

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 2 (127) ✧ 2011

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.
Тимошенков С. П.
Тодуа П. А.
Шубарев В. А.

Отв. секретарь

Лысенко А. В.

Редакция:

Григорин-Рябова Е. В.
Чугунова А. В.

Учредитель:
Издательство
"Новые технологии"

СОДЕРЖАНИЕ

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Гавриленко В. П., Митюхляев В. Б., Раков А. В., Тодуа П. А., Филиппов М. Н., Шаронов В. А. Влияние контаминации в РЭМ на профиль рельефных элементов нанометрового диапазона. 2

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

Костров А. И. Макромодель ячейки памяти с магнитным туннельным переходом 7

Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Рогозин О. А., Рябченков В. В., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Проблемно-моделирующая среда для расчетов и анализа газокинетических процессов 12

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Ковалевский А. А., Строгова А. С., Плякин Д. В., Цыбульский В. В., Борисевич В. М. Трансформация германосиликатного стекла в нанокластеры германия 18

Тимошенков С. П., Гаев Д. С., Бойко А. Н., Горшкова Н. М. Исследование и разработка газопоглощающих покрытий для МЭМС 24

Чигирев П. М. Применение графена в электронной технике 28

Дудин А. А., Кустов Е. Ф. Геометрические и физические свойства наночастиц магнитных ферритов 30

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

Корпухин А. С., Бабаевский П. Г., Жуков А. А., Козлов Д. В., Смирнов И. П. Влияние условий формирования и толщины слоев на термомеханические характеристики полиимид-кремниевых упруго-шарнирных балок тепловых актюаторов. 34

Войцеховский А. В., Несмелов С. Н., Кульчицкий Н. А., Мельников А. А. Неохлаждаемые микроболометры на основе поликристаллического SiGe для инфракрасного диапазона 41

Мальшев К. В., Чернышев С. Л. Вольт-амперные характеристики фигурных AlGaAs сверхрешеток. 48

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

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

УДК 621 382

В. П. Гавриленко^{1, 2}, д-р физ.-мат. наук, зам. ген. дир-ра,

В. Б. Митюхляев¹, канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотр.,

А. В. Раков¹, д-р физ.-мат. наук, проф., гл. науч. сотр.,

П. А. Тодуа^{1, 2}, д-р физ.-мат. наук, проф., ген. директор,

М. Н. Филиппов^{1, 2, 3}, д-р физ.-мат. наук, проф., гл. науч. сотр.,

В. А. Шаронов^{1, 2}, аспирант
E-mail: fgupnicpv@mail.ru

¹ Научно-исследовательский центр по изучению свойств поверхности и вакуума, Москва,

² Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный МО,

³ Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва

ВЛИЯНИЕ КОНТАМИНАЦИИ В РЭМ НА ПРОФИЛЬ РЕЛЬЕФНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НАНОМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА

Поступила в редакцию 14.10.10

Представлены результаты исследований влияния контаминации в РЭМ S-4800 на профиль рельефных элементов меры нанометрового диапазона МШПС-2.0К. Показано, что в результате электронного облучения изменяется форма профиля рельефных элементов, представлены зависимости их параметров от дозы электронного облучения для разных режимов облучения.

Ключевые слова: контаминация, растровый электронный микроскоп, рельефные элементы, мера ширины и периода МШПС-2.0К

Введение

Измерение параметров объектов в растровом электронном микроскопе (РЭМ) сопровождается электронно-стимулированным образованием контаминационной пленки на поверхности исследуемого образца [1]. Эффект контаминации обусловлен полимеризацией углеводородных молекул, адсорбированных поверхностью. Считается [2], что данный эффект можно уменьшить, но нельзя от него полностью избавиться. Образование контаминационной пленки на рельефных элементах поверхности спо-

собно изменить их форму, что необходимо учитывать, когда измеряются объекты нанометровых размеров. Особую остроту эта проблема приобретает в случае стандартных образцов нанорельефа поверхности, предназначенных для калибровки [3] и проверки [4] растровых электронных микроскопов, поскольку эффект контаминации может изменить метрологические характеристики стандартного образца. Так, например, в работе [5] исследована проблема контаминационно-обусловленной деградации стандартного образца NIST, выполненного в виде шаговой структуры на кремнии, и предложена методика по оценке допустимого числа измерений с использованием указанного стандартного образца.

Данная работа посвящена определению изменения размеров элементов нанорельефа поверхности в результате контаминации на примере меры ширины и периода МШПС-2.0К [6]. Рассмотрены различные подходы к оценке контаминации.

Условия эксперимента

Используемая в наших экспериментах мера ширины и периода МШПС-2.0К изготовлена на подложке из монокристаллического кремния, ориентированного по плоскости (100), методом фотолитографии с последующим травлением. Мера состоит из пяти одинаковых модулей, каждый из которых включает в себя три однотипные шаговые структуры, обозначаемые I—I, II—II и III—III. В свою очередь, каждая из шаговых структур имеет номинальное значение шага 2 мкм и состоит из 10 выступов, разделенных канавками. РЭМ-изображение одного модуля меры представлено на рис. 1.

Выступы трапецеидальной формы сформированы в подложке методом анизотропного травления. Боковые стенки выступов совпадают с плоскостями {111} (рис. 2). Таким образом, выступы имеют в сечении вид равнобедренной трапеции с углом при нижнем основании 54,7°.

Исследования влияния контаминации на параметры профиля меры проводились с помощью РЭМ S-4800 (фирма *Hitachi*), который оснащен автоэмиссионным катодом холодного типа и вакуумной системой, включающей турбомолекулярный насос и масляный форвакуумный насос. Для получения РЭМ-изображений в режиме вторичной электронной эмиссии и создания контаминационной пленки была использована энергия электронного пучка 20 кэВ при токе 0,2 нА. До начала эксперимента катод прогревался в течение 3 ч, чтобы выйти на стабильный рабочий режим, а температура в помещении поддерживалась на уровне (22 ± 0,5°) для минимизации дрейфа электронных и механических элементов.

Были реализованы два режима облучения. В первом режиме облучению подвергались выступы 5 и 6 шаговой структуры III—III путем многократного не-

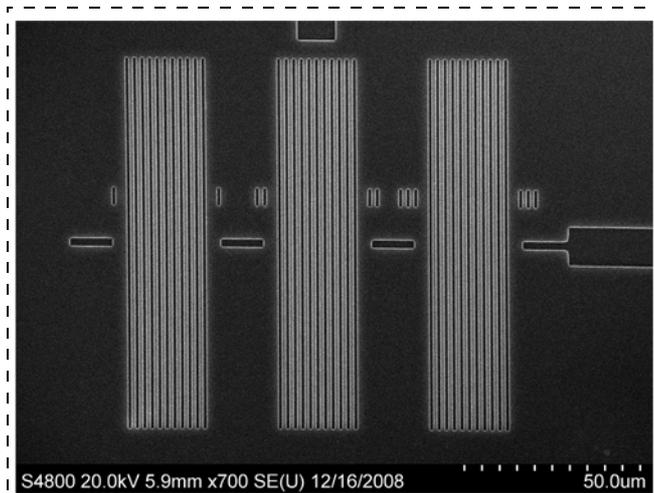


Рис. 1. РЭМ-изображение одного из модулей меры МШПС-2.0К

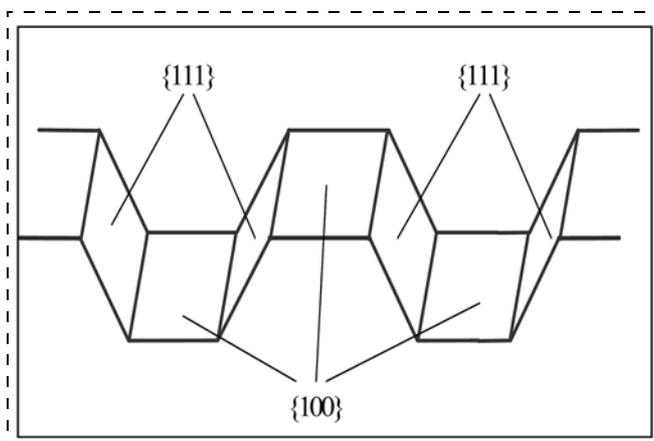


Рис. 2. Схематическое изображение рельефной структуры меры МШПС-2.0К

прерывного сканирования в режиме медленной развертки (40 с/кадр), причем размер раstra составлял $4,3 \times 3,2$ мкм (увеличение РЭМ $\times 30$ К). Область облучения располагалась симметрично относительно выступов 5 и 6, поэтому левый и правый края раstra облучения не захватывали соседние (4 и 7) выступы. Длительность непрерывного облучения составляла 30 мин. После этого корректировали положение ручки тонкой фокусировки на участке, находящемся достаточно далеко от области облучения (более 15 мкм) и далее получали РЭМ-изображения с увеличением $\times 30$ К, включающие пары выступов 5—6 и 8—9, размерность кадра составляла 2560×1920 пикселей, длительность — 40 с. Указанный цикл, состоящий из облучения в течение 30 мин и получения двух РЭМ-изображений, последовательно повторялся несколько раз с тем, чтобы общее время облучения выступов 5—6 составило 3 ч. Перед первым циклом облучения также получали аналогичные два РЭМ-изображения с увеличением $\times 30$ К

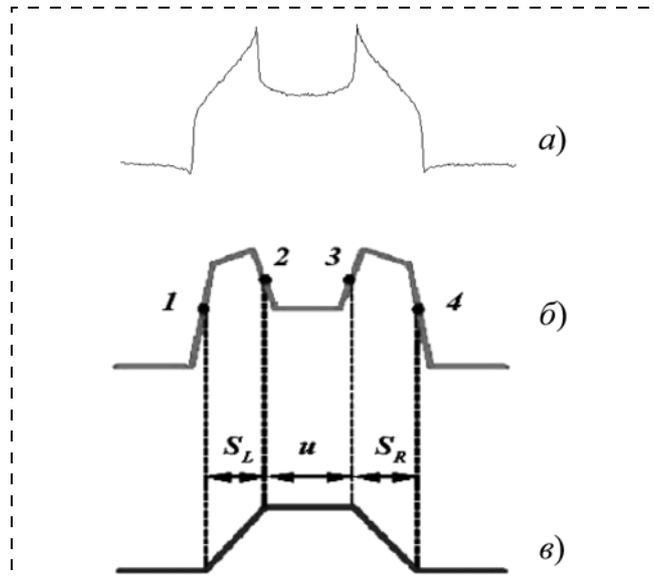


Рис. 3. Видеофильм РЭМ-сигнала (а), его кусочно-линейная аппроксимация (б) для выступа трапецидальной формы в кремнии (в)

выступов 5—6 и 8—9. Таким образом, первый режим облучения можно назвать квазинепрерывным.

Во втором режиме облучению подвергались выступы 9 и 10 шаговой структуры II—II того же модуля меры, которые находились на расстоянии примерно 25 мкм от первой облучаемой группы. Облучение происходило при аналогичных параметрах электронного пучка: энергия электронов 20 кэВ, ток пучка 0,2 нА, увеличение $\times 30$ К, длительность развертки 40 с. Расчеты по Канае и Окаеме [7], приведенные ниже, показали, что максимальный латеральный пробег электронов с энергией 20 кэВ в кремнии не превышает 3 мкм, что исключает взаимное влияние двух облучаемых областей друг на друга. Облучение во втором режиме выступов 9 и 10 структуры II—II происходило следующим образом: после окончания развертки с номером N была сделана пауза в облучении длительностью τ в соответствии с таблицей, а полученное РЭМ-изображение заносилось в память компьютера. Второй режим облучения будем называть прерывистым.

Геометрические параметры профиля выступов меры определяли по полученным РЭМ-изображениям в соответствии с моделью [8]. По указанной модели для трапецидального рельефного элемента в кремнии (профиль которого представлен на рис. 3, в) реальный РЭМ-видеосигнал (рис. 3, а) аппроксимируется кусочно-линейной функцией, представленной на рис. 3, б. Точками 1—4 на рис. 3, б указаны середины линейных участков профиля видеосигнала, которые соответствуют характерным точкам профиля элемента рельефа.

Обработку РЭМ-изображений проводили в автоматическом режиме по заданному алгоритму с помощью компьютерной программы, позволяющей выполнить усреднение по группе строк в целях улучшения соотношения сигнал/шум. Вычислению подлежали параметры профиля выступа: ширина верх-

№ развертки	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Длительность паузы τ , мин	2	30	2	30	2	30	2	30	2	30	2	—

него основания u , левая проекция наклонной стенки S_L и правая проекция наклонной стенки S_R .

Измерения шага проводили с помощью программы "CD Measurement Function", входящей в комплект программного обеспечения РЭМ S-4800, по расстоянию между максимумами, соответствующими эквивалентным элементам шаговой структуры меры. Численная обработка изображения проводилась после усреднения по 10 строкам для уменьшения вклада шумов. При этом в качестве шага рассматривались три варианта: расстояние между левыми эквивалентными точками шаговой структуры (T_L), расстояние между правыми эквивалентными точками шаговой структуры ($T_{пр}$) и среднее из указанных расстояний ($T_{ср}$).

Экспериментальные результаты

Режим облучения № 1. Обработка полученных РЭМ-изображений позволила построить зависимости значений ширины верхнего основания исследуемых выступов 5, 6, 8, 9 структуры III—III (рис. 4) от дозы электронного облучения. Как следует из рис. 4, происходит уширение верхнего основания всех исследуемых выступов, но в разной степени. Для выступов 5 и 6 это уширение происходит примерно с одинаковым темпом, что соответствует симметричной картине облучения этих выступов. В наибольшей степени процесс контаминации способствует уширению выступа 8, хотя он отстоит от края облучаемой области на расстоянии 3 мкм, а с минимальной скоростью растет ширина верхнего основания выступа 9.

Динамика изменения ширины проекции боковой стенки выступов представлена на рис. 5, где верхняя кривая соответствует значениям средней проекции боковых стенок ($S_L/2 + S_R/2$) для выступов 5 и 6, а нижняя кривая — средней проекции боковых стенок выступа 8. Общая тенденция заключается в уменьшении проекции боковых стенок выступов меры в результате электронного облучения, т. е. контаминация на боковой стенке растет неравномерно: у основания выступа в меньшей степени, чем при вершине. Значение проекции боковой стенки выступа меры является

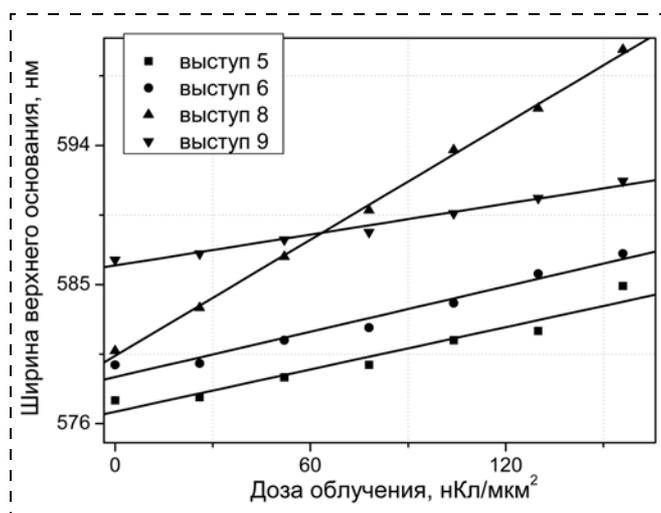


Рис. 4. Зависимость ширины верхнего основания выступов 5, 6, 8 и 9 структуры III—III от дозы электронного облучения в режиме № 1 (квазинепрерывный)

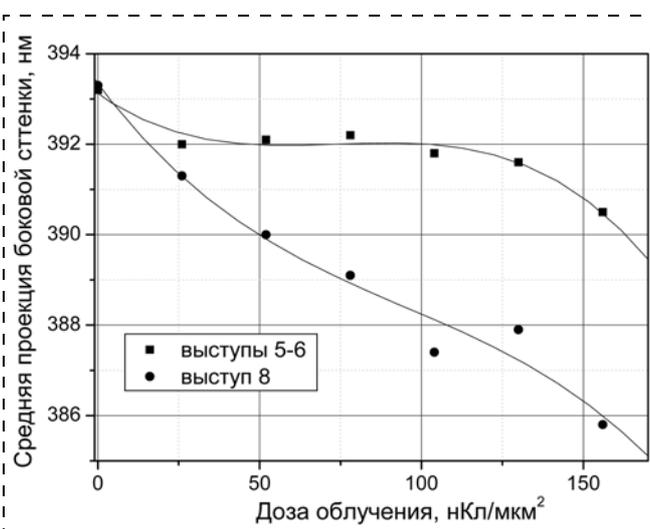


Рис. 5. Зависимость средней проекции боковой стенки для выступов 5—6 и выступа 8 структуры III—III от дозы электронного облучения в режиме № 1 (квазинепрерывный)

важным параметром, который используется при калибровке [3] и поверке [4] РЭМ.

Сравнивая рис. 4 и рис. 5, можно заключить, что ширина верхнего основания выступов изменяется быстрее, чем проекция боковой стенки.

Зависимости изменения шага от дозы электронного облучения для пар выступов 5—6 и 8—9 показаны на рис. 6. На этом рисунке представлены данные по изменению значения шага, определенного как расстояния между максимумами, расположенными в левой области верхнего основания выступа (T_L), в правой области ($T_{пр}$) и среднего значения ($T_{ср}$), где $T_{ср} = (T_L + T_{пр})/2$. Изменение среднего значения шага для выступов 5—6 не превышает 0,5 нм при облучении, что можно объяснить двумя причинами: 1) одинаковым темпом контаминации для выступов 5 и 6 (что подтверждает рис. 4) ввиду симметричного характера их облучения; 2) стабильностью увеличения РЭМ. Результаты изменения шага для выступов 8—9 свидетельствуют о том, что

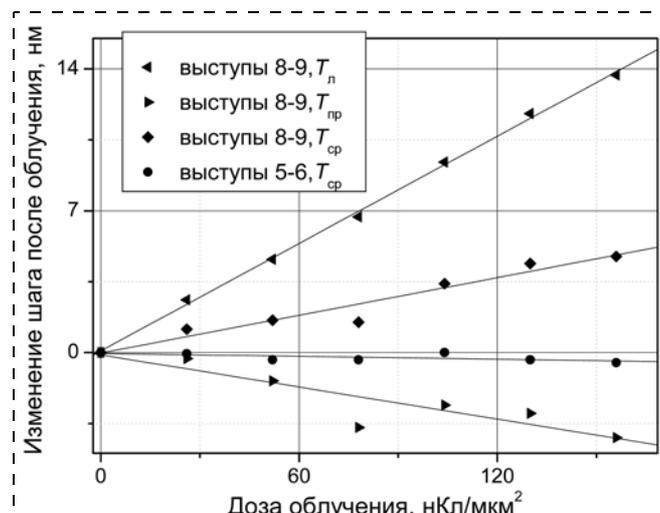


Рис. 6. Зависимость изменения шага от дозы электронного облучения для двух пар выступов 8—9 и 5—6 шаговой структуры III—III

контаминация для этих выступов существенно различна, что также подтверждается рис. 4.

Режим облучения № 2. Для данного режима облучения выступов 9–10 в структуре П–П (см. рис. 1) были получены дозовые зависимости, представленные на рис. 7 и рис. 8 соответственно для ширин верхнего основания выступов 9, 10 и средней проекции боковой стенки для этих выступов. Среднее значение шага $(T_{л}/2 + T_{пр}/2)$ для указанных выступов остается постоянным в пределах ± 1 нм для всех измерений. Следует отметить, что, как и для режима облучения № 1, ширина верхнего основания изменяется быстрее, чем проекция боковой стенки выступа.

При сравнении двух режимов облучения и изменения параметров облучаемых выступов видна существенная разница в дозовых зависимостях (см. рис. 4 и рис. 7). При режиме облучения № 2 (который характеризуется наличием пауз в облучении) темп изменения ширины верхнего основания является более высоким, отличаясь более чем на порядок. Также существенно отличаются дозовые зависимости проекций боковых стенок.

Обсуждение полученных результатов

Для анализа полученных результатов рассмотрим границы области контаминации с точки зрения взаимодействия электронного зонда с образцом. Согласно данным [9], основную роль в электронно-стимулированном осаждении углеводородов играют электроны с энергией от 5 эВ до нескольких сотен электрон-вольт. Таким образом, контаминация обусловлена медленными вторичными электронами, которые генерируются как первичным пучком, так и обратнорассеянными электронами при их выходе на поверхность образца.

Радиус r_b области выхода через поверхность обратнорассеянных электронов для сфокусированного первичного пучка можно оценить по Канайе и Окаяме [7]:

$$r_b = \frac{CR\gamma}{1 + \gamma}, \quad (1)$$

где $C = 1,1$; параметр γ и максимальный пробег электронов R (в мкм) определяются выражениями

$$\gamma = 0,187Z^{2/3}, \quad (2)$$

$$R = \frac{2,76 \cdot 10^{-7} AE^{5/3}}{\rho Z^{8/9}} \times \frac{(1 + 0,978 \cdot 10^{-6} E)^{5/3}}{(1 + 1,957 \cdot 10^{-6} E)^{4/3}}, \quad (3)$$

где Z — атомный номер материала подложки; ρ — ее плотность (в г/см³); A — молярная масса (в г/моль); E — энергия падающих электронов (в эВ).

Расчеты по формуле (1) в условиях нашего эксперимента дают значение радиуса области выхода вторичных электронов для стационарного электронного зонда $r_b = 2,64$ мкм. Таким образом, при облучении выступов 5–6, левая половина выступа 8 попадает в край области выхода вторичных электронов, а выступ 9 не попадает. Это позволяет объяснить существенное увеличение шага для выступов 8–9 с увеличением дозы облучения (см. рис. 6).

Источником контаминационной пленки в РЭМ являются различные молекулы углеводородов типа C_nH_{2n+2} [1]. Под действием электронного облуче-

ния отдельные органические молекулы, локализованные на поверхности образца, приобретают свободные связи, способные соединять соседние молекулы в конгломераты и таким образом формировать пленку на ее поверхности. В работе [2] приведены следующие основные источники органических молекул:

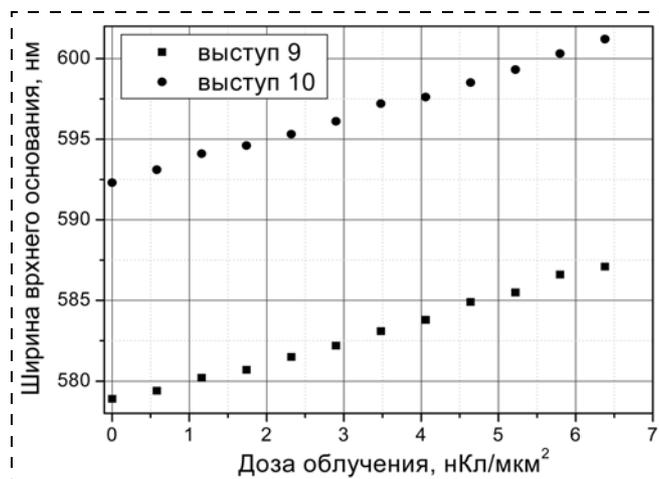


Рис. 7. Зависимость ширины верхнего основания выступов 9 и 10 структуры П–П от дозы электронного облучения в режиме № 2 (прерывистый режим)

- адсорбированные слои углеводородов на самом образце (возникающие при нахождении образца в атмосферных условиях);
- молекулы углеводородов, входящие в состав остаточной атмосферы камеры образцов, источником которых может быть вакуумное масло из насосов откачки (например, диффузионного насоса), резиновые вакуумные уплотнения и адсорбированные слои на стенках камеры.

Процесс контаминации можно описать следующим уравнением в частных производных [10]:

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \frac{p}{(2\pi mkT)^{1/2}} - \frac{n}{\tau_0} + \lambda \nabla^2 n - K, \quad (4)$$

где n — поверхностная плотность адсорбированных молекул массой m ; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; p — парциальное давление молекул углеводородов; τ_0 — постоянная времени десорбции; λ — константа диффузии; K — темп контаминации.

Первый член правой части уравнения (4) обозначает число молекул, падающих на единицу площади, второй член — темп десорбции с поверхности, третий член — процесс поверхностной диффузии.

В соответствии с работой [9], темп контаминации K можно выразить через характерное сечение контаминации σ и плотность потока j медленных вторичных электронов:

$$K = n\sigma j. \quad (5)$$

При наличии условно "безмасляного" вакуума, который обеспечивается в наших условиях турбомолекулярным насосом, мы можем пренебречь первым и вторым членами в правой части (4) и для стационарных условий возбуждения получаем для темпа контаминации

$$K = \lambda \nabla^2 n. \quad (6)$$

Таким образом, темп контаминации определяется поверхностной диффузией углеводородных молекул, а область облучения играет роль их стока.

В случае прерывания электронного облучения наблюдается диффузия углеводородных молекул к области, где происходило облучение:

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \lambda \nabla^2 n, \quad (7)$$

в результате чего их концентрация в этой области возрастает.

Приведенные выше рассуждения позволяют объяснить существенную разницу в дозовых зависимостях ширины верхнего основания облучаемых выступов при разных режимах облучения. Действительно, при непрерывном облучении (режим № 1) диффундирующие по поверхности углеводородные молекулы не успевают дойти до облучаемых выступов, их электронно-стимулированная фиксация на поверхности происходит в поле медленных вторичных электронов, рождаемых обратноотраженными электронами, рассеянными в радиусе порядка 3 мкм от области облучения. Это может объяснить более крутую дозовую зависимость для выступа 8 по сравнению с выступами 5 и 6 (см. рис. 4).

В режиме облучения № 2 паузы в облучении (2 мин и 30 мин) вероятно превышают характерные времена диффузии, необходимые для выравнивания поверхностных концентраций углеводородов в области облучения и вне ее. Закономерность изменения ширины верхнего основания выступа 9 структуры III—III (см. рис. 4) практически совпадает с таковой для выступов 9 и 10 структуры II—II (см. рис. 7). Это становится понятно, если принять во внимание, что обратнорассеянные электроны, возникающие при облучении выступов 5—6, не доходят до выступа 9, а изменения геометрических параметров выступа 9 структуры III—III обусловлены облучением при получении РЭМ-изображений (всего семь РЭМ-изображений, полученных с интервалом примерно 30 мин).

По совокупности проведенных измерений можно констатировать, что дозовые зависимости ширины верхнего основания и проекции боковой стенки выступов меры, обусловленные контаминацией в РЭМ, существенно зависят от характера набора дозы электронного облучения. Изменения указанных параметров в расчете на единицу дозы облучения существенно выше (более чем на порядок) для прерывистого характера облучения (режим № 2), чем для квазинепрерывного (режим № 1). Поэтому оценки влияния контаминации, выполненные на основе непрерывного облучения меры, как это сделано в работе [5], могут дать завышенные значения допустимого числа измерений в одной области (рекомендованное в работе [5] число — 25 измерений).

С учетом данных рис. 8 была проведена оценка допустимого числа измерений с использованием меры МШПС-2.0К в целях проверки или калибровки РЭМ [3, 4], основываясь на аттестованном значении проекции боковой стенки. Полагая допустимым уход значения проекции боковой стенки не более 1,5 нм, получаем максимальное значение — 12 измерений в одном месте. Учитывая, что конструкция меры МШПС-2.0К позволяет использовать до 30 областей, которые легко идентифицировать (вдоль направляющих линий) и которые

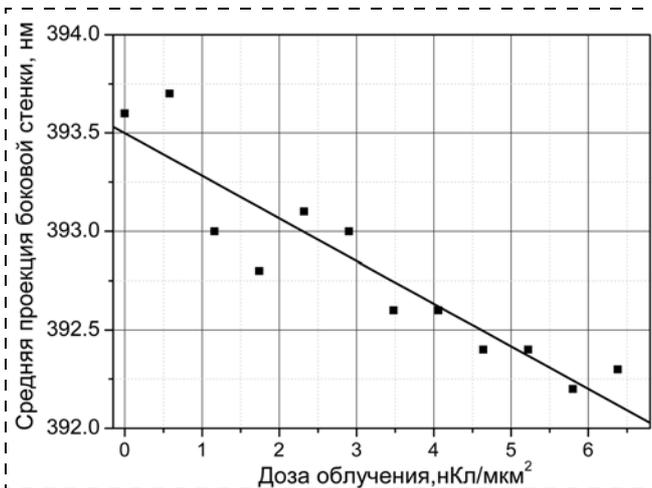


Рис. 8. Зависимость средней проекции боковой стенки выступов 9 и 10 структуры II—II от дозы электронного облучения в режиме № 2 (прерывистый режим).

■ — экспериментальные данные, прямая линия проведена по методу наименьших квадратов

достаточно далеко удалены друг от друга, получаем, что общее допустимое число измерений (калибровок, поверок) с использованием меры МШПС-2.0К равно 360.

Заключение

Контаминация рельефной меры нанометрового диапазона МШПС-2.0К в результате ее длительной эксплуатации в РЭМ способна привести к изменению профиля ее рельефных элементов, при этом наиболее сильно изменяется ширина верхнего основания выступов меры.

Изменение ширины верхнего основания выступов меры в результате контаминации для заданной дозы электронного облучения может увеличиться более чем на порядок в случае наличия пауз в облучении.

Мера МШПС-2.0К допускает до 360 циклов поверки или калибровки РЭМ [4, 5] с использованием аттестованного значения проекции боковой стенки.

Список литературы

1. **Жданов Г. С.** О скорости углеводородного загрязнения объектов в микронных системах // *Поверхность*. 1983. № 1. С. 65—72.
2. **Postek M. T.** An approach to the reduction of hydrocarbon contamination in the scanning electron microscope // *Scanning*. 1996. V. 18, N 4. P. 269—274.
3. **Микроскопы электронные растровые.** Методика калибровки // ГОСТ Р 8.636—2007. М.: Стандартинформ, 2008. 12 с.
4. **Микроскопы электронные растровые измерительные.** Методика поверки // ГОСТ Р 8.631—2007. М.: Стандартинформ, 2007. 12 с.
5. **Tortonesi M., Guan Y., Prochazka J.** NIST-traceable calibration of CD-SEM magnification using a 100 nm pitch standard // *Proc. of SPIE*. 2003. V. 5038. P. 711—718.
6. **Новиков Ю. А., Озерин Ю. В., Плотников Ю. И., Раков А. В., Тодуа П. А.** Линейная мера микрометрового и нанометрового диапазонов для растровой электронной и атомно-силовой микроскопии // *Труды ИОФАН*. 2006. Т. 62. С. 36—76.
7. **Kanaya K., Okayama S.** Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets // *J. Phys. D*. 1972. V. 5, N 1. P. 43—58.
8. **Novikov Yu. A., Ozerin Yu. V., Rakov A. V., Todua P. A.** Method for linear measurements in the nanometre range // *Meas. Sci. Technol*. 2008. V. 18, N 2. P. 367—374.
9. **Silvis-Cividjan N., Hagen C. W., Kruit P.** Spatial resolution limits in electron-beam-induced deposition // *J. Appl. Phys*. 2005. V. 98. P. 084905-1—084905-12.
10. **Reimer L.** Transmission electron microscopy: Physics of image formation and microanalysis // New York: Springer. 1997. P. 492.

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 621.382

А. И. Костров, аспирант,
e-mail: kostrov-s@tut.by
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, Минск

МАКРОМОДЕЛЬ ЯЧЕЙКИ ПАМЯТИ С МАГНИТНЫМ ТУННЕЛЬНЫМ ПЕРЕХОДОМ

Поступила в редакцию 28.08.10

Предложены электрическая макромодель и эквивалентная схема ячейки магниторезистивной памяти на основе магнитного туннельного перехода, переключаемого спин-поляризованным током. В ней использованы нелинейные резисторы для представления параллельного и антипараллельного состояний намагниченности ферромагнитных слоев. Модель ориентирована на применение в системах компьютерного моделирования и проектирования интегральных микросхем. Ее точность и вычислительная эффективность продемонстрированы на примере элемента магниторезистивной памяти.

Ключевые слова: магниторезистивная память, спинтроника, магнитный туннельный переход, моделирование, макромодель, spice

Введение

Открытие эффектов гигантского магнитосопротивления [1] и туннельного магнитосопротивления [2] стимулировало разработку интегральных элементов спинтроники на их основе: магниторезистивной памяти с произвольной выборкой (MRAM) [3, 4], программируемых интегральных схем (ПЛИС), триггеров, регистров, компараторов, биочипов [5, 6]. Однако разработка аналоговых и цифровых схем с использованием ферромагнитных наноструктур ограничена, что объясняется отсутствием устойчивых, эффективных, простых в использовании моделей, которые адекватно моделируют электрические характеристики магнитных туннельных переходов (МТП) и могут легко модифицироваться и встраиваться в программы схемотехнического компьютерного проектирования интегральных микросхем.

Первые попытки реализации макромоделей МТП были осуществлены в работах [7, 8] с применением программы моделирования HSPICE. Однако использование этих моделей не всегда приводило к сходимости расчетов, незначительные модификации подсхем требовали существенных временных затрат для достижения приемлемой сходимости.

К тому же HSPICE содержит набор компонентов, таких как нелинейный резистор, которые в оригинальной программе-симуляторе Berkeley SPICE [9] отсутствуют. Поэтому использование таких моделей осложнялось в SPICE-подобных программах компьютерного проектирования интегральных микросхем.

Предложена устойчивая, эффективная в использовании и настройке, построенная по модульному принципу макромодель ячейки памяти с магнитным туннельным переходом, переключаемым спин-поляризованным током. Ее описание и результаты тестирования в составе блока магниторезистивной памяти представлены в данной статье. В модели используются компоненты программы SPICE, что является достаточным для ее прямого применения в любой системе проектирования интегральных микросхем без создания дополнительных специфических элементов и схем.

Макромодель

Структурная электрическая схема ячейки памяти с МТП представлена на рис. 1. Она состоит из трех модулей: магнитный модуль — формирует гистерезисную характеристику входного тока, модуль хранения двоичного бита — сохраняет направление относительной ориентации магнитомягкого слоя МТП, магниторезистивный модуль — моделирует управляемое напряжением сопротивление в параллельном и антипараллельном состояниях намагниченности ферромагнитных слоев.

Режим хранения моделируется бистабильными состояниями триггера Шмитта, который представлен на рис. 1 как модуль хранения двоичного бита. Входной сигнал триггера Шмитта задается магнитным модулем как импульс ± 5 В (V_{inp}) для установки необходимого уровня выходного сигнала триггера. Магниторезистивный модуль содержит два нелинейных резистора, подключенных параллельно посредством управляемых напряжением ключей (VCS — Voltage Controlled Switch), которые управляются выходным сигналом триггера Шмитта V_{sc} . Ключ VCS, подключенный к параллельному резистору R_p ,

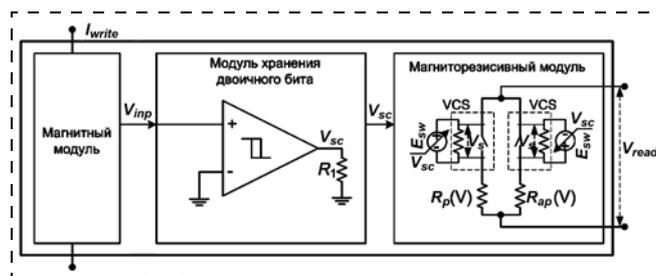


Рис. 1. Модель ячейки памяти с магнитным туннельным переходом

контролируется источником E_{sw} с прямой полярностью, где E_{sw} — источник напряжения, управляемый напряжением (ИНУН). Ключ VCS, подключенный к антипараллельному резистору R_{ap} , управляется таким же ИНУН, но подключенным в обратной полярности. Таким образом, когда один VCS открыт, то другой закрыт, и наоборот. Следовательно, в любой момент времени входная цепь подключена к одному из двух нелинейных резисторов R_p или R_{ap} .

Использование триггера Шмитта с большим коэффициентом усиления и положительной обратной связью может приводить к проблемам сходимости расчетов, о чем указано также в руководстве пользователя программы SPICE. Для исключения проблем сходимости в предложенной макромодели реализована развязка триггера Шмитта от вариаций входных и выходных параметров схемы. Ниже представлено детальное описание всех модулей и элементов макромодели.

Нелинейное сопротивление, зависящее от напряжения. В программах схемотехнического моделирования обычно отсутствует такой элемент, как нелинейный резистор, управляемый напряжением. Эта проблема решается заменой нелинейного сопротивления $R = f(V)$ в параллельное включение обычного резистора R_1 и нелинейного резистора R_2 , сопротивление которого задается регрессионным уравнением. Этот подход проиллюстрирован на рис. 2.

Преобразование, показанное на рис. 2, может быть описано выражением

$$\frac{1}{g(V)} = \frac{1}{f(V)} - \frac{1}{R_1}. \quad (1)$$

Ток, протекающий через сопротивление R_2 , определяется выражением

$$I_{R_2} = V/g(V). \quad (2)$$

Это преобразование может быть представлено источником тока, управляемым напряжением G_1 , который формирует такое же значение тока, который протекает через сопротивление R_2 . С точки зрения электротехники это идентично нелинейному резистору, управляемому напряжением с зависимостью $f(V)$.

В данной реализации зависимость сопротивления от напряжения может быть аппроксимирована функцией [10], удобной для последующей экспоненциальной трехпараметрической регрессии

$$\frac{1}{R_{p(ap)}} = \frac{1}{c_{p(ap)}} + \frac{1}{a_{a(ap)} \exp(-b_{p(ap)} V)}. \quad (3)$$

Низкие индексы p и ap обозначают соответственно параметры для параллельного и антипараллельного направлений намагниченности ферромагнитных слоев. Значения коэффициентов для обоих направлений приведены в таблице.

