразование энергии

Введение

В последние годы имеет место значительный прогресс в создании дизельных двигателей, они стали более высокооборотными, с более высоким КПД, с облегченным запуском и меньшей шумностью.

Это стало возможным благодаря применению в форсунках, подающих топливо в цилиндры двигателя, пьезоэлектрических приводов, обеспечивающих такую подачу под большим давлением за короткое время (сотни микросекунд) и точно дозированными порциями. Используемые до недавнего времени приводы непосредственно от распределительного вала и электромагнитные приводы уже не удовлетворяют современным требованиям к быстродействию, точности и стабильности срабатывания [1—4].

Работа пьезофорсунок, которые в настоящее время являются лучшими из всех известных типов форсунок, основана на использовании в актюаторе обратного пьезоэлектрического эффекта, обеспечивающего быстрое смещение элемента конструкции устройства на расстояние $10\text{—}20$ мкм и передающего усилие до $1...10$ Н через механический привод на иглу (клапан) форсунки, открывающей и закрывающей распыли-

тель, регулируя таким образом процесс впрыска топлива (давление впрыска до 160 МПа и более).

Большинство пьезофорсунок в дизельных двигателях пока работают не непосредственно от атмосферного давления, а от аккумуляторной системы — "common rail" с топливными наносами высокого давления (ТНВД) до $10...20$ МПа. Это обеспечивает значительно более эффективное сгорание топлива, более высокую мощность при меньшем расходе топлива и более низком уровне шума и содержании вредных выбросов (выполнение стандарта Евро V—VI для всех типов таких двигателей).

Однако несмотря на достаточно массовое производство и использование пьезоэлектрических форсунок их параметры еще далеко не являются оптимальными. В частности, из-за того, что при подаче импульса напряжения относительное удлинение пьезоэлектрического стержня очень мало, оно находится в пределах $0,1\%$ от длины стержня (пьезокерамики), приходится для обеспечения достаточно большого шага смещения конца этого стержня и возможности использования импульсов с относительно низкой амплитудой напряжения (до 350 В) создавать многослойные структуры из нескольких сотен пьезоэлектрических пластин. Это значительно усложняет конструкцию инжектора, его технологичность и, кроме того, для увеличения хода клапана применяется, как правило, механический рычажной мультипликатор перемещения.

Пьезокерамические блоки изготавливаются из пластин пьезокерамики типа ЦТС, разделенных между собой металлическими прокладками — электродами, толщина пластин составляет $0,2...0,3$ мм, общая длина блока до 10 см, его толщина не менее 1 см (она определяет механическую прочность стержня, поскольку принцип передачи смещения — ударный). Поэтому трудно рассчитывать на то, что в ближайшее время можно будет установить большое число форсунок на отдельный цилиндр, такая возможность увеличила бы КПД двигателя и гибкость его управления.

Рассмотрение современных быстродействующих актюаторов, которые могли бы быть более технологичными, чем вышеуказанные пьезоэлектрические актюаторы, указывает на принципиальную возможность использования МЭМС-актюаторов. Однако в большинстве МЭМС применяются актюаторы на основе конденсаторов с воздушным зазором, которые имеют высокое быстродействие, но не обладают энергоемкостью, достаточной для впрыска в цилиндр заданных доз топлива, и не обеспечивают необходимый шаг смещения исполнительного элемента конструкции. Их энергоемкость не превышает $0,01$ Дж/м² и при шаге $3...5$ мкм.

В данной статье рассматривается возможность создания приводов для указанных форсунок на основе новых быстродействующих МЭМС-актюаторов, способных развивать на протяжении до 10 мкм и более силы, достаточные для функционирования таких приводов.

Принцип функционирования привода форсунки

В работах [5–9] описан новый принцип электро-механического преобразования энергии, позволяющий значительно увеличить удельную энергоемкость электростатических актюаторов $A_{уд}$ до значений $0,3...3 \text{ Дж/м}^2$ и более. Он основан на переносе процесса электро-механического преобразования энергии в нанометровый зазор протяженностью $5...200 \text{ нм}$. В этих работах представлена также и математическая модель указанного преобразования энергии и основных особенностей работы их функционирования, которая показала очень хорошее соответствие с экспериментальными исследованиями.

Возможность указанного преобразования достигается за счет использования сегнетоэлектрических (диэлектрических) пленок с высоким значением ϵ/d (свыше 10^9 м^{-1}), где ϵ — диэлектрическая проницаемость, d — толщина пленки. В этом случае в структуре электрод—сегнетоэлектрик—нанометровый зазор—подвижный электрод (металлический лепесток) практически все подаваемое напряжение падает на нанозоре, создавая плотность энергии электрического поля до 10^8 Дж/м^3 и давление до $300...1000 \text{ МПа}$, обеспечивая удельную емкость структуры $C_{уд}$ до 10^{-3} Ф/м^2 .

Механизм преобразования энергии в такой структуре иллюстрирует рис. 1. Упругая металлическая пленка (лепесток) 4 длиной L , закрепленная в области A на поверхности подвижной пластины (ПП), при подаче импульса напряжения между ней и электродом 5 под действием сил электростатики прижимается к поверхности сегнетоэлектрика 3 (оставляя нанометровый зазор толщиной $5...200 \text{ нм}$) и натягивается с силой $F_{имп}$, при этом возникают две силы F_1 и F_2 — тангенциальная и нормальная к поверхности. Первая из них и определяет движение ПП относительно неподвижной пластины (НП) по направляющим 2 за счет последующего электростатического наката все большей части поверхности свободной металлической пленки на поверхность сегнетоэлектрика, ее изгиба и механического натяжения. Длина наката $L(t)$ во время действия импульса напряжения t возрастает, соответственно увеличивается и шаг смещения ПП $h(t)$, при этом все большая часть площади лепестка прижимается к по-

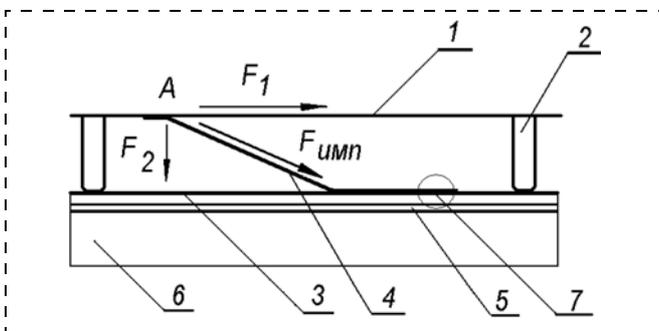


Рис. 1. Механизм электро-механического преобразования энергии в электростатическом актюаторе

1 — подвижная пластина; 2 — направляющие; 3 — слой сегнетоэлектрика; 4 — упругая металлическая пленка (лепесток); 5 — нижний электрод; 6 — неподвижная пластина; 7 — нанометровый зазор $20\text{--}200 \text{ нм}$

верхности сегнетоэлектрика. Расстояние между поверхностями ПП и НП составляет D .

На основе этого принципа электро-механического преобразования энергии создан ряд экспериментальных образцов высокоэнергоемких микродвигателей, микроактюаторов [5–9]. Они состояли из двух пластин с регулируемым значением D в пределах $20...100 \text{ мкм}$. На поверхность НП последовательно методом ВЧ напыления наносились электрод ИТО ($\text{In}_2\text{O}_3 + 6\% \text{ SnO}_2$) и сегнетоэлектрические пленки $\text{Ba}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ с $\epsilon = 3000...4000$ и толщиной $0,5...2 \text{ мкм}$. Микродвигатели имели следующие характеристики: удельная энергоемкость — $0,3...1 \text{ Дж/м}^2$, длительность такта — $20...500 \text{ мкс}$; частота тактов — $1...20 \text{ кГц}$; шаг перемещения ПП за такт — $0,01...30 \text{ мкм}$; амплитуда импульсов напряжения V — $20...60 \text{ В}$.

Основные преимущества указанных двигателей по сравнению с классическими пьезоэлектрическими двигателями, в которых используется обратный пьезоэлектрический эффект:

- больший единичный шаг — от 1 мкм на 1 мм длины керамики до $10...20 \text{ мкм}$ и более на 1 мм длины лепестка;
- МЭМС-конструкция и микроэлектронная технология изготовления;
- меньшие рабочие напряжения;
- большая удельная энергоемкость (до 100 Вт/кг) и сила тяги — $10^3...10^4 \text{ Н/кг}$.

Ранее нами [10] было проведено исследование возможностей построения на основе таких микроактюаторов, работающих в циклическом режиме, высокопроизводительных микронасосов и инжекторов микроструй жидкости, описаны конструкции и особенности функционирования таких устройств, их характерные параметры.

Постановка задачи

Используя полученные в работах [6–8] уравнения, описывающие движение ПП и соотношения между основными параметрами, характеризующими режимы функционирования микродвигателя, проведем элементарный анализ особенностей функционирования рассматриваемого актюатора. Он показывает, что максимально возможный за один такт шаг h_{\max} равен D , при этом максимально возможная длина наката равна $L - D$, а максимальная емкость $C = (L - D)bC_{уд}$ при энергоемкости $A = A_{уд}(L - D)b$, где b — ширина металлической пленки 4 (см. рис. 1). В этом случае, как нетрудно показать, максимальная сила тяги (сила натяжения металлической пленки) $F_{\max} = A_{уд}(L - D)b/d$. Полагая, что $A_{уд} = 1 \text{ Дж/м}^2$, $L - D \approx L = 10^{-3} \text{ м}$, $b = 10^{-1} \text{ м}$, $D = 10^{-5} \text{ м}$, имеем, что при выбранных параметрах $F_{\max} = 10 \text{ Н}$. Отметим, что величина $A_{уд} = C_y V^2 / 2 = 1 \text{ Дж/м}^2$ получается даже при $C_{уд} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ Ф/м}^2$ и при амплитуде прикладываемого напряжения 60 В .

Увеличение энергоемкости актюатора обеспечивается увеличением b за счет расположения на поверхности ПП необходимого числа "полосок", при этом размеры ПП в $1,5 \times 3 \text{ см}$ дают возможность

размещения такого числа "полосок", что эффективное значение b будет иметь значение 20...30 см и более. При этом можно отметить, что возможно и дальнейшее увеличение b как за счет увеличения площади ПП (подложки), так и за счет увеличения числа ПП — формирования пакета из ПП.

Приведенные оценки указывают на возможность достижения основных, характерных для пьезоэлектрических стержней в форсунках параметров: развиваемой за короткое время достаточной силы и протяженности ее действия.

Таким образом, принципиально возможна прямая замена в форсунке пьезоэлектрического актюатора на описанный электростатический актюатор. Один из схематичных примеров возможной конструкции форсунки представлен на рис. 2 (см. третью сторону обложки), где на рис. 2, a представлен фрагмент конструкции, характерной для современных пьезофорсунок.

Однако такой путь не является оптимальным, учитывая сложность конструкции и принцип работы пьезоэлектрического актюатора — ударный механизм конечной передачи энергии на сопло инжектора, определяющий необходимость использования многоэлементных механических конструкций и достаточно высоковольтных импульсов напряжения (350...350 В). Конструкция новой форсунки может быть значительно проще, а геометрические размеры меньше.

Кроме того, можно отметить, что в последнее время на основе пьезоэлектрических приводов разрабатывается инжектор прямого впрыска топлива (Direct Acting Piezo injector, фирма Delphi), когда игла инжектора приводится в действие не посредством указанной выше электрогидравлической схемы "common rail", а непосредственно пьезоэлектрическим приводом, что обеспечивает значительно более быстрое и точное распыление топлива в камеру и быстрое его сгорание.

Особенности функционирования электростатического привода форсунки

Для анализа возможностей описанных актюаторов в указанном классе задач рассмотрим основные закономерности их функционирования.

Типичная конструкция пьезоэлектрической форсунки содержит, наряду с активным пьезоэлектрическим элементом, набор (свыше 30) механических элементов (пружин, клапанов, устройств для отвода и перелива топлива, его подвода под высоким давлением, управляющих движением поршня, клапана, распылителя). Поэтому мы не будем рассматривать особенности конструкции форсунки, построенной на основе нового актюатора, но проведем только исследование возможности достижения таких основных параметров, определяющих работу современных дизельных форсунок, как возможность развития достаточных сил (1...10 Н) за время 20...300 мкс с протяженностью действия этих сил 5...50 мкм.

Анализ указанных возможностей описанных актюаторов проведем на примере их использования в диафрагменных инжекторах топлива. Схематично конструкция такого инжектора представляет собой

(рис. 3, см. третью сторону обложки) резервуар 1 с топливом, разделенный от исполнительного устройства мембраной 3 с радиусом R , которая упруго изгибается под действием сил, развиваемых актюатором, при смещении ПП на величину h (прогиб центра мембраны) посредством передаточного механизма 4 — толкателя. Струя выталкивается из камеры мембраной 3 через сопло 2 радиуса r_0 , при этом возможно использование нескольких сопел с суммарным радиусом r_0 . Скорость истечения струи u и давление в резервуаре зависят квадратично от отношения радиусов R/r_0 , а длина вытекающей струи (объем инжектируемого топлива) оценивается как $s = \bar{u} t_p$, где \bar{u}_0 — средняя скорость струи за время t_p (объем топлива $v = \pi r_0^2$). Давление на выходе сопла возрастает с увеличением соотношения R/r_0 , более высокое значение R/r_0 дает также возможность эффективнее нагружать актюатор, максимально используя силу его тяги на протяжении действия импульса напряжения.

Выберем одну из совокупностей основных параметров, характеризующих функционирование такого устройства: $A_{уд} = 1 \text{ Дж/м}^2$, $L = 10^{-3} \text{ м}$, $b = 0,25 \text{ м}$, $D = 10^{-4} \text{ м}$, $R = 1,5 \cdot 10^{-2} \text{ м}$, $r_0 = 200 \text{ мкм}$, коэффициент жесткости пружины $K = 150 \text{ 000 Н/м}$. Будем полагать, что масса подвижного элемента инжектора равна 3 г, что близко к массе иглы в пьезоэлектрической форсунке.

Для этого случая типичные изменения во времени силы актюатора F_x , давления на выходе сопла, длины смещения центра мембраны, представлены на рис. 4. Как видно, эти параметры близки к тем, которые необходимы для работы дизельных двигателей. Кроме того, можно отметить, что при этом имеет место значительный резерв увеличения F_{max} , по крайней мере, до 3...5 раз как за счет увеличения b (в первую очередь), так и L , а также уменьшения D .

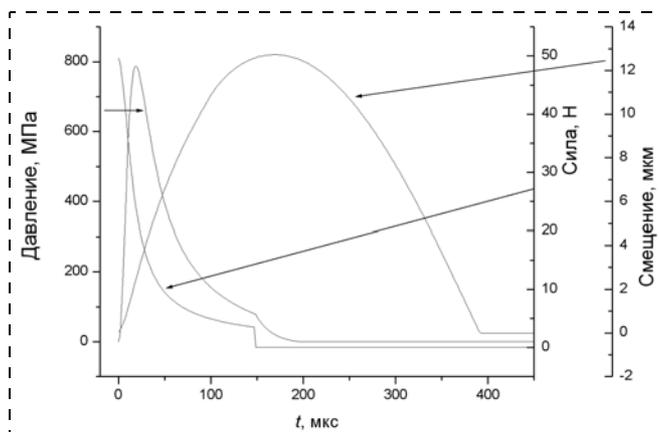


Рис. 4. Поведение во времени основных характеристик инжектора топлива при следующих параметрах:

$L = 1 \text{ мм}$; $b = 0,25 \text{ м}$; $D = 100 \text{ мкм}$; $A_{уд} = 1 \text{ Дж/м}^2$; $K = 150 \text{ 000 Н/м}$; $t_p = 2 \cdot 10^{-4} \text{ с}$; $R = 15 \text{ мм}$; масса подвижной пластины $m = 3 \cdot 10^{-3} \text{ кг}$; $r_0 = 200 \text{ мкм}$

В этом случае сила, развиваемая в начальный момент времени, равна 49 Н, объем инжектируемой капли за время действия импульса напряжения 200 мкс равна 2,7 мл, давление на выходе сопла 750 МПа, смещение центра мембраны 15 мкм.

Важно отметить, что максимальная сила тяги развивается в начальные моменты действия импульса напряжения, это свидетельствует о высокой приемистости актюатора и потенциальной способности двигателя быстро развивать большую мощность при резком нажатии на педаль газа. Эта особенность дает возможность также осуществлять за один цикл подачи топлива многократный его впрыск, когда каждый впрыск может регулироваться (независимо от режимов работы двигателя) по объему впрыскиваемого топлива и продолжительности впрыска. Для обеспечения такого режима работы инжектора необходимо выбрать определенное соотношение таких параметров, как $A_{уд}$, m и коэффициента жесткости пружины K . При этом можно отметить, что скорость впрыска топлива снижается во времени (рис. 5).

Поэтому более выгодно осуществлять впрыск как можно более короткими импульсами. В частности, если при вышеуказанных параметрах и длительности импульса 400 мкс, в цилиндр поступает 2,9 мл топлива, то за то же время, но при воздействии восьми импульсов длительностью 50 мкс, в цилиндр уже поступает 13,4 мл топлива. Таким образом, можно утверждать, что рассматриваемый привод должен функционировать при как можно более коротких временах подачи топлива, а при создании опытных образцов новых форсунок нужно сразу учитывать и использовать такую возможность.

Отметим несколько моментов, имеющих практическое значение при построении новой форсунки.

- Упругий элемент с заданным значением K может быть выполнен как в виде стальной пружины, расположенной в корпусе форсунки, так и виде кремниевой консоли, расположенной в одном

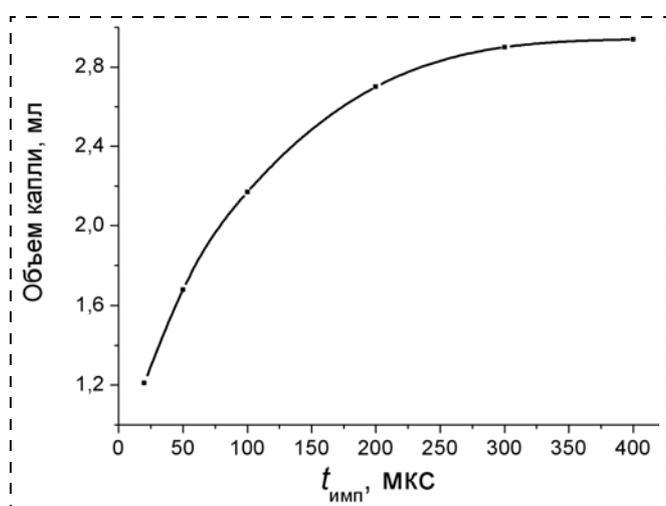


Рис. 5. Зависимость объема капли топлива от длительности импульса напряжения

корпусе с актюатором и созданной в одном технологическом цикле.

- Толщина металлической пленки, общая ее ширина и необходимая сила тяги актюатора должны быть согласованы. В частности, полагая, что предел механической прочности на разрыв бронзы составляет примерно 60 Н, выбирая $b = 0,3$ м и толщину свободной и металлической пленки 3 мкм, находим, что максимальная сила, которая может быть приложена к подвижному элементу конструкции, составляет 5,4 Н.
- Процесс синтеза указанных высококачественных сегнетоэлектрических пленок требует использования достаточно развитой технологии, однако ранее было показано, что описанный принцип электромеханического преобразования энергии может быть осуществлен и при использовании тонких пластин антисегнетоэлектрика [11], в этом случае для достижения заданной энергоемкости необходимо в 2...3 раза увеличивать амплитуду импульсов напряжения (до 120...150 В), что и в этом случае ниже напряжений в современных пьезоэлектрических форсунках. Это открывает возможность изготовления рассматриваемых инжекторов с использованием гибридной интегральной технологии.
- Для обеспечения более быстрого возвращения свободной металлической пленки в исходное состояние каждый из лепестков должен быть выполнен в виде узких полосок (решетки), см. например рис. 6 (см. третью сторону обложки), на котором представлен пример выполнения решетки из пленок бронзы (длина каждого лепестка 1 мм, ширина 25 мм, толщина 2...3 мкм). Расстояние между полосками для обеспечения максимального использования поверхности ПП должно быть минимальным.

Заключение

Проведенный анализ показал, что новый принцип электромеханического преобразования энергии, основанный на процессе электромеханического преобразования энергии в нанометровых зазорах протяженностью 5...200 нм, разделяющих поверхности подвижного электрода и слоя сегнетоэлектрика, и обеспечивающий высокую удельную энергоемкость (до 0,3...3 Дж/м²), позволяет создать эффективные приводы для форсунок топлива дизельного двигателя. Такие форсунки будут способны подавать топливо под большим давлением и за короткое время (сотни микросекунд и менее).

По сравнению с современными пьезоэлектрическими форсунками новый инжектор может быть выполнен по интегральной технологии, иметь более простую и технологичную конструкцию и обладать значительно меньшими размерами и массой, а также возможностью сокращения времени впрыска.

Принципиально возможна и прямая замена пьезоэлектрического привода в современных пьезоэлектрических форсунках на рассматриваемый электростатический привод.

Список литературы

1. **Дизельные** аккумуляторные топливные системы COMMON RAIL (Bosch). М.: Легион—Автодата, 2006. 48 с.
2. **Топливные** системы дизелей с насос-форсунками и индивидуальными ТНВД. (Bosch). М.: Легион—Автодата, 2006. 74 с.
3. **Walker J.** Injection hurtles forward: Bosch's gas/diesel injection projects // Automotive Industries. November, 2003.
4. **Kim H., Mand K.-S, Lai M.-C.** Pressure modulation on micro-machined port fuel injector performance // International Journal of Automotive Technology. 2004. Vol. 5, N 1. P. 9—16.
5. **Дятлов В. Л., Косцов Э. Г.,** Высокоэнергетические микродвигатели на основе тонких сегнетоэлектрических пленок // Микросистемная техника. 1999. № 7. С. 22—32.
6. **Dyatlov V. L., Kostsov E. G.** Planar electrostatic micromotors on the basis of the ferroelectric films // Integrated Ferroelectrics. 1999. N 23. P. 149—160.
7. **Dyatlov V. L., Kostsov E. G. Baginsky I. L.** High-effective electromechanical energy conversion on the basis of thin ferroelectric films // Ferroelectrics. 2000. Vol. 241. P. 99—106.
8. **Baginsky I. L., Kostsov E. G.** High-energy capacitive electrostatic micromotors // Micromech. Microeng. 2003. N 13. P. 190—200.
9. **Kostsov E. G.** Ferroelectric-based electrostatic micromotors with nanometer gaps / IEEE Transaction on Ultrasonics, Ferroelectric and Frequency Control, Special Issue on Nanoscale Ferroelectric. 2006. Vol. 53. N 12. P. 2294—2299.
10. **Ахметов Д. Г., Косцов Э. Г., Соколов А. А.** Микроэлектромеханические электростатические высокопроизводительные инжекторы микроструй жидкости // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 1. С. 53—60.
11. **Baginsky I. L., Kostsov E. G.** Electrostatic micromotor based on ferroelectric cerarnic // Micromech. Microeng. 2004. N 14. P. 1569—1575.

УДК 533.608:681.121

А. А. Бобров, инженер,
А. Ф. Попков, д-р физ.-мат. наук, зам. руковод. ЦКП,
Н. А. Дюжев, канд. физ.-мат. наук, зам. дир-ра ЦКП,
Н. Е. Кулагин, д-р физ.-мат. наук, вед. науч. сотр.,
М. А. Махиборода, зам. нач. отд.,
А. М. Медников, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр.,
Московский институт электронной техники,
e-mail: afpopkov@inbox.ru

РАСЧЕТ ТЕРМОРЕЗИСТИВНОГО АНЕМОМЕТРИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ НА МЕМБРАНЕ

Дан теоретический анализ температурного режима работы в стационарном режиме терморезистивного анемометра на основе кремниевой мембраны в качестве сенсора, регистрирующего значение скорости и расхода газового потока. Описана конструкция разрабатываемого анемометрического преобразователя, его термодинамическая модель и обсуждается связь его конструктивных параметров с выходными характеристиками сенсора. Приведены результаты экспериментальной проверки обсуждаемой модели.

Ключевые слова: нано- и микросистемная техника, преобразователь расхода газа, термокомпенсированная мембрана, терморезисторы, динамический диапазон измерений, скорость потока

Введение

Развитие современных МЭМС-технологий позволило не только усовершенствовать конструктивное исполнение классических расходомеров, но и разработать новые принципы измерения расхода [1, 2]. Построение относительно простого, универсального и дешевого электронного преобразователя расхода, а также многопараметрического преобразователя на его основе и принципе действия, отличающегося универсальностью типоразмеров и функционирующего с приемлемой точностью, представляет собой нетривиальную задачу. Данный факт подтверждает

ся отсутствием на рынке удовлетворительных решений при большом многообразии типов расходомеров, реализованных на различных физических принципах действия.

Разработка и постановка базовой технологии изготовления электронных сенсоров физических величин на основе нано- и микросистем открывает перспективы создания широкого спектра изделий, применяемых в области теплоэнергетики в целях повышения энергоэффективности. В части расходомеров перспективным направлением создания сенсоров высокой разрешающей способности, обладающих возможностью регистрации даже небольшого увеличения расхода газового потока, является создание датчика на основе принципа регистрации изменения сопротивлений платиновых резисторов, которые находятся в потоке контролируемого газа. Датчик выполнен с привлечением технологии многослойных термокомпенсированных диэлектрических мембран [3]. Для измерения скорости протекания среды в калориметрических и термоанемометрических преобразователях используется эффект изменения сопротивления термочувствительных резисторов при обдуве. При этом фиксируется изменение сопротивлений (или их разности) измерительных резисторов относительно сопротивления необдуваемого резистора либо сопротивления самого нагревателя [1, 4]. Большие возможности вариации режимов параметрического преобразования обеспечивают трехрезистивные первичные термические преобразователи (ПТП) расхода газа мембранного типа [5]. В первичном преобразователе такого датчика в качестве чувствительного элемента применяют терморезисторы, подвергаемые постоянному нагреву посредством элемента-нагревателя, расположенного между резисторами, как показано на рис. 1.

Терморезисторы и нагреватель конструктивно объединены в составе кремниевого кристалла. При обтекании кристалла потоком газа происходит изменение температурного распределения на его поверхности, что приводит к изменению электрических параметров чувствительных терморезисторов. Разност-

Расчетная модель ПТП мембранного типа в продувочном канале

Будем рассматривать случай, когда в одном из направлений (вдоль оси z) распределение температуры по среде и мембране можно считать однородным (узкая прямоугольная мембрана), и поэтому $T = T(x, y, t)$. Модельная геометрия задачи для такой мембраны со сдвоенным нагревателем приведена на рис. 1, а. Аналогично можно рассмотреть также и другие варианты резистивного нагрева — одиночный и многоплечевой (меандровый) нагреватели.

Уравнение теплопроводности для среды протекания со скоростью $V(x, y)$ имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} + V(y) \frac{\partial T}{\partial x} = \chi_1 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

где $\chi_1 = \frac{\kappa_1}{\rho_1 c_1}$ — коэффициент температуропроводности среды протекания; κ_1 — коэффициент теплопроводности среды протекания; ρ_1 — удельное сопротивление среды протекания; c_1 — удельная теплоемкость среды протекания. Изменение скорости потока будем предполагать как при ламинарном течении в трубе конечного радиуса $R (R = Y_0/2)$:

$$V(y) = \frac{V}{R} \left(2 - \frac{y}{R} \right) V_0, \quad y < 2R. \quad (2)$$

Будем предполагать, что на границе мембраны температура стабилизируется теплоотводом в объем кристалла, а объем среды протекания выбран достаточно далеко от области нагрева. Кроме того, ввиду малой толщины мембраны по сравнению с диффузионной длиной будем предполагать, что для определения стационарных характеристик нагрева распределение температуры по толщине мембраны можно считать однородным и рассматривать мембрану как одномерную прослойку. Поэтому примем следующие начальные и граничные условия:

$$T(t = 0, x, y) = T_0, \quad T(y = Y_0) = T_0, \quad T(x = \pm X_0) = T_0, \\ T(y = 0) = \tilde{T}(x, t), \quad (3)$$

где $\tilde{T}(x, t)$ задается решением одномерного уравнения распределения температуры вдоль тонкой мембраны

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \chi_0 \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x^2} + \frac{\chi_0}{\kappa_0} \frac{\rho_e I(t, x)^2}{w^2 h_Q h} + \chi_0 \frac{\kappa_1}{h \kappa_0} \left. \frac{\partial T(x, y)}{\partial y} \right|_{y=0}, \quad (4)$$

где $I(t, x) = j(t, x) w h_Q$ — полный ток в тепловом резисторе (резистор расположен в центре мембраны ($x = 0$) и имеет сечение $w \times h_Q$); χ_0 — коэффициент температуропроводности мембраны; κ_0 — коэффициент теплопроводности мембраны; ρ_e — удельное сопротивление резистора; h — толщина мембраны; $j(t, x)$ — плотность тока в резисторе.

Для решения задачи используется сеточное разбиение области счета и конечно-разностная схема

двойной прогонки Рэдфорда—Пикфорда [5]. Ниже описаны результаты пространственных и временных расчетов изменения температуры вдоль мембраны для воздушной среды.

Рассмотрим стационарный режим нагревателя, когда ток $I(t)$ на нем предполагается постоянным во всем интервале времени счета $t > 0$. Вообще говоря, ток нагревателя зависит от номинала резистора и напряжения, значение которого определяется выбранным режимом питания преобразователя. Ниже обсуждаются результаты расчетов теплораспределения вдоль мембраны и разностной температуры на измерительных резисторах при заданной силе тока в нагревателе $I = 50$ мА, которые соответствуют условиям проведенных экспериментальных измерений [6] на преобразователе с номиналами сопротивлений и остальными параметрами, соответствующими разработанному нами преобразователю SRV-3, показанному на рис. 1, б. Его параметры таковы. Нагревательный резистор имел сдвоенную (U-образный нагреватель) конструкцию, так как такая конструкция создает более высокую, чем ленточный нагреватель разностную температуру. Материал резисторов — платина, значение удельного сопротивления которой равно $1,1 \cdot 10^{-7}$ Ом·м. Геометрические размеры сдвоенного терморезистора: ширина ленты $w = 50$ мкм, толщина $h_Q = 0,3$ мкм, расстояние между лентами $u = 50$ мкм (см. рис. 1, а). Параметры мембраны: ширина $L = 800$ мкм, толщина $h = 1,36$ мкм. Окно счета: $X_0 \times Y_0 = (0,8 \times 0,4)$ мм². Разбиение сетки: $N_x \times N_y = 300 \times 176$.

При расчетах варьировали следующие конструктивные параметры преобразователя: толщину и длину мембраны; подъем преобразователя (положение измерителя по оси Y в среде протекания); коэффициент теплопроводности мембраны; положение измерителя по длине мембраны. Радиус трубы задавали равным 2 мм (как в эксперименте работы [6]). Граничную температуру (температуру окружения) при расчетах не варьировали и полагали тождественно равной нулю (отсчетная температура).

На рис. 2 показано рассчитанное установившееся распределение температуры поперек мембраны $T(x)$ при заданном значении тока в сдвоенном нагревателе. Это распределение имеет колоколообразный вид,

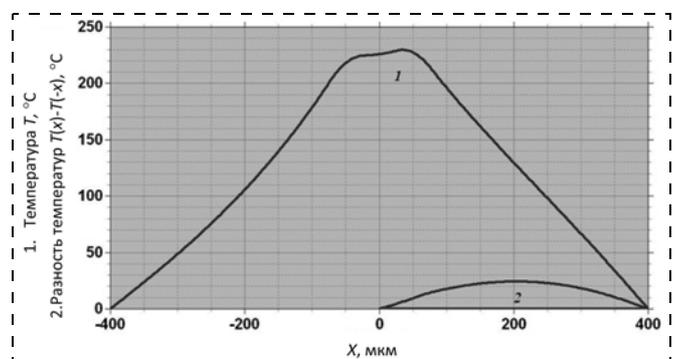


Рис. 2. Расчетная стационарная зависимость распределения температуры (кривая 1) и разностной температуры $\Delta T(x) = T(x) - T(-x)$ (кривая 2) по мембране для разработанного преобразователя типа SRV-3 со сдвоенным нагревателем при силе тока $I = 50$ мА и скорости обдува $V = 10$ м/с

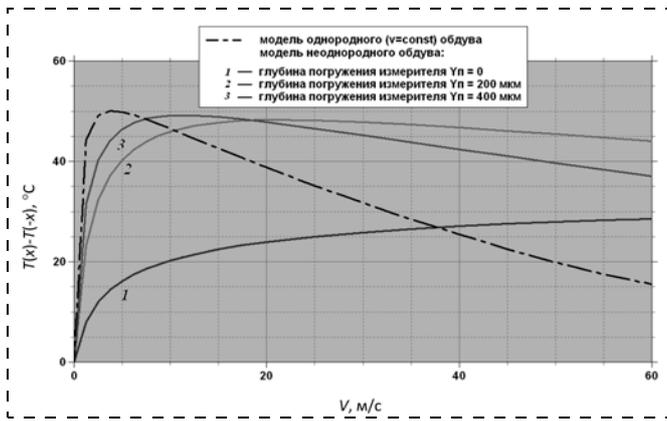


Рис. 3. Установившаяся разность температур резисторов R_2 и R_4 ПТП SRV-3 в зависимости от средней скорости протекания воздушного потока в модели неоднородного и однородного обдува для разных значений глубины погружения преобразователя

максимум которого уменьшается и слегка смещается с ростом скорости обдува. При ненулевой скорости потока возникает асимметрия спада температуры на боковых сторонах этого распределения, которая характеризуется разностной величиной $\Delta T(x) = T(x) - T(-x)$ в точках $\pm x$, симметрично смещенных от центра мембраны. Эта зависимость (рис. 2) достигает максимума на середине подветренной стороны мембраны и смещается в сторону нагревателя при росте скорости протекания воздушного потока. Зависимость разностной температуры $\Delta T(x_m)$ при фиксированном положении измерительного резистора $x_m = 200$ мкм от скорости обдува V для разных значений глубины погружения (высоты подъема) преобразователя $Y_{\text{п}}$ показана на рис. 3. Эта зависимость $\Delta T_{\text{max}}(V)$ имеет участки роста и спада.