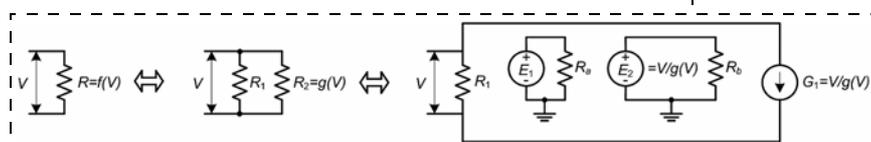


Рис. 2. Реализация нелинейного сопротивления с использованием элементов программы SPICE

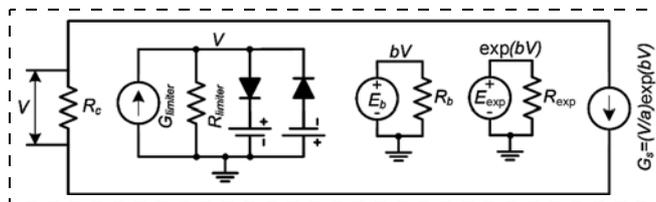


Рис. 3. Блок нелинейного сопротивления, зависящего от напряжения для МТП

Параметры, используемые для аппроксимации нелинейного резистора

Намагниченность	a , МОм	b , В ⁻¹	c , МОм
Параллельная	1,128205	4,566	1,130667
Антипараллельная	2,121791	4,655	3,068426

На рис. 3 представлена электрическая схема, реализующая функцию нелинейных сопротивлений. Первоначально напряжение на резисторе R_c копируется на ограничитель напряжения через источник тока, управляемый напряжением (ИТУН) $G_{limiter}$, и сопротивление $R_{limiter}$. Последовательная комбинация диодов и источников напряжения формирует ограничитель, который используется для предотвращения высоких напряжений при аппроксимации экспоненциальной функции. Затем параллельная комбинация ИНУН E_b и сопротивления R_b масштабирует напряжение в b раз, ИНУН E_{exp} приводит полученное линейное напряжение к виду экспоненциальной функции $\exp(bV)$, а ИТУН G_s реализует требуемую функцию нелинейного резистора. Ограничитель тока $G_{limiter}$ ограничивает выходной сигнал каскада в диапазоне ± 1 В. Экспоненциальная характеристика ИНУН E_{exp} реализована с использованием функции POLY, предусмотренной в SPICE, и шестью полиномиальными коэффициентами разложения в ряд Тейлора (не рекомендуется делать степень аппроксимирующего полинома выше шестой, поскольку погрешность регрессии при этом сильно возрастает). Несмотря на то, что входное напряжение ограничено ± 1 В, масштабируемое напряжение bV может изменяться в диапазоне ± 5 В. Поэтому необходимо провести полиномиальную аппроксимацию экспоненциальной функции степенным рядом, по крайней мере, до 5 В.

Схема, показанная на рис. 3, промоделирована с использованием программы Spectre, входящей в пакет Cadence IC для проектирования аналоговых схем. Результаты моделирования нелинейного сопротивления для параллельной и антипараллельной намагниченностей ферромагнитных слоев и их сравнение с экспериментальными данными [10] показаны на рис. 4. Погрешность не превышает 5 % в диапазоне напряжений от 0,2 до 1 В.

В программе SPICE отсутствует такой компонент, как Switch, но поскольку для реализации управляемого напряжением переключателя (VCS на рис. 1) в данном случае используется программа Spectre, то для моделирования применялся компонент Switch из библиотеки analogLib. Переключа-

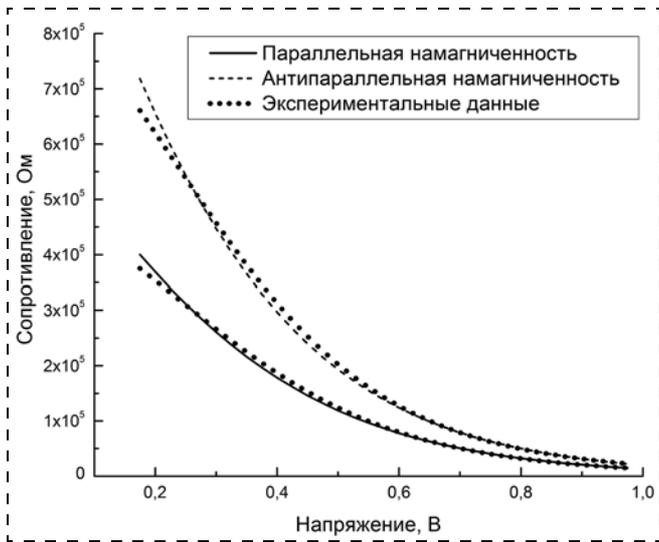


Рис. 4. Результаты измерения и моделирования нелинейного сопротивления

тель формирует высокое сопротивление в положении "ВЫКЛЮЧЕН" и низкое сопротивление в положении "ВКЛЮЧЕН". Для переключения между высоким и низким сопротивлением используется управляющее напряжение V_{sc} , формируемое триггером Шмитта.

Модуль хранения двоичного бита. Модуль хранения двоичного бита — триггер Шмитта — является ключевым, поскольку влияет на эффективность и сходимость расчетов. Триггер полностью изолирован от колебаний параметров входных и выходных элементов. Нагрузка триггера Шмитта фиксирована и не зависит от характера изменения сопротивления МТП или VCS. К тому же магнитный модуль разделяет выходной сигнал по форме, так что управляющий импульс для триггера также не изменяется. Таким образом, включение триггера в схему модуля хранения двоичного бита не приводит к появлению

проблем сходимости расчетов в SPICE-подобных симуляторах. Схематическое представление модуля показано на рис. 5. Он включает операционный усилитель (ОРАМП) с коэффициентом усиления 1000 и положительной обратной связью, формирующий триггер Шмитта.

Схема ОРАМП показана на рис. 5, а. Входной каскад состоит из резистора $R_{inp} = 1$ МОм, подключенного параллельно входу. Напряжение входного каскада усиливается ИТУН G_0 и резистором 1 кОм в 1000 раз. Конденсатор $C_0 = 1$ пФ формирует постоянную времени, которая определяет быстродействие ОРАМП. Ограничитель тока (состоит из источника тока и четырех диодов) ограничивает выходной ток до 1 мА. Ограничитель напряжения, состоящий из двух диодов и двух источников напряжения, ограничивает выходное напряжение в диапазоне ± 5 В.

Схема, реализующая работу триггера Шмитта, показана на рис. 5, б. Она состоит из входного сопротивления $R_{in} = 1$ Ом, подключенного параллельно входным терминалам. Буферный каскад, сформированный G_{in1} , R_{in1} и ограничителем напряжения, предотвращает превышение диапазона напряжений ± 5 В. ОРАМП с положительной обратной связью, образованной резисторами $R_b = 1$ кОм и $R_1 = 2$ кОм, формирует триггер Шмитта с включением в диапазоне ± 2 В. Так как форма выходного сигнала триггера Шмитта является неидеальной, то используется схема формирования выходного напряжения. Схема формирования предполагает, что напряжение V_6 входного терминала ОРАМП всегда опережает напряжение V_5 выходного терминала ОРАМП. Коррекция сигнала выполнена на основе полиномиального ИНУН 2-го порядка с коэффициентами полинома $P_1 = 0$, $P_2 = 21$, $P_3 = -19$, реализующего функцию $E_{out1} = (V_5 + V_6) - 20(V_5 - V_6) = 21V_6 - 19V_5$.

Сравнение передаточных характеристик, полученных с использованием схемы коррекции выходного сигнала и без нее, представлено на рис. 6, а.

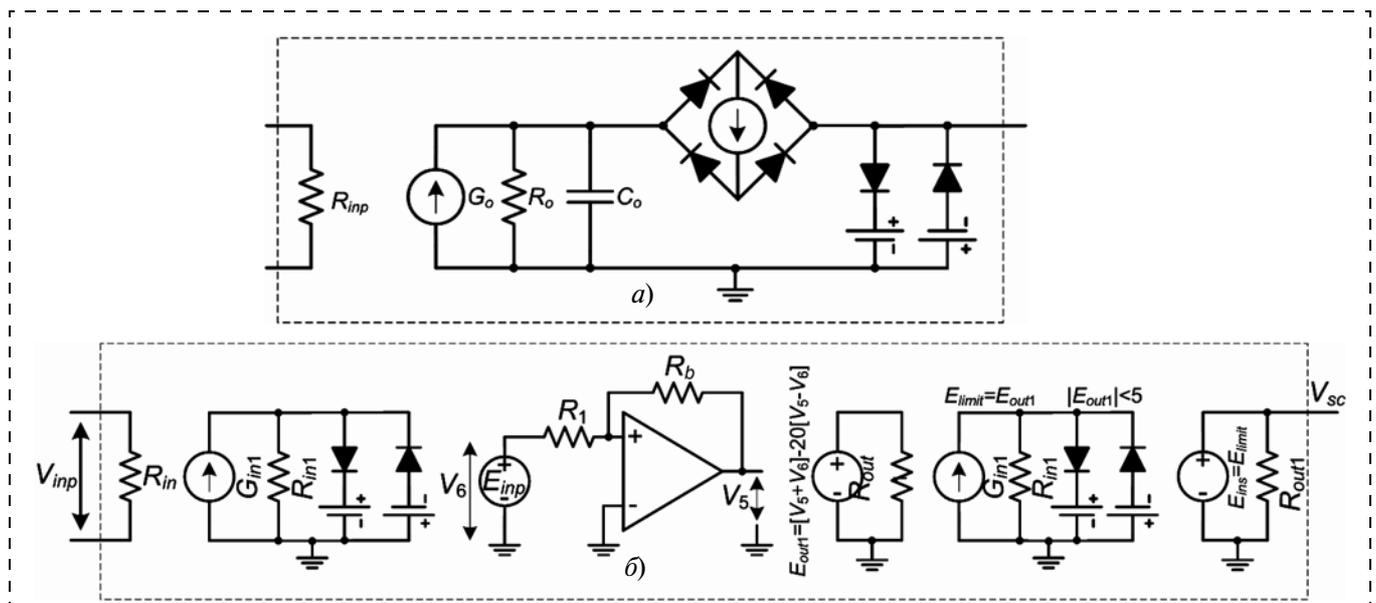


Рис. 5. Модуль хранения двоичного бита: а — идеальный операционный усилитель; б — триггер Шмитта

На рис. 6, б показаны точки, с которых снимаются напряжения при анализе переходных процессов, поясняющие результаты работы схемы коррекции. Напряжение V_6 повторяет входное напряжение V_{inp} , напряжение V_5 является выходной характеристикой триггера Шмитта. Эти напряжения комбинируются, как показано на рис. 5, б, для формирования сигнала E_{out1} , показанного на рис. 6, б. Следующий далее каскад усиления и ограничитель напряжения используются для получения выходного напряжения в диапазоне ± 5 В. Выходной каскад триггера Шмитта является буфером, использующимся для изоляции выхода ОРАМР от вариации выходных нагрузок. Он состоит из параллельно подключенных ИНУН и резистора, который копирует сигнал предыдущего каскада E_{limit} и формирует выходной сигнал триггера Шмитта.

Магнитный модуль. Магнитный модуль преобразует изменение протекающего тока в шине записи в функцию напряжения, совместимую с работой триггера Шмитта.

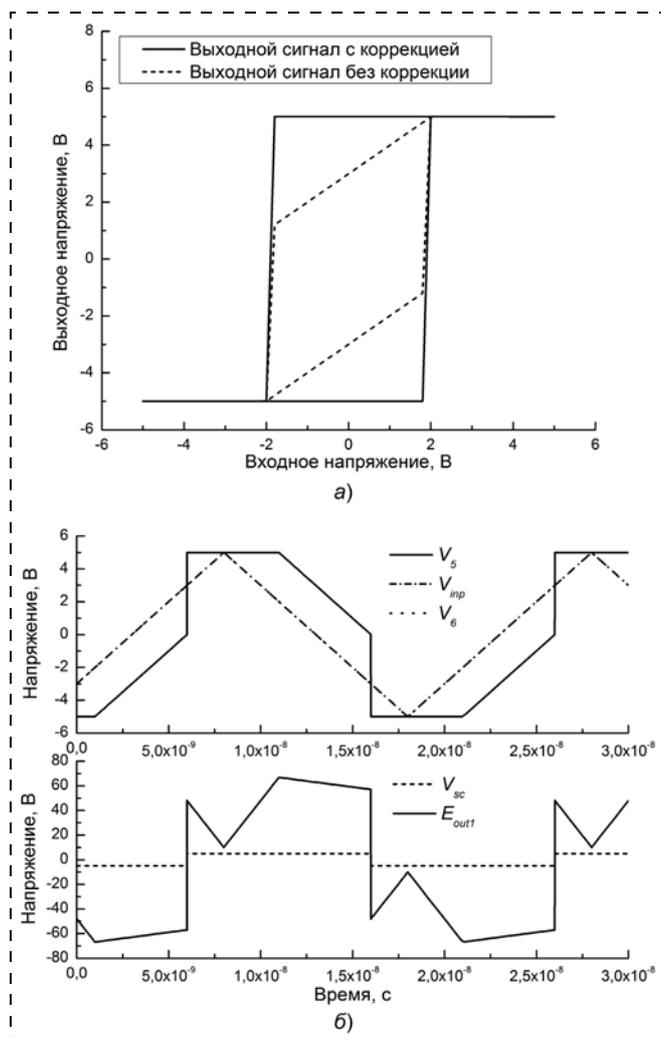


Рис. 6. Результаты моделирования характеристик триггера Шмитта: передаточные характеристики со схемой выходной коррекции и без нее (а); переходные характеристики (б)

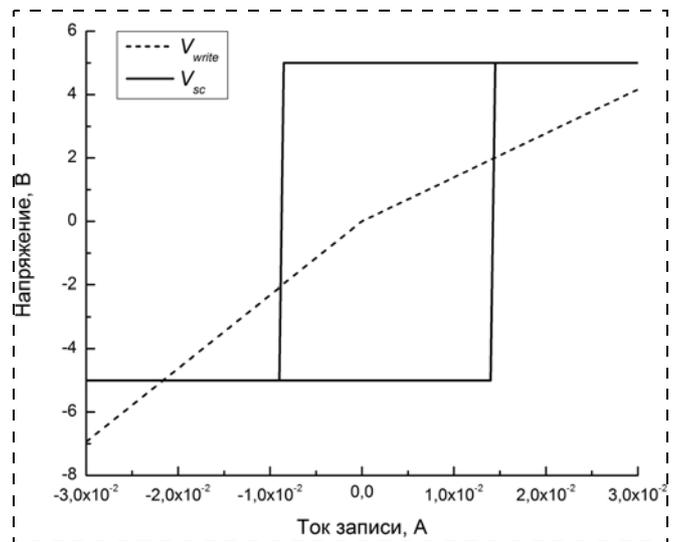


Рис. 7. Передаточная характеристика магнитного модуля при $v_{Hi} = 2$ В, $v_{Lo} = -2$ В, $v_C = 0$ В, $v_W = 4$ В

Данные для входных токов брались из работы [8]. Использовались следующие параметры: пороговое значение тока записи для переключения из антипараллельного состояния в параллельное $i_{Hi} = 14,1$ мА, из параллельного состояния в антипараллельное $i_{Lo} = -8,19$ мА. Середину и длительность импульса петли гистерезиса вычисляли как

$$i_C = (i_{Lo} + i_{Hi})/2;$$

$$i_W = i_{Hi} - i_{Lo}. \quad (4)$$

Для вычисления значений управляющего напряжения триггера Шмитта и соотношения петли гистерезиса триггера с экспериментальными измерениями токового гистерезиса проводили вычисление следующих параметров: пороговых напряжений для перехода из параллельного состояния в антипараллельное и обратно, середину и длительности импульса гистерезиса: v_{Hi} , v_{Lo} , v_C и v_W соответственно. Рассчитанная передаточная характеристика магнитного модуля представлена на рис. 7.

Соотношение между током записи и входным напряжением триггера Шмитта может быть записано как

$$(v_{Write} - v_C)/v_W = (i_{Write} - i_C)/i_W$$

или

$$v_{Write} = (i_{Write} - i_C)v_W/i_W. \quad (5)$$

С учетом этого передаточная характеристика магнитного модуля, подключенного к триггеру Шмитта, с определенными выше параметрами показана на рис. 7. Очевидно, что токи записи более 14,1 мА и менее $-8,2$ мА устанавливают триггер Шмитта в высокое и низкое состояния соответственно, эффективно намагничивая свободный магнитный слой в параллельное или антипараллельное состояние относительно намагниченности фиксированного слоя. Выходное напряжение магнитного элемента v_{Write} на рис. 1 показано как V_{inp} .

Моделирование элемента магниторезистивной памяти

Предложенная макромодель МТП использована для моделирования блока магниторезистивной памяти. Макромодель имеет два терминала, по которым пропускается ток для определения сопротивляющей структуры и два терминала для тока записи, который определяет намагниченность свободного слоя МТП. Как видно из рис. 7, импульса тока амплитудой ± 15 мА достаточно для перемагничивания свободного слоя. Согласно данным рис. 4 при подаче на структуру входного напряжения 0,1 В магнитосопротивление приближается к 100 %. Результаты моделирования записи и чтения 4-битного слова в ячейке магниторезистивной памяти на основе МТП показаны на рис. 8.

На первых четырех графиках показаны комбинации входных сигналов. На нижнем графике даны результаты записи информации в каждой ячейке как уровни тока считывания. Для выборки 4 бит необходимо два адресных входа, которые обозначены как A0 и A1. Входные данные обозначены как DATA. Управляющий сигнал WE используется для разрешения чтения/записи данных: по нижнему уровню данные записываются в память, по верхнему уровню считываются.

Из приведенных расчетов видно, что в интервале 100 нс укладывается восемь циклов записи и чтения различных комбинаций входного сигнала: 1000, 0010, 0100, 0001. Значение тока при считывании логической "1" составляет 74,24 мкА, логического "0" — 83,35 мкА. Далее токи мультиплексируются и формируется выходной сигнал с помощью усилителя считывания.

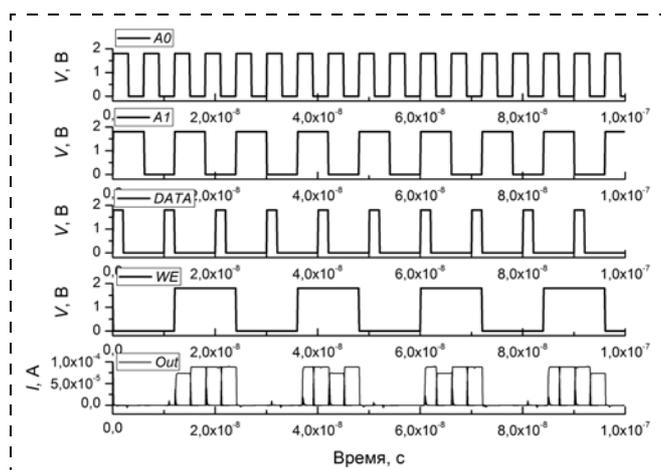


Рис. 8. Характеристики записи и чтения данных магниторезистивной памяти на основе магнитных туннельных переходов

Результаты моделирования показывают достаточно хорошую сходимость расчетов по предложенной макромодели без необходимости корректировки и настройки компонентов несмотря на то, что в макромодели используются три нелинейных элемента.

Заключение

Предложена физически объективная и электрически адекватная статическая модель МТП-структуры. Она является масштабируемой и может использоваться для моделирования переходных характеристик ячеек магниторезистивной памяти и других приборов спинтроники на основе МТП в широком диапазоне входных сигналов (± 10 В). Модель основывается на стандартных SPICE-элементах: идеальных резисторах, конденсаторах, диодах, независимых и нелинейных источниках тока и напряжения, что обеспечивает ее эффективное использование в профессиональных программных комплексах проектирования интегральных микросхем.

Автор выражает признательность профессору В. Е. Борисенко и доценту В. Р. Стемпичкому за полезное критическое обсуждение модели и полученных результатов.

Список литературы

1. Baibich M. N., Broto J. M., Fert A., Van Dau F. N., Petroff F. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61 (21). P. 2472—2475.
2. Julliere M. Tunneling between ferromagnetic films // Phys. Lett. 1975. Vol. A 54 (3). P. 225—226.
3. Cockburn B. F. Tutorial on Magnetic Tunnel Junction Magnetoresistive Random-Access Memory // 12th IEEE International Workshop on Memory Technology. 2004. P. 46—51.
4. Kostrov A. I., Stempitski V. R., Kazimirchik V. N. Simulation of magnetic tunnel junction in ferromagnetic/insulator/semiconductor structure // Proc. of the SPIE. 2009. Vol. 7377. P. 7377P-13.
5. Zhao W., Belhaire E., Chappert C., Jacquet F., Mazoyer P. New non-volatile logic based on Spin-MTJ // Phys. Status Solidi. 2008. Vol. 205, Is. 6. P. 1373—1377.
6. Cardoso F. A., Ferreira H. A., Conde J. P., Chu V., Freitas P. P., Vidal D., Germano J., Sousa L., Piedade M. S., Costa B. A., Lemos J. M. Diode/magnetic tunnel junction cell for fully scalable matrix-based biochip // J. Appl. Phys. 2008. Vol. 103. P. 07A310-1-3.
7. Das B., Black W. C. A Generalized HSPICE Macro-model for Pinned Spin-dependent-tunneling Devices // IEEE Trans. Magn. 1999. Vol. 35, № 5. P. 2889—2891.
8. Lee S., Shin H., Kim D. Advanced HSPICE macromodel for magnetic tunnel junction // Jpn J Appl Phys. 2005. Vol. 44 (4B). P. 2696—2700.
9. The SPICE Home Page. URL: <http://bwrc.eecs.berkeley.edu/Classes/icbook/SPICE/>
10. Shu M.-F., Cabrera A. C., Hsu C.-C., Chen C. C., Wu J. C., Yang C.-C., Wu T.-H. The magnetoresistance ratio of an MTJ device and the influence of ramping DC bias voltage rate measured by conductive atomic force microscope // J. Magn. Magn. Mater. 2006. Vol. 304. P. 294—296.

О. И. Додулад^{1, 2}, бакалавр,
 Ю. Ю. Клосс^{1, 2}, канд. физ.-мат. наук, нач. отдела,
 Д. В. Мартынов^{1, 2}, бакалавр,
 О. А. Рогозин^{1, 2}, бакалавр,
 В. В. Рябченков², канд. физ.-мат. наук, зам. нач. отдела,
 Ф. Г. Черемисин^{1, 3}, д-р физ.-мат. наук, гл. науч. сотр.,
 П. В. Шувалов^{1, 2}, аспирант,
 e-mail: shuvalov.pavel@gmail.com

¹ Московский физико-технический институт,
 г. Долгопрудный МО

² Российский научный центр "Курчатовский институт", Москва

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

ПРОБЛЕМНО-МОДЕЛИРУЮЩАЯ СРЕДА ДЛЯ РАСЧЕТОВ И АНАЛИЗА ГАЗОКИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Поступила в редакцию 01.11.10

Описывается структура, функциональность и область применения проблемно-моделирующей среды, разработанной для решения кинетического уравнения методом конечных объемов. Для вычисления интеграла столкновения используется проекционный метод дискретных ординат. Применяются перспективные технологии: неструктурированные сетки, TVD схемы, параллельные вычисления и расчеты на видеокартах. Перечень возможностей подкреплен множеством примеров моделирования реальных задач.

Ключевые слова: проблемно-моделирующая среда, кинетическое уравнение, компьютерное моделирование, параллельные вычисления, неструктурированные сетки, графический процессор, микроустройства, ударные волны

Введение

В настоящее время существует множество проблемно-моделирующих сред (ПМС) (англ. *problem solving environment*), способных решать широкий спектр задач гидрогазодинамики. Под ПМС понимается специализированное программное обеспечение для решения задач определенного класса, сочетающее в себе автоматизированные вычислительные методы и пользовательский интерфейс для управления ходом решения поставленной задачи.

В качестве вычислительного метода обычно используются или численное решение уравнения Навье—Стокса [1], или статистическое моделирование кинетического уравнения Больцмана (метод DSMC) [2]. Также применяются модельные уравнения [3], справедливые, однако, только для близкой к равновесной функции распределения. Область явлений, для которой число Кнудсена (отношение длины свободного пробега к характерному размеру обтекаемых тел) порядка единицы и число Маха (отношение скорости

газа к скорости звука в нем) порядка или меньше единицы, вызывают большие сложности. Эта область наиболее характерна для моделирования газа в МЭМС и включает в себя широкий круг явлений от теплового скольжения до затухания ударных волн. Для решения этой проблемы использован консервативный метод дискретных ординат точного решения кинетического уравнения Больцмана [4], который лег в основу разработанной ПМС.

Для достижения поставленной цели с использованием открытых технологий был написан кросс-платформенный программный код, позволяющий эффективно выполнять расчеты как на персональном компьютере, так и на многопроцессорных кластерах. В качестве языка программирования был выбран C++, совмещающий высокое быстродействие с объектно-ориентированным программированием, что немаловажно для дальнейшего перспективного развития ПМС.

Благодаря универсальности метода область решаемых задач не ограничивается описанной, а гибкость реализации ПМС позволяет применять его не только для академических расчетов, но и в промышленных целях для моделирования сложных конструкций. Цель этой статьи — на примерах [5] дать описание текущей функциональности разработанной ПМС.

Общая структура

На рис. 1 (см. третью сторону обложки) представлена схема потока данных от входных параметров, предоставляемых пользователем, и генерации расчетной сетки до визуализации результатов с использованием специализированных пакетов. Центральное место на рисунке занимает солвер (или решатель) — программа, выполняющая все необходимые для моделирования газа вычисления.

Для численного решения кинетического уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial r} = \int (f' f'_1 - f f_1) g b d b d \epsilon d \xi'$$

(здесь $g = |\xi - \xi'|$ — относительная скорость молекул, b — прицельное расстояние, ϵ — азимутальный угол, r — радиус-вектор) необходимо оперировать с шестимерной функцией распределения, что предъявляет высокие требования и к объему оперативной памяти, и к вычислительной мощности. Поэтому изначально солверы разрабатывались для функционирования в многопроцессорной среде.

В задачи солвера входит численное решение уравнения Больцмана методом конечных объемов, а также эффективное распараллеливание. Для этого вся расчетная область делится на области (домены), каждая из которых предоставляется отдельному вычислительному узлу. Расчет представляет собой итерационный процесс эволюции функции распределения. С помощью ее интегрирования периодически вычисляются макропараметры, которые записываются в файлы соответствующего формата для дальнейшей визуализации.

Эффективное распараллеливание позволило, с одной стороны, значительно сократить время расчетов (с недель до часов), с другой — обеспечить саму возможность прецизионного расчета на мелких сетках, которые требуют больших объемов памяти. На сегодняшний день солверы используют две технологии распараллеливания: MPI (*Message Parallel Interface*) [6] применяется для вычислений на кластерах из обычных процессоров, Nvidia CUDA (*Compute Unified Device Architecture*) [7] — для расчетов на видеокартах.

Для моделирования устройств, геометрия которых состоит из прямоугольных областей, применяются прямоугольные сетки. Они используются в солверах RectSolv и GPUSolv, которые для вычислений используют обычный и графический процессор соответственно. Для решения задач с произвольной геометрией применяется солвер UnstructSolv, который оперирует с неструктурированными сетками, генерируемые пакетом GMSH [8].

Уравнение Больцмана решается методом расщепления: по очереди моделируются перенос молекул и их столкновения друг с другом. Поскольку результат соударений молекул не зависит от пространственной конфигурации, в частности, от координатных сеток, то все перечисленные солверы используют единый модуль, отвечающий за взятие интеграла столкновений проекционным методом [4].

Для анализа полученных результатов применяют различные программные продукты. Для наглядной визуализации потоков используется пакет NCL (*NCAR Command Language*) [9], с трехмерным распределением макропараметров удобно оперировать в среде Paraview [10], которая, кроме того, обладает возможностью обработки больших объемов данных на кластерных системах. Для внутреннего использования применяется собственный продукт Vviewer [11], заточенный для оперативного анализа выходных данных.

Ввод данных

Для компьютерного моделирования пользователь прежде всего должен сформулировать поставленную задачу на языке, понятном для ПМС. Для этого используют текстовый конфигурационный файл, который передается солверу при его запуске. Был выбран универсальный xml-формат, обеспечивающий одновременно как высокую гибкость задания всевозможных параметров расчета, так и ясность и удобную для чтения (или правки) структуру текста. Такой файл может быть создан вручную либо с помощью специальной графической интерактивной оболочки (рис. 2).

Конфигурационный файл разбит на множество секций, каждая из которых описывает отдельный объект: это может быть как применяемая разностная схема или интеграл столкновений, так и моделируемая геометрия или начальные условия задачи. Каждому объекту соответствует в солвере собственный программный модуль. Таким образом, задание различных параметров в секции есть выбор и настройка отдельных модулей системы.

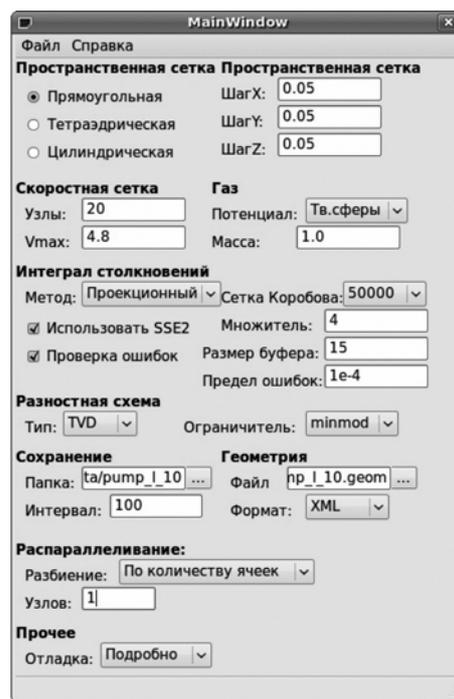


Рис. 2. Интерактивная оболочка

Все расчеты в системе ведутся в безразмерных переменных. Это, во-первых, облегчает анализ вычислений, во-вторых, позволяет применить критерий подобия. Например, если определяющим для физического процесса является число Кнудсена, то результаты вычислений справедливы как для макроустройств в разреженном газе, так и микроустройств в плотном. Соответственно, начальные условия задаются также в безразмерном виде.

Расчетные сетки

Для решения уравнения Больцмана необходимо моделирование эволюции во времени функции распределения, которая в общем случае шестимерна по пространственным и скоростным координатам. Это фазовое пространство покрывается соответствующими конечными сетками.

В скоростном пространстве это просто шар радиусом в несколько тепловых скоростей (обычно это величина порядка пяти максимальных тепловых скоростей в задаче), равномерно заполненный узлами.

В пространственных координатах могут использоваться различные сетки, покрывающие любые геометрии. В простом случае, когда геометрия состоит из прямоугольных областей, применяются прямоугольные сетки, генерируемые встроенным модулем. Построение разностных схем высокого порядка точности значительно проще для таких сеток. При попытке аппроксимировать искривленные поверхности прямоугольными ячейками возникает множество трудностей, поэтому универсальным решением является использование неструктурированных сеток. Для генерации неструктурированных сеток используется пакет GMSH [8] с открытым кодом. В нем используется алгоритм Delaunay [12], а для улучшения ка-

чества тетраэдров — оптимизатор из открытого пакета Netgen [13].

В рамках описываемой ПМС к пространственным сеткам предъявляются следующие требования. С одной стороны, они должны сгущаться в областях, где движение газа представляет наибольший интерес. Это позволяет получить хорошую точность в условиях экономии вычислительных ресурсов. С другой стороны, необходимо высокое качество ячеек (приближенность их к правильным фигурам). Это связано с особенностями решения уравнения переноса: шаг по времени ограничен минимальной высотой ячейки.

Интеграл столкновений

При решении уравнения Больцмана основную сложность представляет правая его часть — нелинейный интеграл столкновений

$$J(f) = \int (f' f'_1 - f f_1) g b d b d e d \xi'.$$

Точное решение уравнения Больцмана дает более аккуратное описание физической реальности, чем различного рода приближения. Однако решение кинетического уравнения в его общем виде стало возможно лишь после изобретения производительных вычислительных машин. Во-первых, это связано с многомерностью функции распределения, а во-вторых, с нелинейностью уравнения, т. е. сложностью интеграла столкновений, который здесь играет главную роль.

В связи с этим даже сейчас часто прибегают к различным приближениям. Пытаются понизить размерность задачи, поскольку в большинстве задач описание с помощью функции распределения является излишне подробным. Такие подходы классифицируются как методы моментов из-за того, что оперируют с моментами функции распределения. Но попытка построить полную систему уравнений относительно моментов приводит к бесконечной системе уравнений, в силу чего приходится использовать дополнительные предположения, сужающие область применимости подхода. Так, например, можно "обосновать" уравнения Навье—Стокса. Другие приближения основаны на преобразовании самого уравнения Больцмана в упрощенные модельные уравнения, часто не обоснованные физически и применимые лишь для решений, в которых функция

распределения не сильно отличается от равновесной. В некоторых случаях приемлемое решение дает статическое моделирование (метод DSMC), однако для получения необходимой точности, особенно для медленных течений, необходимы колоссальные вычислительные ресурсы. Проблема решена с помощью проекционного метода [4].

Согласно используемому методу дискретных ординат интеграл столкновений при его численном вычислении заменяется квадратурной формулой, обладающей свойствами консервативности по всем интегралам движения. Ввиду многомерности интеграла для повышения порядка сходимости точки непосредственного вычисления подынтегральных функций определяются с использованием сеток Коробова [14]. Общий расчет интеграла столкновений происходит согласно схеме "непрерывного счета", в которой изменение функции распределения происходит непрерывно в процессе суммирования. Преимуществом данной схемы является то, что она вместе с процессом случайной перестановки интегрирующих узлов сетки Коробова дает второй порядок малости ошибки численного интегрирования по временному шагу.

Для моделирования процесса столкновения молекул используются различные потенциалы межмолекулярного взаимодействия. Кроме классической модели твердых сфер может использоваться также распространенный потенциал Леннарда—Джонса. Кроме того, решение кинетического уравнения легко обобщается на случай газовой смеси. Для этого необходимо для каждой компоненты ввести свою функцию распределения и попарно вычислять интеграл столкновений для всех сортов молекул, при этом левая часть уравнения не изменяется.

Первостепенная задача создания описываемой в статье ПМС — это тщательное тестирование самой сложной части численной схемы — модуля интеграла столкновений. Первостепенными проверками является проверка на консервативность и проверка на обеспечение максвелловского распределения в задаче релаксации. Помимо них тестирование также проводилось на задачах медленных течений — обеспечение верных коэффициентов теплопроводности и вязкости моделируемых газов в приближении сплошной среды, и сверхзвуковых — получение структуры плоской ударной волны.

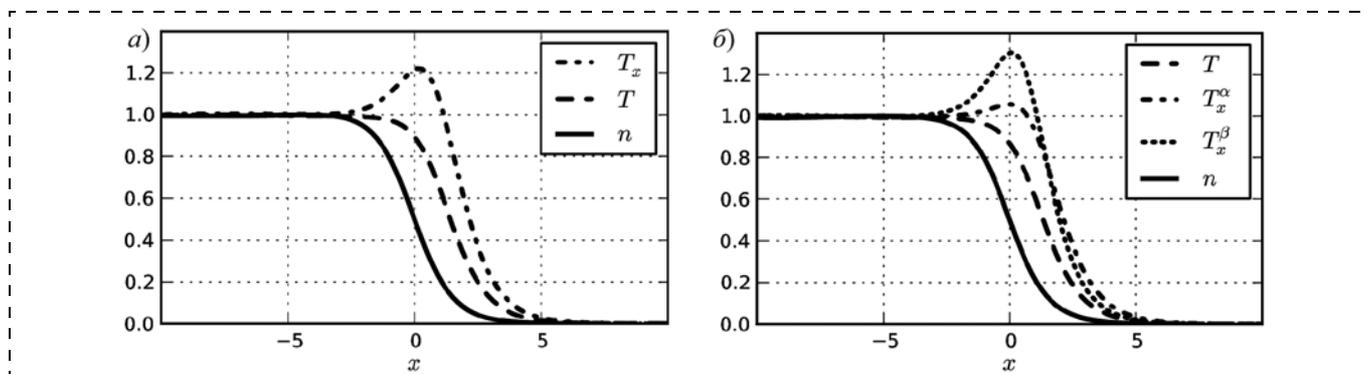


Рис. 3. Структура плоской ударной волны в простом газе (а) и в смеси (б): n — плотность газа, T — температура, T_x — продольная температура

Результаты моделирования ударной волны (УВ) приведены на рис. 3. Использовался потенциал твердых сфер для простого газа и смеси молекул с отношением масс $m^{\alpha}/m^{\beta} = 1/10$. Граничные и начальные условия получали исходя из условий Рэнкина—Гюгонио по заданному числу Маха. Они согласуются с результатами других авторов, проводивших расчет как тем же методом [15], так и другими методами [16].

Солвер на прямоугольных сетках RectSolv

Как было сказано выше, на прямоугольных сетках сравнительно легко строить схемы высокого порядка точности. Поскольку необходимы консервативность и монотонность численного метода, то используются TVD (*Total Variation Diminishing*) схемы с различными ограничителями.

Зачастую для качественного анализа реальных устройств вполне оправданным является анализ двумерных моделей. Снижение размерности задачи позволяет проводить вычисления значительно быстрее, что очень важно для оперативности производимых оценок.

При моделировании двумерных задач достаточно хранить в памяти не шестимерную функцию распределения, а всего лишь четыре с половиной измерения. Два измерения приходится на пространственную часть. Столкновение молекул описывается только в трехмерном пространстве, однако использование симметрии позволяет сократить объем используемой памяти вдвое. Двумерные геометрии могут использоваться как для моделирования течений газа через различные щели, так и для решения осесимметричных задач с использованием цилиндрических координат.