Максимум зависимости $\Delta T_{\text{max}}(V)$ определяет характерную верхнюю граничную скорость V_{max} динамического диапазона измерений преобразователя, если для измерений скорости используется возрастающий участок. Нижняя граница динамического диапазона измерений V_{min} зависит от уровня входного шума усилителя и мостовой схемы, определяющих минимально измеримую разность сопротивлений термочувствительных резисторов ΔR_{min} , которая пропорциональна разностной температуре $\Delta T_{\text{min}}(x_m)$. В линейном пределе минимальная скорость измерения обратно пропорциональна значению начальной крутизны возрастающего участка скоростной зависимости разностного сигнала $\Delta T(V)$, т. е. $V_{\text{min}} = \Delta T_{\text{min}}(x_m) / (d\Delta T_{\text{min}}/dV)$.

Проведем оценку минимально измеримой скорости, определяющей нижнюю границу динамического диапазона преобразователя, на примере расчетной кривой на рис. 3. Для оценок примем эквивалентную схему измерений в виде мостовой схемы Ветстоуна, с номиналами измерительных резисторов $R_1 = R - \frac{\Delta R}{2}$, $R_4 = R + \frac{\Delta R}{2}$, где $\Delta R = R\alpha\Delta T$ — изменение сопротивления под действием разности температур ΔT ; α — коэффициент температурного изменения (для платины $\alpha = 3,8 \cdot 10^{-3} 1/^\circ\text{C}$), $R_2 = R_3 = R_0$ — компенсирующие резисторы первичного преобразователя, и приведенного ко входу первичного пре-

силителя источника шума $\langle e_A^2 \rangle$. Тогда из условия равенства разностного сигнала эквивалентному шуму в режиме заданного напряжения получим

$$\Delta T_{\text{min}} = \frac{e_A}{\alpha V_I} \frac{(R + R_0)^2}{RR_0}. \quad (5)$$

Для оценок примем следующие параметры:

$$e_N = e_R + e_A, \text{ где } \frac{e_R}{\sqrt{\Delta f}} = 4kTR = 2 \text{ нВ}/(\text{Гц})^{1/2} \text{ — шу-}$$

мовое напряжение резисторов; $\frac{e_A}{\sqrt{\Delta f}} = 20 \text{ нВ}/(\text{Гц})^{1/2}$ —

эквивалентный входной шум усилителя (например, для операционного усилителя AD823), тогда для полосы предусилителя $\Delta f = 1$ МГц имеем $e_N \sim e_A = 2 \cdot 10^{-5}$ В. Поэтому, если принять как в условиях эксперимента [6] $R = 1,3$ кОм; $R_0 = 4,7$ кОм, $V_I = 2,6$ В, то получим $\Delta T_{\text{min}} = 1,2 \cdot 10^{-2} ^\circ\text{C}$. Далее, предполагая изменение температуры пропорциональным изменению скорости обдува $\Delta T = \beta V$, как на начальном участке ($\beta = 18,6 ^\circ\text{C} \cdot \text{с}$), для расчетной кривой 2 на рис. 3 найдем

$$V_{\text{min}} = \frac{\Delta T_{\text{min}}}{\beta} = 0,00065 \text{ м/с}.$$

При вариации геометрических размеров и температуропроводности мембраны меняются наклон разностной зависимости $\Delta T(V)$, а следовательно, и минимальная скорость измерения V_{min} , а также скорость достижения максимума зависимости $\Delta T(V)$, определяющая верхнюю границу V_{max} динамического диапазона измеряемых скоростей. Наблюдались три различных типа изменения динамического диапазона при вариации этих параметров. Первый тип характерен для изменения зависимости $\Delta T(V)$, когда варьируется высота подъема преобразователя (глубина погружения в среду протекания). С увеличением подъема преобразователя над стенкой канала происходит значительное увеличение наклона начального участка зависимости $\Delta T(V)$ и рост крутизны вблизи максимума, но при этом происходит значительное смещение максимума в сторону меньших скоростей. Таким образом, с ростом глубины погружения увеличивается чувствительность сенсора, но смещается диапазон измерения скорости потока в сторону меньших скоростей.

Аналогичный тип изменения зависимости $\Delta T(V)$ наблюдается при вариации толщины мембраны в сторону ее уменьшения. С ее уменьшением возрастает значение самого максимума ΔT_{max} и начальный наклон зависимости $\Delta T(V)$, что иллюстрирует преимущество тонких мембран, но при этом уменьшится значение скорости достижения максимума $\Delta T_{\text{max}}(V)$. Динамический диапазон в целом смещается в сторону меньших скоростей (рис. 4, а, б).

Наряду с толщиной мембраны наиболее сильное влияние на увеличение крутизны характеристики преобразователя оказывает теплопроводность мембраны. Данный тип вариации интересен тем, что

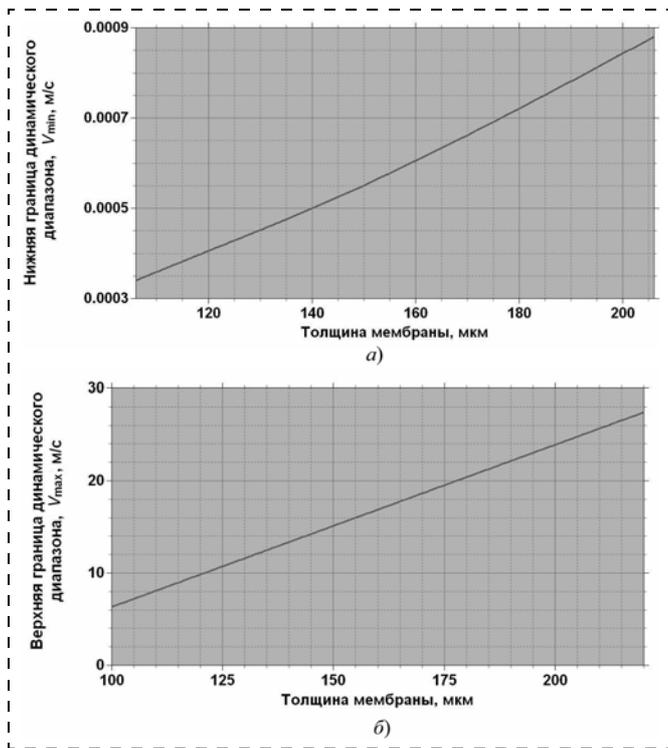


Рис. 4. Влияние толщины мембраны на динамический диапазон измерений скорости протекания воздуха

крутизна начального участка может быть увеличена практически без потери ширины динамического диапазона. Так, уменьшая теплопроводность мембраны в 4 раза, можно повысить чувствительность преобразователя примерно в 6 раз, при этом верхняя гра-

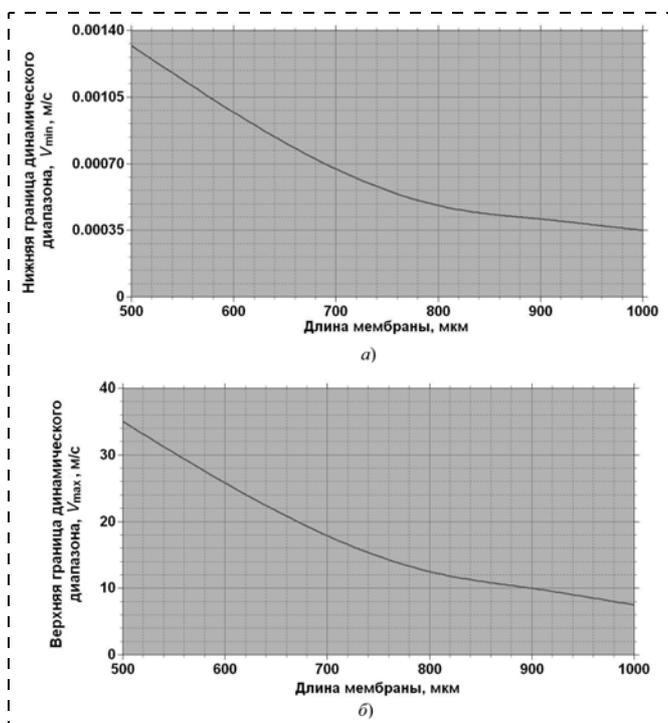


Рис. 5. Влияние длины мембраны на динамический диапазон измерений

ница диапазона уменьшится также в 6 раз, а ΔT_{\max} увеличится примерно в 4 раза.

Существенного повышения крутизны начального участка $\Delta T(V)$ и максимального значения разностного напряжения без уменьшения верхней границы динамического диапазона можно достичь увеличением тока, который ограничивается либо максимально допустимой температурой разогрева мембраны, либо приемлемой потребляемой мощностью при работе в автономном режиме.

При удлинении мембраны происходит, во-первых, увеличение ΔT_{\max} , во-вторых, повышается чувствительность устройства, а динамический диапазон при этом немного уменьшается за счет сдвига ΔT_{\max} в сторону меньших скоростей. На рис. 5, а, б показано влияние вариации длины мембраны на диапазон измерения скоростей.

Важным параметром преобразователя является симметричное смещение центров чувствительных резисторов относительно положения нагревателя — x . Так, для подветренной стороны мембраны при расположении центра чувствительного резистора на середине этой стороны достигается не только максимум зависимости $\Delta T(x) = T(x) - T(-x)$, но и наблюдается наибольшая чувствительность преобразователя.

Сравнение с экспериментом

Нами проводилось также сравнение расчетной стационарной зависимости разностного сигнала с экспериментально измеренной стационарной характеристикой первичного преобразователя скорости потока для воздуха типа SRV-3. Детальное описание условий проведения эксперимента и результатов измерений будет опубликовано позднее в работе [6]. На рис. 6 приведены экспериментальная стационарная выходная характеристика первичного преобразователя SRV-3 и подгоночная кривая, рассчитанная для следующих значений параметров мембраны $\chi_0 = 6,0 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $\kappa_0 = 12,9 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$, $L = 800 \text{ мкм}$, $h = 1,36 \text{ мкм}$ при нулевом погружении в среду протекания и токе на нагревателе равном 50 мА. При подгонке предполагалось, что выходной сигнал преобразователя линейно связан с разностной температурой измерительных резисторов мостовой схемы.

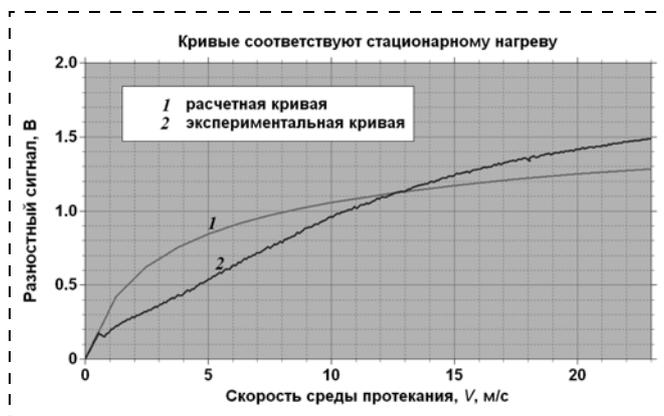


Рис. 6. Зависимость разностного сигнала первичного анемометрического преобразователя калориметрического типа (SRV-3) от скорости протекания воздушного потока, полученная на измерительном продувочном стенде

Из сравнения результатов (рис. 6) видно, что модель качественно согласуется с измеренной экспериментальной зависимостью. Для количественного улучшения результатов требуется совершенствование модели, включая учет температурной зависимости параметров среды протекания и самой мембраны, уточнение условий теплоотвода на границах мембраны и кристалла, нелинейности отклика преобразователя.

Заключение

Таким образом, в результате моделирования нами установлено, что основной характер влияния варьируемых параметров сводится к следующему.

Наиболее сильное влияние на изменение динамического диапазона и разностного сигнала чувствительных резисторов оказывают теплопроводность и толщина мембраны. С уменьшением толщины и теплопроводности мембраны растет чувствительность преобразователя и быстродействие отклика. Диапазон измеряемых скоростей смещается при этом в сторону меньших скоростей. Оптимальные характеристики достигаются при расположении чувствительных резисторов на равных расстояниях от нагревателя и краев мембраны. При увеличении длины мембраны происходит увеличение крутизны начального участка разностного сигнала преобразователя и смещение максимума $\Delta T(V)$ в сторону меньших скоростей. Кроме того, увеличение ширины мембраны приводит к снижению быстродействия процесса измерения.

Расчеты показывают, что погружение преобразователя вглубь канала приводит к увеличению начальной крутизны и снижению скорости достижения максимума. Существенного повышения крутизны начального участка и максимального значения разностного напряжения без уменьшения верхней границы динамического диапазона можно достичь увеличением тока. Значение силы тока нагрева ограничивается либо максимально допустимой температурой разогрева мембраны, либо ограничением на потребляемую мощность при работе в автономном режиме.

Длительность и мощность разогрева определяют энергию измерения $E_{\text{изм}} = I^2 R_{\text{н}} t_{\text{н}}$. Поэтому энергия стационарного режима задается величиной $E_{\text{изм}} = I^2 R_{\text{н}} t_{\text{рел}}$. В случае $I = 50$ мА, она равна 0,3 кДж.

Таким образом, проделанные расчеты показывают, что в стационарном режиме разностный сигнал на измерительных резисторах существенно зависит от мощности нагрева и времени релаксации теплоты по мембране и в окружающую среду, которые, в свою очередь, сильно зависят от толщины и теплопроводности мембраны, а также тепловых характеристик среды протекания. По существу энергия измерения и время нарастания и спада разностного сигнала при включении и отключении тока нагревателя определяются процессом прогрева, а следовательно, и теплоемкостью эффективного объема вблизи нагревателя, который определяется комбинацией диффузионных длин материала мембраны и

окружающей среды и их удельных теплоемкостей. Следует отметить в этой связи существенную зависимость скорости нарастания амплитуды и достижения максимального значения разностного отклика на измерительных резисторах от среды заполнения колодца под мембраной преобразователя.

Дополнительный прогрев среды в колодце приводит к задержке процесса "разгонки" разогрева и времени релаксации теплоты. Так, для воды, характеризующейся большой теплоемкостью, ввиду наличия большого паразитного теплоотвода в колодце под мембраной, погружной способ измерения скорости протекания представляется малоэффективным. В этом случае для интегрального анемометра предпочтительно использование тонкой подложки с малой теплопроводностью вместо мембраны на кремниевой подложке с колодцем.

Воздушное заполнение под мембраной в случае газовой среды протекания не создает этой проблемы. При размещении преобразователя вблизи стенки продувочного канала градиент скорости протекания может оказывать сильное влияние на динамический диапазон преобразователя, так как пик скоростной зависимости разностного сигнала смещается с ростом погружения преобразователя к середине канала. Это обстоятельство возникает тогда, когда усредненная по диффузионной длине скорость протекания среды над каналом далека от максимального значения, достигаемого в середине канала. При малой переходной области пространственного изменения скорости над преобразователем по сравнению с длиной релаксации теплоты в среду этот эффект становится незначительным. Последнее обстоятельство необходимо учитывать также при рассмотрении в процессах теплораспределения при конечной толщине примыкающего к поверхности слоя вытеснения, возрастающего по мере роста скорости потока над преобразователем конечных размеров.

Работа выполнена при поддержке ФАПНИ (ГК № 02.523.11.3018).