Здесь и далее газ предполагается одноатомным и используется модель твердых сфер в качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия.

В качестве примера представлен результат моделирования двумерного одноступенчатого микронасоса Кнудсена. Он состоит из двух одинаковых резервуаров, соединенных последовательно узким и широким каналами, к которым приложены противоположные градиенты температур. В стационарном состоянии за счет эффекта теплового скольжения по направлению к правому резервуару формируется градиент давления, который максимален, когда длина свободного пробега порядка полуширины узкого канала. На рис. 4 показано соответствующее распределение потоков газа. Тщательный анализ двумерного микронасоса изложен в работе [17].

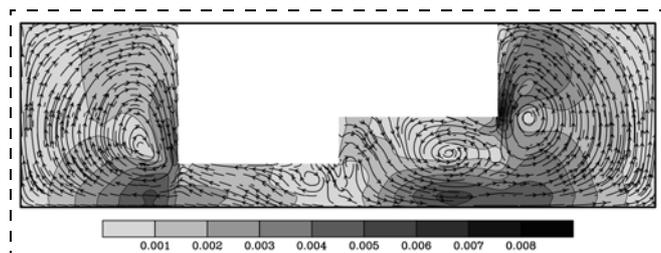


Рис. 4. Стационарное распределение макроскопических потоков газа

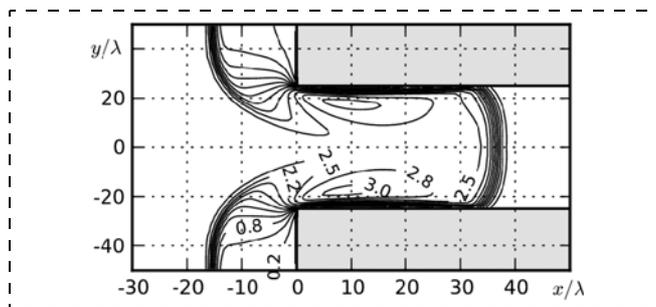


Рис. 5. Поле плотности ударной волны (λ — средняя длина свободного пробега)

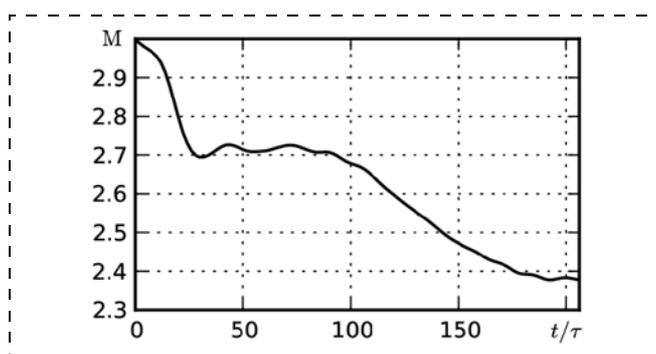


Рис. 6. Зависимость числа Маха M от времени t (τ — среднее время свободного пробега)

Моделирование двумерной задачи с приемлемой точностью обычно занимает всего несколько часов на одной рабочей станции (4 ядра по 3 ГГц), причем это время значительно зависит от начального распределения. Чем ближе оно к стационарному, тем меньше необходимо провести итераций (от 1 тыс. до 20). Расчет аналогичной трехмерной геометрии увеличивает время расчета в десятки раз.

Кроме задач нахождения стационарных распределений солвер позволяет анализировать динамические процессы, как, например, падение ударной волны на узкую прямоугольную щель. На рис. 5 показано распределение плотности газа в начальный момент проникновения ударной волны, а на рис. 6 — процесс затухания ударной волны. Подробное исследование этой задачи можно найти в [18].

Солвер на неструктурированных сетках UnstructSolv

Этот солвер предназначен для моделирования движения газа в областях с любой геометрией. Основную сложность при работе с неструктурированными сетками представляет написание разностных схем высокого порядка точности для решения уравнения переноса. Зачастую разумное использование неравномерных сеток — сгущение в областях с высокими градиентами макропараметров и разрежение в остальных — позволяет обойтись более скоростной схемой первого порядка, дающей хорошие результаты для полей плотности, температуры и давления. На рис. 7 на примере трехмерного микронасоса Кнудсена с цилиндрическими трубками продемонстрирована данная техника: в резервуарах сетка гру-

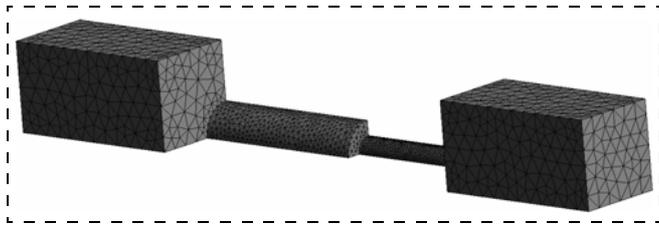


Рис. 7. Неравномерная тетраэдрическая сетка для микронасоса Кнудсена

бая, узкая трубка, наоборот, состоит из мелких тетраэдров.

Примером компьютерных расчетов реальных микроустройств являются результаты моделирования классического и змейчатого (рис. 8, 9, см. третью сторону обложки) многоступенчатых микронасосов Кнудсена. Распределения давления вдоль линий, проходящих через центры всех сечений трубок, представлены на рис. 10. Видно, что такие устройства позволяют создавать значительное отношение давлений на противоположных концах. Использование неструктурированных сеток позволяет провести точные оценки любой технической реализации.

Моделирование одной ступени насоса занимало около 48 ч на четырех ядрах по 3 ГГц, а десятиступенчатого — 120 сут. × ядер. Таким образом, на обычном вычислительном кластере любой расчет выполнялся в течение суток.

С помощью этого солвера были смоделированы экспериментальные данные [19], полученные Кнудсеном в 1910 г. [20], проведены параметрические исследования [21] и выполнен анализ различных типов таких микронасосов [22].

Солвер на графическом процессоре GPUSolv

В последние годы активно развивается индустрия, нацеленная на высокопроизводительные вычисления на графических процессорах (далее GPU). Широкое распространение получили GPU компании NVIDIA благодаря большому числу моделей и наличию бесплатного и отлаженного набора библиотек для разработки. Для разработчиков создано специальное расширение языка C, называемое CUDA [7] и представляющее собой компилятор вычислительного кода для GPU и набор функций для вызова этого кода из обычных программ CPU.

Платформа GPU имеет ряд отличий от CPU. Во-первых, имеется отдельная память, расположенная на устройстве, объем которой ограничен 1 Гбайт для видеокарт общего назначения (т. е. предназначенных в первую очередь для графических и игровых приложений) и 4 Гбайт для видеокарт исключительно для научных расчетов (NVIDIA Tesla). Ручная оптимизация программы под сложную структуру памяти GPU является основной и самой трудоемкой задачей.

Во-вторых, на GPU для достижения высокой производительности требуется поддержание очереди из тысяч вычислительных потоков. Все потоки организованы в виде двумерной сетки, каждый узел сетки является блоком потоков, в котором также может быть трехмерная адресация. Это удобно для физических задач, а в данном солвере сетка блоков описывает двумерное координатное пространство. Из сказанного следует, что высокая производительность достижима лишь в задачах, которые можно разбить на множество мелких независимых подзадач. Кроме того, сложная система вспомогательных объектов требует больше усилий на оптимизацию вычислений, чем на CPU.

Высокая производительность в совокупности с ограниченной памятью очерчивает круг задач для GPU — это параметрические вычисления, быстрые оценочные расчеты. Особенности переноса математического метода на GPU и детальное описание организации хранения данных приведено в работах [23, 24].

Анализ производительности (см. таблицу) основан на сравнении времени расчетов различных вычислительных систем. Под ускорением расчета понимается отношение времен, затраченных на расчет одинаковых задач разными кодами на CPU и GPU. Сравнение проводилось на основе задачи об индуцированном течении в каверне (рис. 11). Это прямоугольная область с твердыми стенками, внутри которой за счет механического движения верхней стенки газ приводится в движение. Параметры ($Kn = 0,1$, $M = 0,003$) подобраны для сравнения с работой [25].

Для интеграла столкновений получено меньшее ускорение, это связано со сложностью задачи численного интегрирования на GPU. Также стоит отметить пропорциональный рост производительности с ростом числа ядер на видеокарте.

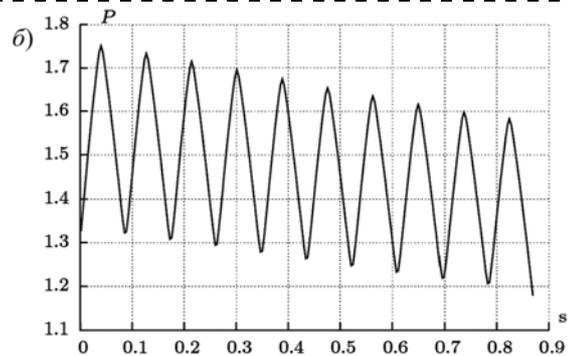
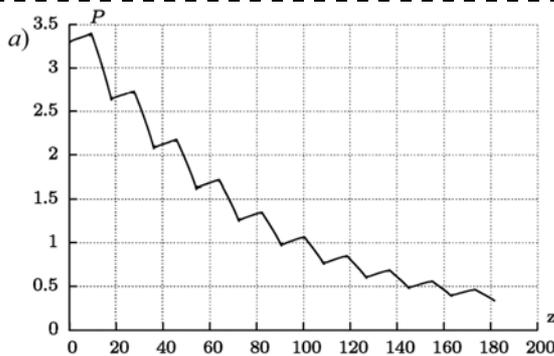


Рис. 10. Распределение давления P для классического (а) и змейчатого (б) микронасосов Кнудсена вдоль оси трубок (z , s измеряются в длинах свободного пробега)

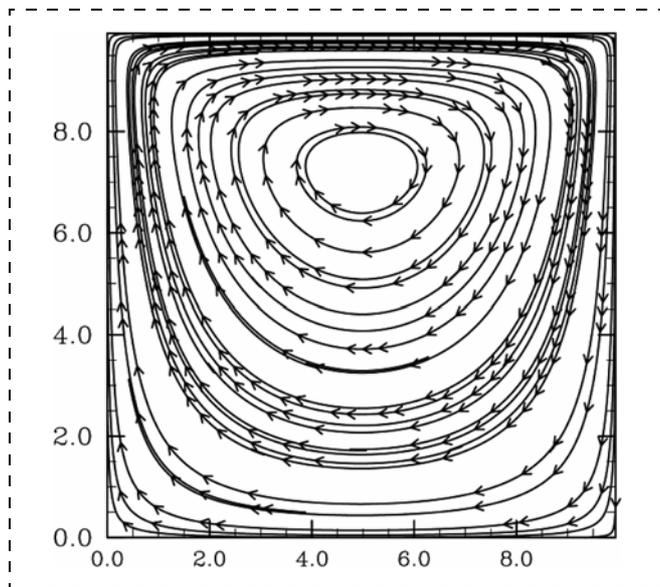


Рис. 11. Структура потоков в каверне

Сравнение различных вычислительных систем на основе CPU и GPU

Устройство	CPU (2,66 ГГц)	9600GT	GTS250	GTX285
Память	4 Гбайт	512 Мбайт	512 Мбайт	1 Гбайт
Ядра	1	64	128	240
Перенос	1469,14	10,436	6,21	3,81
Интеграл	437,43	45,61	20,1	11,47
Общее время	1906,57	56,05	26,32	15,28
Интеграл/Общее	23 %	81 %	76 %	75 %
Ускорение переноса	1	140,8	246,6	385
Ускорение интеграла	1	9,8	21,8	38,1
Общее ускорение	1	34	72,4	124,8

Среди большого числа работ, посвященных переносу физических расчетов на GPU, мало работ, связанных с физической кинетикой. В работе [25], где уравнение Больцмана решается модельным приближением, получено значительное ускорение (более 400 раз), но это связано с отсутствием численного интегрирования.

Заключение

Продемонстрирована способность ПМС эффективно решать широкий класс задач динамики разреженных газов. Использование перспективного проекционного метода вычисления интеграла столкновений позволяет разработанной среде занять свою нишу среди моделирующих систем.

Двумерные расчеты, особенно с использованием графических процессоров, позволяют за несколько часов получать высокоточные оценки сложных явлений динамики разреженного газа. Неструктурированные сетки дают возможность описывать произвольные геометрии, что делает ПМС универсальным инструментом не только в академических целях, но и для инженерных расчетов.

Высокая степень модульности наделяет ПМС гибкостью и расширяемостью, что позволяет ему в

дальнейшем быстро развиваться. Кроссплатформенность программного кода и возможность использования графических процессоров, которые в настоящее время стремительно развиваются, обеспечивают широкий диапазон систем, на которых могут решаться поставленные задачи.

Список литературы

1. ANSYS. URL: <http://www.ansys.com/>.
2. Ivanov M. S. et al. SMILE System for 2D/3D DSMC Computations // Proc. of 25th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. 2006. P. 21–28.
3. Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M. A Model for Collision Processes in Gases // Phys. Rev. 1954. V. 94, N 3. P. 511–525.
4. Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.
5. Tcheremissine F. G. et al. Computing of Gas Flows in Micro- and Nanoscale Channels on the Base of the Boltzmann Kinetic Equation // Procedia Computer Science. 2010. V. 1. P. 735–744.
6. Message Passing Interface Forum. URL: <http://www.mpi-forum.org/>.
7. NVIDIA CUDA Zone. www.nvidia.com/object/cuda_home.html.
8. GMSH. URL: <http://geuz.org/gmsh/>.
9. NCAR Command Language. URL: <http://www.ncl.ucar.edu/>.
10. Para View. URL: <http://www.paraview.org/>.
11. Патент "Программный комплекс для визуализации результатов моделирования явлений в разреженном газе ВК-Viewer" / Черемисин Ф. Г. [и др.]. № 2010613640. 2010.
12. Делоне Б. Н. О пустом шаре // Изв. АН СССР. 1934. Т. 6. С. 793–800.
13. NETGEN. URL: <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>.
14. Коробов Н. М. Тригонометрические суммы и их приложения. М.: Наука, 1989. 240 с.
15. Josyula E. et al. Kinetic Solution of the Structure of a Shock Wave in a Non-Reactive Gas Mixture // Proc. of 27th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. 2010.
16. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
17. Клосс Ю. Ю., Рогозин О. А., Черемисин Ф. Г. Компьютерное моделирование многоступенчатого микронасоса Кнудсена в плоской геометрии // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 6. С. 24–31.
18. Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Черемисин Ф. Г. Падение ударной на плоскую преграду, содержащую микрощели // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 10. URL: <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2009-12-21-001.pdf>
19. Knudsen M. Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularströmung // Ann. der Phys. 1910. Bd. 31, N 9. S. 205–229.
20. Аникин Ю. А., Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Черемисин Ф. Г. Компьютерное моделирование и анализ эксперимента Кнудсена 1910 года // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 8. С. 6–14.
21. Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Черемисин Ф. Г. Разработка методов компьютерного моделирования и анализа микронасоса Кнудсена // Информационные технологии. 2010. № 10. С. 30–35.
22. Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Черемисин Ф. Г. Компьютерное моделирование и анализ технических характеристик термомолекулярных микронасосов // Журнал технической физики. 2011 (в печати).
23. Клосс Ю. Ю., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Решение уравнения Больцмана на графических процессорах // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11. С. 144–152.
24. Kloss Yu. Yu., Shuvalov P. V., Tcheremissine F. G. Solving Boltzmann equation on GPU // Procedia Computer Science. 2010. V. 1. P. 1077–1085.
25. Frezzotti A., Ghiroldi G. P., Gibelli L. Solving kinetic equations on GPUs // ArXiv. 2009. arXiv: 1005.5405v1.

УДК 621.315.529:543.06

А. А. Ковалевский¹, канд. техн. наук, вед. науч. сотр.,
А. С. Строгова¹, мл. науч. сотр.,
Д. В. Плякин¹, мл. науч. сотр.,
В. В. Цыбульский², канд. техн. наук, нач. сектора,
В. М. Борисевич³, вед. технолог,

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

² ОАО "Интеграл", филиал УП "Белмикросистемы"

³ ОАО "Интеграл", филиал з-д "Транзистор"
E-mail: A_kovalevsky@mail.ru

ТРАНСФОРМАЦИЯ германосиликатного стекла в нанокластеры германия

Поступила в редакцию 12.07.10

С использованием спектроскопии рамановского рассеивания света, ИК-спектроскопии, высокоразрешающей электронной и атомной силовой микроскопии и анализа дифракции рентгеновских лучей представлены результаты исследований процесса самоорганизации нанокластеров германия в пленках германосиликатного стекла (ГСС) — ($\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_2$), полученных в процессе окисления и термообработки наноструктурированных пленок поликристаллического кремния, легированного германием (НСПКК (Ge)).

Рассмотрен механизм оттеснения Ge в ГСС к границе раздела ГСС — подложка, который включает следующие стадии: расслоение между GeO_2 и SiO_2 , последующее восстановление кремнием и водородом GeO_2 до Ge и образование ядер маленьких кристаллитов Ge с их последующим ростом.

Ключевые слова: нанокластеры германия, германосиликатное стекло, спектры рамановского рассеяния света, оттеснения германия

Введение

В настоящее время сформировалось достаточно устойчивое направление фундаментальных и прикладных исследований, связанное с созданием кластеров германия для нужд микро- и оптоэлектроники [1–5]. Особое место в этом направлении отводится элементам флэш-памяти — энергонезависимым постоянно программируемым запоминающим устройствам (ЭППЗУ) [6, 7]. Кластеры германия представляют большой интерес и в связи с открытием в нанокристаллах полупроводников оптической нелинейности третьего порядка и обнаружением ха-

рактерной люминесценции, длина волны которой зависит от их размеров [8].

Создают кластеры различными методами: методом сублимации кремния в среде моногермана (GeH_4), методом пиролиза гидридов кремния и германия [9], молекулярно-лучевой эпитаксией [10] и ионной имплантацией больших доз ионов Si^+ , Ge^+ и Ar^+ [11]. Используемое в указанных методах оборудование, безусловно, в значительной степени определяет успех реализации поставленной задачи, но им располагают не все исследовательские центры.

Цель настоящей работы — изучение закономерностей самоорганизации нанокластеров германия в процессе окисления и термообработки пленок наноструктурированного поликристаллического кремния, легированного германием (НСПКК (Ge)).

Методика эксперимента

В качестве подложек использовали кремниевые пластины диаметром 150 мм с ориентацией (100) и удельным сопротивлением 4,5 Ом·см, легированные фосфором. На них предварительно формировались термические оксиды кремния, иттрия и диспрозия, а также нитрид кремния толщиной $(1,0...4,5) \pm 0,5$ нм. Пленки НСПКК (Ge), т. е. пленки с размером зерна менее 10 нм осаждали путем разложения моносилана с моногерманом в условиях пониженного давления 35 ± 5 Па при температуре 560 ± 5 °С в горизонтальном реакторе установки "Изотрон 4-150" [12–14]. Выращивались пленки НСПКК толщиной $(10...55) \pm 1$ нм, при этом размер зерна не превышал 10 нм. Подготовленные таким образом пленки НСПКК (Ge) окислялись в диффузионной печи "Дон", где температура контролировалась с точностью $\pm 0,1$ °.

Химический состав пленок оценивали методами ИК-, Оже- и РФЭ-спектроскопии. РЖ-спектры записывали в диапазоне $300...4000$ см⁻¹ с помощью вакуумного Фурье-спектрометра VERTEX80V "Bruker" и спектрометров "Перкин-Эльмер"-983, ИКС-20. В качестве стандарта сравнения полос поглощения германия использовали полосу поглощения при $445...450$ см⁻¹, и полосу поглощения В—О—Si при 920 см⁻¹ [15], в Оже-спектрах после ионно-лучевого травления пленок германосиликатного стекла (ГСС) аргонном регистрировались пики Ge (76 и 109,8 эВ), пики O (510 эВ), C (272 эВ), Si (92 и 1619 эВ) [16].

При РФЭ-спектроскопии (ЭС-2401) все значения энергии связей $E_{\text{св}}$ приводили к значениям энергии связи $1s$ 1/2-электронов углерода, равной 284,6 эВ. Результаты интерпретировали с учетом значений энергии связи остовых электронов $\text{Si}2p$, $\text{Ge}2p$, $\text{O}1s$, приведенных в работах [16–18].

Исследования топографии поверхности полученных структур проводили с помощью сканирующего электронного микроскопа S-4800, высокоразрешающего электронного микроскопа H-800 (фирма *Hitachi*, Япония) и атомно-силового микроскопа Ntegra Prima. В качестве зондов применяли кремниевые кантилеверы с радиусом закругления вершин зондирующих пирамид 15...20 нм (SCNC12, NT-MDT), а также вискеры, отличительной особенностью которых является завершение зондирующей пирамиды вытянутым узким и более острым конусом из материала на основе углерода (NCC05, NT-MDT). Применение вискеров заметно улучшало контраст изображений островков Ge и SiGe. Кроме того, с помощью атомно-силового микроскопа определяли плотность, размеры и форму кластеров.

Наличие в ГСС Ge- и SiGe-кластеров анализировали на основании данных спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Спектры КРС на оптических фонах получали при облучении структур Ag лазером с длиной волны $\lambda = 514,5$ нм и регистрировали с помощью спектрометра ДФС-52. Спектры регистрировали при комнатной температуре.

Результаты и их обсуждение

В результате проведенных исследований установлено, что главным и основным условием, при котором происходит трансформация германосиликатного стекла (ГСС) с самоорганизацией нанокластеров является расслоение между GeO_2 и SiO_2 , восстановление, с одной стороны, кремнием, а с другой стороны, водородом GeO_2 до Ge, образование ядер ма-

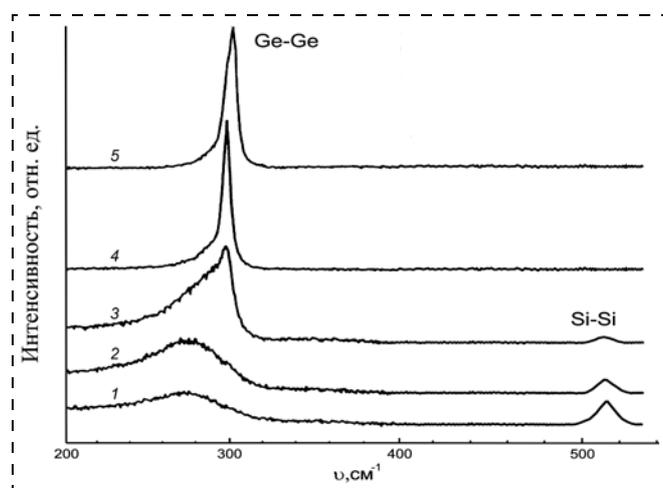


Рис. 1. Спектры рамановского рассеяния ГСС с содержанием Ge $5 \cdot 10^{19}$ ат. \cdot см $^{-3}$: сразу после окисления ПКК (кривая 1), после термообработки при температуре 500 °C (2), 700 °C (3), 800 °C (4) и 900 °C (5)

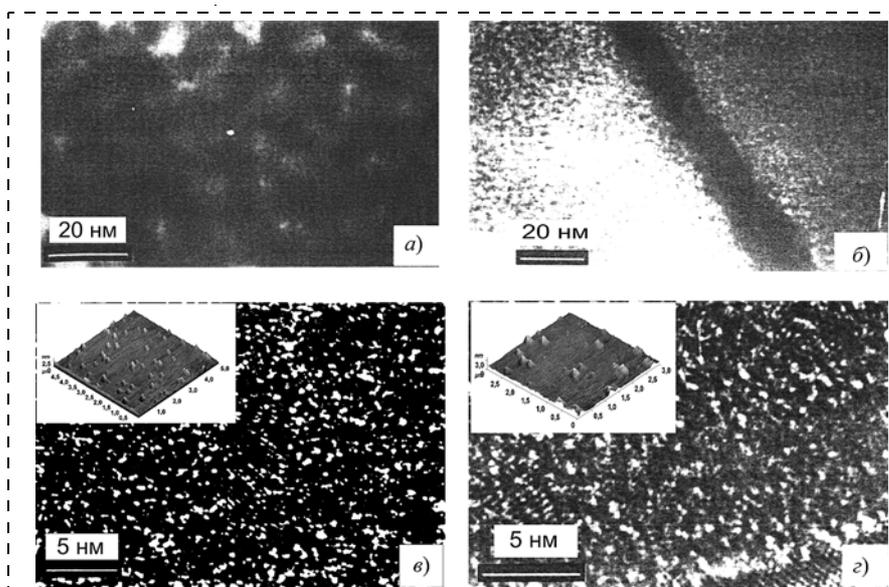
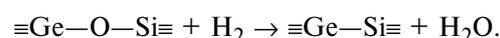
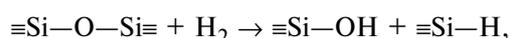
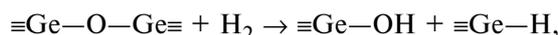
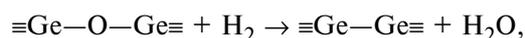
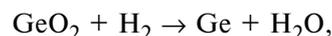
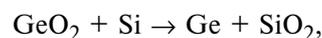
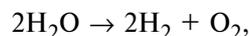


Рис. 2. Топографии структуры пленок ГСС: после окисления (а); после расслоения (б) и с содержанием германия в пленке НСПКК (Ge) 10^{18} ат. \cdot см $^{-3}$ (е) и $5 \cdot 10^{19}$ ат. \cdot см $^{-3}$ (з)

леньких кристаллитов германия (Ge) и их последующий рост.

Установлено, что термическая обработка слоев $\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$, полученных путем окисления НСПКК, легированных германием, во влажном кислороде при температуре выше 700 °C приводит к восстановлению германия и самоорганизации нанокластеров (рис. 1, 2). Восстановление Ge (редукция GeO_2) во влажном кислороде происходит в соответствии со следующими реакциями:



Оба процесса зависят от химического состава аморфных пленок ГСС. В этом аспекте важная роль принадлежит ускоренной самоорганизации нанокластеров германия, по сути, в аморфном смешанном оксиде $\text{GeO}_2-\text{SiO}_2$ в результате восстановления диоксида германия (GeO_2) кремнием и водородом до Ge (см. рис. 1).

На рис. 2 представлены топографии структуры аморфной и перекристаллизованной пленок ГСС с различным содержанием германия в исходной пленке НСПКК (Ge). На этом рисунке отчетливо видны темные области в пленке окисленного НСПКК (Ge), а на вставке размер и плотность самоорганизующихся нанокластеров. По-видимому темные области обусловлены неоднородностью распределения германия в объеме ГСС. Хотя они могут быть также по причине разброса толщины и плотности пленки. На рис. 2 верхний приграничный слой германия также

представлен темной областью по отношению к ГСС. Это свидетельствует в пользу того, что слой германия действительно образуется в приповерхностной области пленки окисленного НСПКК (Ge).

В пленке ГСС, отожженной при 800 °С в среде влажного кислорода, видно большое число нанокластеров германия с размером 2...5 нм. Это хорошо иллюстрирует рис. 2, на котором видно, что в аморфной матрице окисленного НСПКК (Ge) содержатся действительно нанокристаллы германия размером 2...5 нм.

Анализ спектров КРС (см. рис. 1) показывает насколько трансформируется структура ГСС в результате термообработки в среде влажного кислорода при температуре 500...900 °С. Сразу же после окисления пленки НСПКК (Ge) до ГСС последняя характеризуется довольно размытым пиком вблизи 270 см⁻¹. Этот пик стандартно приписывают аморфному кремнию.

Более того, есть и очень слабые пики от кремниевой подложки вблизи 520 см⁻¹, присущие связям Si—Si. При температуре термообработки 800...900 °С не обнаружено спектров в области между 520 и 300 см⁻¹, характерных для связи Ge—Si, что свидетельствует об образовании в этих условиях только нанокластеров германия. Следует отметить, что интенсивность пика в области 520 см⁻¹ после термообработки с увеличением концентрации германия в ГСС немного увеличивается в результате уменьшения эффективного поглощения за счет самоорганизации аморфных групп Ge (рис. 3).

В процессе исследований таких ГСС нами не обнаружен и широкий пик в области 480 см⁻¹, соответствующий связанному Si в аморфных пленках. Самоорганизация кластеров аморфного Ge подтверждена сужением и исчезновением широких пиков приблизительно на 270 см⁻¹, характерных для аморфных слоев, и появлением острого пика фона на в области 300 см⁻¹. В ненапряженных нанокластерах германия пик Ge—Ge симметричный и сосредото-

чен в области 300,5 см⁻¹ с полной шириной в полу-максимуме 2,7 см⁻¹ (см. рис. 1). Нами также установлено, что с увеличением температуры термообработки острый пик рамановского рассеяния с асимметричным плечом в области низких частот перемещается к 300,5 см⁻¹, как следует из рис. 1. Используя результаты рамановского рассеяния, нами оценен средний размер нанокристаллов как функции температуры их термообработки. Расчет среднего размера нанокластеров Ge в ГСС с температурой термообработки показал, что термообработка ГСС в среде влажного кислорода при 800 °С приводит к незначительному увеличению среднего размера нанокластеров, а именно до размера порядка 7 нм (см. рис. 1, 2). Повышение температуры термообработки до 900 °С способствует тому, что пик спектра рамановского рассеяния достигает положения, характерного для чистого монокристаллического германия (см. рис. 1). Это указывает на то, что средний размер нанокластеров больше чем 15 нм, что более чем в 2 раза больше размеров нанокластеров в случае термообработки при 800 °С. Более того, полная ширина в полу-максимуме этого пика — 8 см⁻¹, в противоположность пику в 2,7 см⁻¹, характерному для монокристаллического германия. Структурное состояние затрагивает форму линии фона нанокристаллических пленок и приводит к изменению положения пика для однородного и гомогенного структурных состояний. В результате получено неоднородное распределение по структуре нанокластеров германия, встроженных в матрицу ГСС (см. рис. 2), на что указывает и сильное расширение линий пика обратного рамановского рассеяния света (см. рис. 1).

На рис. 3 приведены спектры рамановского рассеяния пленок ГСС после термообработки в среде влажного кислорода при 800 °С, но с различным содержанием германия. Пики, которые приведены на рис. 3, суммируют средние размеры кристаллитов, сформировавшихся во влажном кислороде при температуре термообработки 800 °С. Они коррелируют с условиями их формирования, а именно парциальным давлением моносилана и моногермана при формировании НСПКК (Ge), с условиями формирования непосредственно ГСС и протекающими химическими реакциями в составе ГСС [19, 20]. Обнаружено, что состав пленок НСПКК (Ge) имеет существенное влияние на процесс самоорганизации кластеров германия. Об этом свидетельствуют спектры рамановского рассеяния (см. рис. 3). Обнаружено, что с увеличением содержания германия в ГСС от 10¹⁷ до 5 · 10¹⁹ ат. · см⁻³ и с увеличением толщины пленок НСПКК (Ge) при их осаждении и легировании германием происходит увеличение плотности нанокластеров. Но вместе с тем в этом случае обнаружено уменьшение содержания кислорода до 10 ат. %, а это уже коррелирует с увеличивающимся содержанием кластеров твердого раствора Ge—Si в матрице ГСС. Подтверждением этому является ширина спектра рамановского рассеяния между 360 и 390 см⁻¹ (см. рис. 3), характерного для связи Ge—Si [21—23]. Присутствие, особенно широких (390 см⁻¹) спектров в пленках ГСС, приготовленных при малом объемном содержании кислорода, предположительно можно объяс-

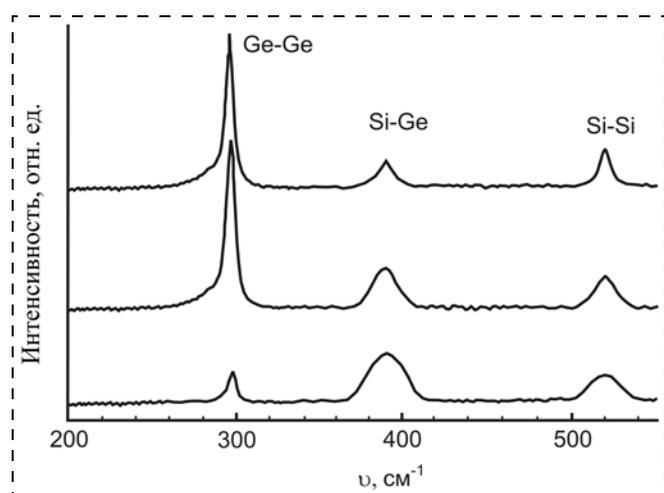


Рис. 3. Спектры рамановского рассеяния света пленок ГСС (Si_xGe_yO_z) после термообработки во влажном кислороде при температуре 800 °С в течение 30 мин. Парциальное давление воды в кислороде 0,1 Па. Содержание германия в ГСС, ат. · см⁻³: 10¹⁷ (1), 10¹⁸ (2) и 5 · 10¹⁹ (3)

нить тем, что в объеме ГСС существуют неокисленные области твердого раствора GeSi.

В результате приходим к заключению, что образование включений кластеров твердого раствора Ge—Si предотвращает как сегрегацию германия, так и формирование цепочек его групп, действующих как ядра кристаллизации. По нашему мнению, в процессе термообработки в среде влажного кислорода атомная концентрация кислорода большая чем 15 ат. % по отношению к кремнию и германию необходима для предотвращения формирования кластеров твердого раствора Ge—Si и возбуждения сегрегации германия и самоорганизации его нанокластеров. Если же содержание Si значительно увеличивается, то атомы Si не связываются кислородом и появляются области твердого раствора SiGe. Увеличение содержания германия в НСПКК (Ge) от 10^{17} до $5 \cdot 10^{19}$ ат. · см⁻³ способствует увеличению размера нанокластеров германия, однако не коррелирует с увеличением числа нанокластеров в матрице ГСС [19, 20].

Всегда в составе как свежеприготовленных, так и отожженных образцов существуют очень небольшие области твердого раствора Si—Ge, как и в свежеприготовленных, так и в отожженных пленках ГСС (см. рис. 1, 3).

В результате рентгеноструктурного анализа ГСС ($\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$) и его интерпретаций подтверждено, что действительно самоорганизуются нанокластеры германия (рис. 4).

В целом же процессы зародышеобразования, роста и созревания нанокластеров германия при термообработке ГСС являются сложными и при рассмотрении необходимо учитывать гетерогенность исходных слоев, поскольку германий присутствует в объеме ГСС не только в элементарном состоянии, но и в виде GeO_2 , GeO. Не исключена и реакция изовалентного замещения, поскольку кремний в данном случае выступает в роли активного восстановителя германия.

В таком случае размер нанокластеров германия может независимо контролироваться путем изменения содержания германия в составе ГСС, средой, температурой и временем термообработки.

Содержание германия в объеме ГСС как главный фактор больше всего влияет на плотность нанокристаллов, а лишь затем среда, температура и время термообработки.

Кристаллизуется германий преимущественно в кристаллографических плоскостях (111), (220) и (311) (рис. 4). Средний размер нанокристаллов, определенный по методике Шеррера, 6 нм, а начало кристаллизации обнаружено уже при ~ 500 °С. Это хорошо согласуется с результатами рамановских исследований (см. рис. 1, где нанокристаллы германия обнаружены при температуре термообработки 500 °С). Атомы германия неравномерно распределяются как между отдельными нанокластерами, так и в пределах одного кластера.

Для сравнения при термообработке ГСС в сухом кислороде обнаружено формирование вблизи границы раздела фазы оксида германия (GeO_2), химически встроенной в матрицу диоксида кремния (SiO_2). Иными словами по поверхности стимулируется

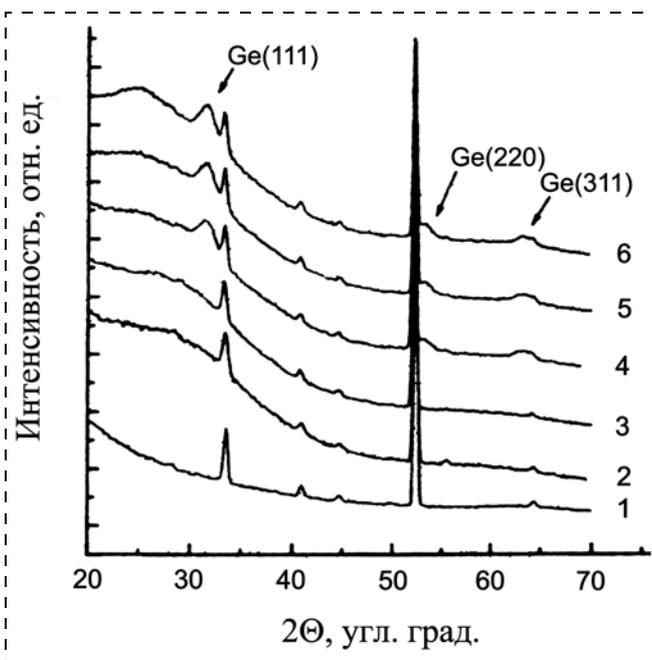


Рис. 4. Дифракция рентгеновских лучей ГСС толщиной 100 нм на окисленной пленке НСПКК (Ge):

1 — НСПКК (Ge); 2 — свежеприготовленное ГСС; 3—6 ГСС после термообработки при температуре 350, 500, 650 и 800 °С, соответственно. Содержание германия в ГСС $5 \cdot 10^{19}$ ат. · см⁻³

формирование фазы GeO_x . Большая часть атомов германия, внедренного в сетку ГСС после отжига при температуре 1100 °С, находится в позициях, когерентных с пленкой НСПКК (Ge). А это может быть в том случае, когда атомы германия диффундируют в слой НСПКК (Ge) и образуют соединение Si—Ge, сегрегируя к границе раздела Si/SiO₂. Эффект усиливается с дефектностью ГСС. Увеличение же концентрации дефектов может происходить вследствие того, что связи, обусловленные атомами германия, слабее, чем соответствующие связи, обусловленные атомами кремния [24].