Список литературы

1. Рабодзей А. Н., Халикеев В. М. БЭК 15. Датчики фирмы Honeywell. М.: Додэка, 2000.
2. Ураксеев М. А., Романченко А. Ф., Абдрашитова Д. Р., Шилов С. А. // Исследовано в России. 2001. С. 587. URL: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2001/051.pdf>. № 051/010419.
3. Дюжев Н. А., Поправкин А. Н., Шкуропат И. Г., Шюкин А. Н., Попков А. Ф. Универсальный термочувствительный элемент к датчикам газового потока // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 2. С. 22—24.
4. Bruschi P., Nurra V., Piotto M. A compact package for integrated silicon thermal gas flow meters // Microsystem Technologies. 2008. Vol. 14, N 7.
5. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 659 с.
6. Бобров А. А., Дюжев Н. А., Медников А. М., Махиборода М. А., Попков А. Ф., Шкуропат И. Г., Матвеева Н. К. Исследование выходного отклика резистивного анемометрического преобразователя расхода газа мембранного типа в стационарном и импульсном режимах нагрева // Нано- и микросистемная техника. 2010. (в печати).

В. П. Драгунов, д-р техн. наук, нач. отдела,
Д. И. Остертак, аспирант,
 Новосибирский государственный технический университет,
 e-mail: drag@adm.nstu.ru, ostertak@ngs.ru

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЭМС С ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ.

ЧАСТЬ II. РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ СИЛ

Проводится сравнение различных подходов к оценке компонент электростатических сил, действующих между электродами плоского конденсатора, содержащего два одинаковых прямоугольных или круглых электрода. Приводятся аналитические выражения для расчета компонент электростатических сил. Рассчитываются погрешности в оценках компонент электростатических сил, действующих на электроды конденсаторов при изменении межэлектродного зазора и площади перекрытия электродов.

Ключевые слова: МЭМС, электрическая емкость, плоский конденсатор, краевые эффекты, компоненты электростатических сил

Введение

При проектировании МЭМС возникает необходимость в оценке взаимного смещения элементов конструкции при различных внешних воздействиях. Решение этой задачи предполагает, в частности, определение компонент внешних сил, действующих на элементы конструкции и, в первую очередь, это касается электростатической силы.

В настоящее время расчет компонент электростатических сил, действующих в МЭМС, как правило, проводят в рамках модели идеального плоского конденсатора (ИПК). Следует, однако, отметить, что модель ИПК не учитывает краевые эффекты. Поэтому при ее использовании остается открытым вопрос о пределах применимости данной модели, особенно при проектировании МЭМС с малыми отношениями линейных размеров электродов к межэлектродным зазорам. При расчете компонент электростатической силы эта проблема обостряется, так как компоненты электростатической силы пропорциональны производным емкости по соответствующим координатам. В результате при расчете электростатических сил необходимо достаточно точно рассчитывать не только емкости между элементами конструкции МЭМС, но и производные этих емкостей по соответствующим координатам.

В данной статье проводится сравнение различных подходов к расчету зависимостей компонент электростатической силы, действующей на электроды плоского конденсатора, содержащего два одинаковых прямоугольных или круглых параллельных электрода, от межэлектродного зазора и взаимного смещения электродов.

Результаты расчетов и их анализ

В процессе проектирования МЭМС возникает необходимость в расчете компонент электростатической силы при неизменных напряжении V между электродами конденсатора и заряде Q на его электродах. В первом случае сила притяжения

$$F_z|_{V=\text{const}} = \frac{V^2}{2} \left| \frac{dC}{dz} \right|, \quad (1)$$

а во втором

$$F_z|_{Q=\text{const}} = \frac{Q^2}{2C^2} \left| \frac{dC}{dz} \right|. \quad (2)$$

Здесь $z = x$ или y в зависимости от того, какая компонента силы определяется — латеральная F_x или нормальная F_y (рис. 1).

Расчет нормальной компоненты силы при изменении зазора между прямоугольными электродами

При расчете силы F_y , с которой притягиваются друг к другу прямоугольные электроды плоского конденсатора, как и в [1], полагали, что длина электрода a много больше его ширины b (рис. 1).

Расчет компонент силы проводился двумя способами: во-первых, с использованием выражений (3)—(5) из работы [1], и, во-вторых, методом площадок (МП) [2]. Результаты этих расчетов практически совпали, поэтому в дальнейшем их принимали за базовые и с ними сравнивали результаты развиваемых аналитических подходов.

Базовая зависимость нормированной нормальной компоненты электростатической силы $\tilde{F}_y(b/d)|_{V=\text{const}} = F_y(b/d)/F_y(100)|_{V=\text{const}}$ от отношения ширины электрода b к межэлектродному зазору d при постоянном напряжении V между электродами конденсатора приведена на рис. 2 (кружки, см. третью сторону обложки). Соответствующая зависи-

мость $\tilde{F}_y(b/d)|_{Q=\text{const}} = F_y(b/d)/F_y(100)|_{Q=\text{const}}$ при постоянном заряде Q на электродах конденсатора приведена на рис. 3 (кружки).

Так же как и при расчете емкостей [1], расчет электростатических сил с использованием этих ме-

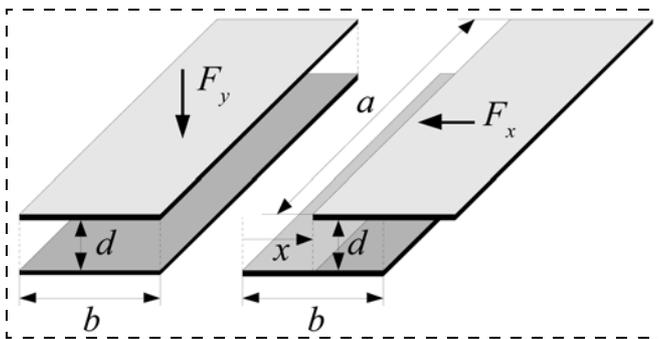


Рис. 1. Двухэлектродная плоскопараллельная конструкция с несмещенными и смещенными друг относительно друга электродами

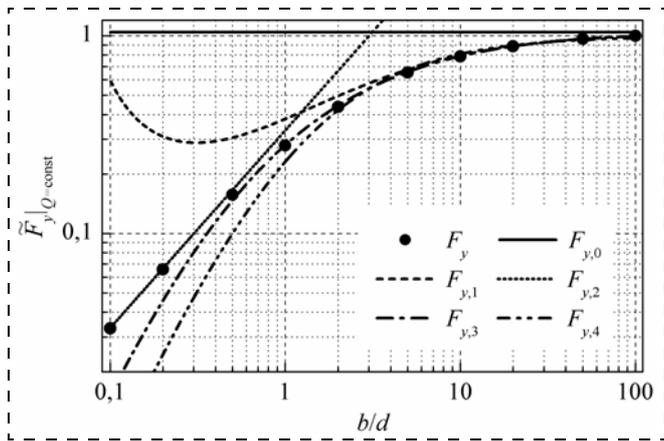


Рис. 3. Зависимости нормированной нормальной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от отношения b/d

тодов на этапах предварительного проектирования представляется излишне громоздким. Поэтому рассмотрим более удобные в данном случае подходы, основанные на использовании аналитических выражений (1), (2) и формул (6)–(10) из работы [1].

В табл. 1 представлены выражения для расчета нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении $F_{y,i}|_{V=\text{const}}$ между электродами плоского конденсатора и постоянном заряде $F_{y,i}|_{Q=\text{const}}$ на его электродах, полученные с использованием формул (1), (2) и выражений (6)–(10) для емкости C_i из работы [1]. Соответствующие зависимости нормированной нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении $\tilde{F}_{y,i}(b/d)|_{V=\text{const}} = F_{y,i}(b/d)/F_{y,i}(100)|_{V=\text{const}}$ и постоянном заряде $\tilde{F}_{y,i}(b/d)|_{Q=\text{const}} = F_{y,i}(b/d)/F_{y,i}(100)|_{Q=\text{const}}$ от отношения b/d , рас-

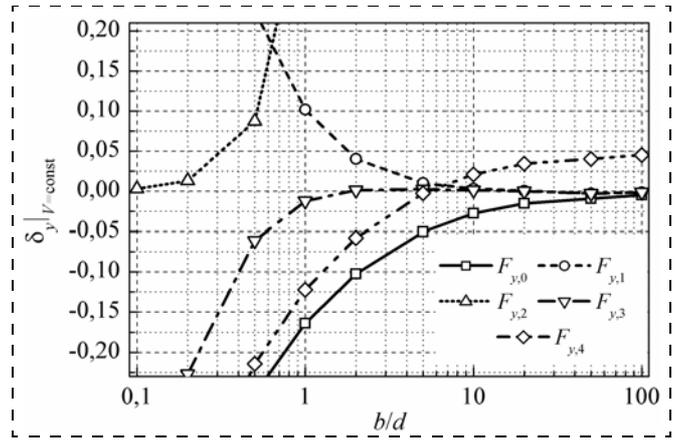


Рис. 4. Зависимости ошибки в оценке нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от отношения b/d

считанные с использованием выражений из табл. 1, приведены на рис. 2 и 3.

Видно, что данные аналитические выражения позволяют рассчитывать F_y с достаточной для практических применений точностью в широком диапазоне значений b/d , а при использовании выражений $F_{y,2}$ и $F_{y,3}$ расчет можно провести практически во всем, актуальном для создания МЭМС, диапазоне значений b/d .

На рис. 4 представлены зависимости ошибки $\delta_{y,i}(b/d)|_{V=\text{const}} = F_{y,i}(b/d)/F_{y,i}(b/d)|_{V=\text{const}} - 1$ в оценках $F_{y,i}|_{V=\text{const}}$ между двумя плоскими прямоугольными электродами от отношения b/d при расчетах с использованием выражений из табл. 1. Соответствующие зависимости ошибки $\delta_{y,i}(b/d)|_{Q=\text{const}} = F_{y,i}(b/d)/F_{y,i}(b/d)|_{Q=\text{const}} - 1$ в оценках $F_{y,i}|_{Q=\text{const}}$ приведены на рис. 5.

Таблица 1

Расчетные формулы для нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении и заряде на прямоугольных электродах

i	$F_{y,i} _{V=\text{const}}$	$F_{y,i} _{Q=\text{const}}$
0	$\frac{V^2 \epsilon_0 \epsilon ab}{2 d^2}$	$\frac{Q^2}{2 \epsilon_0 \epsilon ab}$
1	$\frac{V^2 \epsilon_0 \epsilon ab}{2 d^2} \left(1 + \frac{1}{\pi} \frac{d}{b}\right)$	$\frac{Q^2}{2 \epsilon_0 \epsilon ab} \frac{1 + d/(\pi b)}{\left[1 + \frac{1}{\pi} \frac{d}{b} \left(1 + \ln\left(2\pi \frac{b}{d}\right)\right)\right]^2}$
2	$\frac{V^2 \epsilon_0 \epsilon \pi a}{2 d \ln^2(4d/b)}$	$\frac{Q^2}{2 \epsilon_0 \epsilon \pi a d}$
3	$\frac{V^2 \epsilon_0 \epsilon ab}{2 d^2} \left(1 + \frac{d}{\pi(b + \theta_2 d)}\right)$	$\frac{Q^2}{2 \epsilon_0 \epsilon ab} \frac{1 + d/(\pi(b + \theta_2 d))}{\left[1 + \frac{1}{\pi} \frac{d}{b} \left(1 + \theta_1 \ln\left((2\pi) + \ln\left(\frac{b}{d} + \theta_2\right)\right)\right)\right]^2}$
4	$1,05 \frac{V^2 \epsilon_0 \epsilon ab}{2 d^2}$	$\frac{Q^2}{2 \epsilon_0 \epsilon ab} \frac{1,05}{(1,05 + \theta_3 d/b)^2}$
$\theta_1 = 1,03, \theta_2 = 0,75, \theta_3 = 1,13$		

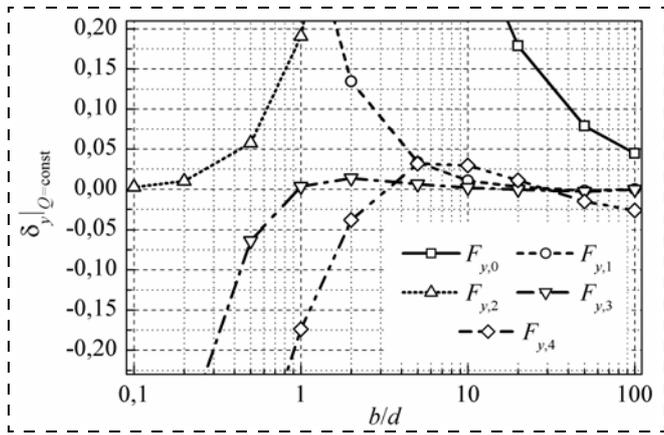


Рис. 5. Зависимости ошибки в оценке нормальной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от отношения b/d

Из рис. 4 видно, что с использованием выражений для $F_y, i|V = \text{const}$ рассчитывать нормальную компоненту электростатической силы при постоянном напряжении с погрешностью менее 10 % можно лишь при $b/d \geq 2$, $b/d \geq 1$, $b/d \leq 0,5$, $b/d \geq 0,4$ и $b/d \geq 1,3$ для $i = 0, 1, 2, 3$ и 4 соответственно, а с погрешностью менее 5 % при $b/d \geq 5$, $b/d \geq 1,7$, $b/d \leq 0,3$, $b/d \geq 0,6$ и $b/d \geq 2,2$ для $i = 0, 1, 2, 3$ и 4 соответственно.

Из рис. 5 видно, что с использованием выражений для $F_y, i|Q = \text{const}$ рассчитывать нормальную компоненту электростатической силы при постоянном заряде с погрешностью менее 10 % можно при $b/d \geq 40$, $b/d \geq 2,6$, $b/d \leq 0,65$, $b/d \geq 0,45$ и $b/d \geq 1,4$ для $i = 0, 1, 2, 3$ и 4 соответственно, а с погрешностью менее 5 % при $b/d \geq 90$, $b/d \geq 4$, $b/d \leq 0,45$, $b/d \geq 0,55$ и $b/d \geq 1,8$ для $i = 0, 1, 2, 3$ и 4 соответственно.

Отметим, что значения нормальной компоненты электростатической силы при постоянном заряде, рассчитанные в рамках модели ИПК (см. рис. 3 — сплошная линия), в отличие от базовой зависимости, не зависят от отношения b/d , поэтому при уменьшении b/d погрешность таких оценок существенно возрастает. В результате, если при постоянном напряжении оценки значений нормальной компоненты электростатической силы, выполненные в рамках модели ИПК, с приемлемой точностью можно проводить при $b/d \geq 2$, то при постоянном заряде это возможно лишь при $b/d \geq 40$.

Расчет нормальной компоненты силы при изменении зазора между круглыми электродами

Аналогичный анализ был проведен и для МЭМС с круглыми электродами. В этом случае тоже рассчитывалась сила F_{ky} , с которой притягиваются друг к другу электроды соответствующего плоского конденсатора. Базовые зависимости нормированной нормальной компоненты электростатической силы $\tilde{F}_{ky}(r/d)|V = \text{const} = F_{ky}(r/d)/F_{ky}(10)|V = \text{const}$ (при постоянном напряжении между электродами конденсатора) и $\tilde{F}_{ky}(r/d)|Q = \text{const} = F_{ky}(r/d)/F_{ky}(10)|Q = \text{const}$

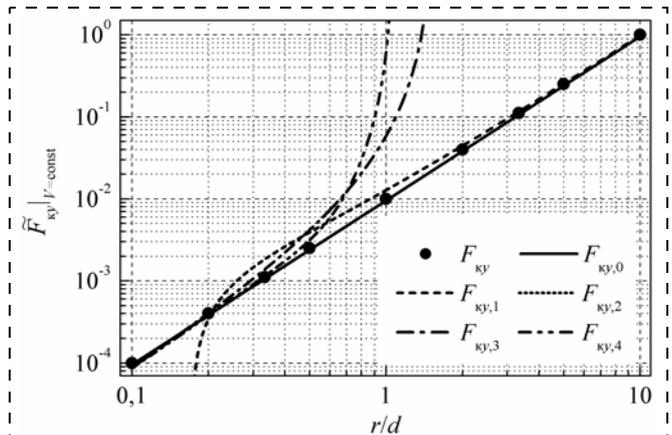


Рис. 6. Зависимости нормированной нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от отношения r/d

(при постоянном заряде на электродах конденсатора) от отношения радиуса электрода r к межэлектродному зазору d , рассчитанные с использованием формулы (11) из работы [1], приведены на рис. 6 и 7 (кружки), соответственно.