В результате обнаружены нанокластеры германия в объеме всего подслоя ГСС толщиной 100 нм. Таким образом, в результате термообработки ГСС в среде влажного кислорода самоорганизация нанокластеров германия очевидна.

Полученные результаты подтверждаются и высокоразрешающей электронной микроскопией как для свежеприготовленных (рис. 5, а), так и для отожженных пленок ГСС (рис. 5, б) на толщине слоя 100 нм. Средний размер кристаллов $7,2 \pm 1,4$ нм (поперечное сечение) и $7,4 \pm 2,7$ нм (продольное сечение по слою) определен после термообработки структуры во влажном кислороде. Очевидно, что пространственное изменение размера нанокристаллов коррелирует с толщиной слоя.

В любом случае термообработка ГСС ($\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$) или $\text{SiO}_x/\text{GeO}_y$ вызывает реакцию смешивания. В этой реакции германий стремится к взаимодействию с кислородом. Замена его кремнием и формирование почти стехиометрического SiO_2 и элементарного германия начинается как минимум на толщине 0,4...0,5 нм слоя, при условии, что процесс прово-

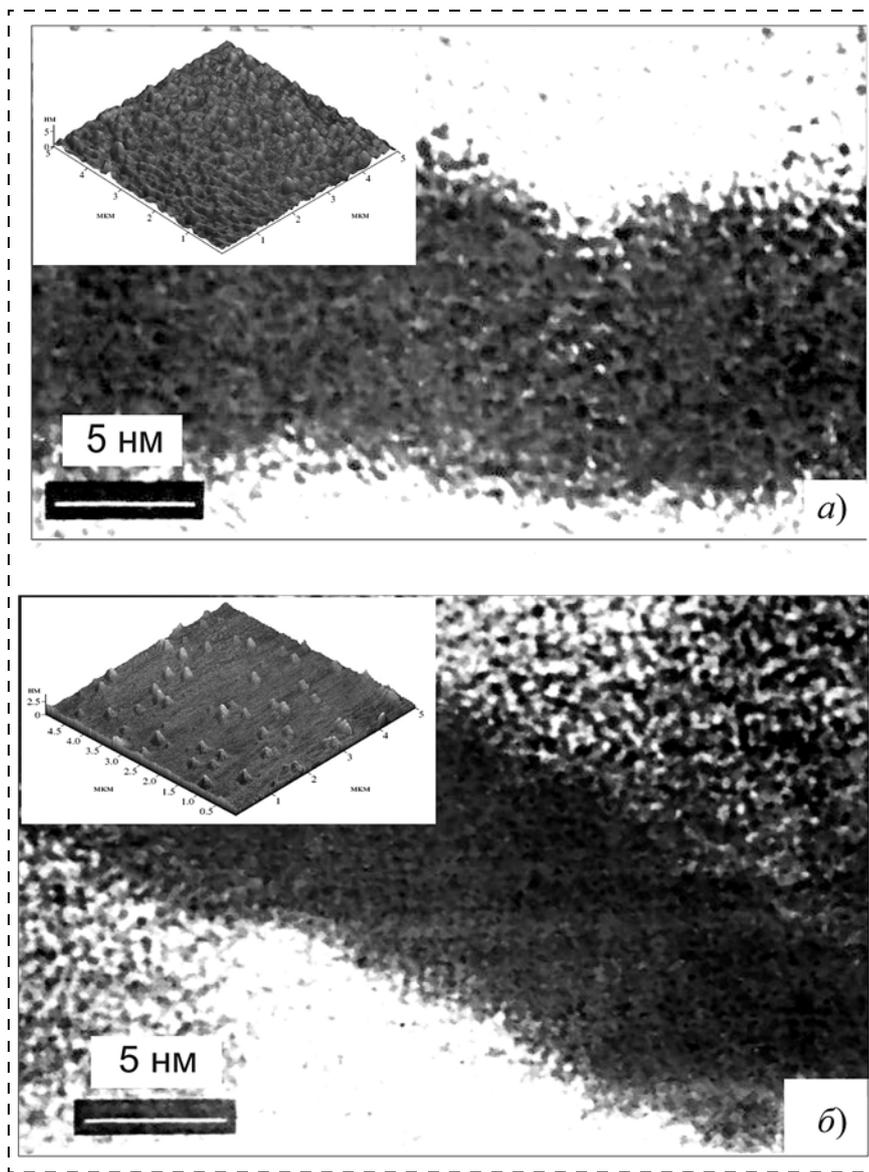


Рис. 5. Микрофотографии высокоразрешающей электронной микроскопии и АСМ нанокластеров германия в матрице ГСС после окисления НСПКК (Ge) (а) и после термообработки ГСС (б)

дится во влажном кислороде при парциальном давлении водяного пара не меньше 0,1 Па и приводит к формированию нестехиометрической матрицы SiO_x ($x \approx 1$) с различными соотношениями Ge/ SiO_x (от 0,02 до 0,2).

В процессе проведенных исследований нами не наблюдалось быстрого увеличения размеров кристаллов, пока температура отжига не достигла точки плавления германия (938,3 °С).

Особенность термообработки ГСС состоит в том, что она приводит к двум различным процессам в ГСС. Сначала происходит расслоение GeO_2 — SiO_2 , а затем сегрегация примеси. В этом случае атомы кислорода, связанные с германием, разбросаны по матрице SiO_2 , а на поверхности ГСС самоорганизуются уплотненные фазы германия.

Эти движущие силы процесса самоорганизации нанокластеров зависят от температуры и времени термообработки во влажном кислороде и локальной

концентрации элемента [19, 20]. Самоорганизация нанокристаллов германия также зависит от температуры, времени и концентраций основных элементов процесса, но по-другому в отличие от первой фазы расслоения. Она связана с дальнейшей очисткой фазы германия. Вследствие этого происходит обогащение ГСС дефектами, которые расположены в неоднородной напряженной области нанокластеров германия. Поверхность кристаллов может быть определена большим числом двойных скоординированных дефектов германия, типа O—Ge—O (GeO_2) и внутренней поверхности матрицы SiO_x с подобными O—Si—O (SiO_2) дефектами.

Следует отметить, что отличительной особенностью ГСС ($\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$), обычно получаемого методом осаждения из газовой фазы Si- и Ge-содержащих веществ, используемых в производстве интегральных микросхем, является сильная неоднородность в нанометровом масштабе. Практически независимо от конкретного метода осаждения исходный оксид содержит наноразмерные включения чистого GeO_2 или области, сильно обогащенные Ge. Именно эти области играют активную роль в эффекте образования нанокластеров, а исходно присущая гетерогенность объясняет преимущественную трансформацию дефектов, связанных с германием, и сильную зависимость электрофизических параметров от концентрации последнего. Термодинамическая нестабильность, даже относительно стехиометрических оксидов, $\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$ (в первую очередь, нестабильность фракции GeO и

SiO , GeO_2) обеспечивает достаточно легкую фазовую трансформацию.

Заключение

Таким образом, самоорганизация нанокластеров германия базируется на формировании нестехиометрических оксидных слоев с избытком германия или недостатком кислорода, растворенного в SiO_2 , а германия в $\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$.

Процессы зародышеобразования, роста и созревания нанокластеров германия при термообработке $\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{O}_z$ аналогичны процессам синтеза нанокластеров кремния в диоксиде кремния, но являются более сложными и при их рассмотрении необходимо учитывать гетерогенность исходных слоев, поскольку германий присутствует не только в элементарном состоянии, но и как GeO_2 , при этом не следует ис-

ключать реакцию изовалентного замещения, поскольку кремний выступает как активный восстановитель германия. Размер нанокластеров германия можно задавать и только изменением содержания германия в ГСС и температуры (времени) термообработки, причем первый фактор в большей степени влияет на плотность нанокластеров, учитывая высокую скорость зародышеобразования, о чем свидетельствуют маленькие размеры критического зародыша германия — порядка 1 нм. Формирование аморфных кластеров германия в осажденных слоях происходит уже при температуре около 500 °С, а оптимальный массив нанокластеров формируется при температуре 800 °С.

Список литературы

1. Тыщенко И. Е., Фельсков М., Черков А. Г., Попов В. П. Поведение германия, имплантированного в SiO₂ вблизи границы сращивания структуры кремний-на-изоляторе // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41 Вып. 3. С. 301—306.
2. Володин В. А., Гацкевич Е. И., Двуреченский А. В., Ефремов М. Д., Ивлев Г. Д., Никифоров А. И., Орехов Д. А., Акимов И. Д. Модифицирование нанокластеров германия и кремния под действием импульсного лазерного излучения // Физика твердого тела. 2003. Т. 37, Вып. 11. С. 1352—1357.
3. Dong-Won Kim, Sungbo Hwang, Eolgar T. F., Banerje S. Characterization of SiGe Quantum Dots on SiO₂ and HfO₂ Grown by Rapid Thermal Chemical Preposition for Nanoelectronic Device // Journal of Electrochemical Society. 2003. V. 150, № 4. P. 240—243.
4. Якимов А. И., Двуреченский А. В., Никифоров А. И., Чайковский С. В., Тийс С. А. Фотодиоды Ge/Si со встроенными слоями квантовых точек Ge для ближней инфракрасной области (1,3—1,5 мкм) // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37. Вып. 11. С. 1383—1388.
5. Малосиев А. Р., Плотноченко В. Г., Рыбалтовский А. О., Соколов В. О., Колгашев В. В. Образование нанокластеров германия в германосиликатных стеклах, подвергнутых термообработке в атмосфере водорода // Неорганические материалы. 2003. Т. 39, № 3. С. 374—379.
6. Грищенко В. А., Насыров К. А., Грищенко Д. В., Новиков Ю. Н. и др. Новый элемент памяти на кремниевых нанокластерах в диэлектрике с высокой диэлектрической проницаемостью ZrO₂ для электрически перепрограммируемого постоянного запоминающего устройства // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39, № 9. С. 748—753.
7. King Ya-Chin, King Tsu-Jae, Hu Chenming. MOS Memory Using Germanium Nanocrystals Formed by Thermal Oxidation of Si_{1-x}Ge_x // IEEE Transaction on Electron Devices. 1998. V. 45, № 9. P. 531—534.
8. Duta A. K. Visible photoluminescence From Ge Nanocrystal Embedded into a SiO₂ Matrix fabricated by Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 68, № 9. P. 1189—1191.
9. Светлова С. П., Шенгуров В. Г., Чалков В. Ю., Красильник З. Ф., Андреев Б. А., Дроздов Ю. Н. Гетероэпитаксиальные структуры Si_{1-x}Ge_x/Si (100), полученные сублимационной молекулярно-лучевой эпитаксией кремния в среде GeH₄ // Изв. РАН. Серия физическая. 2001. Т. 65, № 2. С. 204—207.
10. Шамирзаев Т. С., Сексенбаев М. С., Журавлев К. С., Никифоров А. И., Ульянов В. В., Пчеляков О. П. Фотолю-

минесценция квантовых точек германия, выращенных на кремнии на субмонослое SiO₂ // Физика твердого тела 2005. Т. 47. Вып. 1. С. 80—82.

11. Качурик Г. А., Реболе Л., Скорупа В., Янков Р. А., Тыщенко И. Е., Фреб Х., Бёже Т., Лео К. Коротковолновая фотолюминесценция слоев SiO₂, имплантированных большими дозами ионов Si⁺, Ge⁺ и Ar⁺ // Физики и техника полупроводников. 1998. Т. 32, № 4. С. 439—444.
12. Ковалевский А. А., Борисевич В. М., Долбик А. В. Исследование кинетики процесса осаждения слоев поликристаллического кремния в результате разложения моногидридов при пониженном давлении // Материалы. Технологии. Инструменты. 2007. Т. 12, № 3. С. 65—72.
13. Kovalevsky A. A., Borisenko V. E., Borisevich V. M., Dolbik A. V. Doping Effect in the Structure of Polycrystalline Silicon Films Grown via Silane Pyrolysis // J. Inorganic Materials. 2005. V. 41, № 12. P. 1260—1265.
14. Ковалевский А. А., Долбик А. В. Особенности взаимодействия германия с пленками поликристаллического кремния // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 4. С. 29—33.
15. Ковалевский А. А. Свойства тонких пленок бородифосфоросиликатных стекол, модифицированных германием // Неорганические материалы. 1993. Т. 29, № 5. С. 692—696.
16. Handbook of Huger Electron Spectroscopy / Eds. Davis L. E. et. al. 2nd d. Physical Electronic Industries. Edina. 1976. 256 p.
17. Нефедов В. Н. Рентгеноэлектронная спектроскопия химических соединений: Справочник. М.: Химия, 1984. 256 с.
18. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy / Eds. Wagner C. D. et. al. Parkin-Elmer Corp, 1979. 190 p.
19. Ковалевский А. А., Строгова А. С., Плякин Д. В., Строгова Н. С. Особенности самоорганизации нанокластеров германия в процессе восстановления германия в германосиликатном стекле // Труды VII Международной конференции "Аморфные и микрокристаллические полупроводники", Санкт-Петербург, 28 июня — 1 июля 2010. С. 309—310.
20. Ковалевский А. А., Строгова А. С., Борисевич В. М., Плякин Д. В., Строгова Н. С. Факторы, определяющие самоорганизацию нанокластеров германия в процессе восстановления германия в германосиликатном стекле // Труды VII Международной конференции "Аморфные и микрокристаллические полупроводники", Санкт-Петербург, 28 июня — 1 июля 2010. С. 311—312.
21. Востриков Н. В., Гусев С. П., Долгов И. В., Дроздов Ю. Н., Красильник З. Ф. и др. Упругие напряжения и состав самоорганизующихся наностроек GeSi на Si (001) // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34, Вып. 1. С. 8—12.
22. Володин В. А., Ефремов М. Д., Никифоров А. И., Орехов Д. А., Пчеляков Д. П., Ульянов В. В. Резонансное комбинационное рассеяние света в наностроек Ge, сформированных на подложке Si (111), покрытой ультратонким SiO₂ // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37, Вып. 3. С. 1220—1224.
23. Пархоменко Ю. Н., Белогорохов А. И., Герасименко Н. Н., Иржак А. В., Лисаленко М. Г. Свойства самоорганизованных Si—Ge наноструктур, полученных методом ионной имплантации // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38, Вып. 5. С. 593—597.
24. Ковалевский А. А., Бабушкина Н. В., Плякин Д. В., Строгова А. С. Самоорганизация системы высокоупорядоченных нанокластеров германия при осаждении пленок поликристаллического кремния, легированного германием // Микроэлектроника. 2010. Т. 39, № 1. С. 210—218.

С. П. Тимошенко¹, д-р техн. наук, проф., зав. каф.,
e-mail: spt@miee.ru,

Д. С. Гаев², канд. хим. наук, доц.,
e-mail: dahir@mail.ru,

А. Н. Бойко¹, канд. техн. наук, доц.,
e-mail: ant_nico@mail.ru,

Н. М. Горшкова¹, канд. техн. наук, доц.,
e-mail: gorshkovan@bk.ru

¹ Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Московский государственный институт электронной техники"

² Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова"

ИССЛЕДОВАНИЕ И РАЗРАБОТКА ГАЗОПОГЛОЩАЮЩИХ ПОКРЫТИЙ ДЛЯ МЭМС

Поступила в редакцию 12.10.10

Методом магнетронного распыления получены наноструктурированные пленки состава $Ti_{1-x}V_x$, представляющие интерес в качестве геттерных покрытий в микроэлектромеханических системах. Показано, что получаемые покрытия имеют выраженный гранулированный характер с размером зерен в диапазоне 20...120 нм. Рассчитанные значения фрактальной размерности свидетельствуют о высокой развитости поверхности пленок.

Ключевые слова: МЭМС, газопоглощающие покрытия, наноструктурирование, фрактальные структуры

Введение

При использовании многих микроэлектромеханических устройств и систем (МЭМС), таких как гироскопы, акселерометры, болометры, необходим контроль состава газовой среды или поддержание вакуума внутри корпуса, что требует применения газопоглотителей (геттеров) при производстве МЭМС. Необходимость разработки новых технологий создания геттеров для МЭМС обусловлена многими факторами. Назовем основные из них. Во-первых, это миниатюрность и особенности функционирования микросистем: традиционные газопоглотители, как распыляемые, так и нераспыляемые, имеют слишком большой объем для встраивания в корпус МЭМС. Во-вторых, многие микроструктуры не выдерживают нагрева выше 400...500 °С, т. е. требуются геттеры с низкой температурой активирования. И, в-третьих, при использовании нераспыляемых геттеров, изготавливаемых методами порошковой технологии, возможно образование микрочастиц, нарушающих функционирование МЭМС.

Поэтому актуальной задачей является разработка технологий формирования газопоглотителей, удов-

летворяющих функциональным требованиям микросистем, а также соответствующих тенденций к интеграции технологических процессов формирования микроструктур и газопоглотителей. Технология формирования геттеров должна быть совместима с процессами, применяющимися при герметизации МЭМС: анодным соединением, эвтектическим соединением, пайкой стеклянной фриттой и др. Искомые технологии должны обеспечивать активную развитую поверхность и в то же время исключать возможность появления микрочастиц в корпусе.

В связи со сказанным выше представляется перспективным метод магнетронного осаждения, который является одним из базовых методов, используемых в технологии интегральных схем при формировании металлизации. Применение магнетронного осаждения позволяет получать наноструктурированные пленки, характеризующиеся высокоразвитой поверхностью. В известной мере наличие развитой поверхности является одним из условий высокой сорбционной емкости геттера и его эффективности применительно к технологии МЭМС.

Целью настоящей работы было исследование морфологии наноструктурированных газопоглощающих пленок состава $Ti_{70}V_{30}$, полученных магнетронным распылением составных и порошковых мишеней. Выбор материала исследуемой пленки обусловлен высокоэффективными геттерными свойствами сплава $Ti_{70}V_{30}$, который характеризуется высокой активностью к газам и относительно низкой температурой активации.

Методика получения образцов

Пленки состава $Ti_{70}V_{30}$ получали на установке УВН-2М методом магнетронного распыления составной и порошковой мишеней планарного типа. Распыление мишеней выполнялось при давлении аргона 0,66 Па. Плотность ионного тока варьировалась в интервале 10...30 мА/см² при напряжении магнетрона 350...500 В. Составная мишень была изготовлена из чистых металлов (Ti, V). Площади зон ионного распыления титана и ванадия на составной мишени определялись путем моделирования соответствующих атомарных потоков с учетом коэффициентов распыления и аккомодации в плазме аргона. Порошковая мишень представляла собой пресованную пористую пластину состава $Ti_{70}V_{30}$, изготовленную методами порошковой металлургии. Пленки осаждали на окисленные кремниевые монокристаллические подложки и подложки из стекла (марка К-8), которые являются базовыми конструкционными материалами в технологии изготовления МЭМС. Предварительный разогрев подложек перед процессом распыления проводили с применением галогенных ламп до температуры 150 °С. В процессе осаждения геттерных пленок температура подложек поднималась не выше 200 °С. Толщина пленок контролировалась с помощью интерферометра Линника МИИ-4.

Результаты исследований и их обсуждение

Микроструктуру полученных в работе пленок исследовали методами световой (Latimet-20), атомно-силовой (Solver Pro EC, НТ-МДТ), ионной и электронной микроскопии (МРЭМ-200). Анализ фазового и химического состава пленок проводили на рентгеновском дифрактометре Дрон-6 и элементном флуоресцентном анализаторе Спектроскан Макс GV.

Ниже представлены результаты исследований, которые отражают характерные особенности морфологии и структуры пленок, полученных магнетронным распылением двух типов мишеней при давлении аргона 0,66 Па, плотности ионного тока 30 мА/см² и напряжении 450 В. Толщина исследуемых пленок составляла 0,4 мкм.

Обработка результатов анализа химического состава пленок на элементном флуоресцентном анализаторе показала, что отклонение химического состава пленок, полученных как на составной мишени, так и на порошковой, составляет не более 3 мол. % по титану и ванадию для всех исследуемых образцов. Следует отметить, что пленки, полученные распылением порошковой мишени, характеризуются фоновым содержанием примесей. На рис. 1 представлены спектры рентгеновской флуоресценции для пленок обоих типов. На спектрах образца, полученного распылением порошковой мишени, отмечается содержание кадмия и др.

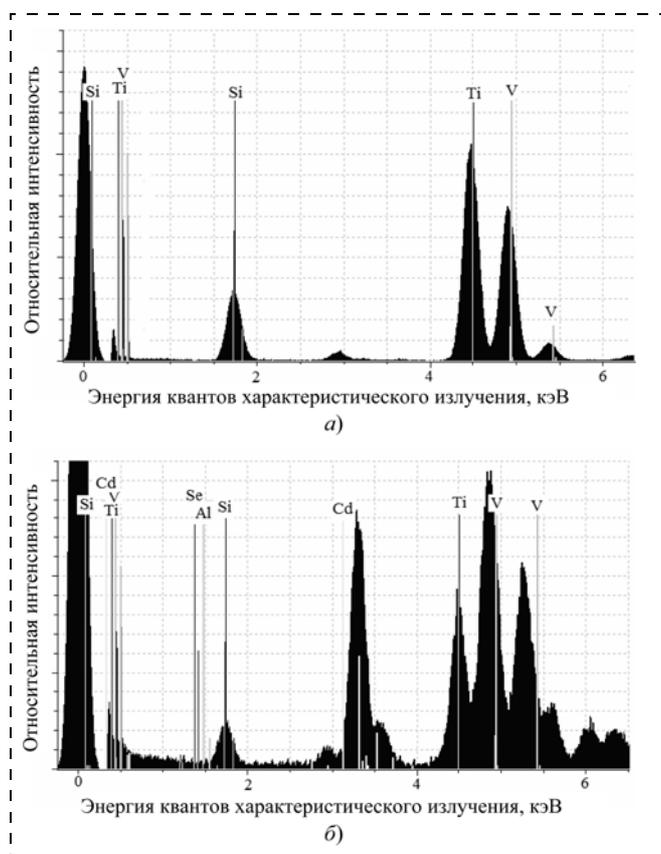


Рис. 1. Спектры рентгеновской флуоресценции пленки, полученной методом магнетронного распыления:

а — составная мишень; *б* — порошковая мишень

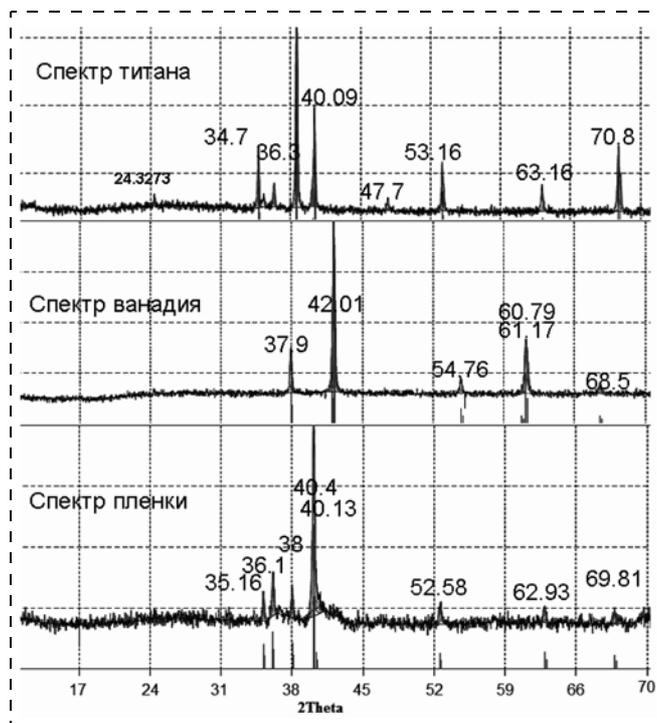


Рис. 2. Рентгеновские дифрактограммы чистых ванадия, титана и пленки состава $Ti_{70}V_{30}$ (2θ — угол вращения счетчика рентгеновских квантов)

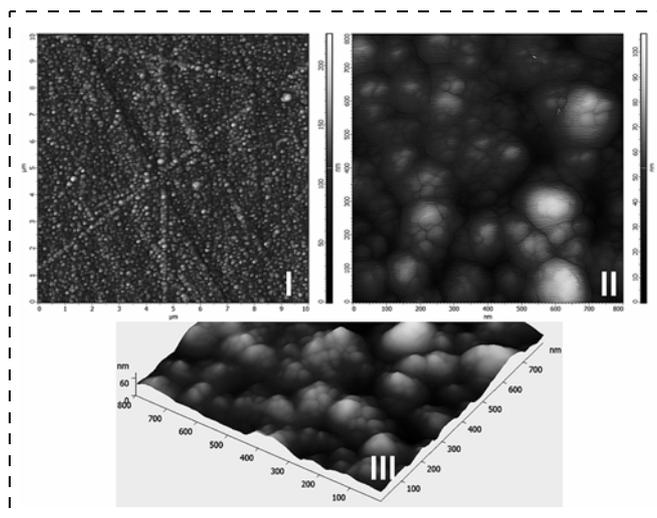


Рис. 3. 2D(I, II) и 3D(III) АСМ-изображения поверхности пленок $Ti_{70}V_{30}$, полученных распылением составной мишени

На рис. 2 представлена дифрактограмма пленки, полученной магнетронным распылением составной мишени. Анализ дифрактограмм указывает на то, что пленка, вероятнее всего, представляет собой атомарный раствор ванадия на основе титана.

Рельеф и морфологические характеристики поверхности пленок исследовали методом атомно-силовой микроскопии с использованием микроскопа Solver Pro EC. Измерения проводили на воздухе при нормальных условиях в полуконтактном режиме. На рис. 3, 4 представлены двумерные (2D, I и II) и трехмерные 3D (III) изображения поверхности образцов с зонами сканирования 10×10 , 2×2 , 1×1 мкм. Как видно из представленных результатов, в обоих случаях пленки явля-

ются выражено гранулированными в нанодиапазоне, также это просматривается на изображениях излома пленки, полученных с помощью ионной и электронной микроскопии (рис. 5). Указанный характер микроструктуры сохраняется по всей толщине пленок. Сами гранулы, как показывает анализ изображений, представляют собой фрактальные агрегаты.

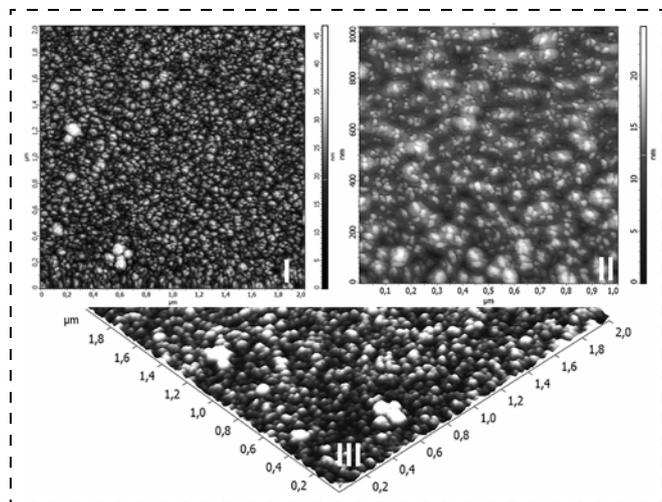


Рис. 4. 2D(I, II) и 3D(III) АСМ-изображения поверхности пленок $Ti_{70}V_{30}$, полученных распылением порошковой мишени

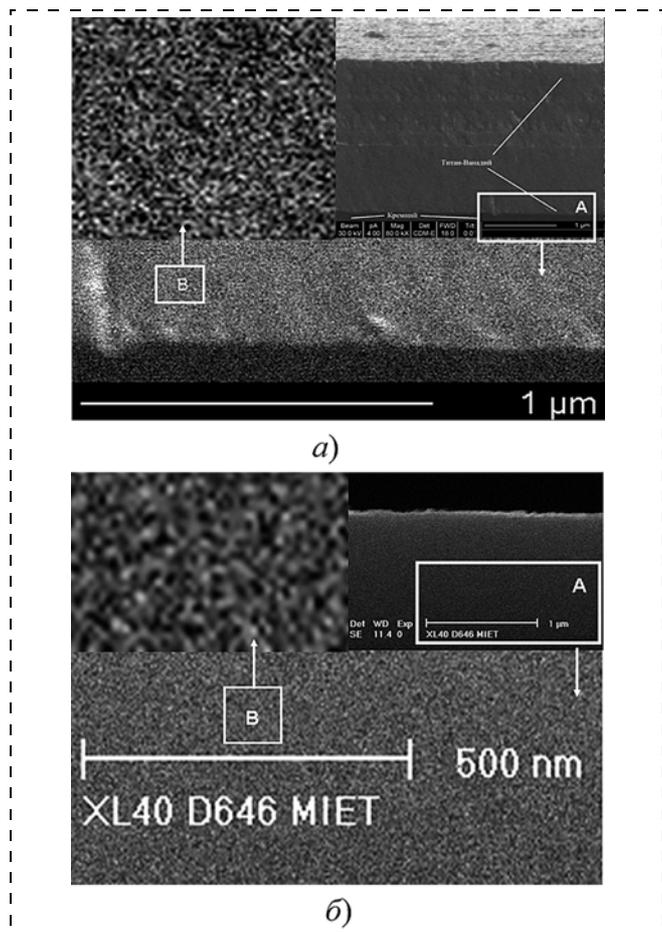
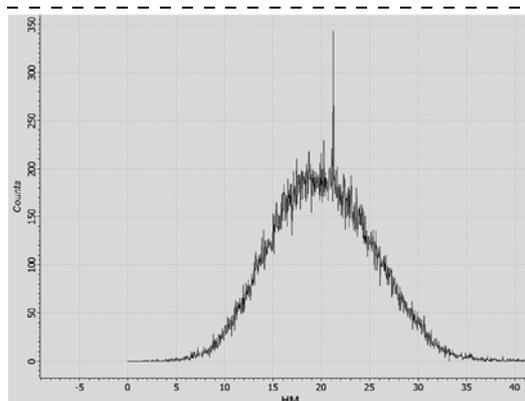
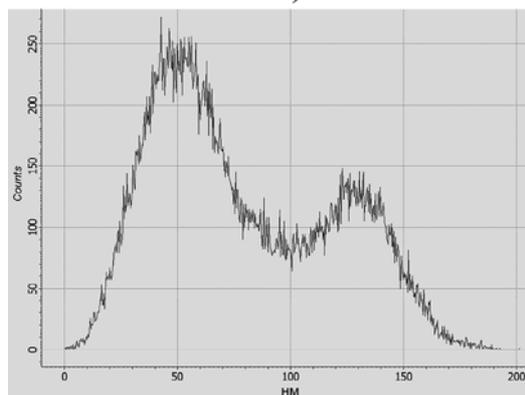


Рис. 5. Изображения на ионном (а) и электронном (б) микроскопах излома пленки $Ti_{70}V_{30}$, полученной распылением составной мишени



а)



б)

Рис. 6. Гистограммы распределения по размерам кристаллических зерен сплава на пленках состава $Ti_{70}V_{30}$, полученных методом магнетронного распыления:

а — порошковая мишень; б — составная мишень

С использованием программного пакета Nova были построены гистограммы распределения кристаллических зерен по характеристическому размеру (рис. 6). Распределение на пленках обоих типов носит двухмодальный характер. Характеристические размеры гранул пленок, полученных распылением порошковой мишени, примерно одного порядка — 18 и 23 нм для каждой моды соответственно. Структура пленок, полученных распылением составной мишени, характеризуется наличием гранул двух типов, характеристические размеры которых отличаются в два раза (рис. 6, б): размер гранул, соответствующих первой моде — порядка 50 нм, второй моде — порядка 120 нм.

В последнее время достаточно эффективно используется фрактальный подход к анализу морфологических особенностей технологических поверхностей [1–5]. Для определения фрактальной размерности пленочных структур используют различные аналитические и расчетные методы оценки. В работе для оценки фрактальных параметров мы использовали два подхода. Оценивались фрактальная размерность профиллограмм, описывающих профиль рельефа пленок, и фрактальная размерность поверхности. Фрактальная размерность профиллограмм оценивалась методом отрезков по методике, изложенной в работе [3], а фрактальная размерность поверхности — методом "площадь—периметр" по алгоритму, рекомендованному в работе [7].

Для оценки указанных фрактальных параметров анализировались АСМ-изображения поверхностей, представленные на рис. 7, а, б (фрагмент I). Фрактальная размерность рельефа поверхности оценивалась по 10 профилограммам, полученным для каждой области сканирования. На рис. 7, а, б (фрагмент II) приведены типичные профилограммы, описывающие рельеф пленки вдоль светлой линии на соответствующих АСМ-изображениях. Усредненные значения фрактальной размерности рельефа поверхности пленок, полученных распылением составной и порошковой мишеней, составили $1,74 \pm 0,04$ и $1,56 \pm 0,05$ соответственно.

Оценку фрактальной размерности поверхности проводили по результатам обработки 20 сечений плоскости поверхности пленки параллельными плоскостями, проходящими по развитой рельефной части пленок. На рис. 8 приведены зависимости суммарной площади островков S от их периметра P для каждого сечения. Линейная зависимость этих параметров указывает на фрактальные свойства исследуемых поверхностей.

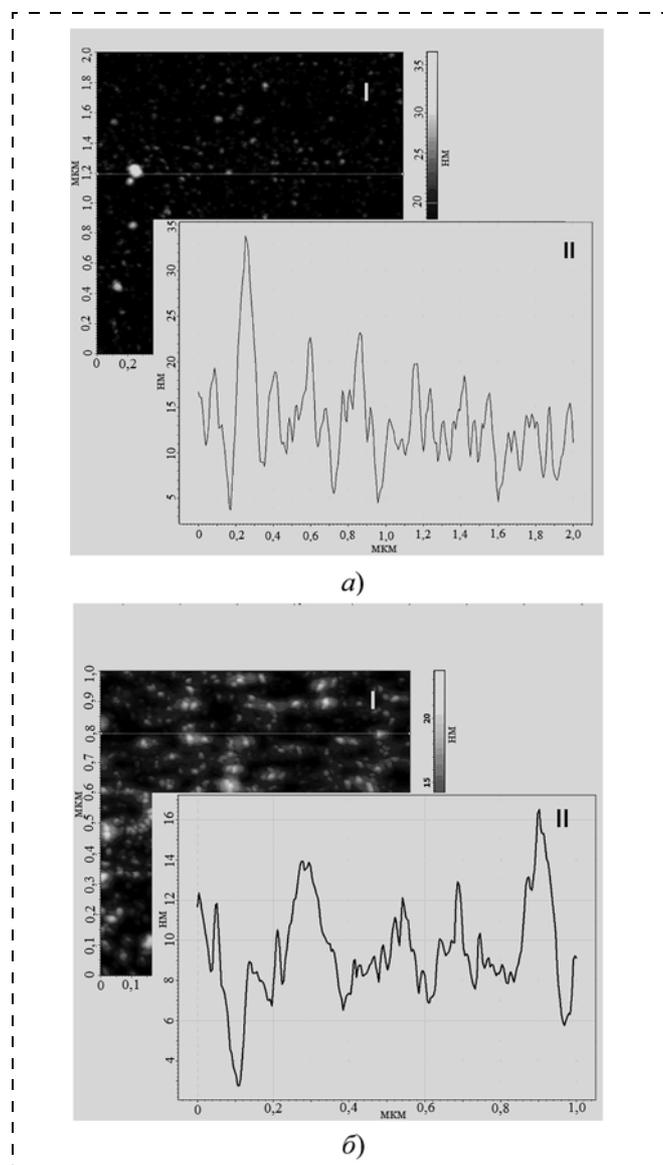


Рис. 7. Типовые профилограммы поверхности образцов пленок состава $Ti_{70}V_{30}$, полученных методом магнетронного распыления: а — составная мишень; б — порошковая мишень

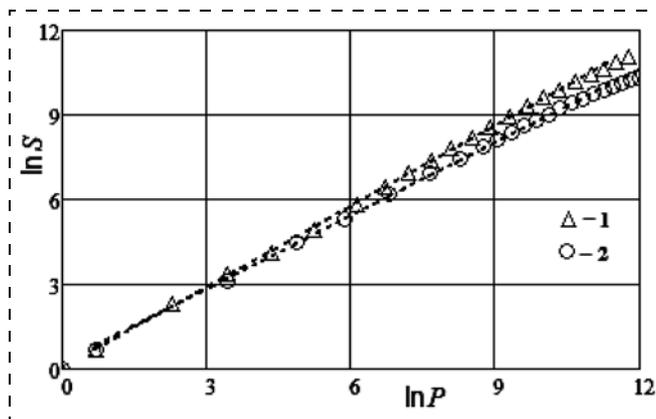


Рис. 8. Зависимость площади островков на поверхности от их периметра:

1 — составная мишень; 2 — порошковая мишень

Оценка фрактальной размерности дала значения $2,901 \pm 0,059$ и $2,721 \pm 0,104$ для пленок, полученных распылением составной и порошковой мишеней соответственно, что говорит о высокоразвитой поверхности исследуемых газопоглощающих покрытий.

Заключение

Результаты проведенных исследований указывают на то, что формирование объема и поверхности пленок происходит по фрактальному механизму. Полученные значения фрактальных характеристик свидетельствуют о высокой эффективной площади поверхности, что указывает на перспективность применения представленной технологии для формирования газопоглощающих покрытий при производстве МЭМС и других электронных устройств.

Авторы выражают благодарность А. А. Канаметову за помощь в проведении измерений на атомно-силовом микроскопе.

Исследования проведены в рамках реализации ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009—2013 годы (государственный контракт № П1226).

Список литературы

1. Торхов Н. А., Божков В. Г., Ивонин И. В., Новиков В. А. Исследование свойств поверхности арсенида галлия методом атомно-силовой микроскопии // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43. Вып. 5. С. 546—554.
2. Арутинов П. А., Толстихина А. Л., Демидов В. Н. Система параметров для анализа шероховатости микрорельефа поверхности материалов в сканирующей зондовой микроскопии // Заводская лаборатория. 1999. Т. 65. № 9. С. 27—37.
3. Измеров М. А. Методы определения фрактальной размерности инженерных поверхностей // Вестник Брянского государственного технического университета. 2006. № 3. (11).
4. Зынь В. И., Молчатский С. Л. Исследование фрактальной структуры поверхности полимерных пленок стирола и октаметилтрисилоксана // Поверхность. 1999. № 4. С. 66.
5. Шияев П. А., Павлов Д. А., Хохлов А. Ф. и др. Связь фрактальной размерности и свойств поверхности поликристаллического кремния // Микросистемная техника. № 6. 2003. С. 10—12.
6. Шишкин Е. И. Моделирование и анализ пространственных и временных фрактальных объектов. Екатеринбург: Изд. Уральского гос. университета. 2004. С. 88.
7. Шияев П. А., Павлов Д. А., Хохлов А. Ф. Методы расчета фрактальной размерности СЗМ изображений // Микросистемная техника. 2004. № 3. С. 35—38.

П. М. Чигирев, аспирант,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
E-mail: pavelchigirev@gmail.com

ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФЕНА В ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКЕ

Поступила в редакцию 05.10.10

Рассмотрены области применения графена в электронике и электронной технике как уже существующие, так и потенциальные. Описаны принципы создания транзистора на основе графена с использованием планарной технологии. Также рассмотрен процесс создания опытных образцов чипов энергонезависимой памяти, магнитометров, фотодетекторов, датчиков массы на основе графена.

Ключевые слова: графен, применение графена, транзистор на основе графена, магнитометры на основе графена, фотодетектор на основе графена, датчик массы на основе графена

Создание усовершенствованных элементов микросхем, в первую очередь транзисторов, является одной из самых основных задач нанoeлектроники. Обладая выдающимися характеристиками, графен подходит как для улучшения существующих, так и для создания совершенно новых элементов. Однако проблема промышленного получения монослоев графена с заданными свойствами окончательно не решена, тем не менее, исследования в области построения электронных устройств на основе этих материалов ведутся очень активно.

Очевидно, что свойства графена позволят создать транзистор, который будет работать в терагерцовом диапазоне. Однако данный транзистор будет иметь большой ток утечки, т. е. будет очень сложно разделить два состояния с закрытым и открытым каналом.

Использовать напрямую графен для создания полевого транзистора без токов утечки не представляется возможным ввиду отсутствия запрещенной зоны в этом материале. Сначала нужно создать запрещенную зону достаточной ширины при рабочей температуре, чтобы термически возбужденные носители вносили малый вклад в проводимость.

Для решения этой задачи можно использовать тонкие полоски графена [1] (графеновые наноленты) с такой шириной, чтобы благодаря квантово-размерному эффекту ширина запрещенной зоны была достаточной для перехода в диэлектрическое состояние (закрытое состояние) прибора при комнатной температуре. Благодаря высокой подвижности, в разы превышающей подвижность носителей в кремнии, быстродействие такого транзистора будет заметно выше. Принципиальная схема описанного транзистора [2] представлена на рис. 1.

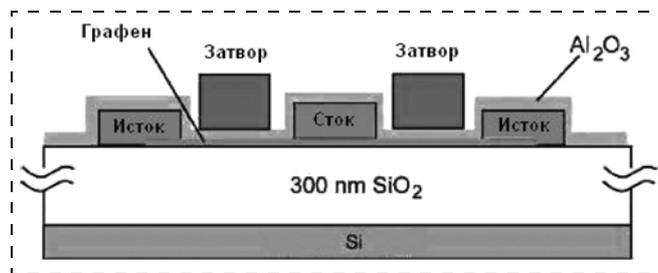


Рис. 1. Принципиальная схема полевого транзистора

Еще одна реализация была предложена авторами [3]. Транзистор состоит из графеновых истока и стока, соединенных островком из проводящего материала или из квантовой точки (рис. 2). Островок транзистора настолько мал, что способен уместить только один электрон в один момент времени. Если к островку подходят новые электроны, то они отбрасываются электростатической силой. Любой электрон из истока квантово-механически туннелирует (есть отличная от нуля вероятность его прохождения через энергетический барьер) к островку, после чего "исчезает", просачиваясь к истоку. Напряжение, приложенное к третьему электроду — затвору, управляет входом и выходом электрона с островка, таким образом регистрируя либо логический 0 (на островке нет электрона), либо 1 (электрон на островке).

Исследователи из университета штата Пенсильвания (США) создали 100-миллиметровую графеновую подложку [4] для исследования устройств сверхвысоких частот. Изначально ученые искали пути модернизации работы транзисторов в радиочастотных устройствах. По сообщениям исследователей, графен на поверхности был получен способом термического разложения SiC. Создание таких подложек с однородными свойствами графена позволит ученым вплотную приблизиться к коммерческому использованию потенциала графена.

Одно из ключевых составляющих любого компьютерного устройства — память, а в частности, энергонезависимая память, которая на сегодняшний день является основой всех коммуникаторов, нетбуков, телефонов и т. д. RRAM (резистивная память с произвольным доступом) — энергонезависимая память, основанная на использовании двух устойчивых состояний диэлектрика — состояния с высоким сопротивлением и состояния с низким сопротивлением, переключение между которыми осуществляется путем приложения внешнего напряжения.

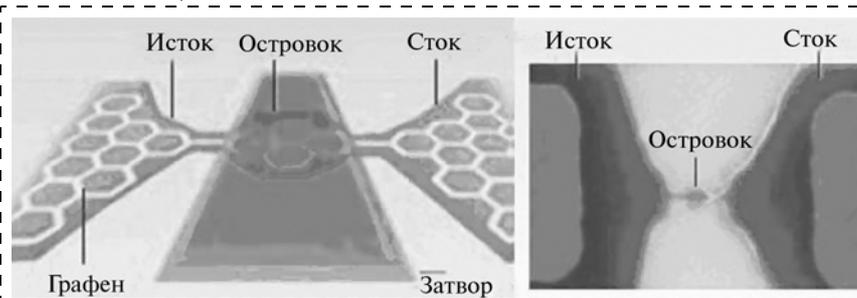


Рис. 2. Одноэлектронный транзистор на основе графена

В недавно опубликованной работе [5] группа корейских ученых продемонстрировала как с помощью пористой матрицы из анодированного оксида алюминия можно сформировать на проводящей графеновой подложке массив RRAM-памяти на основе оксида никеля. Для этого на подложку допированного ниобием титаната стронция (Nb-SrTiO_3) с атомарно-гладкой поверхностью помещают лист графена и шаблон из оксида алюминия, после чего внутри пор осаждается оксид никеля и платина, а шаблон растворяется. В результате формируется строго упорядоченный массив RRAM-памяти, при этом размеры (диаметр и толщина) наноструктур на основе оксида никеля составляют ~30 нм. Стоит отметить, что отличительными особенностями данного массива являются крайне низкие токи записи/стирания (меньше 1 нА), заметное влияние графеновой пленки на соответствующие разности напряжений, а также великолепная устойчивость состояний с высоким и низким сопротивлениями при циклировании.

Одна из фундаментальных задач физики на сегодняшний день — детектирование магнитных полей с разрешением в несколько нанометров, например, для увеличения плотности записи на жесткие магнитные диски (HDD). Современные технологии, основанные на эффекте ГМС и туннельном эффекте Гаусса, когда речь заходит о микро- и наномире, так или иначе имеют существенные ограничения вследствие теплового магнитного шума. Указанное ограничение никак не сказывается в сенсорах, основанных на эффекте Холла, однако используемые пленки полупроводников или металлов поглощают проходящее через них магнитное поле, и как следствие, имеют недостаточные чувствительность и пространственное разрешение.

Коллектив ученых из США [6] создал и изучил свойства магнитометров на основе графена, принцип работы которых основан не только на эффекте Холла, но и на эффекте магнитосопротивления. На подложку SiO_2 помещают лист графена, а на него — электроды из золота. Далее было показано, что характеристики устройства достаточно сильно зависят от приложенного магнитного поля. Также было установлено, что чувствительность магнитометров может варьироваться в широких пределах. Различия в характеристиках при переходе от одного устройства к другому, по мнению ученых, может быть связано с различными дефектными уровнями на границе графен/подложка или графен/контакты, и указывает на то, что требуется некоторая оптимизация методики получения магнитометров на основе графена.

Тем не менее, магнитометр на основе графена, имеющий субнанометровое разрешение, был продемонстрирован впервые, а работы, продолженные в данном направлении, позволяют в скором времени создать сверхминиатюрные датчики магнитного поля для самого широкого спектра применений — от биологии до магнитной памяти.

Двумерный монослой графена обладает уникальными не только элек-

тронными свойствами, но и оптическими: монослой графена способен поглощать до 2 % падающих фотонов в видимой и УФ областях спектра, а с увеличением числа слоев поглощение растет. При этом полупроводники A_3B_5 в широком диапазоне длин волн прозрачны. Уникальная комбинация оптических и электронных свойств графена позволяет создавать на его основе как новые поколения существующих устройств, так и совершенно новые устройства.

Так был создан супербыстрый фотодетектор [7] на основе одно- и многослойного графена. При поглощении света в графене происходит генерация электрон-дырочных пар, которые в обычном состоянии рекомбинируют обратно в течение десятков пикосекунд в зависимости от качества слоя и концентрации носителей заряда, однако при приложении внешнего поля может произойти разделение носителей заряда и генерация фототока. Это же происходит и в присутствии "внутреннего поля", которое, как было показано, образуется на поверхности раздела металлического электрода и графена. За счет этого поля и обеспечивается работа детектора.

В отличие от диодов Шоттки, которым ввиду большого барьера металл—полупроводник—металл требуется большое напряжение, графеновая система, где такой барьер практически отсутствует, требует практически нулевого напряжения. Для генерации фототока во внешней схеме носители заряда должны покинуть область генерации до рекомбинации. Если предположить, что в сильном поле подвижность может достигать $5,5 \cdot 10^5$ м/с, для того чтобы покинуть 200-нанометровую область фотогенерации, носителям заряда понадобится ~0,36 пс, таким образом, вероятность этого процесса довольно велика, что приводит к высокой внутренней эффективности (6...16 %).

Также на основе графена был создан сверхчувствительный датчик массы в виде наномеханического резонатора из подвешенного графена [8]. Резонансная частота колебаний подвешенной графеновой мембраны (рис. 3), собственная масса которой чрезвычайно мала, изменяется при попадании на нее частиц какого-либо вещества, что позволяет использовать такое устройство в качестве датчика массы.

Процесс создания резонаторов довольно прост: графен размещается на подложке из кремния и диоксида кремния, затем формируются электроды из золота, а в слое диоксида кремния вытравливается микроканал глубиной около 100 нм. На такую же

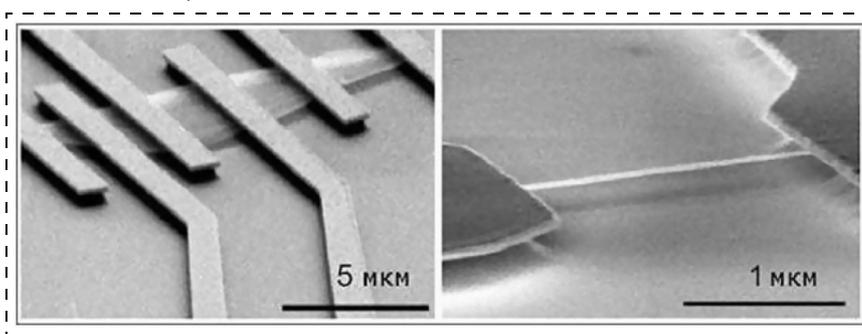


Рис. 3. Сверхчувствительный датчик массы на основе графена

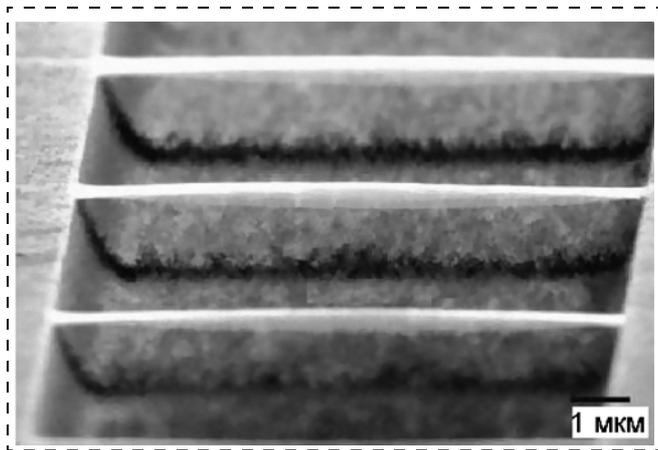


Рис 4. Полоски графена для наномеханических резонаторов

глубину вытравливается площадка под той частью электрода, которая контактирует с графеном.

Устройством управляют с помощью постоянного напряжения V_g , которое позволяет изменять натяжение мембраны и сдвигать резонансную частоту колебаний графенового слоя. Результаты экспериментов говорят о том, что резонансная частота колебаний однослойной графеновой мембраны при $V_g = -7$ В составляет приблизительно 65 МГц.

Как показали измерения в рабочем режиме, при низких температурах устройство "чувствует" изменение массы графенового слоя приблизительно на 1 зептограмм (10^{-21} г), что соответствует двум атомам золота. Было выяснено, что отклик устройства имеет более сложный характер, чем ожидалось: вещество, помещенное на графеновую мембрану, изменяет не только ее массу, но и натяжение.

Существует способ жидкофазного травления карбида кремния с выращенным на ней графеном [9]

для создания "подвешенных" наномеханических резонаторов (рис. 4).

Еще одна перспективная область применения графена — электроды в ионисторах (суперконденсаторах) для использования их в качестве перезаряжаемых источников тока [10]. Опытные образцы ионисторов на графене имеют удельную энергоемкость 32 Вт · ч/кг, сравнимую с таковой для свинцово-кислотных аккумуляторов (30...40 Вт · ч/кг).

Список литературы

1. Wang X., Ouyang Y., Li X., Wang H., Guo J., Dai H. Room-temperature all-semiconducting sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100. P. 255—259.
2. Lin Y., Jenkins K. A., Valdes-Garcia A., Small J. P. et al. Operation of graphene transistors at gigahertz frequencies // Nano Letters. 2009. Vol. 9 (1). P. 422—426.
3. Geim A. K., Kim P. Carbon Wonderland // Scientific American. 2008. Vol. 4. P. 90—97.
4. Robinson J. et al. Key milestone reached on road to graphene-based electronic devices // Focus on Materials. 2010. Vol. 3. P. 6—7.
5. Son J. Y., Shin Y. H., Kim H., Jang H. M. NiO resistive random access memory nanocapacitor array on graphene // ACS Nano. 2010. Vol. 4 (5). P. 2655—2658.
6. Pisana S., Braganca P. M., Marinero E. E., Gurnev B. A. Tunable Nanoscale Graphene Magnetometers // Nano Lett. 2010. Vol. 10 (1). P. 341—346.
7. Xia F., Mueller T., Lin Y., Valdes-Garcia A., Avouris P. Ultrafast graphene photodetector // Nature Nanotechnology. 2009. Vol. 4. P. 839—843.
8. Chen C., Rosenblat S., Bolotin K. I., Kalb W., Kim P., Kymissis I., Stormer H. L., Heinz T. F., Hone J. Performance of monolayer graphene nanomechanical resonators with electrical readout // Nature Nanotechnology. 2009. Vol. 4. P. 861—867.
9. Campos L. C., Manfrinato V. R., Sanchez-Yamagishi J. D., Kong J., Jarillo-Herrero P. Anisotropic etching and nanoribbon formation in single-layer graphene // Nano Lett. 2009. Vol. 9 (7). P. 2600—2604.
10. Vivekchand S. R., Rout C. S., Subrahmanyam K. S., Govindaraj A., Rao C. N. Graphene-based electrochemical supercapacitors // J. Chem. Sci. 2008. Vol. 120. P. 9—13.

УДК 621.382

А. А. Дудин, магистр, мл. науч. сотр.,
Е. Ф. Кустов, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН,
e-mail: alexanderdudin@msn.com

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ МАГНИТНЫХ ФЕРРИТОВ

Поступила в редакцию 05.07.10

Исследуется строение координационных сфер или орбит кристаллов с гексагональной и кубической структурой, их размеры и координационные числа. Рассчитываются орбиты атомов всех подрешеток октаэдрических и тетраэдрических пустот. В качестве базовых структур рассматриваются плотноупакованные структуры

ГЦК и ГПУ ионов кислорода магнитных материалов. Распределение катионов металлов обеих структур осуществляется по октаэдрическим и тетраэдрическим пустотам. Полученные данные помогают точно определить физические свойства частиц и материалов на основе магнитных наночастиц.

Ключевые слова: строение, координационная сфера, орбита, кристалл, магнитные кластеры

Введение

Геометрические и физические свойства магнитных ферритов хорошо изучены. Есть множество таблиц и формул для их расчета. Однако при работе с магнитными материалами, имеющими размеры наночастиц, эта информация оказывается бесполезной. Свойства объемных материалов в большей степени зависят от состава и внутреннего строения. Изменение их размеров оказывает слабое влияние на

физические параметры. При переходе к наноразмерным объектам наблюдается противоположная картина. Сильная зависимость физических свойств наночастиц от их размеров обусловлена большим числом атомов на поверхности частицы — так называемый "размерный эффект". При малых размерах число атомов в объеме и на поверхности примерно одинаково, а если речь идет об оболочках или очень маленьких наночастицах (10...20 нм), то их число по сравнению с числом атомов в объеме становится очень большим.

В данной работе описан новый метод определения геометрических и физических свойств наночастиц магнитных материалов. Он основан на орбитальной модели наночастиц и нанокластеров. Информация об орбитах кластеров и наночастиц позволяет с большой точностью определить основные физические свойства полученных материалов.

Данный метод применяется для расчета орбит кластеров с гексагональной кристаллической структурой магнетоплюмбита, ильменита и корунда, а также с кубической структурой шпинели и перовскита. Для этих структур рассчитаны радиусы и координационные числа орбит, а также магические числа магнитных кластеров.

Оболочки кластеров с кристаллической структурой

Теория строения наноструктурных материалов дискретных составов: наночастиц, кластеров, нанокристаллов, квантовых точек на основе орбитальной системы строения наномасштабных структур развита в работах [1—3]. Орбита определяется как совокупность атомов с одинаковыми расстояниями от центра системы и характеризуется координационным числом k . Структура наномасштабных материалов, описываемых орбитальной системой, формируется как набор концентрических, вложенных друг в друга орбит атомов эквидистантных от центра системы. Орбиты группируются в оболочки, имеющие формы полиэдров, в вершинах, ребрах или на гранях которых расположены атомы с различными типами упаковок.

Для основных групп симметрии имеются пять координационных чисел (КЧ), линейная комбинация которых определяет составы любых оболочек.

Орбитальная система основана на группах симметрии основных семи кристаллических сингоний и включает в себя пятикратную симметрию икосаэдрической и пентагональной сингоний. Всего орбитальная система наноструктур включает 39 групп точечной симметрии, распределенных по девяти сингониям [4, 5].

Наночастицы и кластеры магнитных материалов в большинстве случаев имеют структуру основных кристаллических плотных упаковок анионов: это гранецентрированная кубическая (ГЦК) структура и гексагональная плотной упаковки (ГПУ) структура. Кластеры икосаэдрической плотной упаковки (ИПУ) структуры рассмотрены в работе [3] и в магнитных структурах к настоящему времени не встречаются. Причиной этому может быть тот факт, что икосаэдрические и пентагональные кристалличе-

ские структуры не существуют, а синтез наночастиц магнитных материалов осуществляется в формате существующих кристаллических структур. Существуют только додекаэдрические центры в кристаллической структуре граната, да и только для немагнитных катионов больших размеров. Поэтому магнитные частицы с осями симметрии пятого порядка — это объекты будущих исследований в области новых магнитных материалов.

Структура, состав и классификация кластеров различных групп симметрии приведены в работе [6].

В этой работе исследуется строение кластеров различной симметрии с различными типами анионных упаковок и различными типами упаковок катионов по тетраэдрическим и октаэдрическим пустотам. Разработанный метод конструирования кластеров применяется к кластерам со структурой кристаллов гексагональных и кубических ферритов.

Кластеры с идеальной гексагональной ГПУ структурой

Аналитические выражения радиусов орбит ГПУ структуры следующие:

- для основной ГПУ решетки

$$W: R^2([j_1 j_2 j_3]) = \left(j_1 + \frac{1}{2}j_2\right)^2 + \frac{3}{4}j_2^2 + \left(\frac{c}{a}\right)^2 j_3^2; \quad (1)$$

$$W': R^2([j_1 j_2 j_3]) = \left(j_1 + \frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}\left(j_2 + \frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(j_3 + \frac{1}{2}\right)^2;$$

- для решетки с центром в октаэдрической пустоте

$$O: R^2([j_1 j_2 j_3]) = \left(j_1 + \frac{1}{2}j_2\right)^2 + \frac{3}{4}\left(j_2^2 + \frac{2}{3}\right) + \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(j_3^2 + \frac{1}{4}\right)^2; \quad (2)$$

$$O': R^2([j_1 j_2 j_3]) = \left(j_1 + \frac{1}{2}j_2\right)^2 + \frac{3}{4}\left(j_2^2 - \frac{2}{3}\right) + \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(j_3^2 - \frac{1}{4}\right)^2;$$

- для решетки с центром в тетраэдрической пустоте

$$T: R^2([j_1 j_2 j_3]) = \left(j_1 + \frac{1}{2}j_2\right)^2 + \frac{3}{4}j_2^2 + \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(j_3^2 + \frac{5}{8}\right)^2; \quad (3)$$

$$T': R^2([j_1 j_2 j_3]) = \left(j_1 + \frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}\left(j_2^2 + \frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(j_3^2 + \frac{1}{8}\right)^2,$$

где W и W' — радиусы орбит атомов (кислорода в данном случае) в двух подрешетках; O и O' — радиусы орбит атомов в октаэдрической пустоте; T и T' — радиусы орбит атомов в тетраэдрической пустоте.

Координационные числа и квадраты радиусов орбит атомов кластеров с плотноупакованными гексагональными оболочками двух подрешеток с идеальным значением параметра $(c/a)^2 = 8/3$ даны в табл. 1.

Таблица 1

Координационные числа и квадраты радиусов координационных сфер и координаты атомов кластеров с плотноупакованными гексагональными оболочками (ГПУ) с идеальным значением параметра $(c/a)^2 = 8/3$

ГПУ W		ГПУ W'	
k	R^2	k	R^2
1	0,00	—	—
6	1,00	6	1,00
2	2,67	6	2,00
6	3,00	12	3,00
12	3,67	12	5,00
6	4,00	6	6,00
12	5,67	6	6,33
12	6,67	12	7,00
12	7,00	6	7,33
6	9,00	12	8,33
24	9,67	6	9,00
2	10,67	12	10,00
24	11,67	12	10,33
6	12,00	12	11,00
12	13,00	6	11,33
12	13,67	12	12,33
24	14,67	12	13,00
24	15,67	6	14,33
6	16,00	12	15,00
24	17,67	12	15,33
—	—	12	16,33
—	—	24	17,00
—	—	18	18,00

Магические числа магнитных кластеров ГПУ структуры с октаэдрическими и тетраэдрическими узлами

Магнитные материалы с ГПУ структурой имеют основные структурные типы как у корунда, ильменита и магнетоплюмбита [7, 8].

Структура типа корунда образуется на базе ГПУ структуры атомов кислорода, причем катионы занимают только октаэдрические позиции. Эта структура встречается у оксидов трехвалентных металлов $M_2^{3+}O_3^{2-}$ ($M = Fe, Cr, Al$ и т. д.). Катионы находятся в эквивалентных позициях, поэтому у простых оксидов трехвалентных элементов ферримагнетизм возникнуть не может. Гематиты $Fe_2^{3+}O_3^{2-}$ и $Cr_2^{3+}O_3^{2-}$ являются антиферромагнетиками.

Структура ильменита ABO_3 образует диоксиды, причем катионы A и B не сильно отличаются по размерам, чередуются друг с другом и оба могут иметь октаэдрическую координацию.

Структуру ильменита имеют кристаллы титанатов Fe, Mn, Co, Ni , а также манганаты: $CoMnO_3, NiMnO_3$. Кристаллы со структурой ильменита могут быть ферримагнетиками при благоприятных условиях или антиферромагнетиками. Например, титанаты стехиометрического состава являются антиферромагнетиками.

В структурах магнетоплюмбита $PbFe_{12}O_{19}$ ионы Pb занимают позиции анионов кислорода, а катио-

Таблица 2

Радиусы орбит (R^2), координация орбит (k), магические числа (N_λ) ГПУ (h), тетраэдрической (t) и октаэдрической (o) подрешеток кластеров с гексагональной кристаллической структуры магнетоплюмбита, ильменита и корунда

Параметры			PbFe ₁₂ O ₁₉		TiFeO ₃		Fe ₂ O ₃	
24R ²	Тип	k	N_λ	Ионы	N_λ	Ионы	N_λ	Ионы
0	h	1	1	O ²⁻	1	O ²⁻	1	O ²⁻
9	t	4	5	Fe ³⁺	5	Ti ⁴⁺	—	—
12	o	6	11	Fe ³⁺	11	Fe ³⁺	7	Fe ³⁺
24	h	12	23	O ²⁻	23	O ²⁻	19	O ²⁻
25	t	1	24	Fe ³⁺	24	Ti ⁴⁺	—	—
33	t	9	33	Fe ³⁺	33	Fe ³⁺	—	—
36	o	6	39	Fe ³⁺	39	Ti ⁴⁺	25	Fe ³⁺
44	o	6	45	Fe ³⁺	45	Fe ³⁺	31	Fe ³⁺
48	h	6	51	O ²⁻	51	O ²⁻	37	O ²⁻
49	t	6	57	Fe ³⁺	57	Fe ³⁺	—	—
57	t	9	66	Fe ³⁺	66	Ti ⁴⁺	—	—
60	o	12	78	Fe ³⁺	78	Fe ³⁺	49	Fe ³⁺
64	h	2	80	O ²⁻	80	O ²⁻	51	O ²⁻
68	o	6	86	Fe ³⁺	86	Fe ³⁺	57	Fe ³⁺
72	h	18	104	O ²⁻	104	O ²⁻	75	O ²⁻
81	t	9	113	Fe ³⁺	113	Fe ³⁺	—	—
88	h	12	125	O ²⁻	125	O ²⁻	87	O ²⁻
89	t	3	128	Fe ³⁺	128	Ti ⁴⁺	—	—
92	o	12	140	Fe ³⁺	140	Fe ³⁺	99	Fe ³⁺
96	h	6	146	O ²⁻	146	O ²⁻	105	O ²⁻
97	t	6	152	Fe ³⁺	152	Ti ⁴⁺	—	—
105	t	18	170	Fe ³⁺	170	Fe ³⁺	—	—

ны Fe распределяются по октаэдрическим и тетраэдрическим позициям.

В табл. 2 даны параметры подрешеток кластеров с ГПУ структурой типа магнетоплюмбита ($PbFe_{12}O_{19}$), ильменита ($TiFeO_3$) и корунда (Fe_2O_3).

Коэффициент 24 при R^2 обусловлен особенностями геометрического расположения атомов в ячейках элементарных решеток этого типа кластеров.

Для гексаферрита бария распределение атомов по узлам решетки следующее.

В узлах гексагональной подрешетки ГПУ структуры находятся атомы кислорода и атомы бария, замещающие атомы кислорода в узлах с координацией 12.

Блок S содержит катионы Fe^{3+} в тетраэдрических и октаэдрических позициях. Блок R содержит катион Pb^{2+} и 6 катионов Fe^{3+} , из них 5 катионов имеют координацию 6 и один координацию 5 как слипшиеся основанием два тетраэдра атомов кислорода.

Первый кластер с 23 атомами состоит из трех орбит с общей формулой: $[O^{2-} @ Fe_4^{3+} @ Fe_6^{3+} @ O_{12}^{2-}]$,

химическая формула $[Fe_{10}^{3+} O_{13}^{2-}]^{4+}$.

Кластерная структура ильменита $TiFeO_3$ имеет 23 атома, состоит из трех орбит с общей формулой:

$[O^{2-} @ Ti_4^{4+} @ Fe_6^{3+} @ O_{12}^{2-}]$ и химической формулой

$Ti_4Fe_6O_{13} : [Ti_4^{4+} Fe_6^{3+} O_{12}^{2-}]^{16+}$.

Радиусы орбит (R^2), координация орбит (k), магические числа (N_λ) ГЦК (c), тетраэдрической (t) и октаэдрической (o) подрешеток кластеров с кубической кристаллической структурой шпинели

Параметры			MFe ₂ O ₄ (шпинели)		ABO ₃ (перовскиты)	
R^2	Тип	k	N_λ	Ионы	N_λ	Ионы
0	c	1	1	O ²⁻	1	A
0,1875	t	4	5	M	—	—
0,25	o	6	11	Fe ³⁺	—	—
0,5	c	12	23	O	13	O
0,6875	t	12	35	M	—	—
0,75	o	8	43	Fe ³⁺	21	B
1	c	6	49	O	27	A
1,1875	t	12	61	M	—	—
1,25	o	24	85	Fe ³⁺	51	B
1,5	c	24	109	O	75	O
1,6875	t	16	125	M	—	—
2	c	12	137	O	87	A
2,1875	t	24	161	M	—	—
2,25	o	30	191	Fe ³⁺	117	B
2,5	c	24	215	O	141	O
2,6875	t	12	227	M	—	—
2,75	o	24	251	Fe ³⁺	165	B
3	c	8	259	O	173	A
3,1875	t	24	283	M	—	—
3,25	o	24	307	Fe ³⁺	197	B
3,5	c	48	355	—	245	O

Структура корунда Fe₂O₃ имеет следующий кластер с 19 атомами, который состоит из трех орбит с общей формулой: [O²⁻@Fe₆³⁺@O₁₂²⁻] и химической

формулой Fe₆O₁₃: [Fe₆³⁺O₁₃²⁻]⁸⁻.

Размеры всех кластеров определяются радиусом орбиты ионов кислорода и равны $R = a$, где a — параметр кристаллической решетки соответствующего кристалла.

Кластеры кубических магнитных структур

Химическая формула шпинели феррита M²⁺Fe₂³⁺O₄²⁻. Кристаллическая структура содержит 8 молекул в элементарной ячейке. В шпинели ионы кислорода формируют идеальную гранцентрированную кубическую решетку (ГЦК). Катионы занимают тетраэдрические (8) и октаэдрические (16) пустоты. В нормальной [M²⁺]_(тетр)[Fe₂³⁺]_(окт)[O₄²⁻]_(ГЦК) шпинели M²⁺ занимают тетраэдрические пустоты, а Fe₂³⁺ октаэдрические пустоты. В обращенной [Fe₂³⁺]_(тетр)[M²⁺Fe₂³⁺]_(окт)[O₄²⁻]_(ГЦК) шпинели M²⁺ занимают половину октаэдрических пустот, а половина Fe₂³⁺ — тетраэдрические пустоты.

Радиусы орбит трех подрешеток шпинельной структуры:

$$\text{ГЦК: } \left(\frac{1}{2}j_1 + \frac{1}{2}j_2\right)^2 + \left(\frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{2}j_3\right)^2 + \left(\frac{1}{2}j_1 + \frac{1}{2}j_3\right)^2; \quad (4)$$

тетраэдрической:

$$\left(\frac{1}{2}j_1 + \frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{2}j_3 + \frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}j_1 + \frac{1}{2}j_3 + \frac{1}{4}\right)^2; \quad (5)$$

$$\text{октаэдрической: } \left(\frac{1}{2}j_1 + \frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}j_2 + \frac{1}{2}j_3\right)^2 + \left(\frac{1}{2}j_1 + \frac{1}{2}j_3\right)^2 \quad (6)$$

Распределение ионов в нормальной шпинели показаны в табл. 3.

Первый кластер шпинельной структуры с 23 атомами состоит из трех орбит с общей формулой [O²⁻@M₄²⁺@Fe₆³⁺@O₁₂²⁻] с химической формулой [M₄²⁺Fe₆³⁺O₁₃²⁻]. Кластер шпинельной структуры совпадает с аналогичным кластером гексаферрита с заменой ионов железа в тетраэдрических узлах на

ионы двухвалентного катиона M. Вследствие этого кластер шпинельной структуры становится нейтральным.

Перовскитная структура образуется из упаковки ионов кислорода в ГЦК структуру, причем 1/3 атомов кислорода замещена двухвалентным катионом A большого радиуса. Катионы B занимают октаэдрические пустоты. Первый кластер перовскитной структуры с 21 атомами состоит из трех орбит с общей формулой [A²⁺@O₁₂²⁻@B₈⁴⁺] и химической формулой [A²⁺B₈⁴⁺O₁₃²⁻]⁸⁺.

Размеры кластеров определяются радиусом орбиты ионов кислорода и равны $R = a/2$ (табл. 3), где a — параметр кристаллической решетки соответствующего кристалла.

Следует отметить, что кубические кластеры магнитных структур имеют меньшие относительные размеры, чем гексагональные. Однако реальные соотношения размеров зависят от параметров кристаллических решеток.

Заключение

Изложенный выше материал показывает возможности влиять на магнитные характеристики синтезируемых наночастиц путем изменения их морфологии: размеров, формы и состава, соотношения ядро—оболочка, расположения частиц в матрице.

Температурная обработка (отжиг) может менять кристаллическую структуру ядра и оболочки и т. п.

В связи с наличием большого числа поверхностных атомов наночастицы проявляют высокую химическую активность, что усложняет изучение их свойств. Однако для детального описания свойств нанокристаллических материалов, представляющих собой ансамбль наночастиц, внедренных в какую-то дискретную среду, необходимо четкое разделение особенностей свойств наночастиц и эффектов их взаимодействия со средой.

Представленный метод и рассчитанные на его основе геометрические параметры помогут в дальнейшем более точно определить физические свойства магнитных наночастиц и помочь ученым в синтезе новых материалов с лучшими характеристиками.

Список литературы

1. Kustov E. F. // J. Comput. and Theor. Nanoscience. 2008. N 5. P. 317.
2. Kustov E. F. // J. Compt. and Theor. Nanoscience. 2008. N 5. P. 2144.
3. Kustov E. F. // J. Compt. and Theor. Nanoscience. 2009. N 6. P. 692.
4. Kustov E. F., Nefedov V. I. // Dokl. Phys. Chem. 2007. N 414, part 2. P. 150.
5. Kustov E. F., Nefedov V. I. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2008. N 53, part 4. P. 2103.
6. Kustov E. F., Nefedov V. I. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2008. N 53, part. 14. P. 2105—2170.
7. Крупичка С. Физика ферритов и родственных им магнитных окислов. Т. 1. М.: Мир, 1976.
8. Darby M. I., Isaac E. D. // IEEE Transactions on Magnetic. 1974. V. 10, N 2. P. 259—304.
9. Kustov E. F., Nefedov V. I. // Dokl. Acad. Nauk 2007. N 414, part 6. P. 772.

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

УДК 621.363

А. С. Корпухин*, аспирант, инж.,
П. Г. Бабаевский**, д-р техн. наук, проф., зав. каф.,
А. А. Жуков*, д-р техн. наук, доц., нач. отдела,
Д. В. Козлов*, аспирант, инж.,
И. П. Смирнов*, нач. группы.

* ОАО "Российская корпорация ракетно-космического приборостроения и информационных систем", Москва, e-mail: design-center@rniikp.ru

** ГОУ ВПО "МАТИ" — Российский государственный технологический университет им. К. Э. Циолковского, Москва

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ И ТОЛЩИНЫ СЛОЕВ НА ТЕРМО- ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИИМИД- КРЕМНИЕВЫХ УПРУГО- ШАРНИРНЫХ БАЛОК ТЕПЛОВЫХ АКТЮАТОРОВ

Поступила в редакцию 21.10.10

Исследовано влияние условий формирования и толщины полиимидного слоя, состояния балки в процессе его имидизации, а также природы и толщины функционального металлического слоя на начальный угол отклонения

слоистых композиционных упруго-шарнирных полиимид-кремниевых консольных балок тепловых актюаторов и его изменение при нагревании и охлаждении. Установлено, что с точки зрения направленного регулирования этих характеристик важнейшую роль играют температура имидизации и толщина полиимидных слоев в упруго-шарнирной области, а также свободное или заневоленное состояние балок в процессе имидизации. Функциональные слои металлов толщиной порядка 0,1 мкм незначительно влияют на термодформационные характеристики балок, а при увеличении их толщины — резко ухудшают эти параметры.