На этих же рисунках приведены зависимости нормированной нормальной компоненты электростатической силы $\tilde{F}_{ky, i}(r/d)|V = \text{const} = F_{ky, i}(r/d)/F_{ky, i}(10)|V = \text{const}$ (при постоянном напряжении) и $\tilde{F}_{ky, i}(r/d)|Q = \text{const} = F_{ky, i}(r/d)/F_{ky, i}(10)|Q = \text{const}$ (при постоянном заряде) от отношения r/d , рассчитанные с использованием формул (1), (2) и выражений (12)—(16) для емкости C_{ki} из работы [1]. Соответствующие аналитические выражения для расчета нормальной компоненты электростатической силы $F_{ky, i}|V = \text{const}$ и $F_{ky, i}|Q = \text{const}$ приведены в табл. 2. Отметим, что зависимости $F_{ky, 0}$ и $F_{ky, 2}$ при постоянном напряжении, представленные на рис. 6, совпадают.

Зависимости ошибки $\delta_{ky, i}(r/d)|V = \text{const} = F_{ky, i}(r/d)/F_{ky, i}(r/d)|V = \text{const} - 1$ в оценках силы $F_{ky}|V = \text{const}$ и $\delta_{ky, i}(r/d)|Q = \text{const} = F_{ky, i}(r/d)/F_{ky, i}(r/d)|Q = \text{const} - 1$ в оценках $F_{ky}|Q = \text{const}$, действующих между двумя плоскими круглыми электродами, от отношения r/d

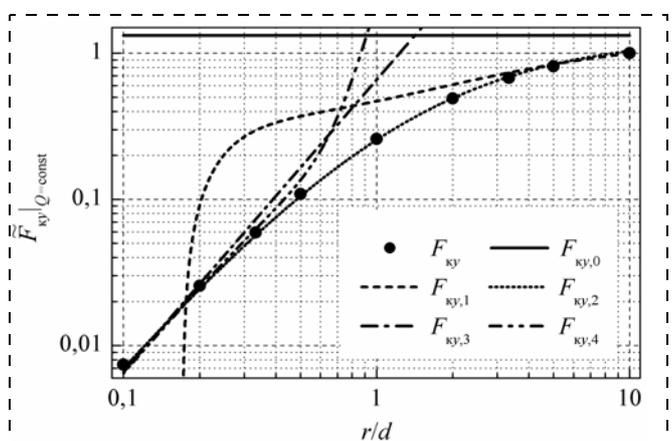


Рис. 7. Зависимости нормированной нормальной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от отношения r/d

Расчетные формулы для нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении и заряде на круглых электродах

i	$F_{\text{кy},i} V=\text{const}$	$F_{\text{кy},i} Q=\text{const}$
0	$\frac{V^2}{2} \frac{\epsilon_0 \epsilon \pi r^2}{d^2}$	$\frac{Q^2}{2} \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon \pi r^2}$
1	$\frac{V^2}{2} \frac{\epsilon_0 \epsilon}{\pi} \left[\pi \frac{r}{d} - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{d}{2r}\right) \right] \left[\pi \frac{r}{d} + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{d}{2r}\right) + 1 \right]$	$\frac{Q^2}{2} \frac{\left[\pi \frac{r}{d} - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{d}{2r}\right) \right] \left[\pi \frac{r}{d} + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{d}{2r}\right) + 1 \right]}{\epsilon_0 \epsilon \pi r^2 \left[\pi \frac{r}{d} + \ln\left(16\pi \frac{r}{d}\right) - 1 + \frac{1}{4\pi r} d \ln^2\left(\frac{d}{2r}\right) \right]^2}$
2	$\frac{V^2}{2} \frac{\epsilon_0 \epsilon \pi r^2}{d^2}$	$\frac{Q^2}{2} \frac{\pi}{\epsilon_0 \epsilon d^2 (\pi r/d + 4)^2}$
3	$\frac{V^2}{2} \frac{8\epsilon_0 \epsilon r^2}{\pi d^2 (1 - 2r/(\pi d))^2}$	$\frac{Q^2}{2} \frac{1}{2\epsilon_0 \epsilon \pi d^2}$
4	$\frac{V^2}{2} \frac{\epsilon_0 \epsilon \pi \left(33 \frac{r^4}{d^4} - 14 \frac{r^2}{d^2} + 8 \right)}{\left(\frac{33 r^4}{20 d^4} - \frac{7 r^2}{6 d^2} - \pi \frac{d}{r} + 2 \right)^2}$	$\frac{Q^2}{2} \frac{33 \frac{r^4}{d^4} - 14 \frac{r^2}{d^2} + 8}{16\epsilon_0 \epsilon \pi d^2}$

при расчетах с использованием выражений из табл. 2 приведены на рис 8 и 9 соответственно.

Из рис. 8 видно, что с использованием выражений $F_{\text{кy}, 0}$ и $F_{\text{кy}, 2}$ (зависимости совпадают) можно рассчитывать нормальную компоненту электростатической силы при постоянном напряжении с погрешностью около 5 % во всем представленном диапазоне, тогда как с использованием $F_{\text{кy}, 1}$, $F_{\text{кy}, 3}$ и $F_{\text{кy}, 4}$ погрешность оценок не превысит 10 % лишь при $r/d \geq 2,2$, $0,11 \leq r/d \leq 0,24$ и $0,14 \leq r/d \leq 0,38$ соответственно, а с погрешностью менее 5 % — соответственно при $r/d \geq 3,1$, $0,14 \leq r/d \leq 0,22$ и $0,2 \leq r/d \leq 0,34$.

В то же время расчеты показывают, что с использованием выражения для $F_{\text{кy}, 0}$, полученного в рамках модели ИПК, погрешность в оценках нормальной компоненты электростатической силы при по-

стоянном заряде будет менее 32 % лишь при $r/d \geq 10$. При этом использование $F_{\text{кy}, 2}$ позволяет проводить расчеты электростатической силы при постоянном заряде с ошибкой менее 10 % во всем представленном на графике диапазоне r/d . Из рис. 9 также видно, что с использованием выражений для $F_{\text{кy}, i}|Q = \text{const}$ рассчитывать нормальную компоненту электростатической силы при постоянном заряде с погрешностью менее 10 % можно при $r/d \geq 3,2$, $0,11 \leq r/d \leq 0,24$ и $0,12 \leq r/d \leq 0,36$ для $i = 1, 3$ и 4 соответственно, а с погрешностью менее 5 % — при $r/d \geq 4,2$, $0,2 \leq r/d \leq 20$, $0,13 \leq r/d \leq 0,21$ и $0,18 \leq r/d \leq 0,32$ соответственно для $F_{\text{кy}, 1}$, $F_{\text{кy}, 2}$, $F_{\text{кy}, 3}$ и $F_{\text{кy}, 4}$.

Отметим, что зависимости нормальной компоненты электростатической силы от межэлектродного зазора при учете краевых эффектов и для круглых,

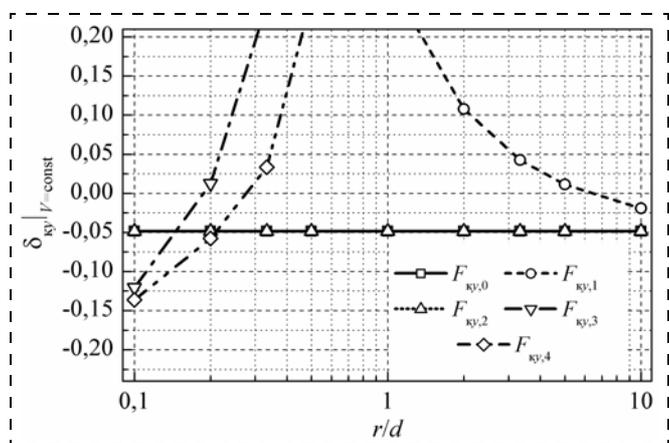


Рис. 8. Зависимости ошибки в оценке нормальной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от отношения r/d

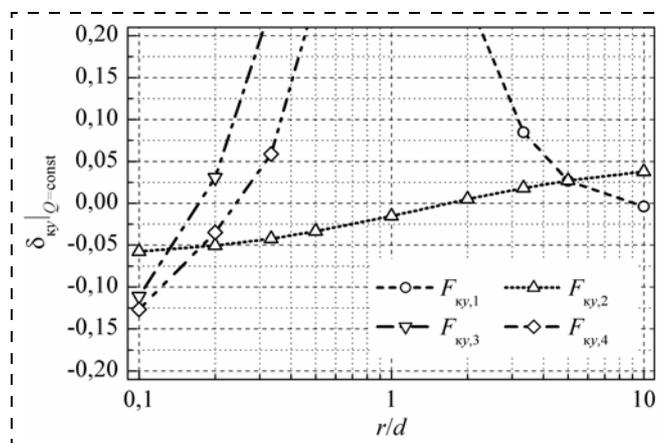


Рис. 9. Зависимости ошибки в оценке нормальной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от отношения r/d

и для прямоугольных электродов при неизменном заряде качественно отличаются от соответствующих зависимостей, рассчитанных в рамках модели ИПК. Это связано с тем, что в рамках модели ИПК при постоянном заряде изменение межэлектродного зазора d вызывает пропорциональное изменение напряжения V между электродами. При этом отношение V/d , т. е. напряженность электрического поля (а значит, и сила, действующая на единичный заряд) остается неизменной. В свою очередь, учет краевых эффектов замедляет изменение емкости (а значит, и напряжения между электродами) при изменении межэлектродного зазора. В результате напряженность электрического поля изменяется, что при постоянном заряде вызывает изменение нормальной компоненты электростатической силы.

Расчет латеральной компоненты силы при изменении площади перекрытия прямоугольных электродов

Рассчитаем силу F_x с которой притягиваются друг к другу электроды плоского прямоугольного конденсатора при смещении их друг относительно друга. При этом также будем полагать, что $a \gg b$ (см. рис. 1).

Базовые зависимости нормированной латеральной компоненты электростатической силы $\tilde{F}_x(x/b)|_{V=\text{const}} = F_x(x/b)/F_{x,\text{max}}|_{V=\text{const}}$ при постоянном напряжении V между электродами конденсатора, рассчитанные численно с использованием метода площадок [3] при различных отношениях b/d , приведены на рис. 10. Характерной особенностью приведенных зависимостей является наличие пологой области при значениях x/b в интервале от 0 до 1. По мере увеличения отношения b/d пологая область расширяется, а ее наклон уменьшается.

В случае постоянного напряжения латеральная компонента электростатической силы пропорциональна первой производной емкости по соответствующей координате (в данном случае по x). Поэтому пологую область на зависимостях $F_x(x/b)|_{V=\text{const}}$ можно объяснить практически линейной в этом интервале зависимостью емкости (рис. 6 в работе [1]).

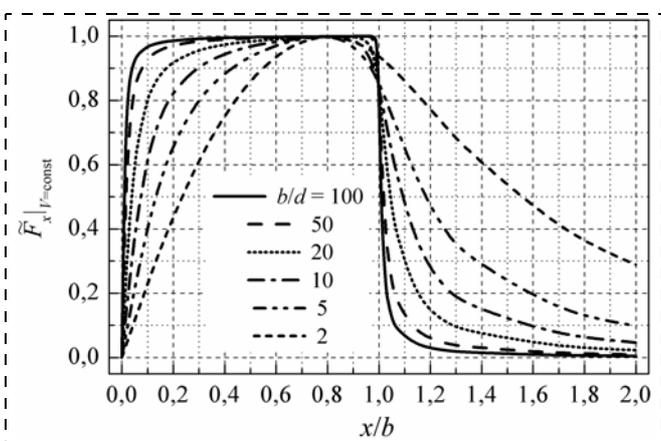


Рис. 10. Базовые зависимости нормированной латеральной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от относительного смещения электродов

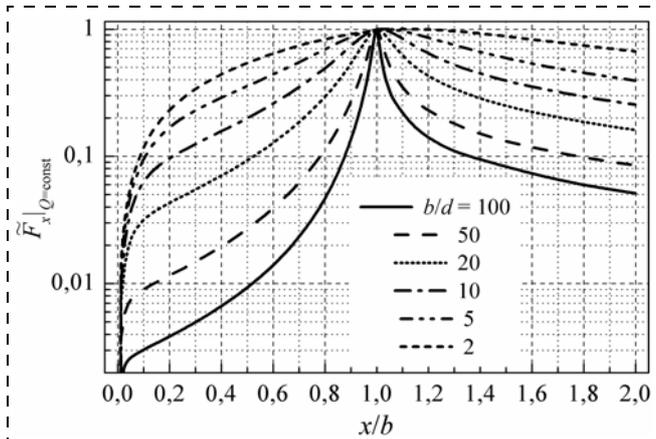


Рис. 11. Базовые зависимости нормированной латеральной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от относительного смещения электродов

Возрастание силы вблизи $x/b = 0$ и спад в окрестности точки $x/b = 1$ связаны с проявлением краевых эффектов. Расширение пологой области при увеличении отношения b/d происходит вследствие уменьшения относительного вклада краевых эффектов, поскольку линейная область на зависимости емкости расширяется с ростом отношения b/d .

Базовые зависимости нормированной латеральной компоненты электростатической силы $\tilde{F}_x(x/b)|_{Q=\text{const}} = F_x(x/b)/F_{x,\text{max}}|_{Q=\text{const}}$ при постоянном заряде Q на электродах конденсатора, рассчитанные с использованием метода площадок [3] при различных отношениях b/d , приведены на рис. 11.

Из представленных на рис. 11 зависимостей видно, что в отличие от предыдущего случая данные зависимости не имеют пологой области, причем с увеличением отношения b/d зависимость $F_x(x/b)|_{Q=\text{const}}$ в окрестности точки $x/b = 1$ становится более узкой.

Такой характер зависимостей $F_x(x/b)|_{Q=\text{const}}$ объясняется тем, что в данном случае латеральная компонента электростатической силы пропорциональна первой производной емкости по соответствующей координате (в данном случае по x) и обратно пропорциональна квадрату емкости. При увеличении взаимного смещения электродов в интервале $0 < x/b < 1$ емкость уменьшается, а производная емкости изменяется слабо, что и приводит к увеличению латеральной составляющей электростатической силы при смещении электродов. При $x/b > 1$, наоборот, емкость системы изменяется слабо, тогда как производная емкости стремится к нулю, что и приводит к уменьшению латеральной составляющей электростатической силы. Сужение зависимости $F_x(x/b)|_{Q=\text{const}}$ с ростом отношения b/d можно объяснить уменьшением влияния краевых эффектов.

В табл. 3 приведены аналитические выражения для расчета латеральной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении и заряде, полученные с использованием формул (1), (2) и выражений для оценки емкостей C_0^* и C_3^* из работы [1].

На рис. 12 представлены зависимости латеральной компоненты электростатической силы F_x от от-

Расчетные формулы для латеральной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении и заряде на прямоугольных электродах

i	$F_{x,i} _{V=\text{const}}$	$F_{x,i} _{Q=\text{const}}$
0	$\frac{V^2 \varepsilon_0 \varepsilon a}{2 d}$	$\frac{Q^2}{2} \frac{d}{\varepsilon_0 \varepsilon a b^2 (1 - x /b)^2}$
3	$\frac{V^2}{2} \frac{C_3}{b} \theta \left[1 - \exp\left(-\frac{b}{d} \frac{ x }{b}\right) \right]$	$\frac{Q^2}{2} \frac{\frac{1}{b C_3} \theta \left[1 - \exp\left(-\frac{b x }{d}\right) \right]}{\left[1 - \theta \left\{ \frac{ x }{b} - \frac{d}{b} \left(1 - \exp\left(-\frac{b x }{d}\right) \right) \right\} \right]^2}$
$C_3 = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon a b}{d} \left\{ 1 + \frac{1}{\pi} \frac{b}{d} \left[1 + \theta_1 \ln(2\pi) + \ln\left(\frac{b}{d} + \theta_2\right) \right] \right\},$ $\theta_1 = 1,03, \theta_2 = 0,75,$ $\theta = 1,0366 - 2,2275/[1 + 2,3467(b/d)^{0,5403}]$		

носительного смещения электродов x/b , рассчитанные при постоянном напряжении V на обкладках конденсатора для различных соотношений b/d . Расчет проводился при $a = 1000$ мкм, $b = 100$ мкм и $V = 5$ В. Маркерами обозначены результаты расчетов методом площадок, сплошными линиями — расчет с использованием выражения $F_{x,3}|_{V=\text{const}}$, которое позволяет учитывать влияние краевых эффектов. В рамках модели ИПК соответствующее выражение для $0 < x/b < 1$ имеет вид $F_{x,0}|_{V=\text{const}}$ (см. табл. 3).

На рис. 13 и 14 приведены зависимости ошибки $\delta_x(x/b)|_{V=\text{const}} = F_{x,i}(x/b)/F_{x,3}(x/b)|_{V=\text{const}} - 1$ в оценках латеральной компоненты электростатической силы между двумя прямоугольными электродами от отношения x/b при расчетах с использованием выражений $F_{x,3}|_{V=\text{const}}$ и $F_{x,0}|_{V=\text{const}}$ соответственно.