Ключевые слова: тепловой актюатор, слоистые композиционные консольные балки, полиимид, кремний, металлы, условия формирования, термодформационные характеристики

Введение

В настоящее время в качестве подвижных исполнительных элементов микроэлектромеханических и микроробототехнических устройств и систем, изготавливаемых по кремниевой технологии и обеспечивающих высокие управляемые усилия или смещения и, соответственно, решение разноплановых задач по микроперемещению объектов, смещению зеркальных отражающих поверхностей, изменению направления лучей лазера и т. п., наиболее перспективными являются балочные тепловые микроактюаторы, функционирующие на основе биморфного термоупругого эффекта и сочетающие сравнительную простоту технологии изготовления и универсальность применения [1—6]. Слоистые композиционные балки, состоящие из материалов с резко различными термическими коэффициентами линейного расши-

рения (ТКЛР) и отклоняющиеся в ту или иную сторону от своего исходного положения при нагревании или охлаждении, обеспечивают заданный термомеханический эффект теплового актюатора. Технологичность и рабочая эффективность таких актюаторов наилучшим образом обеспечивается использованием (наряду с кремнием, его соединениями и металлами) органического полимера — полиимида (ПИ) в качестве одного из основных элементов слоистых композиционных балок, обладающего управляемыми технологическими свойствами и хорошей адгезией к другим материалам, а также высокими физико-механическими свойствами, в том числе тепло- и термостойкостью, в сочетании с резко отличными от неорганических материалов (более чем

на десятичный порядок) термоупругими характеристиками — ТКЛР и модулем упругости [7, 8]. Наибольшей эффективностью обладают консольно-балочные упруго-шарнирные структуры, выполненные на основе трапецевидных кремниевых элементов, адгезионно связанных между собой несущей ПИ-пленкой, обеспечивающей как биморфный термомеханический эффект в местах адгезионного контакта ПИ—кремний, так и упруго-шарнирный эффект в местах свободной пленки. Поэтому термомеханические свойства таких структур, характеризующие отклонение балки от исходной плоскости при охлаждении до комнатной температуры (T_k) после термообработки и их изменение при последующем нагревании или охлаждении, зависят в основном от термоупругих и адгезионных свойств несущей ПИ-пленки, которые, в свою очередь, определяются ее толщиной, составом и условиями формирования [2—5]. Существенную роль при этом могут играть также тонкие функциональные металлические слои, наносимые на несущую ПИ-пленку.

Целью работы являлось исследование термомеханических характеристик слоистых композиционных полиимид-кремниевых консольных балок тепловых актюаторов в зависимости от условий формирования и толщины несущего ПИ- и функционального металлического слоев упруго-шарнирных микроструктур.

Экспериментальная часть

Объектами исследования служили термомеханически деформируемые упруго-шарнирные слоистые балки, консольно закрепленные в рамке с мезаструктурой, сформированной в монокристаллическом кремнии. Балки состоят из трапецевидных плоских кремниевых стержней и несущей ПИ-пленки, адгезионно связывающей стержни и образующей упруго-шар-

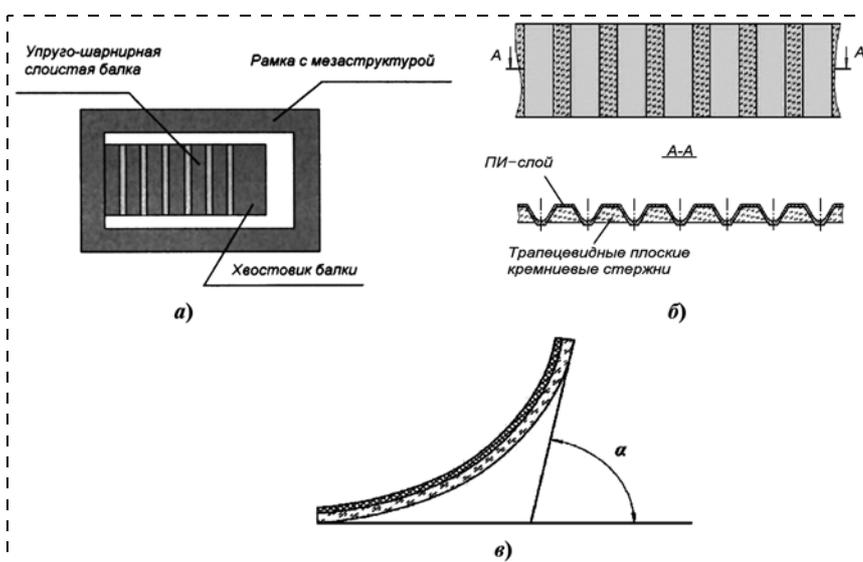


Рис. 1. Схематическое изображение упруго-шарнирной слоистой консольной балки: общий вид сверху в рамке с мезаструктурой (а); вид сверху и поперечное сечение в увеличенном масштабе (б); угол отклонения балки от плоскости рамки α (в)

нирные узлы в канавках между стержнями, с нанесенным на ПИ-пленку тонким функциональным металлическим слоем или без него (рис. 1).

В качестве образцов при исследованиях использовали модули, содержащие по четыре упруго-шарнирные слоистые балки. Для получения таких модулей методами фотолитографии и жидкостного анизотропного травления в пластинах монокристаллического кремния с ориентацией (100) формировали многомодульные микроструктуры, состоящие из набора (от 30 до 50) параллельных V-образных канавок, вытравленных на расстоянии приблизительно 250 мкм друг от друга на глубину 160—180 мкм. Далее методом центрифугирования на поверхности кремниевых пластин с канавками формировали пленки преполимера нанесением раствора ПАК (полиамидокислоты на основе пиромеллитового диангирида и оксидианилина) в диметилацетамиде с последующей сушкой в термопечи при 393 К в течение двух часов. После этого методом плазмохимического травления пластины кремния подвергали утонению снизу (с противоположной стороны по отношению к пленке ПАК или полиимидной пленке до ее нижней части), таким образом регулируя, одновременно с формированием (высвобождением) упруго-шарнирных участков полимерной пленки в канавках и разделением трапецевидных кремниевых стержней, основные геометрические параметры балок. Травление кремния осуществляли в установке "Плазмаком-203" в содержащей элегаз плазме при напряжении смещения $U_{см} = 40$ В и давлении $P = 10$ Па.

Утонение (регулирование толщины) сформированной ПИ-пленки, в том числе ее упруго-шарнирных участков, осуществляли плазмохимическим травлением сверху в той же установке, что и травление кремния, но в ионно-индуцированной кислородсодержащей плазме при напряжении смещения

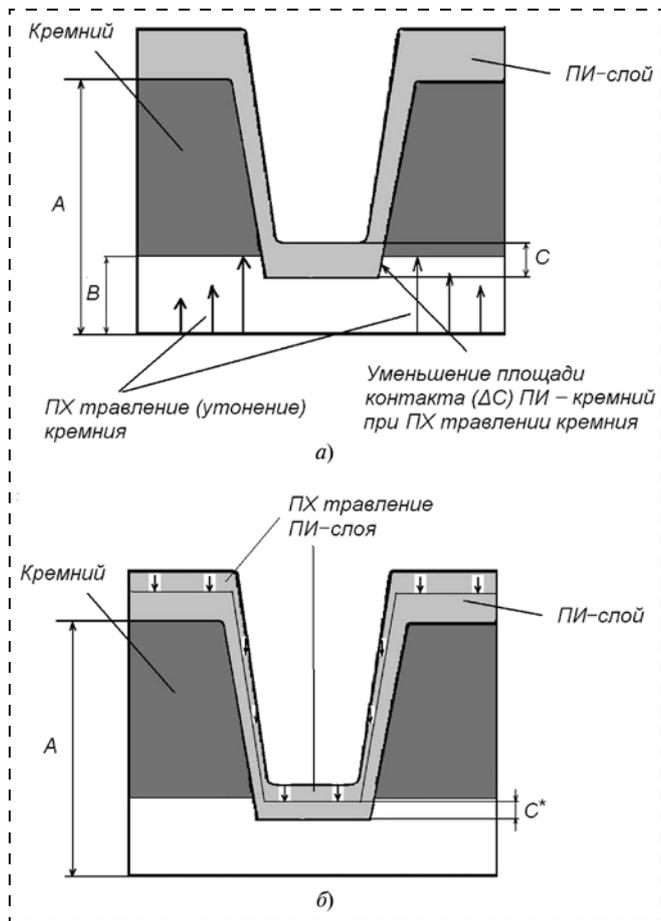


Рис. 2. Схематическое изображение формирования упруго-шарнирных участков пленки в канавках и изменений основных геометрических параметров балок в поперечном сечении в процессах плазмохимического травления (утонения) пластины кремния (а) и ПИ-пленки (б):

A — исходная толщина кремниевой пластины; B — толщина стравливаемого слоя кремния; C и C^* — толщина упруго-шарнирного участка ПИ-пленки до и после ПХ травления соответственно, ΔC — уменьшение площади контакта ПИ-кремний при ПХТ пластины кремния

$U_{см} = 200$ В и давлении $P = 10$ Па с использованием образцов, подвергнутых после травления кремния термоимидизации (термообработке для имидизации) слоев ПАК при 573 К в течение одного часа. Формирование упруго-шарнирных участков ПИ-пленки и изменения основных геометрических параметров балок в поперечном сечении в процессах плазмохимического травления (утонения) пластины кремния и ПИ-пленки схематически показано на рис. 2.

Стравливание кремния и ПИ-пленки при выбранных режимах осуществлялось со скоростью приблизительно 1 мкм/мин. При этом общая высота профиля получаемых микроструктур по сечению составляла 160—180 мкм, а толщина шарнирного участка ПИ-слоя варьировалась от 9 до 35 мкм.

После утонения плазмохимическим травлением пластины кремния разделяли на отдельные модули, содержащие по четыре упруго-шарнирные балки с нанесенным сплошным слоем пленки высушенной

неимидизированной ПАК. Перед термоимидизацией слоев ПАК при различных температурах у одной части модулей, не прошедших термоимидизацию, все четыре балки сохраняли в горизонтальном (за-неволенном) состоянии в плоскости рамки за счет сплошной (неразрезанной) пленки ПАК. У другой части модулей пленку ПАК разрезали с трех сторон по профилю балок, оставляя их консольно закрепленными в рамке в свободном (вырезанном) состоянии. На рис. 3 приведены фотографии двух типичных модулей с четырьмя вырезанными и невырезанными балками после термоимидизации.

Для выявления влияния условий формирования, природы и толщины слоев слоистых композиционных полиимид-кремниевых консольных балок тепловых актюаторов на их термодформационные характеристики все исследованные модули были разделены на три группы. Первую группу модулей использовали для определения влияния температуры имидизации пленки ПАК ($T_{им}$) после ее предварительной сушки на начальный угол отклонения балок после имидизации и охлаждения до комнатной температуры $\alpha(T_k)$ и на его изменение при нагревании и охлаждении от комнатной до заданной температуры $\Delta\alpha(T)$. В таких модулях, полученных без утонения ПИ-слоя после ПХ травления пластины кремния, т. е. с неимидизированным слоем ПАК толщиной примерно 35 мкм, а также с предварительно невырезанными балками, слой ПАК подвергали

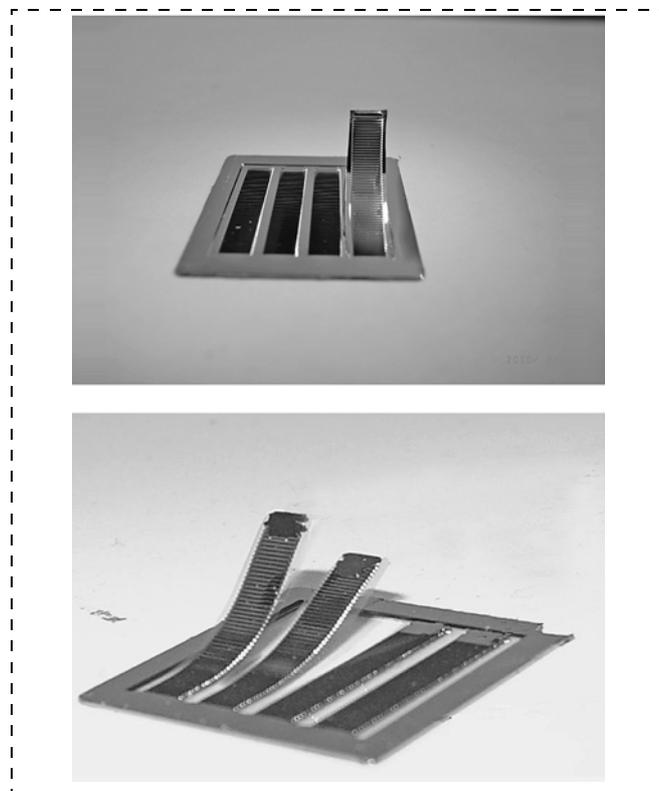


Рис. 3. Фотографии двух типичных модулей с четырьмя вырезанными и невырезанными балками с различным отклонением от плоскости рамки

термоимидизации при температуре 488 К в течение двух часов, затем медленно охлаждали до комнатной температуры, вырезали (высвобождали) одну балку, измеряли ее отклонение от плоскости рамки на начальный угол $\alpha(T_K)$, а затем определяли его изменение при нагревании и охлаждении $\Delta\alpha(T)$. Далее тот же образец (модуль) последовательно подвергали повторной термообработке в течение двух часов при 523 К, 573 К и 623 К, каждый раз высвобождая очередную балку и определяя ее термодформационные характеристики.

Вторую группу модулей использовали для исследования зависимости термодформационных характеристик балок, полученных без утонения ПИ-слоя, т. е. без предварительной термоимидизации слоя ПАК, и с утонением ПИ-слоя ПХ травлением сверху после ПХ травления пластины кремния, т. е. с предварительной термоимидизацией слоя ПАК при 573 К в течение одного часа, от толщины упруго-шарнирного участка ПИ-пленки, а также зависимости этих характеристик от состояния балок до и в процессе термоимидизации пленки ПАК при заданной температуре — предварительно вырезанных до имидизации с отклонением на заданный угол и вырезанных после нее. В последнем случае в модулях с высушенной пленкой ПАК толщиной приблизительно 35 мкм, полученных без утонения слоя ПАК, часть балок одного модуля до имидизации оставляли невырезанной, а часть — вырезали и отклоняли от плоскости рамки на углы 22°, 56° и 88° соответственно с фиксированием этих углов закладками, которые удерживали фиксированный угол при имидизации и охлаждении до T_K . Далее проводили имидизацию пленки ПАК, нагревая образцы от комнатной температуры в течение двух часов до температуры 573 К, выдерживая при этой температуре в течение часа, а затем медленно

охлаждая до комнатной температуры. В результате химических усадок при имидизации и термических усадок при охлаждении до комнатной температуры предварительно вырезанные и заневоленные под определенным углом балки после освобождения их изменяли свои первоначальные углы отклонения до некоторого начального угла при комнатной температуре $\alpha(T_K)$, а невырезанные, сохранявшие после термоимидизации свое положение в плоскости рамки, после высвобождения также отклонялись на определенный начальный угол $\alpha(T_K)$.

Третью группу модулей использовали для исследований влияния природы и толщины функциональных слоев металлов на начальный угол отклонения балок и его изменения при нагревании и охлаждении. При этом на поверхности одной части модулей после термоимидизации пленки ПАК толщиной приблизительно 25 мкм (со стороны ПИ-пленки или со стороны кремния, т. е. сверху или снизу соответственно) с предварительно невырезанными балками методом магнетронного напыления по заданному режиму формировали тонкие (толщиной 0,1 мкм) функциональные слои металлов — алюминия и систему металлов ванадий—никель. На другой части образцов на поверхность сплошной ПИ-пленки после термоимидизации методом массочного напыления на отдельные балки в одном модуле наносили слои алюминия различной толщины от 0,1 до 0,7 мкм, после чего балки вырезали. Фотография модуля с четырьмя вырезанными балками с напыленным алюминием различной толщины приведена на рис. 4 (см. четвертую сторонку обложки).

Определение термодформационных характеристик каждой упруго-шарнирной слоистой балки в модулях проводили индивидуально. Начальный угол отклонения балок от плоскости рамки при комнатной

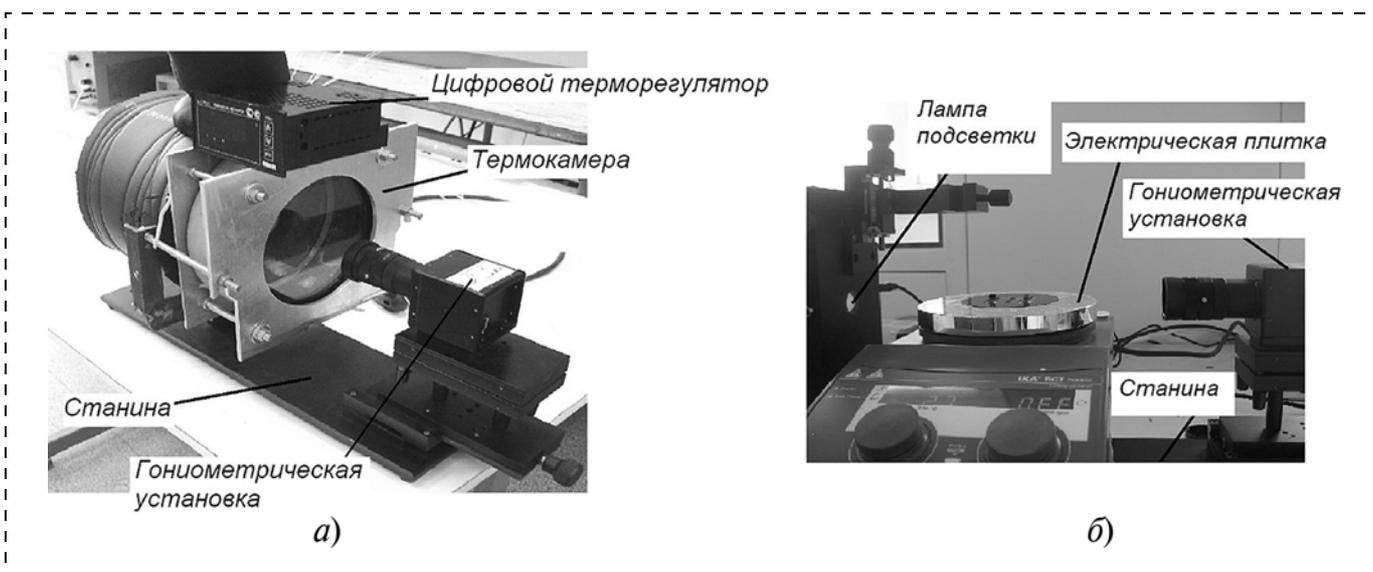


Рис. 5. Фотографии стенда для проведения измерений начального угла отклонения и термодформаций балок на основе термокамеры с цифровым терморегулятором (а) или электрической плиты с регулятором температуры (б)

температуре $\alpha(T_k)$ и его изменение при нагревании от комнатной температуры до 423 К $\Delta\alpha(423) = \alpha(T_k) - \alpha(423)$ и при охлаждении от T_k до 77 К: $\Delta\alpha(77) = \alpha(77) - \alpha(T_k)$ определяли гониометрическим методом, обеспечивающим измерение углов отклонения от 0 до $180 \pm 0,05^\circ$ относительно базовой линии. Измерительный стенд (рис. 5) включает гониометрическую установку САМ101 с входящим в комплект программным обеспечением, состоящую из станины, на которую крепятся видеокамера, лампа подсветки, термокриокамера (рис. 5, а) с цифровым терморегулятором, позволяющим регулировать температуру в диапазоне от 97 до 423 К или электрическую плитку с регулятором температуры (рис. 5, б), позволяющую нагревать образцы до 593 К. Термокриокамеру использовали при испытании образцов при охлаждении и нагревании, а плитку — только при нагревании.

Образец располагается или внутри термокриокамеры (при испытании на охлаждение и нагрев), или на поверхности плитки (при испытании только на нагрев) и проводится его плавный нагрев или охлаждение. При этом образец, попадая в поле зрения видеокамеры, в режиме реального времени отображается на экране монитора, после чего с помощью программного обеспечения осуществляется автоматическое фотографирование и измерение начального угла отклонения $\alpha(T_k)$ и термодформаций $\Delta\alpha(T)$ балки при изменении температуры. Точность проводимых измерений обуславливается точностью измерительных средств — гониометра ($\pm 0,01^\circ$), цифрового терморегулятора ($\pm 0,1$ К), плитки ($\pm 0,1$ К).

Результаты и их обсуждение

На рис. 6 приведены обобщенные результаты исследования образцов балок первой группы модулей по влиянию температуры имидизации несущего ПИ-слоя на их термодформационные характеристики. Из приведенных данных видно, что начальный угол отклонения балок при комнатной температуре $\alpha(T_k)$ и его изменение при охлаждении до 77 К $\Delta\alpha(77)$ пропорционально возрастают с повышением температуры имидизации $T_{им}$, а изменение угла отклонения при нагревании до 423 К $\Delta\alpha(423)$ уменьшается.

Вероятнее всего это связано с повышением химических (непосредственно в процессе имидизации) и термических (при охлаждении до T_k и ниже) усадочных (остаточных) деформаций и, соответственно, напряжений в ПИ-слое с повышением $T_{им}$. При нагревании образцов от T_k до 423 К проявляется эффект отжига, уменьшающий остаточные напряжения и, соответственно, деформацию балки, причем с

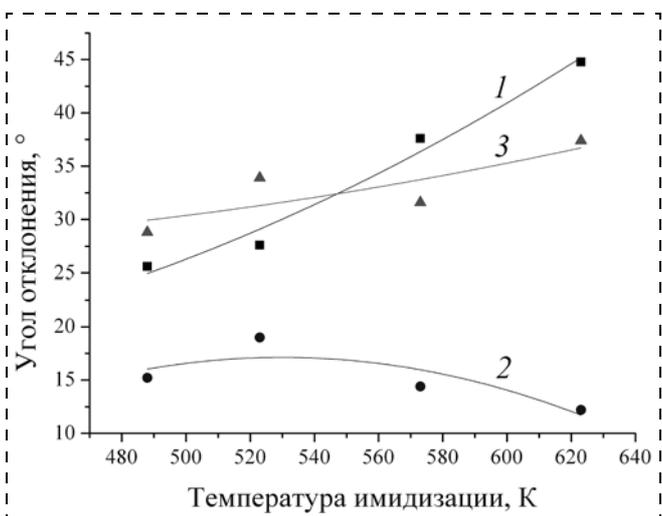


Рис. 6. Влияние температуры имидизации несущего ПИ-слоя толщиной 35 мкм предварительно невырезанных балок в модулях первого типа, полученных без утонения слоя ПАК после ПХ травления пластины кремния, на их термодформационные характеристики: начальный угол отклонения при комнатной температуре $\alpha(T_k)$ (1) и его изменения при нагревании $\Delta\alpha(423)$ (2) и охлаждении $\Delta\alpha(77)$ (3)

повышением $T_{им}$ выше 520 К этот эффект проявляется наиболее резко.

В случае балок модулей второго типа, полученных без утонения ПИ-слоя с термоимидизацией слоя ПАК в невырезанном состоянии перед ПХ травлением пластины кремния снизу, с уменьшением толщины упруго-шарнирного ПИ-слоя С (см. рис. 2, а) с 35 до 28 мкм наблюдается резкое увеличение начального угла отклонения при комнатной температуре $\alpha(T_k)$ при практически постоянном, хотя и различном по абсолютным значениям его изменении при нагревании до 423 К (в пределах $15-10^\circ$) и охлаждении до 77 К (в пределах $20-25^\circ$) (рис. 7, а). Утонение ПИ-слоя ПХ травлением сверху от 28 до 9 мкм после термоимидизации слоя ПАК приводит к резкому уменьшению как начального угла отклонения, так и изменения его абсолютного значения при нагревании от T_k до 423 К (рис. 7, б).

Увеличение предварительного (принудительного до и в процессе имидизации) угла отклонения балок модулей второго типа, полученных без утонения слоя ПАК после ПХ травления пластины кремния и имидизированных в заневоленном состоянии при одинаковых условиях, резко увеличивает начальный угол их отклонения при комнатной температуре после имидизации, но практически не приводит к изменению его абсолютного значения как при нагревании, так и при охлаждении (рис. 8).

Нанесение на несущий ПИ-слой толщиной 35 мкм сверху предварительно невырезанных балок модулей третьего типа, полученных без утонения ПИ-слоя после ПХ травления пластины кремния, функционального слоя алюминия толщиной от 0,1 до 0,7 мкм приводит, с увеличением толщины функционального слоя, к резкому (практически в 2 раза) уменьше-

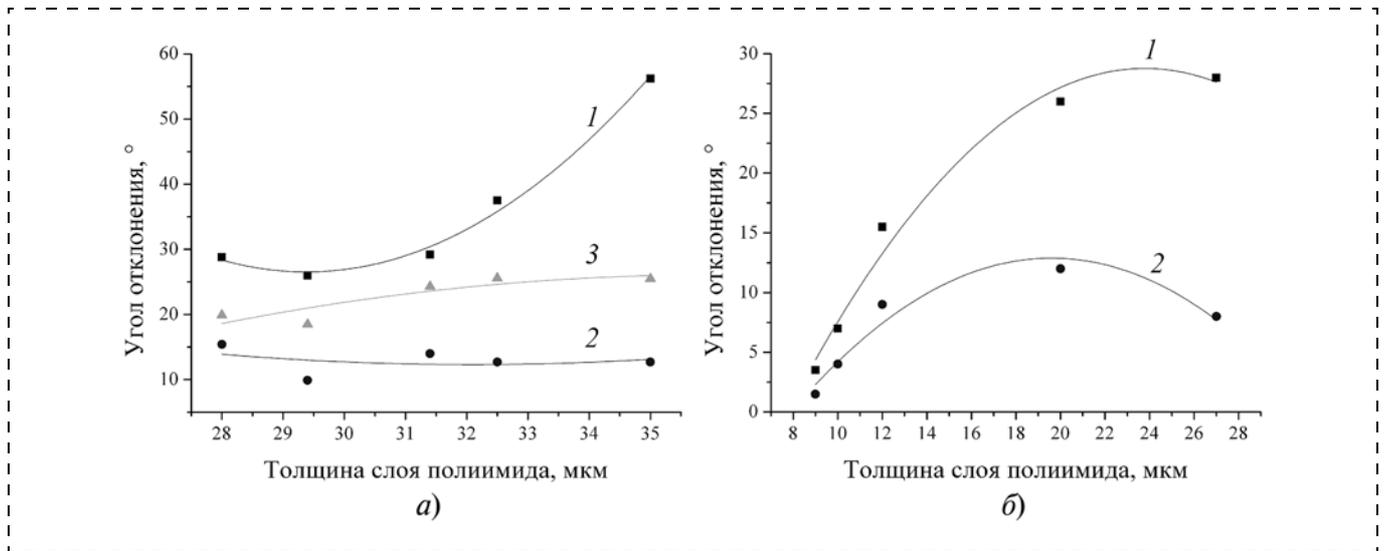


Рис. 7. Влияние толщины ПИ-слоя в канавке (в упруго-шарнирной зоне) на начальный угол отклонения при комнатной температуре $\alpha(T_k)$ (1) и его изменения при нагревании $\Delta\alpha(423)$ (2) и охлаждении $\Delta\alpha(77)$ (3) балок модулей второго типа, полученных без утонения слоя ПИ при ПХ травлении образца со стороны кремния (а) и с утонением со стороны ПИ (б) после ПХ травления пластины кремния снизу

нию начального угла отклонения балок при комнатной температуре после имидизации $\alpha(T_k)$ при практически постоянном, но различном по абсолютным значениям, его изменении при нагревании до 423 К (в пределах 25—15°) и охлаждении до 77 К (в пределах 35—30°) (рис. 9).

Нанесение функционального металлического слоя толщиной порядка 0,1 мкм как алюминиевого, так и системы ванадий—никель, как сверху (со стороны ПИ-слоя), так и снизу (со стороны кремния) сравнительно мало влияет, а в некоторых случаях даже улучшает термодформационные свойства слоистых композиционных полиимид-кремниевых консольных балок тепловых актюаторов (рис. 10, см. четвертую сторону обложки).

Таким образом, исследования влияния температуры имидизации ПИ-слоя консольных балок тепловых актюаторов на их термодформационные характеристики показали, что начальный угол отклонения балок при комнатной температуре и его изменение при охлаждении до 77 К пропорционально возрастают с повышением температуры имидизации в 1,8 и 1,4 раза соответственно, а изменение угла отклонения при нагревании до 423 К уменьшается приблизительно на 30 %, что может быть связано с эффектом отжига, уменьшающего деформацию балки, причем с повышением температуры имидизации выше 520 К этот эффект проявляется наиболее резко.

Для образцов балок, имидизированных в невырезанном состоянии, показана возможность направленного регулирования начального угла отклонения (приблизительно в 2 раза) за счет варьирования толщиной ПИ-слоя и/или кремния плазмохимическим травлением. При этом термодформационные ха-

рактеристики изменяются за счет уменьшения площади контакта ПИ—кремний.

Для образцов, имидизированных в вырезанном состоянии с заданной деформацией (заневоленных под определенным углом), показана возможность направленного регулирования начального угла отклонения, без изменения термодформационных характеристик при последующем нагревании или охлаждении.

Влияние функциональных слоев металлов толщиной приблизительно 0,1 мкм на термодформа-

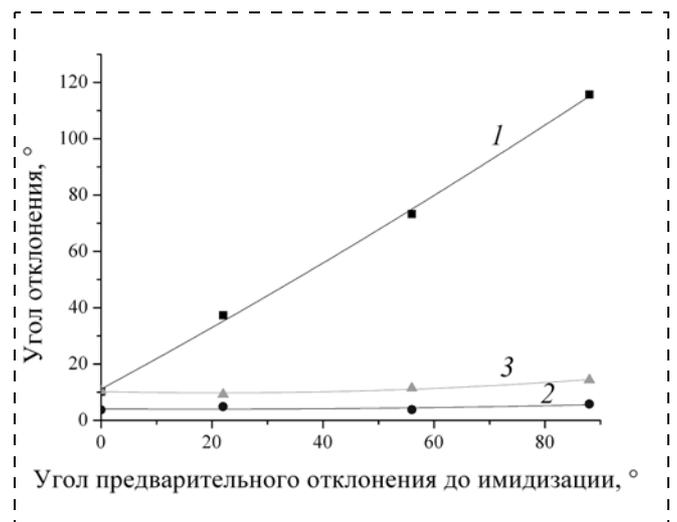


Рис. 8. Влияние предварительного (принудительного до и в процессе имидизации) угла отклонения балок модулей второго типа, полученных без утонения слоя ПАК после ПХ травления пластины кремния и имидизированных в заневоленном состоянии при одинаковых условиях имидизации, на начальный угол их отклонения при комнатной температуре после имидизации $\alpha(T_k)$ (1) и его изменения при нагревании $\Delta\alpha(423)$ (2) и охлаждении $\Delta\alpha(77)$ (3)

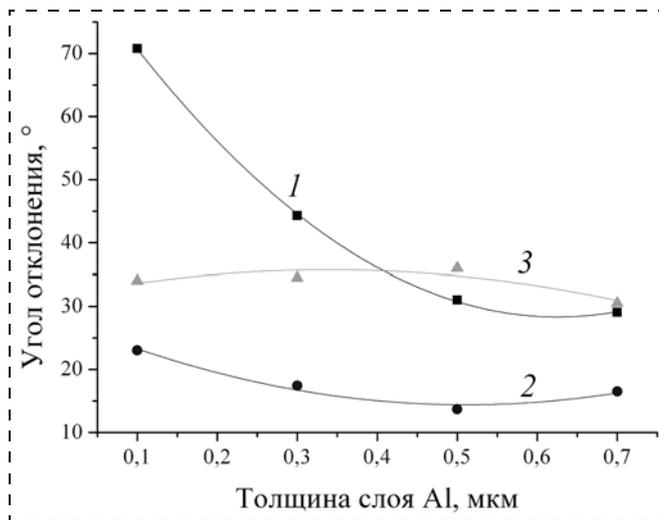


Рис. 9. Зависимости начального угла отклонения при комнатной температуре $\alpha(T_k)$ (1) и его изменений при нагревании $\Delta\alpha(423)$ (2) и охлаждении $\Delta\alpha(77)$ (3) предварительно не вырезанных балок модулей третьего типа, полученных без утонения ПИ-слоя после ПХ травления пластины кремния, от толщины Al слоя, нанесенного на ПИ несущий слой толщиной 35 мкм сверху

ционные характеристики балок незначительно, в то время как увеличение толщины напыленного слоя алюминия с 0,1 до 0,7 мкм приводит к уменьшению начального угла отклонения при комнатной температуре $\alpha(T_k)$ упруго-шарнирной слоистой балки приблизительно в 2 раза.

С точки зрения направленного регулирования термодформационных характеристик слоистых композиционных полиимид-кремниевых консольных балок тепловых актуаторов, важнейшую роль играют условия формирования (в первую очередь $T_{им}$) и толщина ПИ-слоев в упруго-шарнирной об-

ласти, а также состояние (свободное или заневоленное) балок в процессе имидизации слоев ПАК.

Работа выполнена в рамках проекта Министерства образования и науки РФ (гос. контракт № 16.740.11.0080 от 1 сентября 2010 г.).

Список литературы

1. Springer Handbook of Nanotechnology. 2nd Edition / Bharat Bhushan (Ed). Springer. 2007. 1916 p.
2. Ebefors T. Polyimide V-groove Joints for Three-Dimensional Silicon Transducers. PhD thesis. Stockholm: Royal Institute of Technology. 2000. 144 p.
3. Ebefors T., Kalvesten E., Stemme G. Dynamic Actuation of Polyimide V-grooves Joints by Electrical Heating // Sensors and Actuators. 1998. V. 67. P. 199–204.
4. Жуков А. А., Корпухин А. С., Гринькин Е. С. Микросистемный биморфный привод устройств космической робототехники // Тр. 19-й Всероссийской НТК "Экстремальная робототехника". Санкт-Петербург: ГНЦ "Центральный научно-исследовательский институт робототехники и технической кибернетики (ЦНИИ РТК)". 2008. С. 126–127.
5. Тимошенко С. П., Жуков А. А., Захаров А. А. Биморфный балочный актуатор с V-образными подимидными канавками // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 7. С. 60–64.
6. Заявка на патент "Тепловой микромеханический актуатор и способ его изготовления" № 2010111378.
7. Жуков А. А., Козлов Д. В., Корпухин А. С., Смирнов И. П. Методика измерений деформационных характеристик микроактуаторов // Сб. статей Второй Всероссийской научно-технической конференции "Актуальные проблемы ракетно-космического приборостроения и информационных технологий". М.: Радиотехника, 2010 (в печати).
8. Жуков А. А., Корпухин А. С., Бабаевский П. Г., Киевский В. А. Физико-механические характеристики композиционных слоистых материалов на основе полипиромеллитимида для термомеханических актуаторов // Перспективные материалы. 2008. Спец. выпуск (6). Часть 2. № 12. С. 239–241.

К сведению читателей

В цикле статей Абрамова И. И. "Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники" были замечены следующие опечатки.

Часть VII (№ 8, 2009). Стр. 13, правый столбец, строки 15–12 снизу, должно быть: "Показано, что для повышения точности расчетов важно сгущение сетки пространственной дискретизации в методе конечных элементов на границах между центральной частью и контактами".

Часть VIII (№ 9, 2010). Стр. 28, 29, должно быть: $T = 77$ К вместо 11 К.

Часть VIII (№ 10, 2010). Стр. 31, правый столбец, строка 12 снизу, должно быть: "работы [38]".

Часть VIII (№ 11, 2010). Стр. 31, левый столбец, 19, 18 строки снизу: <100> и <110> следует поменять местами.

Часть VIII (№ 10 и № 11, 2010). Стр. 40. Библиографические источники № 79 и № 80 следует поменять местами.

Редакция приносит извинения за допущенные опечатки.

А. В. Войцеховский¹, д-р физ.-мат. наук, проф.,

С. Н. Несмелов¹, канд. физ.-мат. наук,
ст. науч. сотр.,

Н. А. Кульчицкий², д-р техн. наук, проф.,

А. А. Мельников², д-р физ.-мат. наук, проф.,

¹ Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
"Томский государственный университет",
Томск, e-mail: vav@elefot.tsu.ru

² Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Московский государственный институт
радиотехники, электроники и автоматики
(технический университет), Москва,
e-mail: n.kulchitsky@gmail.com,
a.melnikov@mirea.ru

НЕОХЛАЖДАЕМЫЕ МИКРОБОЛОМЕТРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО SiGe ДЛЯ ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА

Поступила в редакцию 25.10.10

Рассмотрены особенности технологии создания неохлаждаемых микроболометрических детекторов на основе пленок поликристаллического силицида германия, а также параметры дискретных и матричных детекторов на основе данного материала. Потенциальные преимущества детекторов данного типа могут быть реализованы при совмещении технологии создания детекторов с кремниевой КМОП-технологией.

Ключевые слова: инфракрасные детекторы, микроболометры, поликристаллический силицид германия

За последние два десятилетия достигнут значительный прогресс в создании неохлаждаемых тепловых детекторов инфракрасного диапазона, которые приблизились по пороговым характеристикам к фотонным детекторам при значительно меньшей стоимости [1–4]. Одним из активно разрабатываемых перспективных типов тепловых детекторов являются болометры, принцип действия которых рассмотрен, например, в работах [1, 5–7]. Наиболее широко используются металлические, термисторные и полупроводниковые болометры. Также недавно разработаны композитные и сверхпроводящие болометры [1]. На практике используют два типа детекторных структур: микромостик и конструкцию на пленочной подложке (рис. 1) [1].

В настоящее время наиболее широко используются для создания микроболометрических формирователей изображения оксид ванадия [4, 8, 9] и легированный α -Si : H [3, 10]. Оксид ванадия VO_x имеет

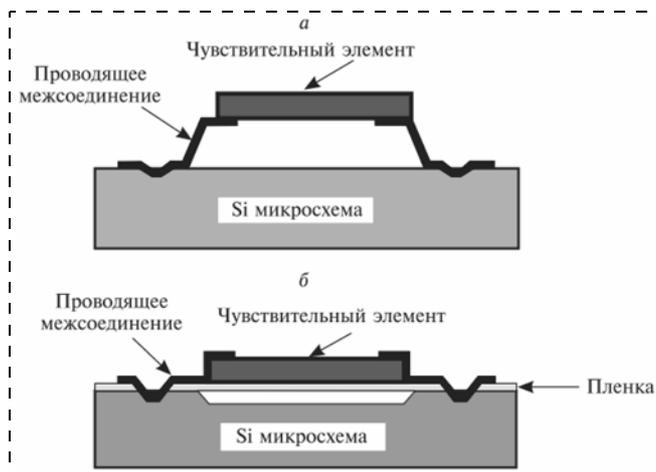


Рис. 1. Конструкции чувствительных элементов тепловых приемников:

a — чувствительный элемент в форме микромостика; *b* — чувствительный элемент на тонкопленочной подложке [1]

высокие значения отрицательного температурного коэффициента сопротивления (ТКС), часто превышающие 4 %/K [1], на основе VO_x созданы матрицы форматами 320×240 с размером пикселя 50 мкм [1, 11], а также форматами 320×240 и 640×480 с размерами пикселя 37 и 23,5 мкм [12], соответственно. Однако оксид ванадия — нестандартный материал для КМОП-технологии, изготовление VO_x в виде тонких пленок является сложным для управления процессом ввиду узкого диапазона технологических параметров, обеспечивающих стабильность и оптимальность характеристик оксида. Металлы (Pt, Ni) совместимы с КМОП-технологией, но имеют низкие значения температурного коэффициента сопротивления, а болометры на основе сверхпроводящих пленок требуют значительного охлаждения, что значительно повышает стоимость приборов. Болометры на основе α -Si : H, B [3, 13–15] характеризуются большими уровнями шумов и теплопроводности, а кроме того этот материал нестабилен при тепловых обработках и под действием ультрафиолетового облучения. Болометры на основе карбида кремния SiC имеют высокие значения ТКС (4–6 %), но для стабилизации свойств материала требуется отжиг при температурах около 1000 °С, что несовместимо с КМОП-технологией.

Перспективны для создания микроболометров аморфные пленки $a\text{-Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$ [16–18], но, несмотря на хорошие значения ТКС, а также совместимость технологии осаждения пленок с КМОП-технологией, матричные инфракрасные микроболометрические детекторы на основе $a\text{-Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$ пока не созданы, что определяется высокими шумами в структуре, а также недостаточно отработанной технологией получения этого материала. Также разрабатываются в последние годы микроболометры на основе *n*-потенциальных ям [19], квантовых ям [20], аморфного германия [13, 21], а также аморфного силицида германия [10, 22, 23].

Автор монографии [1] полагает, что основой для производства следующего поколения пленочных полупроводниковых болометров станут новые материалы (например, SiGe, Ge—Sn, Si—C, Si—N, Ge—S, Ge—N). В настоящее время ведутся исследования по повышению уровня обнаружительной способности полупроводниковых болометров, превышающей $10^9 \text{ см} \cdot \text{Гц}^{0,5} \cdot \text{Вт}^{-1}$ [1]. В данной работе рассмотрены технология и характеристики микроболометров на основе поликристаллического SiGe, относительно нового материала для производства микроболометров.

Технология создания микроболометров на основе поликристаллического SiGe

За последние 10—12 лет поликристаллический силицид германия стал одним из основных материалов для разработок неохлаждаемых болометрических детекторов инфракрасного диапазона [24—38]. Поликристаллический силицид германия $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ имеет достаточно высокие значения ТКС и относительно невысокую температуру отжига ($<650^\circ\text{C}$). Электрические свойства поликристаллического силицида германия рассмотрены, например, в работе [39]. При производстве болометрических детекторов обычно используют осаждение из газовой фазы при пониженном или атмосферном давлении (Inter-university MicroElectronic Center, IMEC совместно с XenICs (Бельгия) [24—35]; Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing (Китай) [36—38]).

Наибольших успехов при производстве болометров на основе поликристаллического SiGe добились бельгийские компании IMEC и XenICs, Leuven (Бельгия) [24—35]. Одиночные детекторы, разрабатываемые данными компаниями, имеют размеры от $25 \times 25 \text{ мкм}$ до $450 \times 450 \text{ мкм}$, типичные дозы легирования бором активной части детекторов равны $6 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, а дозы легирования опор 10^{16} см^{-2} . При создании детекторов используются процессы осаждения из газовой фазы при атмосферном или пониженном давлении, ионная имплантация, отжиг при температурах 650, 850 или 1050°C , химическое травление.

Известны разработки болометрических детекторов на основе поликристаллического SiGe (Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing) [36—38]. Для получения тонкой пленки SiGe использовали систему для осаждения из газовой фазы в ультравысоком вакууме, доза легирования активного слоя при ионной имплантации бора составляла $4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Поддерживающие опоры микроболометра также выполняют функцию электрических контактов и для этой цели их легировали путем ионной имплантации с дозой $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ и энергией 25 кэВ, после чего проводился отжиг при 650°C в течение 1 мин в атмосфере N_2 . Для выделения областей детекторов применяли процессы сухого и влажного травления.

В работе [29] рассмотрено сильное влияние при заключительных операциях увеличения температуры выше 450°C на фронтальную и обратную стороны стандартной КМОП-подложки с алюминиевыми межсоединениями и вольфрамовыми затворами. Исследовались все характеристики КМОП-схем после отжига в течение 90 мин при 520°C . Показано, что основное влияние температуры отжига заключается в увеличении сопротивления линий межсоединений. Характер увеличения зависит от материала межсоединений.

До недавнего времени считалось, что необходимым процессом при создании микроболометров на основе поликристаллического SiGe является отжиг при температуре, большей, чем 650°C [40]. Ввиду того, что операции отжига при такой температуре плохо совместимы с КМОП-технологией, в последние годы активно велись разработки альтернативных низкотемпературных технологий [29, 40—44]. Так в ИФП СО РАН (г. Новосибирск) ведутся исследования, направленные на создание пленок поликристаллического силицида германия путем молекулярно-лучевого осаждения германия и кремния в сверхвысоком вакууме при относительно низких температурах ($<500^\circ\text{C}$) [42—44]. Поликристаллический SiGe может быть также получен в результате твердофазной кристаллизации пленки из аморфного силицида германия ($\alpha\text{-SiGe}$). Такая кристаллизация может происходить при низких температурах, но требует, по крайней мере, нескольких часов для формирования пленки поликристаллического материала на подложке SiO_2 [40, 41]. Фирмы CASTI Universidade de Vigo (Испания) и ENEA Frascati (Италия) совместно разрабатывают технологию кристаллизации пленок аморфного силицида германия при воздействии импульсного лазерного излучения (ArF-эксимерного лазера), позволяющую ускорить процесс твердофазной кристаллизации и понизить его температуру [40, 41]. Несмотря на определенные успехи альтернативных технологий, в настоящее время созданы технологии и протестированы образцы микроболометров, созданных методом осаждения из газовой фазы.

В результате проведенных исследований механических напряжений показано, что поликристаллический SiGe, сформированный при атмосферном давлении, имеет напряжения сжатия (до 150 МПа), которые снижаются при повышении температуры отжига. При температуре отжига 900°C напряжения близки к нулю. Увеличение температуры отжига приводит к появлению напряжений растяжения (рис. 2). Для поликристаллического SiGe, сформированного при сниженном до 40 Торр (5,3 кПа) давлении, характерны напряжения растяжения (около 80 МПа), которые практически не зависят от температуры отжига.

Полученные данные свидетельствуют о том, что путем изменения давления при формировании слоев SiGe можно управлять возникающими напряжениями. Компенсация напряжений в многослойной структуре может быть обеспечена подбором соответствующей



Рис. 2. Эффект влияния температуры отжига на релаксацию напряжений в поликристаллическом $\text{Si}_{0,7}\text{Ge}_{0,3}$ [25]

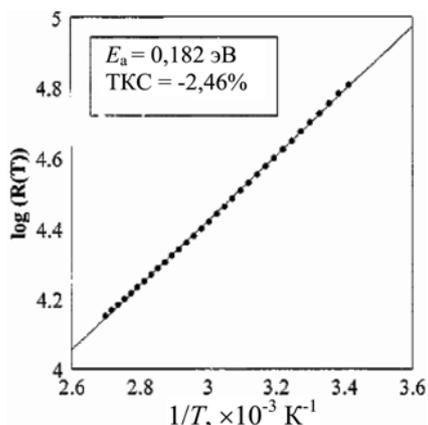


Рис. 3. Температурная зависимость сопротивления болометра. Кружки — экспериментальные результаты. Наклон прямой линии позволяет определить энергию активации [25]

ших параметров чувствительного и поглощающего слоев. В результате проведенных рядом групп исследований показано, что электрические свойства поликристаллического SiGe хорошо подходят для создания инфракрасных детекторов. Температурный коэффициент сопротивления и удельное сопротивление поликристаллического SiGe практически не

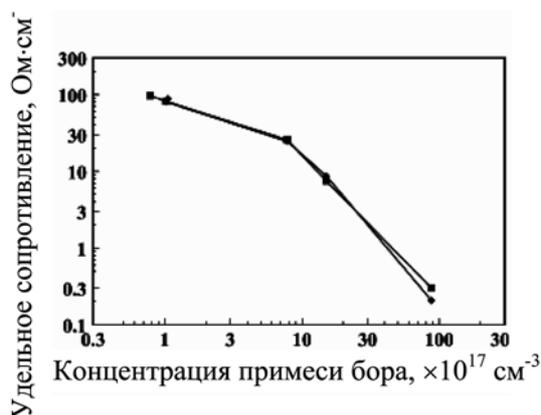


Рис. 4. Зависимость удельного сопротивления поликристаллического $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$, отожженного при температуре 520 °C (кружки) и 650 °C (квадраты), от концентрации легирующей примеси бора [29]

зависят от температуры отжига в интервале температур 650...850 °C (в некоторых работах предлагается проводить отжиг при температурах, не превышающих 520 °C). На рис. 3 приведена типичная зависимость сопротивления болометра на основе поликристаллического SiGe от температуры [25]. В работе [29] исследовано влияние уменьшения температуры отжига до температур, меньших 520 °C, на электрические свойства поликристаллического SiGe. Для достижения этой цели были изготовлены образцы $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ с различными концентрациями бора (от 10^{17} до $2 \cdot 10^{19}$ В/см³). На рис. 4 иллюстрируется эффект изменения удельного сопротивления от уровня легирования при температурах отжига от 520 до 650 °C.

В общем, можно отметить, что сопротивление уменьшается от 100 до 0,3 Ом·см при увеличении концентрации бора от 10^{17} до $2 \cdot 10^{19}$ В/см³. Для заданной концентрации бора сопротивление слабо зависит от температуры отжига в диапазоне температур 520...650 °C, что свидетельствует о том, что отжиг при 520 °C в течение 30 мин достаточен для активации примеси бора.

В табл. 1 сравниваются основные электрические и тепловые характеристики болометрических детек-

Таблица 1

Электрические и тепловые характеристики инфракрасных болометрических детекторов на основе поликристаллического SiGe и альтернативных материалов

Авторы	Материал	R, кОм	ТКС, %/K	τ, мс	G, Вт/K
Dong [36, 37]	поли-SiGe	350	-1,91	16,6	—
Leonov [30]	поли-SiGe	17—82	-0,75...-1,4	10—14	$5 \cdot 10^{-8}$
Sedky [26]	поли-SiGe, RPCVD	10	-0,68	22,8	$3,16 \cdot 10^{-7}$
Sedky [26]	поли-SiGe, APCVD	143	-2	7,8	$8 \cdot 10^{-7}$
Garcia [22]	a-Si _{0,1} Fe _{0,9}	3×10^4	-3,7	300—500	$5 \cdot 10^{-7}$
Iborra [16]	a-Ge _x Si _{1-x} O _y	640	-4,21	1,8	$2 \cdot 10^{-6}$
Torres [21]	a-Ge:Fe	10^6	-5	100—800	$2 \cdot 10^{-7}$
Tezcan [19]	n-ямы	4,43	-0,5	3,2	$6,7 \cdot 10^{-7}$

торов различных типов. Из табл. 1 видно, что болометрические детекторы на основе поликристаллического SiGe имеют тепловую постоянную времени, хорошо соответствующую типичной для систем реального времени кадровой частоты 30 Гц. Обозначение RPCVD означает, что нанесение SiGe осуществлялось при пониженном давлении (40 Торр), а APCVD — при атмосферном давлении методом химического осаждения из паровой фазы [26]. Обозначение *n*-ямы означает потенциальные ямы в Si [19].

Детекторы на основе поликристаллического силицида германия

В работе [25] исследовательской группы из IMEC, XenICs, Leuven (Бельгия) сообщается о разработке болометров на основе поликристаллического SiGe, имеющих размеры от 10×10 мкм до 50×50 мкм и различные конфигурации поддерживающих опор. Для приложенного смещения 1,5 В достигнута чувствительность, близкая к 10^3 В/Вт. Это значение может быть легко увеличено более чем на порядок, путем уменьшения ширины и толщины поддерживающих опор, что приближает чувствительность к уровню, типичному для лучших болометров.

В работе [26] той же группы сообщается о разработке болометров из поликристаллического SiGe, имеющих поперечные размеры от 50×50 мкм до 25×25 мкм (включая опоры). Тепловая изоляция обеспечивалась длинными опорами различной ширины. Авторы работы [26] отмечают три обстоятельства:

1. Два различных типа поликристаллического SiGe были изготовлены путем химического осаждения из газовой фазы при атмосферном давлении (APCVD-технология), а также при пониженном давлении до 40 Торр (RPCVD-технология). Концентра-

ция германия в пленке достигала 30 %. Это значение было выбрано для минимизации теплопроводности поликристаллического SiGe. Два материала имели различные механические свойства: первый материал обладал большим напряжением сжатия, а второй — малым напряжением растяжения.

2. Поглощающий слой использован четвертьволнового типа, имеющий среднюю эмиссионную способность 90 % в спектральном диапазоне 8...14 мкм и тепловую емкость 2,4 Дж/м²К.

3. Доза легирования в опорах составляла 10^{16} атомов бора/см², что намного превышало концентрацию в активной части (которая обычно составляла $6 \cdot 10^{13}$ атомов бора/см²). Так что сопротивление опор было много меньше, чем активной части.

На рис. 5 показана зависимость чувствительности от постоянного смещения для болометров, созданных по APCVD-технологии. Болометры имели разные теплопроводности и различные размеры. Концентрация бора в поликристаллическом SiGe составляла $3 \cdot 10^{13}$ см⁻².

Из рис. 5 ясно, что чувствительность увеличивается при уменьшении теплопроводности. При подаче смещения на прибор постоянным током он нагревается за счет протекания тока и ТКС уменьшается, поэтому чувствительность не увеличивается линейно при увеличении напряжения, а достигает определенного предела. Нагрев можно исключить при использовании импульсного смещения с периодом много меньшим, чем постоянная времени прибора. В этом случае чувствительность будет изменяться линейно при увеличении напряжения смещения. Тепловые постоянные времени изменялись от 22,8 до 1,55 мс в зависимости от размеров прибора и их теплопроводности.

Основные выводы, которые следуют из экспериментальных исследований следующие: шум типа $1/f$ всегда доминирует над шумом Джонсона, а шумом теплового сопротивления можно пренебречь. Улучшение характеристик прибора возможно при уменьшении компоненты шума типа $1/f$. Несмотря на высокие значения чувствительности и ТКС приборов размером 25×25 мкм по эффективной обнаружительной способности приборы размером 50×50 мкм им не уступают вследствие меньших значений шума типа $1/f$. Также можно отметить, что для приборов, созданных по RPCVD-технологии, несмотря на меньшие значения шума и теплопроводности эффективная обнаружительная способность улучшается незначительно вследствие заметного уменьшения ТКС.

На сайте компании XenICs в 2003 году была размещена реклама коммерчески выпускаемых компаний дискретных детекторов на основе болометров из поликристаллического SiGe [33]. Эти детекторы чувствительны к инфракрасному излучению в спектральном диапазоне 8...12 мкм и предназначены для бесконтактного измерения температуры, спектро-

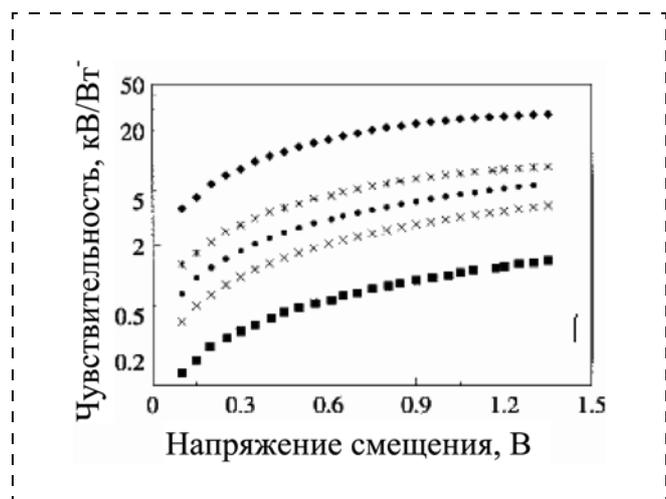


Рис. 5. Зависимость чувствительности от напряжения смещения для приборов, имеющих различные теплопроводности (черные ромбы — $G = 1,56 \cdot 10^{-7}$ Вт/К, звездочки — $G = 4,7 \cdot 10^{-7}$ Вт/К, черные кружки — $G = 8 \cdot 10^{-7}$ Вт/К, кресты — $G = 1,3 \cdot 10^{-6}$ Вт/К, черные квадраты — $G = 4,13 \cdot 10^{-6}$ Вт/К) [26]

скопии, контроля технологических процессов, охран-ных систем, противопожарных датчиков. Детекторы типа XSNG-8.0-001-A имеют размер 450×450 мкм, но отмечается возможность создания по заказу детекторов любой формы и размеров (от 30×30 мкм до 1×1 мм). Рабочая температура детекторов может изменяться от -40 до 70 °С. Максимальный отклик детекторов наблюдается при длине волны $10,2$ мкм, при этом уменьшение спектрального отклика по диапазону $8...14$ мкм не превышает 10 %. Сопротивление детекторов составляет 700 кОм, тепловая постоянная времени — 21 мс, обнаружительная способность $3 \cdot 10^8$ см · Гц^{0,5}/Вт при частоте 10 Гц, чувствительность при этой частоте превышает $1,5 \cdot 10^4$ В/Вт. Следует отметить, что экспериментальные тестовые детекторы данных производителей имеют обнаружительную способность до $2,26 \cdot 10^9$ см · Гц^{0,5}/Вт.

Микроболометры, разработанные группой из Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing [36, 37], имеют максимальную обнаружительную способность, равную $8,3 \cdot 10^8$ см · Гц^{0,5}/Вт, при частоте 15 Гц. Чувствительность микроболометров при 10 Гц равна $1,7 \cdot 10^4$ В/Вт, а тепловая постоянная времени — $16,5$ мс. Отмечено, что низкочастотный шум (шум типа $1/f$) доминирует при частотах, меньших 100 Гц, в диапазоне частот $100...150$ Гц шум типа $1/f$ сравним по значению с шумом Джонсона, а при частотах, больших 150 Гц, доминирует шум Джонсона. В результате исследований зависимости обнаружительной способности от напряжения смещения выбрано оптимальное значение, которое составляет $12,5$ В.

В табл. 2 приведены пороговые характеристики болометров на основе различных материалов. Несмотря на относительно небольшие значения ТКС ($0,68...2$ %/°С) болометрические детекторы на основе поликристаллического SiGe обеспечивают хоро-

шие пороговые характеристики (обнаружительная способность до $2,26 \cdot 10^9$ см · Гц^{0,5}/Вт, температурная чувствительность (NETD) — $70...85$ мК). Для сравнения, NETD для болометров на основе $a\text{-Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$ составляет $3,85$ К. Из табл. 2 видно, что, несмотря на высокие значения чувствительности по напряжению для болометров на основе $a\text{-Si}_{0,1}\text{Ge}_{0,9}$: Н и $a\text{-Ge}$: F ($1,9 \cdot 10^6$ В/Вт и $4,2 \cdot 10^6$ В/Вт, соответственно), болометры на основе поликристаллического силицида германия имеют существенно большие значения обнаружительной способности (до $2,26 \cdot 10^9$ см · Гц^{0,5}/Вт), чем, например, болометры на основе $a\text{-Si}_{0,1}\text{Ge}_{0,9}$: Н (10^5 см · Гц^{0,5}/Вт) вследствие меньших шумов в детекторах на основе поликристаллического силицида германия.

Следует отметить, что по известным литературным данным в настоящее время выпуск линейных и малых двумерных матриц освоен только бельгийской компанией XenICs [27, 30, 31]. Выпускались линейные матрицы размером до 122 элементов и двумерные матрицы размером 14×14 элементов. Планировался выпуск больших линейных матриц размером до 200 элементов, а также больших двумерных матриц 160×128 элементов [31]. Использование ряда оригинальных методов оптимизации характеристик детекторов и тонких пикселей ($0,2$ мкм) с U-профилями обеспечило малые значения NETD (<100 мК). Предварительные данные свидетельствуют о прекрасной однородности свойств матричных детекторов.

В работе [38] научной группы из Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing, сообщается о создании монолитной неохлаждаемой матрицы размером 8×8 болометрических детекторов из поликристаллического силицида германия. Пленки поликристаллического SiGe наносились путем газового осаждения в сверхвысоком вакууме. Исследована зависимость ТКС от температуры отжига. Для уменьшения теплопроводности болометра термистор из поликристаллического SiGe поддерживался четырьмя опорами, образуя микромостик. Измерения и расчеты показали, что средняя чувствительность составляет $1,07 \cdot 10^4$ В/Вт при однородности $10,5$ % без коррекции и времени теплового отклика $10,5$ мс. Обнаружительная способность достигала $3,75 \cdot 10^8$ см · Гц^{0,5}/Вт при частоте модуляции 30 Гц и напряжении смещения 5 В.

Оптимизация характеристик микроболометров для инфракрасных формирователей изображения сталкивается с противоречивыми требованиями. Для увеличения чувствительности надо минимизировать теплопроводность, но при данном объеме прибора это приводит к большому значению тепловой постоянной времени. Отклик пикселя становится более медленным по сравнению со временем формирования кадра (частота кадров обычно 30 Гц или выше). Логическое решение этой проблемы за-

Таблица 2

Сравнительные пороговые характеристики инфракрасных болометрических детекторов на основе поликристаллического SiGe и альтернативных материалов

Авторы	Материал	R_V , кВ/Вт	D , см \times Гц ^{0,5} /Вт
Dong [36, 37] Leonov [30]	поли-SiGe поли-SiGe	15 (5 В, 10 Гц)** 55...190 (2 В, 30 Гц)	$8,3 \cdot 10^8$ (15 Гц) $10^9...1,4 \cdot 10^9$
Sedky [26]	поли-SiGe, RPCVD	16,45 (5 В, 10 Гц)	$2,26 \cdot 10^9$
Sedky [26]	поли-SiGe, APCVD	28,1 (5 В, 10 Гц)	$1,59 \cdot 10^9$
Garcia [22]	$a\text{-Si}_{0,1}\text{Ge}_{0,9}:\text{H}$	1900 (550 нА)	10^5
Iborra [16]	$a\text{-Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$	0,38 (100 нА)	$4,8 \cdot 10^7$
Torres [21]	$a\text{-Ge}:\text{Fe}$	4200 (8,3 В)	$2,6 \cdot 10^6$
Tezcan* [19]	n -ямы	4 (5 В, 30 Гц)	$1,2 \cdot 10^9$

* Данные численного моделирования.

** В скобках значения столбца R_V приведены напряжение или ток смещения, а также для некоторых детекторов частота измерений.

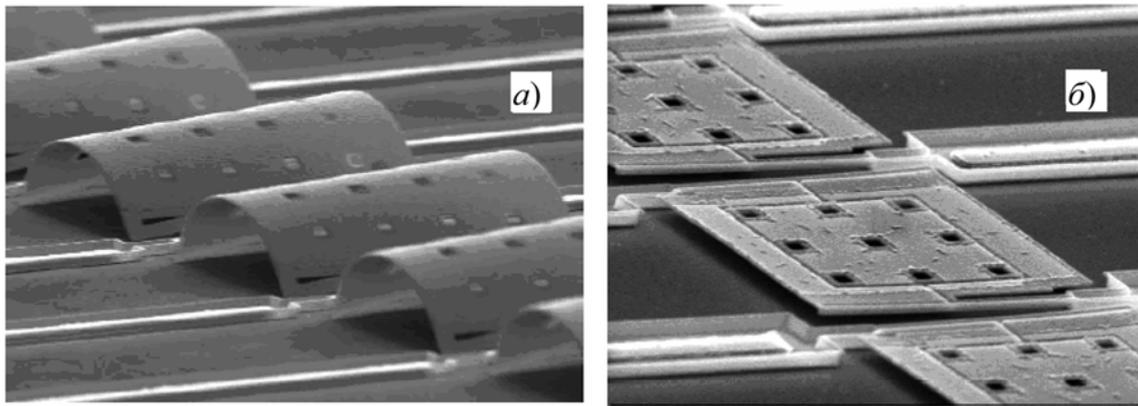


Рис. 6. Изображения линейных матриц на основе микроболометров из поликристаллического SiGe с толщиной слоя 0,26 мкм, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа:

a — неоптимизированные процессы; *b* — после оптимизации процессов создания поглощающего слоя TaN и формирования U-профиля в пикселе [30]

ключается в уменьшении толщины прибора, но уменьшение толщины прибора приводит к резкому уменьшению прочности и изгибу пикселя. В компании XenICs предложен способ решения проблем, связанных с изгибом тонких пикселей, который заключается в формировании активного слоя специальной формы (U-профиль), что повышает механическую прочность структур (рис. 6). Для обеспечения хороших пороговых характеристик детекторов важен правильный выбор материала и параметров поглощающего слоя (обычно для повышения эффективности поглощения используют поглощающие слои толщиной в четверть длины волны излучения, хотя при строгом расчете оптимальной толщины поглощающего слоя следует учитывать спектры излучения объектов и спектры пропускания атмосферы и входной оптической системы). Перспективно применение для создания поглощающих слоев тонких металлических пленок.

Заключение

Таким образом, в настоящее время разработаны основные технологические процессы для формирования монолитных микроболометрических детекторов на основе поликристаллического силицида германия, которые перспективны для создания на их основе неохлаждаемых и относительно недорогих матриц фокальной плоскости для спектрального диапазона 8...12 мкм. Важной задачей разработчиков детекторов на основе поликристаллического силицида германия является снижение температуры отжига для лучшей совместимости технологии создания болометров и стандартных КМОП-процессов. Следует отметить, что в последние пять лет детекторы на основе поликристаллического силицида германия испытывают острую конкуренцию с быстро

прогрессирующими микроболометрами на основе аморфного кремния и аморфного силицида германия.

Список литературы

1. **Рогальский А.** Инфракрасные детекторы / Пер. под ред. А. В. Войцеховского. Новосибирск: Наука, 2003. 636 с.
2. **Tissot J. L.** IR detection with uncooled focal plane arrays. State-of-the art and trends // *Opto-electronics review*. 2004. Vol. 12 (1). P. 105–109.
3. **Tissot J. L., Troulleau C., Fieque B., Crastes A., Legras O.** Uncooled microbolometer detector: recent developments at ULIS // *Opto-Electronics review*. 2005. 14 (1). P. 25–32.
4. **Алиев В. Ш., Васильева Л. Л., Демьяненко М. А., Есаев Д. Г., Овсяк В. Н., Фомин Б. И.** Свойства слоев оксидов ванадия, используемых в качестве термочувствительных элементов неохлаждаемых матричных микроболометрических приемников // Тезисы докладов 21-й Международной научно-технической конференции по фотоэлектронике и приборам ночного видения. 25–28 мая 2010. Москва, Россия. С. 95.
5. **Bhan R. K., Saxena R. S., Jalwania C. R., Lomash S. K.** Uncooled infrared microbolometers arrays and their characterization techniques // *Defence Science Journal*. November 2009. Vol. 59, N 6. P. 580–589.
6. **Демьяненко М. А., Кравченко А. Ф., Овсяк В. Н.** Неохлаждаемые резистивные микроболометры. Ч. I. Режим постоянного смещения // *Автометрия*. 2005. Т. 41, № 1. С. 88–103.
7. **Демьяненко М. А., Кравченко А. Ф., Овсяк В. Н.** Неохлаждаемые резистивные микроболометры. Ч. II. Режим импульсного смещения // *Автометрия*. 2005. Т. 41, № 5. С. 108–122.
8. **Демьяненко М. А., Есаев Д. Г., Марчишин И. В., Овсяк В. Н., Фомин Б. И.** Поглощение инфракрасного и терагерцового излучения в неохлаждаемых микроболометрических приемниках // Тезисы докладов 21-й Международной научно-технической конференции по фотоэлектронике и приборам ночного видения. 25–28 мая 2010. Москва, Россия. С. 99.

9. **Chen C., Ma H., Xiang S., Yi X.** Fabrication and performance of microbolometer arrays based on nanostructured vanadium oxide thin films // *Smart Materials and Structures*. 2007. Vol. 16, N 3. P. 696.
10. **Ambrosio R., Moreno M., Mireles J., Torres A., Kosarev A., Heredia A.** An overview of uncooled infrared sensors technology based on amorphous silicon and silicon germanium alloys // *Physica Status Solidi (c)*. April 2010. Vol. 7, N 3—4. P. 1180—1183.
11. **Radford W., Murphy D., Ray M., Prost S., Kennedy A., Soch K., Coda R., Lung G., Moody E., Gleichman D.** 320 × 240 microbolometer focal plane array for uncooled application // *Proc. SPIE*. 1995. Vol. 2552. P. 675.
12. **Oda N., Yoneyama H., Sasaki T., Sano M., Kurashina S., Hosako I., Sekine N., Sudoh T., Irie T.** Detection of terahertz radiation from quantum cascade laser using vanadium oxide microbolometer focal plane arrays // *Proc. SPIE*. 2008. Vol. 6940. P. 69402Y.
13. **Енукова Т. А., Иванова Н. Л., Куликов Ю. В., Мальяров В. Г., Хребтов И. А.** Аморфные пленки кремния и германия // *Письма в ЖТФ*. 1997. Т. 23, № 13. С. 21—26.
14. **Erukova T. A., Ivanova N. L., Kulikov Yu. V., Malyarov V. G., Khrebtov I. A.** Amorphous silicon and germanium films for uncooled microbolometers // *Technical Physics Letters*. 1997. Vol. 23, N 7. P. 504—506.
15. **Almasri M., Bai Xu, Castracane J.** Amorphous silicon two-color microbolometer for uncooled IR detection // *Sensors Journal*. April 2006. Vol. 6, N 2. P. 293—300.
16. **Iborra E., Clement M., Herero L.-L., Sangrador J.** IR uncooled bolometers based on amorphous $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$ on silicon micromachined structures // *Journal of microelectromechanical systems*. 2002. Vol. 11, N 4. P. 322—329.
17. **Ahmed A. H. Z., Tait R. N.** Characterization of amorphous $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$ for micromachined uncooled bolometers application // *Journal of Applied Physics*. 2003. Vol. 94, N 8. P. 5326—5332.
18. **Ahmed A., Tait R. N.** Noise behavior of amorphous $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{O}_y$ for microbolometers application // *Infrared Physics and Technology*. 2005. Vol. 46. P. 468—472.
19. **Tezcan D. S., Kocer F., Akin T.** An uncooled microbolometer infrared detector in any standard CMOS technology // *The 10th Int. Conf. On Solid-State Sensor & Actuators (TRANSDUCER-99)*. June 7—10, 1999. Sebday. Japan. P. 610—613.
20. **Wissmar G. E., Radamsson H. H., Yamamoto Y., Tillack B., Vieider C., Andersson J. Y.** SiGe quantum wells for uncooled long wavelength infra-red radiation (LWIR) sensors // *Journal of Physics: Conference Series*. 2008. Vol. 100. Part 4. P. 042029.
21. **Torres A., Kosarev A., Garsia Cruz M. L., Ambrosio R.** Uncooled micro-bolometer based on amorphous germanium film // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2003. Vol. 329. P. 179—183.
22. **Garcia M., Ambrosio R., Torres A., Kosarev A.** IR bolometers based on amorphous silicon germanium alloys // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2004. Vol. 338. P. 744—748.
23. **Yon J. J., Nieto J. P., Vandroux L., Imperinetti P., Rolland E., Goudon V., Vialle C., Arnaud A.** Low-resistance a-SiGe-based microbolometer pixel for future smart IR FPA // *Proc. SPIE*. 2010. Vol. 7660. P. 76600.
24. **Fresh Patents № 9787004428** May 1997. Method of fabrication of an infrared radiation detector and infrared detector device / P. Fiorini, S. Sedky, M. Caymax, C. Baert.
25. **Sedky S., Fiorini P., Caymax M., Verbist A., Baert C.** IR bolometers made of polycrystalline silicon germanium // *Sensor and Actuators*. 1998. № A66. P. 193—199.
26. **Sedky S., Fiorini P., Baert K., Hermans L., Mertens R.** Characterization and optimization of infrared poly SiGe bolometers // *IEEE transactions on electron devices*. 1999. Vol. 46, N 4. P. 675—682.
27. **Moor P.-D., John J., Sedky S., VanHoof C.** Linear arrays of fast uncooled poly-SiGe microbolometers for IR detection // *Proc. SPIE*. 2000. Vol. 4028. P. 27—34.
28. **Moor P.-D., Kavadias S., Leonov V., Van Hoof C.** Process development of fast and sensitive polySiGe microbolometer arrays // *Proc. SPIE*. 2001. Vol. 4228. P. 94—99.
29. **Sedky S., Witvrouw A., Baert K.** Poly SiGe, a promising material for MEMS monolithic integration with the driving electronics // *Sensor and Actuators*. 2002. № A97-98. P. 503—511.
30. **Leonov V. N., Perova N. A., Vermeieren J., Grietens B., Goessens C., Moor P. D., Van Hoof C. A.** Optimization of design and technology for uncooled poly-SiGe microbolometer arrays // *Proc. SPIE*. 2002. Vol. 4721. P. 122—133.
31. **Leonov V. N., Perova N. A., Vermeiren J. P., Grietens B., Goessens C., Moor P. D., Van Hoof C. A.** Micromachined poly-SiGe bolometer arrays for infrared imaging and spectroscopy // *Proc. SPIE*. 2003. Vol. 4945. P. 54—63.
32. **Handbook of infrared detection technologies** / Ed. by M. Henini and M. Razeghi. Oxford: Elsevier Advanced Technology, 2002. 518 p.
33. **8—14 micrometers microbolometer arrays, march 2003** (URL: <http://www.XenICs.com>).
34. **Пат. США № 2005/0012040 A1**, U. S. class: 250/338.4, заявл. 17.08.2004, опубл. 20.01.2005 / Fiorini P., Sedky S., Caymax M., Baert C. Interuniversitair Microelektronica Centrum (IMEC), Leuven (BE), Method of fabrication of an infrared radiation detector and infrared detector device.
35. **Пат. США № 7,320,896 B2**, U. S. class: 438.14, 438.149, 438; 250.338.1, МПК: H01L 21/00; заявл. 28.12.2006, опубл. 22.01.2008. Fiorini P., Sedky S., Caymax M., Baert C. Infrared Radiation Detector.
36. **Dong L., Yue R.-F., Liu L.-T.** Characterization of uncooled poly SiGe microbolometer for infrared detection // *Chin. Phys. Lett.* 2003. Vol. 20, N 5. P. 770—773.
37. **Dong L., Yue R., Liu L.** An uncooled microbolometer infrared detector based on poly-SiGe thermistor // *Sensor and Actuators*. 2003. № A105. P. 286—292.
38. **Ruifeng Y., Dong L., Litian L.** Monolithic Uncooled 8 × 8 Bolometer Arrays Based on Poly-SiGe Thermistor // *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*. 2006. Vol. 27, N 7. P. 995—1003.
39. **King T. J., McVittie J. P., Saracwat K. C.** Electrical properties of heavily-doped polycrystalline silicon-germanium films // *IEEE Transaction on Electron Devices*. 1994. Vol. 41, N 2. P. 228—232.
40. **Chiussi S., Serra C., Serra J., Gonzales P., Leon B., Urban S., Andra G., Bergmann J., Falk F., Fabbri F., Fornarini L., Martelli S., Rinaldi F.** Laser crystallisation of poly-SiGe for microbolometers // *Applied Surface Science*. 2002. Vol. 186. P. 166—172.
41. **Chiussi S., Lopez E., Serra J., Gonzalez P., Serra S., Leon B., Fabbri F., Fornarini L., Martelli S.** Influence of laser fluence in ArF-excimer laser assisted crystallisation of a-SiGe:H films // *Applied Surface Science*. 2003. Vol. 208/209. P. 358—363.
42. **Чистохин И. Б., Михайловский И. П., Фомин Б. И., Черепов Е. И.** Поликристаллические слои сплава кремний-германий для неохлаждаемых болометрических приемников ИК-излучения // *Прикладная физика*. 2003. № 2. С. 98—101.
43. **Chistokhin I. B., Michailovsky I. P., Fomin B. I., Cherepov E. I.** Polycrystalline layers of silicon-germanium alloy for uncooled IR bolometers // *Proc. SPIE*. 2003. Vol. 5126. P. 407—414.
44. **Чистохин И. Б., Гутаковский А. К., Дерябин А. С.** Структура и электрофизические свойства поликристаллических пленок SiGe, полученных методом молекулярно-лучевого осаждения // *ФТП*. 2007. Т. 41, № 3. С. 352—355.