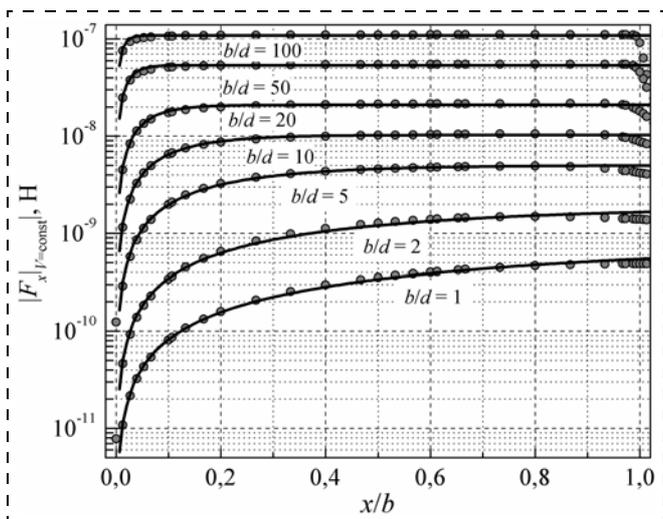


Рис. 12. Зависимости латеральной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от относительного смещения электродов. Маркеры — расчет МП, линии — расчет с использованием $F_{x,3}|_{V=\text{const}}$

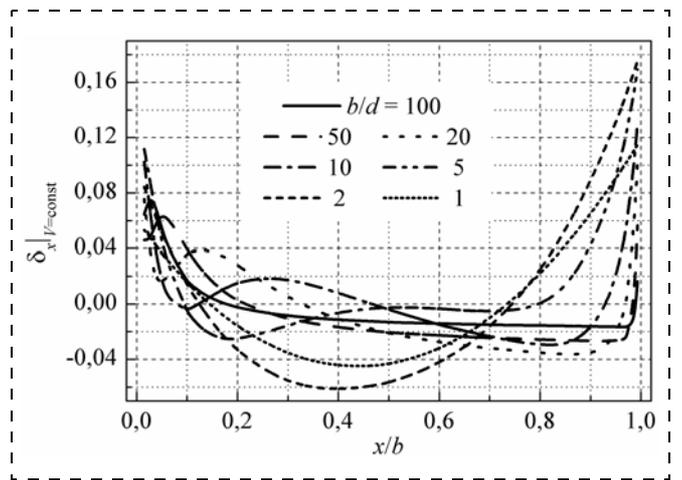


Рис. 13. Зависимости ошибки в оценке латеральной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от относительного смещения электродов, рассчитанной с использованием $F_{x,3}|_{V=\text{const}}$

Из рис. 13 видно, что различие между оценками силы F_x при постоянном напряжении на обкладках конденсатора, полученными с использованием численных расчетов и по формуле $F_{x,3}|_{V=\text{const}}$ при $b/d \geq 1$ в интервале $0,02 < x/b < 0,9$ не превышает 10 %, что представляется вполне приемлемым для практических применений.

Из рис. 14 следует, что аналогичные оценки в рамках модели ИПК $F_{x,0}|_{V=\text{const}}$ приводят к погрешности менее 10 % лишь при $b/d > 5$. Например, при $b/d \geq 20$ погрешность будет менее 10 % в интервале $0,2 < x/b < 0,98$. В то же время при $b/d = 2$ минимальная погрешность будет уже около 50 %, а при $b/d = 1$ — более 120 %, т. е. в данном случае модель ИПК оказывается неприемлемой.

На рис. 15 представлены зависимости латеральной компоненты электростатической силы F_x от от-

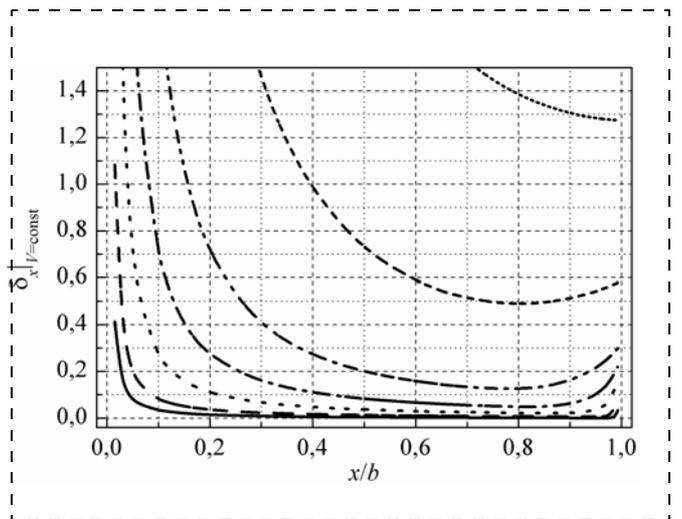


Рис. 14. Зависимости ошибки в оценке латеральной компоненты электростатической силы при постоянном напряжении от относительного смещения электродов, рассчитанной с использованием $F_{x,0}|_{V=\text{const}}$, тип линии соответствует рис. 13

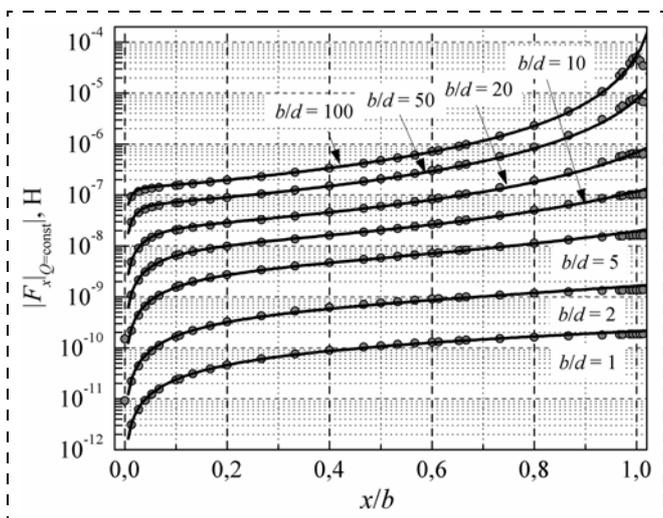


Рис. 15. Зависимости латеральной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от относительного смещения электродов. Маркеры — расчет МП, линии — расчет с использованием $F_{x, 3|Q=const}$

носительного смещения электродов x/b , рассчитанные при постоянном заряде Q на обкладках конденсатора для различных соотношений b/d . Расчет проводился при $a = 1000$ мкм, $b = 100$ мкм и $Q = 5 \cdot 10^{-14} b/d$ Кл. Маркерами обозначены результаты расчетов методом площадок, сплошными линиями — расчет с использованием выражения $F_{x, 3|Q=const}$, учитывающего влияние краевых эффектов. В рамках модели ИПК соответствующее выражение имеет вид $F_{x, 0|Q=const}$ (табл. 3).

На рис. 16 и 17 приведены зависимости ошибки $\delta_x(x/b)|_{Q=const} = F_{x, i}(x/b)/F_{x, 3}(x/b)|_{Q=const} - 1$ в оценках латеральной компоненты электростатической силы между двумя прямоугольными электродами от отношения x/b при расчетах с использованием выражений $F_{x, 3|Q=const}$ и $F_{x, 0|Q=const}$ соответственно.

Из рис. 16 видно, что различие между оценками силы F_x при постоянном заряде на обкладках кон-

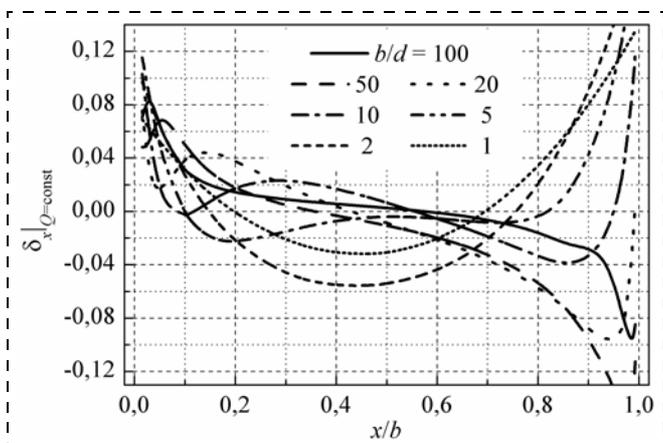


Рис. 16. Зависимости ошибки в оценке латеральной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от относительного смещения электродов, рассчитанной с использованием $F_{x, 3|Q=const}$

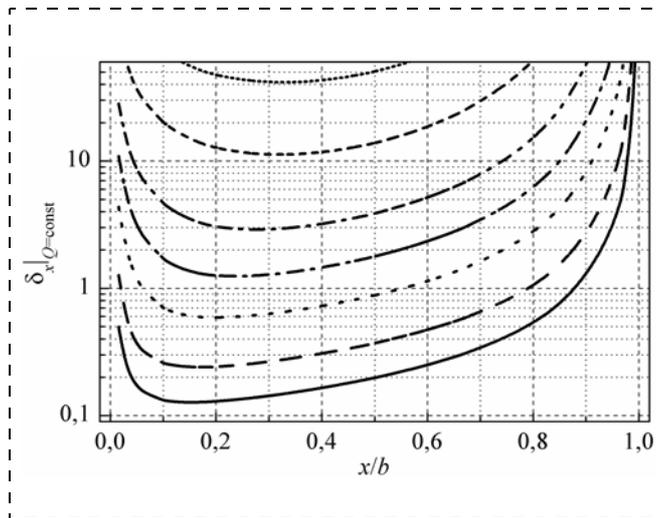


Рис. 17. Зависимости ошибки в оценке латеральной компоненты электростатической силы при постоянном заряде от относительного смещения электродов, рассчитанной с использованием $F_{x, 0|Q=const}$, тип линий соответствует рис. 16

денсатора, сделанными с использованием метода площадок и полученной нами формуле $F_{x, 3|Q=const}$ при $b/d \geq 1$ в интервале $0,02 < x/b < 0,9$ не превышает 10 %, что представляется вполне приемлемым для практических применений. Аналогичные оценки, выполненные с использованием $F_{x, 0|Q=const}$ в рамках модели ИПК, приводят к минимальной погрешности 12 % — при $b/d = 100$ и 24 % — при $b/d = 50$ (рис. 17). Таким образом, при постоянном заряде проводить оценки F_x для $b/d \leq 50$ в рамках модели ИПК практически нельзя.

Заключение

Проведено исследование пределов применимости различных подходов для оценки компонент электростатических сил, действующих между электродами плоского конденсатора с изменяющимся межэлектродным зазором и площадью перекрытия электродов.

Показано, что в рамках модели ИПК рассчитывать нормальную компоненту электростатической силы между двумя прямоугольными электродами с погрешностью менее 10 % при постоянном напряжении можно лишь при $b/d \geq 2$, а при постоянном заряде — при $b/d \geq 40$.

Найдены аналитические выражения $F_{y, 3|V=const}$ и $F_{y, 3|Q=const}$, позволяющие проводить аналогичные оценки с погрешностью не выше 10 % при $b/d \geq 0,4$ и $b/d \geq 0,45$ соответственно.

Показано, что оценки значений нормальной компоненты электростатической силы между двумя круглыми электродами, выполненные в рамках модели ИПК, при постоянном напряжении для $r/d > 0,1$ приводят к ошибке около 5 %, а при постоянном заряде для $r/d \leq 10$ — к погрешности более 32 %.

Установлено, что в рамках модели ИПК для прямоугольных электродов нельзя проводить оценки

латеральной компоненты электростатической силы с приемлемой точностью при постоянном напряжении, если $b/d < 5$, а при постоянном заряде, если $b/d < 50$.

Для расчета латеральной компоненты электростатической силы в интервале $0,02 < x/b < 0,9$ предложены аналитические выражения $F_{x, 3|V = \text{const}}$ и $F_{x, 3|Q = \text{const}}$, позволяющие при $b/d \geq 1$ проводить оценки латеральной компоненты электростатической силы с погрешностью менее 10 %, что вполне достаточно для практических применений.

В целом, проведенный анализ показал, что на этапе предварительного проектирования МЭМС при $b/d < 50$ расчеты целесообразно проводить в два этапа. На первом — для грубой оценки и сужения возможного интервала искомых параметров можно воспользоваться моделью ИПК, а на втором для

уточнения результата — использовать приведенные в данной работе аналитические выражения.

Данная работа выполнена в рамках реализации Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009—2013 гг. (проект НК-392П/16).

Список литературы

1. Драгунов В. П., Остертак Д. И. Электростатические взаимодействия в МЭМС с плоскопараллельными электродами. Часть I. Расчет емкостей // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 7. С. 37—41.
2. Драгунов В. П., Колчужин В. А., Остертак Д. И. Влияние краевых эффектов на электрическую емкость в МЭМС // Доклады АН ВШ РФ. 2009. Т. 13. № 2. С. 97—105.
3. Драгунов В. П., Остертак Д. И. Расчет латеральной составляющей электростатической силы в МЭМС // Научный вестник НГТУ. 2009. Т. 34. № 1. С. 229—232

УДК 681.518.5

А. М. Боронахин, канд. техн. наук, доц., зам. зав. каф., e-mail: boronachin@mail.ru,
Л. Н. Подгорная, аспирант, инж., e-mail: o_ln@rambler.ru,
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова (Ленина)

ПРИМЕНЕНИЕ МИКРОМЕХАНИЧЕСКИХ ДАТЧИКОВ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ РЕЛЬСОВОГО ПУТИ

Рассматривается возможность использования микромеханических акселерометров и гироскопов в диагностике состояния железнодорожного пути. Разработан алгоритм определения вертикальных неровностей рельсовых нитей. Приводятся результаты экспериментального проезда системы.

Ключевые слова: микромеханический акселерометр, микромеханический гироскоп, инерциальный измерительный модуль, диагностика пути, дефекты рельсового пути

Введение

Современные инерциальные технологии и достижения микросистемной техники позволяют создавать компактные микромеханические измерительные модули и разрабатывать на их основе системы для различных областей применения. Так, например, на базе микромеханических датчиков угловой скорости (гироскопов) и линейных ускорений (акселерометров) создаются миниатюрные системы навигации и ориентации, широко используемые в автомобильной промышленности, работо-

технике, управлении движением беспилотных летательных аппаратов и т. п.

Одним из актуальных направлений использования микромеханических измерительных датчиков является железнодорожный транспорт, так как в силу миниатюрности, вибро- и ударопрочности (тысячи g) появляется возможность создавать системы, которые могут быть установлены непосредственно на буксовые узлы подвижного состава [1]. Реализуемые при этом инерциальные методы благодаря достаточно высокой чувствительности гироскопов и акселерометров позволяют контролировать неровности рельсового пути с малыми амплитудами (единицы миллиметров) и длинами, существенно меньшими, чем расстояние между колесными парами тележки вагона (~2,5 м) [2], что является преимуществом перед используемыми на сегодняшний день методами [5].

В данной статье рассматривается возможность использования устанавливаемых на буксы колесных пар тележки вагона инерциальных измерительных модулей (ИИМ) на микромеханических чувствительных элементах для определения дефектов рельсовых нитей. При этом алгоритмы коррекции их показаний не требуют привлечения дополнительной аппаратуры, а базируются лишь на априорно известном строении железнодорожного пути.

Состав системы диагностики рельсового пути на микромеханических датчиках

Кафедрой Лазерных измерительных и навигационных систем (ЛИНС) СПбГЭТУ "ЛЭТИ" были разработаны четыре ИИМ (рис. 1, см. четвертую сторону обложки), включающие в себя следующие датчики фирмы *Analog Devices*: три микромеханических гироскопа ADXRS614, измерительные оси которых расположены ортогонально, два акселерометра ADXL203 (с диапазоном измерения $\pm 1,7g$) и акселерометр ADXL278 (с диапазоном $\pm 35g$), использова-

ние которого объясняется необходимостью изучения действия ударных нагрузок при прохождении рельсовых стыков. Каждый ИИМ перед установкой на вагон проходит процедуру калибровки [3, 4].

В рамках экспериментального проезда в качестве эталонного измерителя (для проверки достоверности получаемых результатов) в систему был включен измерительный блок (ИБ) на волоконно-оптических гироскопах (ВОГ) и кварцевых линейных акселерометрах, который крепится под кузовом над тележкой вагона, а также аппаратура вагона: датчик пути (одометр) и четыре датчика линейных перемещений (ДП). Последние позволяют определять амплитуды вертикальных перемещений ИИМ относительно кузова и оценивать рассогласование показаний из-за различных мест установки датчиков [1].

В целях обеспечения синхронизации по времени моментов опросов подсистем их сигналы поступают на специализированную 16-канальную плату разработки кафедры ЛИНС СПбГЭТУ "ЛЭТИ" (возможные протоколы: RS232/422/485, USB и Can, рис. 2, см. четвертую сторону обложки), с которой передаются в бортовой компьютер через порт USB с частотой 1 кГц, где происходит обработка получаемой информации.

Результаты экспериментального проезда

На рис. 3 (см. четвертую сторону обложки) и его увеличенном фрагменте (рис. 4, см. четвертую сторону обложки) изображен график действующих на буксы вертикальных ускорений, характеризующих действия ударных нагрузок при прохождении рельсовых стыков. Амплитуды сигналов акселерометров увеличиваются до 100 м/с^2 и более. Для сравнения на графиках приведены также показания вертикального акселерометра ИБ.

Определение вертикальных неровностей. Неровности рельсовых нитей в горизонтальной и вертикальной плоскостях согласно [5] определяются относительно некоторой хорды, в основе методов контроля используется двухточечная (длина хорды определяется базой тележки, рис. 5) или трехточечная (длина хорды определяется базой вагона) схема измерений.

Изменение коэффициента передачи двухточечного хордового метода по амплитуде в зависимости от длины неровности $r(\lambda)$ приведено на рис. 6. Из графика видно, что хордовый метод позволяет приблизительно восстановить форму неровности только при условии, что ее длина превышает длину хорды $\lambda > a$. При $\lambda < a$ измерения, как таковые, отсутствуют из-за нелинейного искажения информации, и короткие неровности восстановлению вооб-

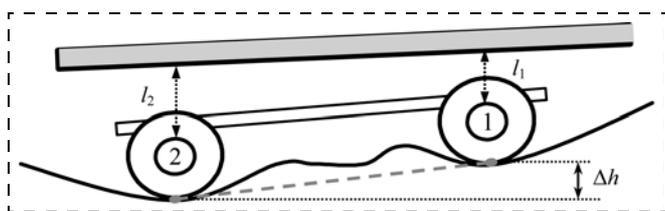


Рис. 5. Иллюстрация двухточечного хордового метода измерения просадки Δh

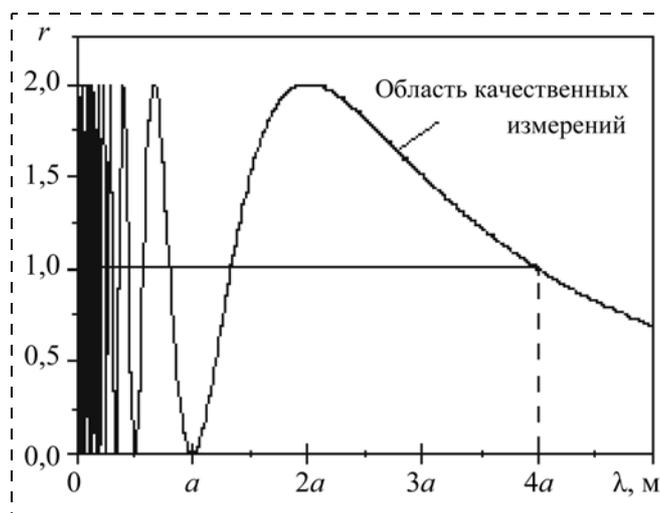


Рис. 6. Зависимость коэффициента передачи хордового метода от длины гармонической неровности

ще не подлежат. Причем при увеличении длины неровности чувствительность метода заметно падает.

Таким образом, использование хордовых методов измерения приводит к искажению формы и размеров контролируемых неровностей [2]. Поэтому для получения достоверных значений контролируемых параметров бесхордовый инерциальный метод измерения просадки является более адекватным.

Инерциальный метод измерений просадок и параметров, характеризующих дефекты рельсов, предполагает использование показаний вертикальных акселерометров, в частности, определение траектории движения букс колесных пар тележки. Применение для этого прямых показаний ИИМ затруднено по причине высокой нестабильности характеристик микромеханических чувствительных элементов. Для повышения точности определения траектории вводится допущение (с учетом проектного положения пути), что среднее значение вертикальной скорости равно нулю на некотором выбранном интервале.

Если при движении тележки по рельсовому пути, представляющему собой набор неровностей различных длин и амплитуд, необходимо выявить неровности с длинами, ограниченными сверху некоторым пороговым значением ($\lambda \leq \lambda_0$), интервал коррекции должен соответствовать таким значениям коэффициента передачи хордового метода, при которых разновысотность первого и второго колес равна нулю. При этом база a характеризуется не расстоянием между соседними колесами, а представляет собой дистанцию, пройденную одним колесом. Корректировать показания акселерометров в таком случае надо на интервале, соответствующем максимальной длине неровности, которую необходимо выявить $\lambda = \lambda_0$.

В целях проверки достоверности описанного выше инерциального метода определения просадки необходимо провести сравнение хордовой просадки с разновысотностью буксовых узлов первого и второго по ходу движения колес. Графики полученных траекторий движения буксовых узлов и хордовые просадки Δh приведены на рис. 7: ИИМ1 — первый по ходу движения микромеханический модуль, ИИМ2 — второй.

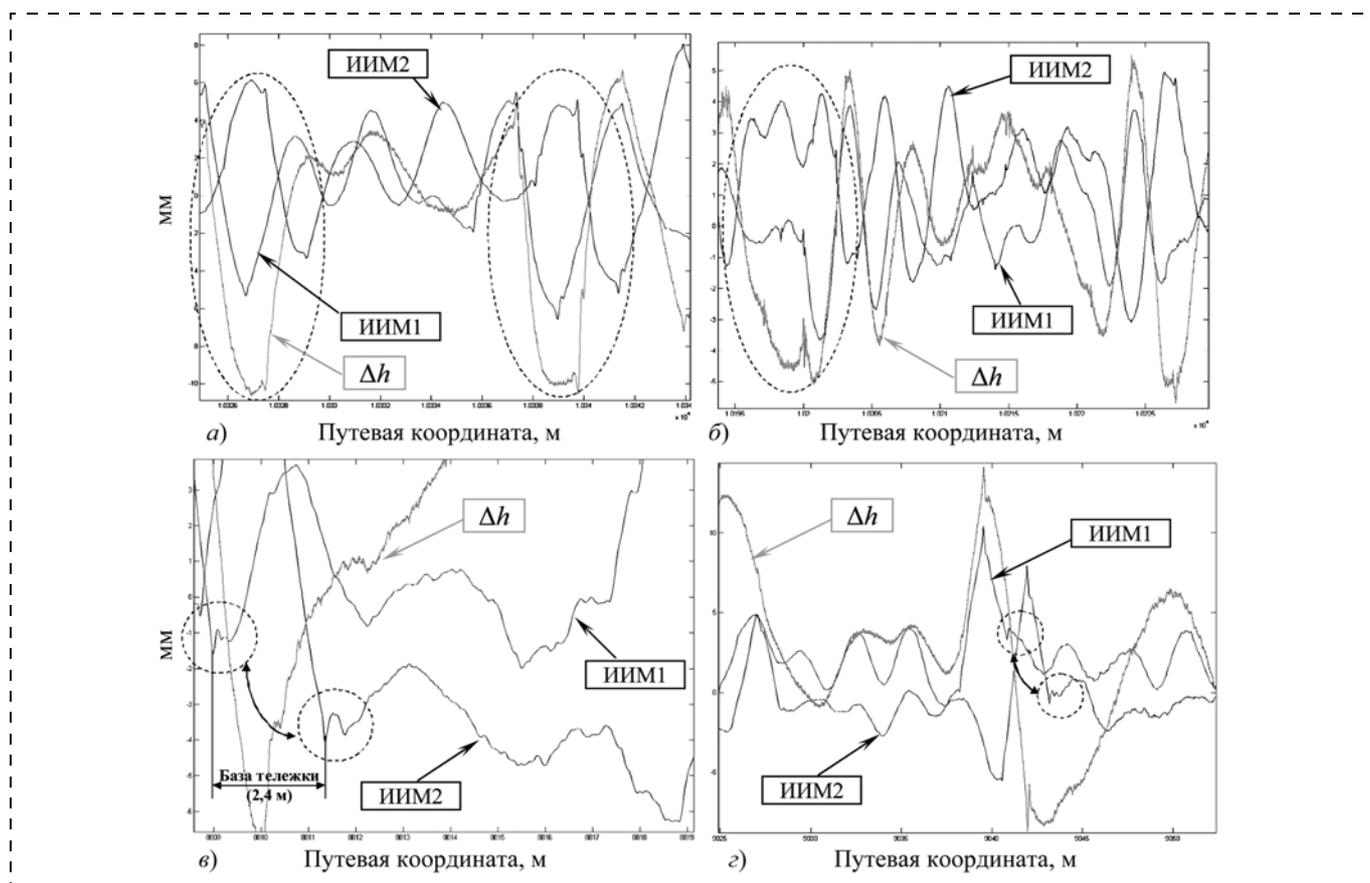


Рис. 7. Просадки рельсовых нитей (Δh) и вертикальные перемещения букс (ИИМ1, 2)

На выделенных участках графиков (рис. 7, а, б) видно, что разновысотность первого и следом идущего колес (разность между кривыми ИИМ1 и ИИМ2) соответствует кривой Δh , что подтверждает состоятельность оцененных траекторий движения буксовых узлов по показаниям ИИМ. Из анализа рис. 7, в, з можно сделать вывод, что хордовый способ определения просадки Δh характеризуется нечувствительностью к неровностям, длины которых менее двух баз тележки (см. также рис. 6), в то время как инерциальный метод такого недостатка лишен, например, на выделенных участках по показаниям микромеханических модулей оценены просадки длиной менее метра. В данном случае речь может идти о наличии отрясенной шпалы (расстояние между шпалами составляет $\sim 0,6$ м).

Отсюда можно сделать вывод: хордовая просадка является дифференциальной оценкой и не может адекватно характеризовать геометрию рельса, так как в ней учитывается разновысотность точек пути. Это подтверждают

ранее полученные аналитические выражения [2]. Кроме того, на рис. 7, б видно различие траекторий движения буксовых узлов, что объясняется различной динамикой прохождения неровностей и стыков.

Определение дефектов рельсового пути. По результатам экспериментального проезда оценивалась возможность определения дефектов рельсов: волнообразной деформации, смятия головки рельса, рифлей — коротких (3—25 см) волнообразных неровностей на головке рельсов (рис. 8). Данные дефекты в настоящее время выявляются внешним осмотром с использованием ручных путеизмерительных приборов, т. е. в принципе не могут быть определены такими оперативными средствами, как путеизмерительные вагоны и вагоны-дефектоскопы. Согласно нормативным документам, в случае обнаружения дефектов до их устранения накладываются ограничения на скорость движения железнодорожных составов (в зависимости от категории — 120; 100; 70, 40 км/ч, вплоть до закрытия участка пути).

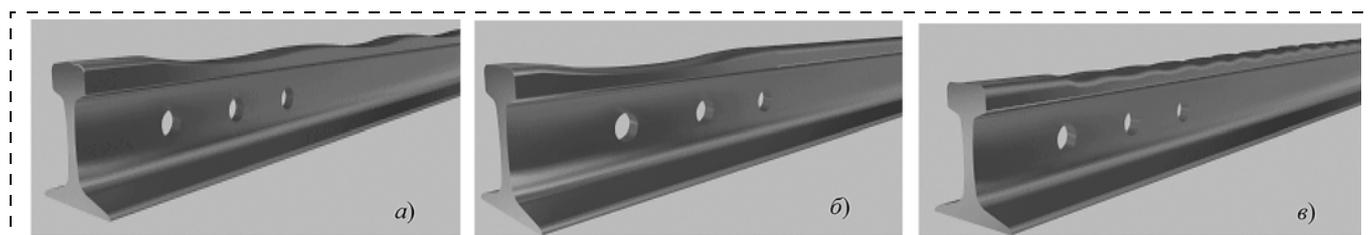


Рис. 8. Дефекты рельсового пути:

а — волнообразная деформация головки рельса; б — смятие головки рельса; в — рифли

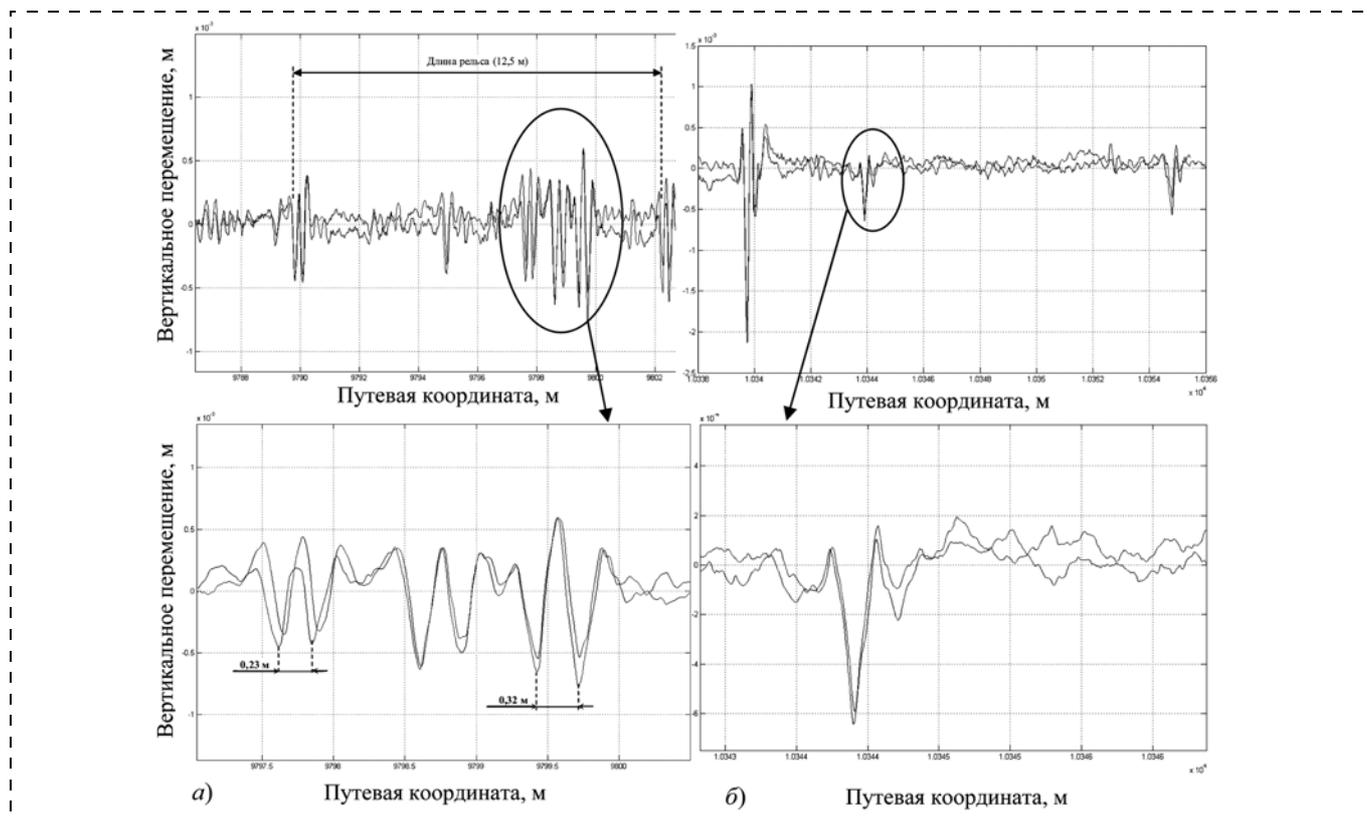


Рис. 9. Дефекты рельсовых нитей:

a — волнообразные деформации, *б* — смятие головки рельса

На выделенных участках рис. 9 между двумя рельсовыми стыками наблюдаются деформации рельса с амплитудами порядка 1 мм: волнообразные деформации или рифли (рис. 9, *a*), и смятие головки рельса на рис. 9, *б*.

Заключение

Результатом данной работы стало подтверждение возможности микромеханических датчиков (без коррекции от внешних измерителей) в определении просадок, а также показана целесообразность продолжения научных исследований по определению таких дефектов рельсового пути, как волнообразная деформация, смятие головки рельса и рифли.

Использование микромеханических инерциальных датчиков позволяет реализовывать на практике измерения в условиях динамического взаимодействия железнодорожного состава и рельсового пути. Это дает возможность совершенствовать существующие способы контроля состояния нижнего строения пути и предлагать новые:

- контроль угловых скоростей колесных пар тележки вокруг вертикальной оси (рысканье в колее) и некомпенсированных вертикальных и поперечных линейных ускорений буксовых узлов (в точке контакта колесо—рельс) для получения информации о состоянии пути на криволинейных участках, а также в зонах стыковых соединений и стрелочных переводов;
- реализация измерений коротких вертикальных неровностей (просадок с длиной менее 2,5 м) с погрешностью не более 1 мм — в рамках модернизации используемых в настоящее время хордовых

схем, а также для реализации автоматизированного контроля (например, на базе вагона) качества поверхности катания рельсов, измерение которых в настоящий момент выполняется в основном ручными средствами.

Перспективность внедрения измерительных систем на базе микромеханических датчиков объясняется, в первую очередь, возможностью создания миниатюрных автоматизированных комплексов диагностики и оповещения в режиме on-line, которыми могут быть оснащены локомотивы регулярно курсирующих железнодорожных составов. Такой подход позволит повысить частоту повторных измерений (следовательно, и оперативность обнаружения дефектов) интенсивно эксплуатируемых участков пути и выявить тенденции в появлении и развитии дефектов.

Список литературы

1. **Боронахин А. М., Олейник Л. Н., Филипеня Н. С.** Малогабаритная интегрированная система диагностики рельсового пути // Гироскопия и навигация. 2009. № 1 (64). С. 63—74.
2. **Боронахин А. М., Гупалов В. И., Филипеня Н. С.** К вопросу о синтезе путеизмерительных комплексов нового поколения // Железные дороги мира. 2004. № 8. С. 44—48.
3. **Боронахин А. М., Иванов П. А., Суров И. Л.** Исследование погрешностей триады микромеханических гироскопов с использованием малогабаритного двухосного стенда // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 1. С. 35—41.
4. **Русинский В. З., Лесючевский В. М., Литманович Ю. А., Столбов А. А.** Алгоритм калибровки трехосного блока акселерометров, предназначенного для использования в БИНС // Гироскопия и навигация. 2000. № 4. С. 86.
5. **Инструкция** по расшифровке лент и оценке состояния рельсовой колеи по показаниям путеизмерительного вагона ЦНИИ-2 и мерам по обеспечению безопасности движения поездов: ЦП 515. Утв. МПС 14.10.1997 г. М.: МПС, 1999.

SIMEXPO '2010 Scientific Instrument Manufacturing

4-ая Международная специализированная выставка приборов и оборудования для научных исследований «SIMEXPO – Научное приборостроение – 2010»

«SIMEXPO – Научное приборостроение – 2010» – единственное в России уникальное выставочное мероприятие, дающее возможность специалистам ознакомиться с научными разработками и новейшими технологиями в приборостроении, применяемыми в различных областях науки и промышленности в рамках одной специализированной выставки.

27–30 сентября 2010 года

**ЦВК «ЭКСПОЦЕНТР», г. Москва,
Павильон 7, Зал 4**

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ РАЗДЕЛЫ – 2010:

- Научное и технологическое оборудование
- Компоненты и материалы для производства приборов, оборудования и систем
- Элементная база и узлы, комплектующие
- Компьютерные технологии в приборостроении, софт
- Средства автоматизации и интерпретации результатов
- Средства обеспечения электромагнитной совместимости
- Средства и системы автоматизации (промышленных процессов)

ОРГАНИЗАТОРЫ:

- Приборная комиссия Российской академии наук
- Компания «И. Джей Краузе энд Эсоушиэтс»
- совместно с ЗАО «ЭКСПОЦЕНТР»

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РАЗДЕЛЫ ВЫСТАВКИ:

Приборы, оборудование и системы для научных исследований: измерительные • контрольно-измерительные • испытательные • лабораторные • аналитические • приборы контроля и диагностики



NEW!

В 2010 году в рамках выставки пройдет СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЙ САЛОН приборов, оборудования и систем промышленного применения IMEEX – 2010!

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РАЗДЕЛЫ САЛОНА:

Приборы, оборудование и системы промышленного применения: измерительные • контрольно-измерительные • испытательные • лабораторные • аналитические • приборы контроля и диагностики

Приглашаем все предприятия и организации, заинтересованные в развитии данной отрасли, в продвижении своей продукции и установлении деловых контактов и партнерских отношений принять активное участие в «SIMEXPO – Научное приборостроение – 2010»!

ЗАЯВКИ НА УЧАСТИЕ ПРИНИМАЮТСЯ
до 02 сентября 2010 года в Дирекции выставки:
Тел. (499) 135-12-46, 135-12-47, факс (495) 223-22-69
www.simexpo.ru, E-mail: Forum@simexpo.ru



Научно-промышленный форум «ТЕХНИЧЕСКОЕ ПЕРЕООРУЖЕНИЕ МАШИНОСТРОИТЕЛЬНЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ РОССИИ. СПЕЦИАЛЬНЫЕ ЛАЗЕРНЫЕ, ОПТИЧЕСКИЕ И НАНОТЕХНОЛОГИИ»

Уважаемые господа!

С 19 по 21 октября 2010 года в Екатеринбурге состоится **Научно-промышленный Форум "Техническое перевооружение машиностроительных предприятий России. Специальные лазерные, оптические и нанотехнологии"**, в рамках которого будут проведены научно-практические конференции, посвященные вопросам: технического перевооружения, специализации и кооперации машиностроительных предприятий, специальным лазерным и оптическим технологиям, применению нанотехнологий и наноматериалов в машиностроении, а также **специализированная выставка "Станкостроение. Лазерные, оптические и нанотехнологии—2010"**.

Ежегодно, начиная с 2006 года, в Форуме принимают участие компании из стран ближнего и дальнего зарубежья — лидеры мирового станкостроения и металлообработки, а также предприятия производители и поставщики отечественного оборудования и инструмента. Успешно зарекомендовав себя в профессиональной среде, Форум стал одним из крупнейших на Урале проектов в этой сфере.

Организаторы Форума и выставки: Союз предприятий оборонных отраслей промышленности Свердловской области и Союз машиностроительных предприятий Свердловской области, Объединение "Универсальные выставки".

При поддержке: Правительства Свердловской области, Администрации города Екатеринбурга, Международной научно-технической организации "Лазерная Ассоциация", Общероссийской общественной организации "Союз машиностроителей России".

В Форуме и выставке 2009 года приняли участие 80 компаний из 7 стран. Форум отличался значительным ростом участия зарубежных компаний. Активное участие в нем приняли компании из Германии, Франции, Италии, Чехии, Болгарии. Зарубежное станкостроение представили компании: "VEMAS-Verbundinitiative Maschinenbau Sachsen", "Auerbach Maschinenfabrik GmbH", "GalvanoTechnik Leipzig GmbH", "HÖRMANN-RAWEMA GmbH", "KUKA Systems GmbH", "MIKROMAT

Präzisionswerkzeugmaschinen GmbH", "NILES-SIMMONS GmbH", "Profiroll Technologies GmbH", "StarragHeckert GmbH", "Viameca", "Meyer France", "Acrotecna".

В экспозиции были представлены также ведущие российские предприятия, такие как "Алапаевский станкостроительный завод", "Средневожский станкостроительный завод", "Саста" — станкозавод (Рязанская обл., г. Сасово), "Липецкий станкозавод "Возрождение", "Ивтехсервис", "Джет Систем РУ", "Ирлен-Инжиниринг" (г. Санкт-Петербург), "Инжек", Автогенмаш", "Градиент-Инсталл", "Кировоградский завод твердых сплавов", "Ковосвит-Русь", "Лапик" (г. Саратов), "Уралпромкомплект", "Станкообразив", "Уралпром-Импекс", "Обнинский центр порошкового напыления", "РЦЛ", "Уральский лазерный центр", "УралНИТИ", "УралЛИТЦ" и другие.

Возможность ознакомиться с последними достижениями в технологиях металлообработки, инновационным оборудованием, предлагаемым ведущими станкостроительными компаниями мира, привлекает на Форум большое число деловых посетителей. В 2009 году в работе Форума приняли участие более 2000 специалистов предприятий и организаций ОПК и машиностроения.

Рекламная кампания мероприятия предусматривает размещение информации в специализированных изданиях. Приглашаем принять участие в работе выставки и Форума. Предлагаем сотрудничество на условиях взаимозачетов. В обмен на размещение рекламных материалов — участие в выставке "Станкостроение-2010". Участие может быть в любой форме: очное, заочное, рекламный лист в официальном каталоге участников выставки. Сумма оказываемых услуг равнозначна.

Предлагаем также рассмотреть вопрос информационного спонсорства.

Пакет "Информационная поддержка" — 80 тыс. руб. То есть фирма оказывает рекламно-информационные услуги на эту сумму. Объединение "Универсальные выставки" в рамках медиа-плана обязуется выполнить следующее:

- ❖ разместить логотип фирмы на пригласительных билетах;
- ❖ на обложке каталога участников выставки;
- ❖ на растяжках (не менее 4 шт.);
- ❖ размещение баннера на сайте Объединения "Универсальные выставки";
- ❖ предоставить рабочее место для участия в выставке — 3 м²;
- ❖ разместить рекламный щит или флаг фирмы в экспозиции выставки;
- ❖ разместить рекламный модуль А4, ч/б в официальном каталоге выставки.

*С уважением и надеждой на сотрудничество,
зам. директора по рекламе Объединения
"Универсальные выставки"
Мальцева А. В.*



Вторая международная специализированная выставка

ИННОВАЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ

1 - 3 марта, 2011

Москва, МВЦ Крокус Экспо, павильон 1, зал 1

ОРГАНИЗАТОР:

Выставочная компания "Мир-Экспо"



ПРИ ПОДДЕРЖКЕ:

Института металлургии и материаловедения
им. А.А. Байкова Российской Академии Наук,
Союза Термистов России, Союза производителей композитов.

ОСНОВНАЯ ЦЕЛЬ ВЫСТАВКИ:

Проведение мероприятия, способствующего экспонентам в налаживании новых деловых контактов и партнерских отношений, развитию и внедрению инновационных материалов и технологий в различных отраслях промышленности.

ОСНОВНЫЕ РАЗДЕЛЫ:

- Магниты
- Функциональные наноматериалы
- Высокочистые вещества
- Техническая керамика
- Редкоземельные металлы

ДЕЛОВАЯ ПРОГРАММА:

2 марта 2011 г. в МВЦ "Крокус Экспо", павильон 1, зал 1, в рамках выставки проводится
Вторая научно-практическая конференция "Перспективы использования инновационных материалов и технологий в промышленности".

ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА:



Оргкомитет: ООО «Выставочная компания «Мир-Экспо»

Россия, 115533, Москва, проспект Андропова, 22

Тел./факс: 8 499 618 05 65, 8 499 618 36 83, 8 499 618 3688

imt@mirexpo.ru | www.mirexpo.ru

Belous A. I., Gasenkova I. V., Drozd S. E., Konnov E. V., Mukhurov N. I., Belous V. A. *Technological Variant of Realization of the Design of Capacity Voltage Converter LSIC for MEMS Sensors* 2

In the article there are examined one of variants of constructive — technological construction and creation of capacity-voltage converter LSIC for electronic circuit of general application MEMS sensor. The suggested block diagram LSIC sensor can be used for making MEMS with capacitive output from a sensitive element.

Keywords: optimization of parameters MEMS sensors, capacity-voltage converter, integrated circuits, designs, technology

Anikin Yu. A., Kloss Yu. Yu. , Martynov D. V., Tcheremissine F. G. *Computer Simulation and Analysis of the Knudsen experiment of the 1910 year* 6

In 1910 Martin Knudsen studied the thermal creep effect in a cylindrical pipe with an applied temperature gradient. The researcher developed the device that could work as a pump under certain conditions. This invention has found a practical interest in the modern nano- and microtechnologies. In this work the Knudsen experiment is repeated by means of computer simulation of the kinetic Boltzmann equation. The results obtained are compared.

Keywords: Knudsen pump, simulation, kinetic Boltzmann equation, unstructured grids, projection method

Petrov V. V., Nazarova T. N., Kopilova N. F., Zabluda O. V., Kisilev I., Bruns M. *Study of Physical and Chemical, Electrophysical Properties and Gas Sensitive Characteristics of $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ Nanocomposite Films* . . . 15

In the work formation of $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ thin sol-gel films was studied. Investigation of their physical and chemical and electrophysical properties were carried out. Gas sensitive characteristics also were studied. It is defined that the sensor on the base of $\text{SiO}_2\text{—SnO}_x\text{—CuO}_y$ films shows the selective sensitivity to NO_2 in a range of working temperatures 100—200 °C.

Keywords: sol-gel method, gas-sensitive material, nitrogen dioxide

Glukhova O. E., Slepchenkov M. M. *Electronic and Elastic Properties of Graphane — New Material of Electronics: Quantum Chemical and Empirical Study* 22

It is established that the unsaturated by hydrogen nanoparticle of graphane (graphane) is elastic material by help of the molecular-mechanical method. At the same time the modulus of cushioning of graphane depends on its size that allows to define the linear parameter of graphane with maximum Young modulus for this material. Electronic structure of graphane nanoparticles is researched by semiempirical method PM3. It is established that graphane nanoparticles one can to characterise as insulator at that its band gap of the electronic spectrum decreases with the length growing and tend to defined value. At the same time ionization potential also decreases. The comparative analysis of calculated amounts with analogous parameters of single layer nanotubes is carried out.

Keywords: graphane nanoparticle, pseudo Young modulus, axial compression, band gap spectrum

Malishev A. V. *Features of Lithium-Titanium Ferrite Ceramics Polarization Properties* 24

For the first time loop-shaped electrical polarization dependences from electric field intensity (dielectric hysteresis) are registered for lithium-titanium ferrite ceramics. Temperature evolution of a hysteresis curve parameters is explored for ferrite samples. The received results can be interpret in sight of Maxwell-Vagner relaxation polarization or in sight of polarization connected with ferroelectrics state forming in ferrite electrical subsystem.

Keyword: dielectric relaxation polarization, dielectric hysteresis, ferroelectricity

Shtennikov V. N. *Problems and Prospects of Use of Free Materials from Lead in the Military and Space Technics* 27

Application free from lead of technology of installation of electronic devices has created many new problems. It is necessary for the internal enterprises and the organisations to make active works on liquidation of negative consequences of introduction of free technologies from lead.

Keywords: the device, free technology from lead, soldering, a component, solder, the printed-circuit board

Kostsov E. G., Sokolov A. A. *Microelectromechanical Fuel Injector for Diesel Engines*. 30

The investigation of the possibilities of effective electrostatic actuators construction, i. e. drives manufactured by microelectronic technique and fuel injectors for diesel engines. The operation of actuators with high specific energy, up to $0.3\text{--}3\text{ J/m}^2$ is based on electromechanical energy conversion in nanoscale gaps (5–200 nm), separating the surface of moving electrode and the ferroelectric layer.

The nozzles are able to bring fuel under high pressure over 100 MPa and for a short time, hundreds of microseconds or less. Compared to the modern piezoelectric injectors they have much smaller dimensions and weight, as well as they enable to reduce the time of injection.

Keywords: diesel engines, fuel injectors, MEMS, electrostatic micromotor, high energy output, electromechanical energy conversion

Bobrov A. A., Popkov A. F., Dyuzhev N. A., Kulagin N. E., Makhboroda M. A., Mednikov A. M. *Calculation of the Thermal Mass Flow Membrane Sensor*. 34

The paper is devoted to the design principles and main problems of developing of integer thermal anemometer fabricated by the usage of silicon membrane technology. Physical model of the developed anemometer construction is described. Theoretical analysis of temperature regimes of functioning of thermo-resistive transducer in the stationary mode and relation of output characteristics to the mostly important construction parameters are discussed. Calculated anemometer characteristic is compared with the results of experimental measurements.

Keywords: MEMS-technology, gas flow sensor, temperature-compensated membrane, dynamic range of measurements, flow speed

Dragunov V. P., Ostertak D. I. *Electrostatic Interactions in MEMS with Plane-Parallel Electrodes. Part II. Estimation of electrostatic forces*. 40

The different approaches for calculation of electrostatic force components, acting between the electrodes of plane capacitor, composed of two identical rectangular or round electrodes, are compared. The analytical expressions for estimations of electrostatic force components are presented. The deviations in estimations of electrostatic force components, acting between the electrodes due to the variation of interelectrode gap and overlapping area of the electrodes, are calculated.

Keywords: MEMS, electric capacitance, plane capacitor, fringing field effect, electrostatic force components

Boronahin A. M., Podgornaya L. N. *Micromechanical Sensors Application for Railway Track Diagnostic*. . . 47

The possibility of the micromechanical accelerometers and gyroscopes application for the railway track diagnostics is considered. The algorithm of railroad irregularities definition is developed. The results of the system experimental passage are given.

Keywords: micromechanical accelerometer, micromechanical gyroscope, inertial measurement unit, railroad diagnostics, railroad defects

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, Стромьинский 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. Позорелова*. Технический редактор *Е. М. Патрушева*. Корректор *Т. В. Пчелкина*

Сдано в набор 21.06.2010. Подписано в печать 20.07.2010. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,66. Заказ 571. Цена договорная

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