К. В. Малышев, канд. техн. наук, доц.,
МГТУ им. Н. Э. Баумана,
e-mail: malyshev@bmstu.ru

С. Л. Чернышев, канд. техн. наук, проф.,
МАТИ — Российский государственный
технологический университет
им. К. Э. Циолковского,
e-mail: nature@front.ru

ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФИГУРНЫХ AlGaAs СВЕРХРЕШЕТОК

Поступила в редакцию 27.10.10

Теоретически исследованы вольт-амперные характеристики квазипериодических полупроводниковых сверхрешеток нового типа, построенных на основе фигурных чисел. Фигурные сверхрешетки сравниваются со стандартными периодическими сверхрешетками и квазипериодическими фибоначиевыми сверхрешетками. Для сравнения резонансно-туннельных свойств сверхрешеток предложена информационная мера.

Ключевые слова: вольт-амперная характеристика, сверхрешетка, квазипериодический, наноструктура, одномерный квазикристалл, фигурное число, число Фибоначи, ценность информации

Введение

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) квазипериодических полупроводниковых наноструктур привлекают сейчас внимание в связи с перспективами их приложений в наноэлектронике [1]. В частности, форма начального и падающего участков ВАХ диодных структур на основе сверхрешеток (СР) важна для их применения в нейронных сетях, клеточных автоматах, нелинейных преобразователях радиосигналов и в криптографических системах. В коротких СР с периодом порядка 10 нм и с общей длиной, меньшей характерной длины свободного пробега электрона, равной порядка 100 нм, понижена вероятность образования доменов сильного электрического поля, движение которых сильно вмешивается в резонансно-туннельную проводимость и ухудшает сверхвысоко-частотные характеристики приборов на основе СР. Поэтому короткопериодные СР малой длины особенно перспективны для наноэлектронных устройств диапазона 0,1...10 ТГц.

Квазипериодические СР занимают промежуточное положение между идеально упорядоченными и идеально разупорядоченными СР. Их типичными примерами являются решетки Фибоначи и решетки Ту-Морзе (*Thue-Morse*). Аналоги кристаллических минизон в энергетической зависимости их туннельной прозрачности имеют сильно изрезанный вид и обладают самоподобием. В отличие от периодических СР в квазипериодических СР приложение внешнего напряжения не просто сдвигает, уширяет

и понижает резонансные пики, но сильно меняет и положение, и форму "минизон" прозрачности. Это открывает новые возможности по управлению формой ВАХ приборов на основе СР. В частности, отмечается перспективность применения квазипериодических СР в качестве электронных фильтров [2].

В данной работе для конструирования квазипериодических СР используются фигурные числа, описанные в работе [3]. Фигурные числа имеют три управляемых параметра (порядок или форма, размерность и номер) по сравнению с одним (номер) у чисел Фибоначи. Поэтому СР на основе фигурных чисел могут открыть дополнительные возможности по управлению резонансно-туннельным транспортом электронов.

Вольт-амперные характеристики фибоначиевых сверхрешеток

Фибоначиевая сверхрешетка (ФСР) [1] — это слоистая наноструктура, состоящая из чередующихся слоев барьеров и ям для электронов проводимости. Слои имеют нанометровую толщину и образуют последовательность вида *BABBA...*, где буквой *B* обозначен барьерный слой, а буквой *A* — слой потенциальной ямы.

Расчет туннельной прозрачности СР в данной работе проводился методом матрицы переноса [4], а расчет ВАХ — по стандартной формуле Цу-Есаки [2]. Для изучения зависимости ВАХ от параметров СР мы взяли такие же характерные параметры СР, как в работе [2]. Содержание алюминия в барьерном *B*-слое $Al_xGa_{1-x}As$ составляло $x = 0,3$, что соответствует высоте потенциального барьера 0,37 эВ для электронов проводимости. Толщина барьерного слоя равнялась двум монослоям по 0,565 нм. Толщина слоя ямы была увеличена с 5 до 12 монослоев, чтобы приблизить две нижние "минизоны" СР к уровню Ферми эмиттера. Это понизило напряжение начала падающего участка примерно до 0,3 В и усилило влияние второй "минизоны" на форму ВАХ. Эффективная масса электрона — 0,08 от массы свободного электрона, энергия Ферми в крайних *n* + GaAs-слоях — 0,069 эВ. К потенциальному профилю барьеров и ям была добавлена контактная разность потенциалов 0,1 эВ между крайними *n* + GaAs-слоями и средними нелегированными *i*-AlGaAs-слоями. Температура — 300 К.

ФСР S_N ранга $N = 1, 2, \dots$, начиная с $N = 3, 4, \dots$, строится путем последовательного соединения (конкатенации) $S_{N+2} = S_{N+1} + S_N$ решеток двух предыдущих рангов S_{N+1} , и S_N (табл. 1). При этом $S_1 = A$ и $S_2 = B$. Здесь $S_N = F_{N-1}$, где F_N — число Фибоначи под номером $N = 0, 1, 2, \dots$.

На рис. 1 ВАХ ФСР S_N для рангов $N = 4, 5$ и 6 сравниваются с ВАХ периодической сверхрешетки (ПСР) $P_4 = BABABABA$. На вставке показаны профили потенциальной энергии электрона поперек слоев СР. Структура S_4 совпадает со структурой стандартного двухбарьерного резонансно-туннель-

Таблица 1

N	S_N	M	P_1	P_2	I , бит
1	A				
2	B				
3	$S_3 = S_2 + S_1 = B + A = BA$				
4	$S_4 = S_3 + S_2 = BA + B = BAB$	1	1	0	3,6
5	$S_5 = S_4 + S_3 = BAB + BA = BABBA$	2	1/2	0	0,9
6	$S_6 = BABBA + BAB = BABBABAB$	3	1/3	2/3	3,3
7	$S_7 = S_6 + S_5 = BABBABABBA$	6	1/2	1/6	1,2

ного диода (РТД). Волнистость ВАХ у ФСР гораздо заметнее, чем у ПСР, а средний наклон примерно одинаков.

ВАХ каждого следующего "поколения" ФСР "наследует" основные резонансные особенности ВАХ ФСР предыдущих двух "поколений". Это связано с рекуррентным правилом последовательного присоединения $S_{N+2} = S_{N+1} + S_N$. Видно, что пиковые напряжения ФСР-"потомка" больше пиковых напряжений ФСР-"предков". Это связано с увеличением общей длины СР при конкатенации. Прикладываемое к СР напряжение понижает резонансные уровни приблизительно обратно пропорционально длине СР. Поэтому с ростом длины СР для выполнения условия резонанса требуется все большее напряжение.

Конструирование фигурных сверхрешеток

Повышение степени разнообразия СР достигается путем использования при их конструировании ба-

зовых числовых систем, имеющих большое число управляемых параметров по сравнению с обобщенными числами Фибоначчи. К таким математическим объектам относятся фигурные числа [3]. Фигурное число представляет математический объект, объединяющий в себе число, множество и геометрическую фигуру. Каждый такой объект характеризуется тремя неотрицательными целочисленными параметрами L, M, N . Значение параметра L определяет порядок арифметического ряда, задающего фигурные числа. Параметр M определяет форму геометрических фигур и соответственно их группу симметрии. Натуральные числа N — это номера, определяющие эволюцию объектов (например моментов времени).

Фигурное число $F_L^M(N)$ задается следующими соотношениями [3]:

$$F_{L+1}^M(N) = \sum_{i=0}^{i=N} F_L^M(i). \tag{1}$$

Здесь $L = 0, 1, 2, \dots; M = 0, 1, 2, \dots; N = 0, 1, 2, \dots$
 При этом $F_L^M(0) = 0; F_L^M(1) = 1; F_0^M(N) = M + 1$ при $N > 1$. Фигурное число подобно числам Фибоначчи может задаваться рекуррентными соотношениями вместе с начальными и граничными условиями. Показано [5], что фигурное число $F_2^0(N)$ представляет вложение в гексагональную решетку; фигурное число $F_2^1(N)$ — вложение в квадратную решетку; фи-

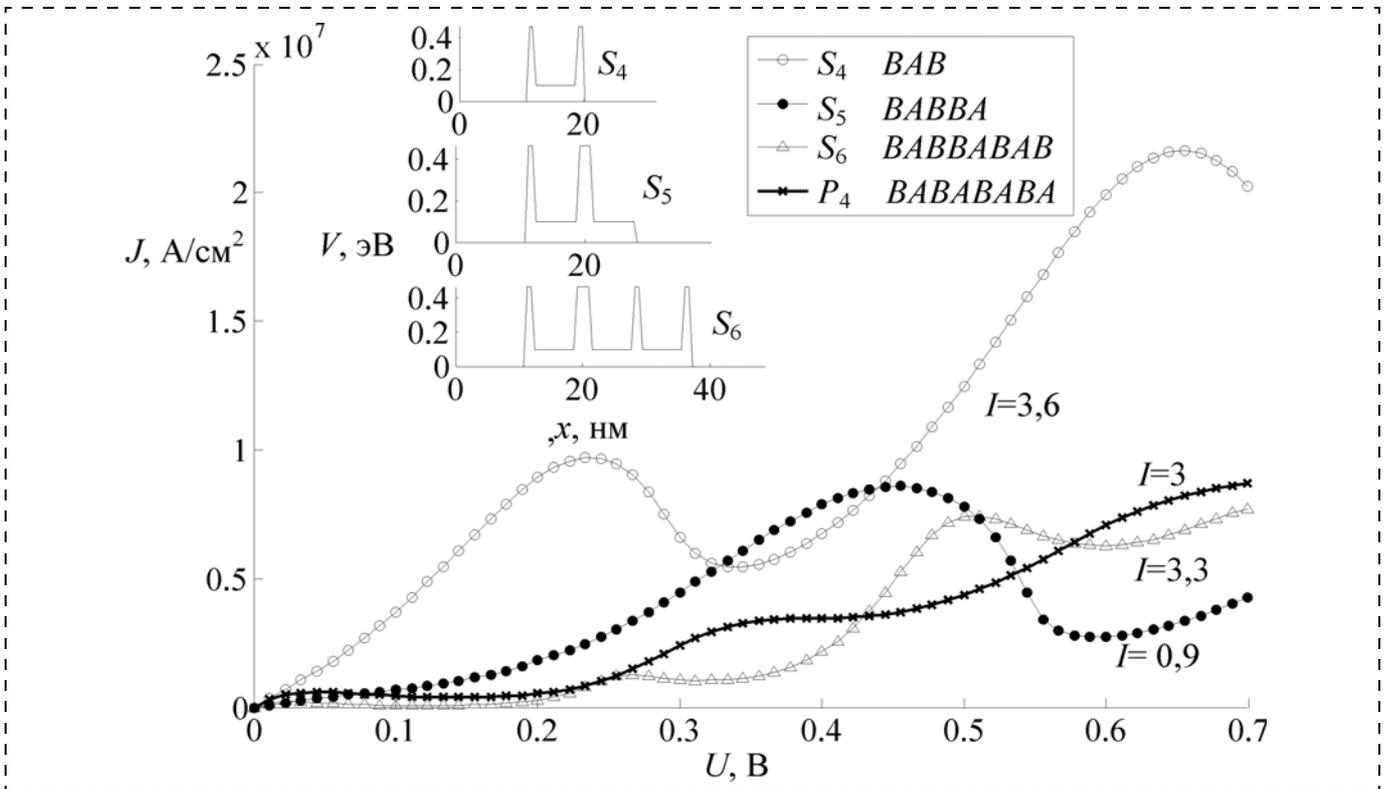


Рис. 1. ВАХ фибоначчиевых сверхрешеток

гурное число $F_3^0(N)$ — вложение в гранецентрированную решетку; фигурное число $F_3^1(N)$ — вложение в объемно центрированную решетку. Вложения в решетки и решетчатые упаковки изучаются в связи с моделированием атомных и молекулярных структур как твердых тел, так и жидкостей. Установление соответствия фигурного числа и определенной решетки позволяет рассматривать этапы эволюции наносистемы в процессе самоорганизации и анализировать структуру и свойства решетки на основе изученных свойств фигурных чисел.

Конструирование фигурных СР выполняется на основе фигурных чисел аналогично фибоначиевым СР. Эти построения могут быть проведены различными способами, приводящими в общем случае к различным и неоднозначным результатам.

Для фигурных чисел согласно их определению при натуральных L и N справедливы следующие рекуррентные соотношения:

$$F_L^M(N) = F_{L-1}^M(N) + F_L^M(N-1); \quad (2)$$

$$F_L^M(N) = F_L^0(N) + M\Phi_L^0(N-1) \quad (3)$$

с граничными условиями $F_L^0(1) = 1$; $F_0^0(N) = 1$, $N > 1$.

По аналогии с решетками Фибоначчи этим граничным условиям можно поставить в соответствие слои A и B потенциальных ям и барьеров:

$$F_L^0(1) = A, L = 0, 1, 2, \dots;$$

$$F_0^0(N) = B, N > 1. \quad (4)$$

Первый способ построения фигурных СР заключается в использовании определения (1), рекуррентного соотношения (3) и граничных условий (4). Сначала определим СР, соответствующие фигурным числам $F_L^M(1)$ и $F_0^M(N)$. Так, из определения (1) следует, что $F_L^M(1) = A$, $L = 0, 1, 2, \dots$, поскольку $F_L^0(0) = 0$ (пустое множество). Согласно соотношению (3) $F_0^0(2) = B$. Тогда из (1) следует, что $F_0^M(2) = B + MA = BA\dots A$, где символ A повторяется M раз. Так же получаем выражение $F_0^M(N) = B + MB = B\dots BB$, где для $N > 2$ символ B повторяется $M + 1$ раз.

СР, соответствующие фигурным числам $F_1^0(N)$, определим согласно (1), располагая слагаемые по

Таблица 2

N	1	2	3	4	5
$F_1^0(N)$	B	AB	BAB (3,6)	$ABAB$ (4,6)	$BABAB$ (3,1)
$F_2^0(N)$	B	ABB	$ABBABB$ (1,4)	$BBABABBABB$ (1,5)	$BABBABBABABBABB$ (1,3)
$F_3^0(N)$	B	$ABBA$	$BBABBABA$ (1,2)		
$F_1^1(N)$		ABB	$BABAB$ (3,1)	$ABABBAB$ (1,2)	$BABABABAB$ (3,1)
$F_1^2(N)$		$ABBB$	$BABABAB$ (3,0)	$ABABBABBAB$ (1,7)	$BABABABABABAB$ (3,1)
N	1	2		3	
$F_4^0(N)$	B	$ABBAB$ (1,4)		$BABBABABBABABBA$ (1,3)	
$F_5^0(N)$	B	$ABBABA$ (1,4)		$ABBABABBABABBABABAB$ (1,3)	
$F_6^0(N)$	B	$ABBABAB$ (1,2)		$BBABABBABABBABABBABABBABAB$ (1,6)	
$F_2^1(N)$		$ABBB$ (0,19)		$ABBABBABB$ (0,64)	
$F_3^1(N)$		$ABBAB$ (1,4)		$BBABBABAABBA$ (0,58)	
$F_4^1(N)$		$ABBABB$ (1,4)		$BABBABABBABABBAABBAB$ (1,1)	
$F_5^1(N)$		$ABBABAB$ (1,2)		$ABBABABBABABBABABBABABBABA$ (1,3)	
$F_2^2(N)$		$ABBBB$ (0,19)		$ABBABBABBABB$ (1,1)	
$F_3^2(N)$		$ABBABB$ (1,4)		$BBABBABAABBAABBA$ (0,3)	
N	6		7		8
$F_1^0(N)$	$BBABAB$ (3,1)		$ABBABAB$ (1,2)		$BABBABAB$ (3,3)
$F_1^1(N)$	$BBABABBABAB$ (1,8)		$ABBABABBABAB$ (1,2)		$BABBABABBABAB$ (2,1)

убыванию номера N , аналогично построениям в табл. 1 и табл. 2:

$$F_1^0(N) = F_0^0(N) + F_0^0(N-1) + \dots + F_0^0(1) + F_0^0(0) = BBB...BA,$$

где число символов B при $N > 1$ равно $N - 1$. Используя рекуррентное соотношение (3), находим СР, соответствующие фигурным числам

$$F_1^M(N) = BBB...BA + (BB...BA + \dots + BB...BA), \quad (5)$$

где в скобке выделено M одинаковых слагаемых, каждое из которых включает $N - 2$ символов B . Из выражения (5) при $N > 2$ получаем число $K = M + 1$ барьерных каскадов, определяемых совокупностью слоев B , отделенных друг от друга слоями A .

Используя аналогично определение (1) и рекуррентное соотношение (3), получаем выражение для СР, соответствующих двумерным фигурным числам

$$F_2^M(N) = BBB...BA + BB...BA + \dots + BA + A + M(BB...BA + B...BA + \dots + BA + A), \quad (6)$$

где в выражении $BBB...BA$ число символов B равно $N - 1$, в выражении $BB...BA$ число символов B равно $N - 2$ и т. д. Общее число символов в выражениях (5) и (6) равно соответствующему фигурному числу.

На основе определения (1) получаем таким же образом все СР, соответствующие фигурным числам $F_L^M(N)$.

Заметим, что последовательно применяя рекуррентное соотношение (1), фигурные числа можно представить в следующем виде:

$$F_L^M(N) = \sum_{K=0}^{K=S} C_L^K F_K^M(N-K), \quad (7)$$

где $S = L$, если $L < N$ и $S = N - 1$, если $L \geq N$. В справедливости этого выражения можно убедиться, если определить его при $M = 0$. Тогда с учетом формулы, определяющей фигурные числа нулевого порядка в виде биномиального коэффициента

$$F_L^0(N) = C_{L+N-1}^{N-1},$$

$$C_{L+N-1}^{N-1} = \sum_{K=0}^{K=S} C_L^K C_{N-1}^{N-K-1},$$

где $S = L$, если $L < N$ и $S = N - 1$, если $L \geq N$. Здесь C_{L+N-1}^{N-1} — биномиальный коэффициент, равный числу сочетаний $N - 1$ элементов из $N + L - 1$ элементов.

Выражение (7) с учетом граничных условий (4) также позволяет последовательно определять фигур-

ные СР на основе фигурных чисел. Однако получаемые при этом СР будут отличаться от тех, которые получаются на основе рассмотренного выше способа, опирающегося на рекуррентное соотношение (3).

Например, представление фигурного числа $F_1^1(1)$ на основе (7) приводит к структуре $BBBAA$ (один барьерный каскад), тогда как фигурная СР, построенная на основе соотношений (1), (3) и (4), имеет вид $BBABA$ (два барьерных каскада). Отметим, что соотношение (3) является отличительной особенностью определяемых согласно (1) фигурных чисел по сравнению, например, с прямоугольными фигурными числами.

Конструируемые квазипериодические СР, построенные, например, на основе одномерных ($L = 1$) фигурных чисел $F_1^M(N)$, на первый взгляд, представляют некоторые регулярные (изменяющиеся по определенному закону) структуры и, следовательно, не являются квазистохастическими. В то же время, взаимосвязь фигурных чисел с числами Фибоначчи при изменении условий (4), как показывают результаты предварительных исследований, может приводить к появлению квазистохастичности.

Чтобы получить фигурные СР со стохастическими свойствами, аналогичными ФСР, можно отказаться от требования фиксированных граничных условий. Вместо этих условий можно воспользоваться разложением чисел Фибоначчи F_N по треугольным (нулевого порядка) фигурным числам $F_L^0(N)$ [3]:

$$F_N = \sum_{n=1}^{n=\lfloor N/2 \rfloor + 1} F_{N-2(n-1)}^0(n). \quad (8)$$

Отметим, что согласно геометрическому представлению фигурных чисел нижний индекс соответствует размерности. Например, фигурное число $F_3^0(N)$ представляет трехмерную конструкцию. Как указано в работе [3], числа Фибоначчи также имеют схожие геометрические свойства. Так, номер N числа Фибоначчи соответствует определителю матрицы порядка N .

Двигаясь слева направо по соответствующей символической последовательности S_N (см. табл. 1), приравниваем каждому слагаемому (фигурному числу) в сумме (8) очередной участок последовательности символов. Для $S_1 = A$ и $S_2 = B$ сумма (8) содержит только по одному слагаемому. Так, получаем выражения для исходных элементов последовательности символов

$$S_1 = A = F_0 = F_0^0(1);$$

$$S_2 = B = F_1 = F_1^0(1). \quad (9)$$

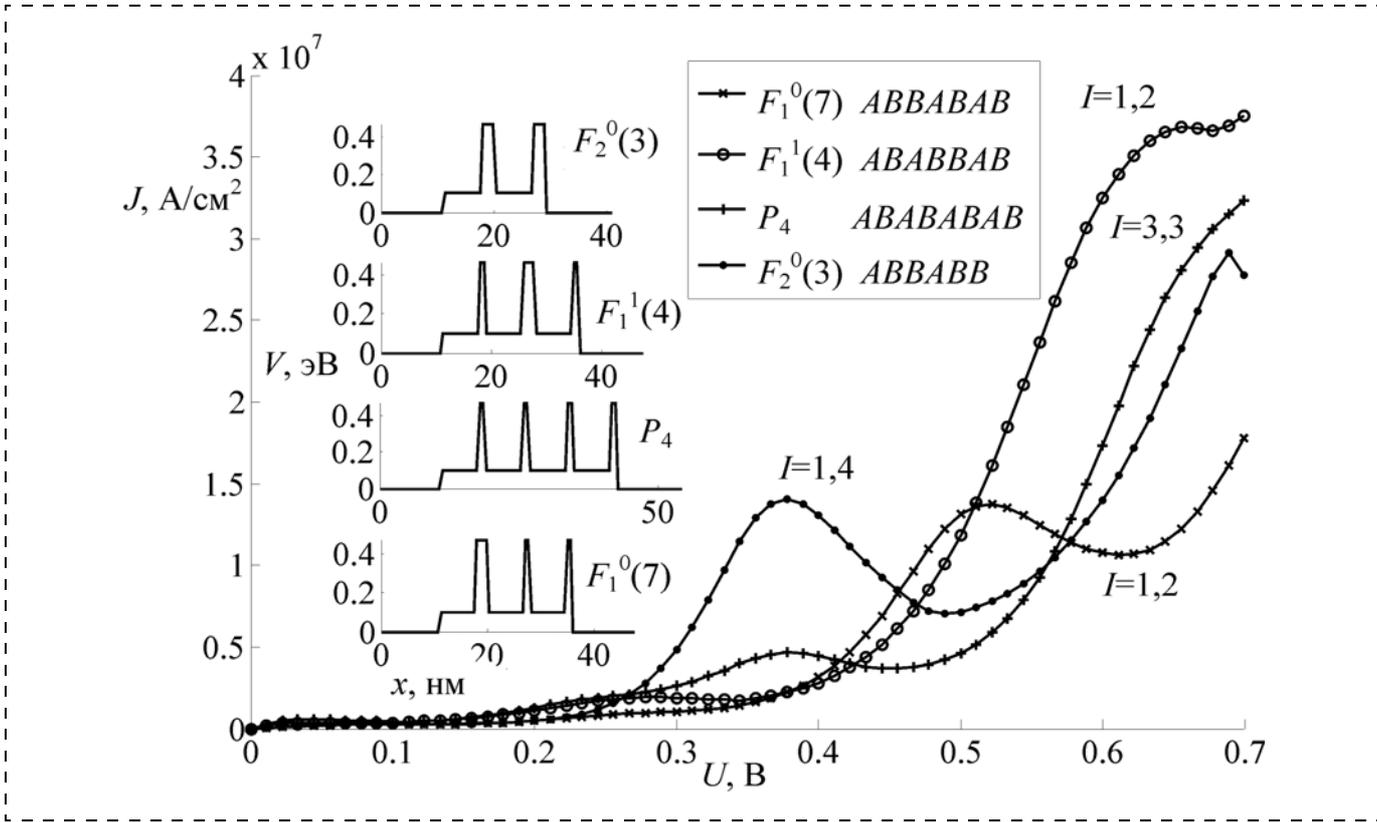


Рис. 2. ВАХ 4-барьерных фигурных сверхрешеток

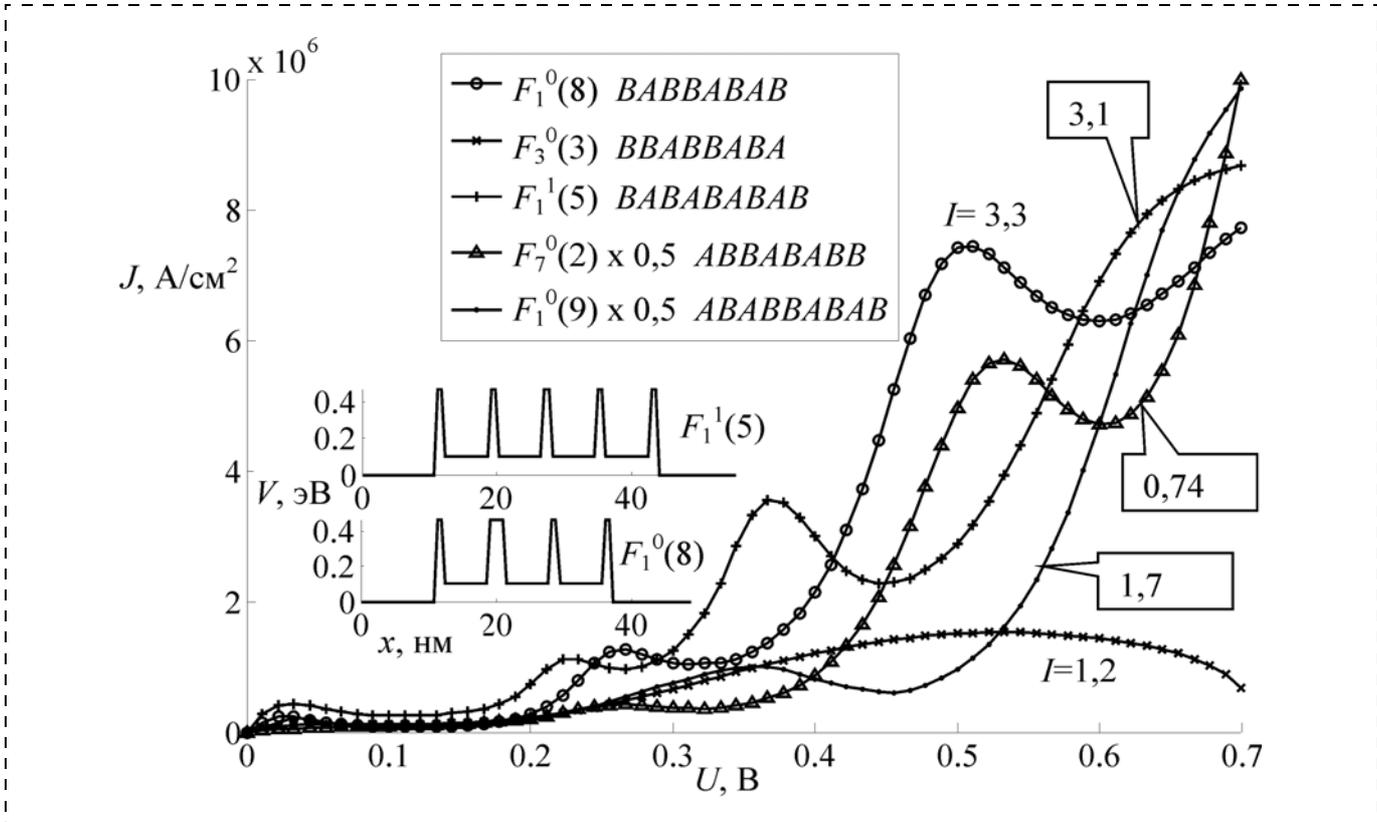


Рис. 3. ВАХ 5-барьерных фигурных сверхрешеток

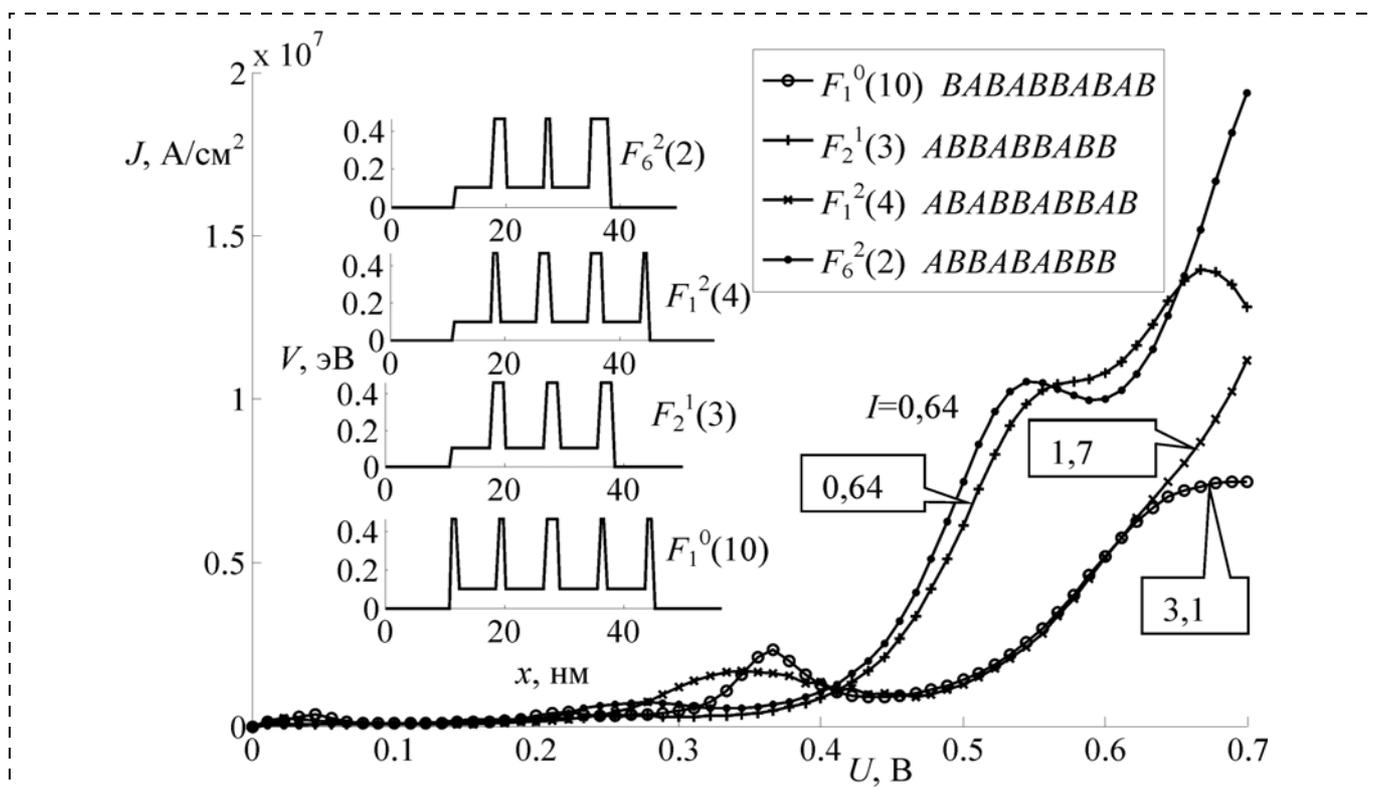


Рис. 4. ВАХ 6-барьерных фигурных сверхрешеток

лона фигурная СР $F_1^1(5)$. Их близкие значения I согласуются с близким расположением второго максимума их ВАХ. При этих напряжениях остальные фигурные СР имеют почти совпадающие участки ВАХ. Из них ближе всех к эталону (I ближе всех к 0) фигурная СР $F_7^0(2)$. Ее пиковые напряжения почти такие же, как у ФСП S_6 , но гораздо больше отношение второго пикового тока к первому.

На рис. 4 приведены ВАХ фигурных СР, содержащих шесть барьерных слоев. Одинаково близки к эталону (I около 0) СР $F_2^1(3)$ и $F_6^2(2)$. Их ВАХ почти совпадают на участках до 3-го максимума включительно. ВАХ остальных двух СР сильно различаются на 3-м максимуме, что согласуется с большим различием их значений I .

Выводы

1. Предложен и исследован новый тип полупроводниковых сверхрешеток, основанный на фигурных числах $F_L^M(N)$. Он аналогичен сверхрешеткам Фибоначчи S_N , но открывает более широкие перспективы по управлению формой вольт-амперной характеристики квазипериодических наноструктур благодаря двум добавочным степеням свободы.

2. Характерные особенности вольт-амперных характеристик у фигурных сверхрешеток богаче, чем у фибоначиевых. В частности, фигурные сверхрешетки могут иметь почти совпадающие характеристики до второго и даже третьего максимума включительно, а далее существенно отличаться.

3. Предложена и проверена информационная мера I сверхрешеток, связанная с их резонансно-туннельными свойствами относительно эталонной сверхрешетки. Чем дальше от эталона сверхрешетка, тем сильнее I отличается от 0 и тем сильнее различия в пиковых напряжениях и формах вольт-амперных характеристик.

4. Формой вольт-амперных характеристик фигурных сверхрешеток можно управлять в широком диапазоне, меняя индексы сверхрешетки. При этом фигурная сверхрешетка может состоять менее чем из сотни монослоев AlGaAs.

Список литературы

1. **Fibonacci** Superlattices of Narrow-Gap III–V Semiconductors / F. Dominguez-Adame, E. Macia, B. Mendez et al. // Semiconductors Science and Technology. 1995. Vol. 10. P. 797–802.
2. **Current** density in generalized Fibonacci Superlattices under a uniform electric field / P. Panchdhyayee, R. Biswas, A. Khan, P. K. Mahapatra // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. Vol. 20. 275243 (7 p.).
3. **Чернышев С. Л., Чернышев Л. С.** Квантовый анализ результатов измерений // Измерительная техника. 2006. № 12. С. 3–8.
4. **Turley P. J., Teitworth S. W.** Electronic Wave Functions and Electron — Confined Phonon Matrix Elements in GaAs/AlxGal-xAs Double — Barrier Resonant Tunneling Structures // Physical Review. B. 1991. Vol. 44. № 78. P. 3199–3210.
5. **Чернышев С. Л.** Моделирование двумерных и трехмерных решеток на основе фигурных чисел // Вопросы радиоэлектроники. Сер. "Общетехническая". 2010. Вып. 2. С. 188–202.
6. **Харкевич А. А.** Избранные труды: в 3 т. Т. 3: Теория информации. Опознавание образов. М.: Наука, 1973. — 524 с.

Gavrilenko V. P., Mityukhlyayev V. B., Rakov A. V., Todua P. A., Filippov M. N., Sharonov V. A. *Effect of Contamination in a SEM on the Profile of Relief Structures in the Nanometer Range* 2

We present the results of the study of the effect of contamination in a S-4800 SEM on the profiles of relief elements of the MSHPS-2.0K measure of the nanometer range. It is shown, that the electron irradiation leads to the modification of the profiles of the relief elements. Dependences of the profile parameters on the electron irradiation dose are presented for different irradiation modes.

Keywords: contamination, scanning electron microscope, relief elements, test object MSHPS-2.0K

Kostrov A. I. *Macromodel of a Memory Cell with a Magnetic Tunnel Junction* 7

We have developed electric macromodel and equivalent circuit of a magnetoresistive memory cell based on a magnetic tunnel junction with a spin transfer torque writing approach. Nonlinear resistors have been used to represent parallel and antiparallel magnetizations of ferromagnetic layers. The model aims to be used in computer modeling and design of integrated circuits. Its efficiency has been demonstrated on the example of the magnetoresistive memory module.

Keywords: magnetoresistive memory, spintronics, magnetic tunnel junction, simulation, macromodel, spice

Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Martynov D. V., Rogozin O. A., Ryabchenkov V. V., Tcheremissine F. G., Shuvalov P. V. *Problem Solving Environment for Computing and Analyzing the Gas Kinetic Processes* 12

The article describes the structure, functionality and application domain of the developed problem-modeling environment (PSE). It based on solving the kinetic equation by finite-difference schemes and uses the projection method for evaluating the collision integral. Promising directions are developed in PSE: unstructured grids, TVD schemes, multiprocessing and GPU computing. The list of features is supported by numerous examples of simulating real-world problems.

Keywords: problem solving environment, kinetic equation, computer simulation, parallel computing, unstructured grids, GPU, microdevices, shock waves

Kovalevsky A. A., Strogova A. S., Plyakin D. V., Tzibylysky V. V., Borisevich V. M. *Transformation of Germanium Silicate Glasses into Germanium Nanoclusters* 18

With the use of Raman scattering of light, IR-spectrographic, high-resolution electronic and atomic power microscopy and analysis of X-rays diffraction the results of investigation of the process of self-organization of nanoclusters of germanium in the films of Germanium Silicate glass (GSG) — $(Si_xGe_yO_z)$ attained in the process of oxidation and heat treatment of nanostructures films of polycrystalline silicone doped by Germanium (NSFPCS(Ge)) are presented.

Mechanism of Germanium edging in GSG to the border of division of GSG-gate which includes the stages: layering between GeO_2 and SiO_2 , the subsequent restoration by silicone and oxygen GeO_2 up to Ge with their subsequent growth is being investigated.

Keywords: Germanium nanoclusters, Germanium Silicate glass, spectrum of Raman light dispersion, Germanium edging

Timoshenkov S. P., Gaev D. S., Boyko A. N., Gorshkova N. M. *Research and Development of Getters Coatings for MEMS* 24

The magnetron sputtering have been made the nanostructured films of structure $Ti_{1-x}V_x$, which are of interest in quality getters coatings for using in microelectromechanical systems. It is shown that received coatings have the expressed granulated character, with the size of grains in a range of 20—120 nanometers. The calculated values fractal dimensions testify to high specific surface of coatings.

Keywords: MEMS, getters coatings, nanostructuring, fractal structures

Chigirev P. M. *The Application of Graphene in Electronics* 28

The article considers the application of graphene in electronics and electronic engineering, both the existing and potential. It describes principles of creating transistors based on graphene using planar technology. Also it considers the process of creating a prototype chip nonvolatile memory, magnetometers, photodetectors, ultra-sensitive mass sensors based on graphene.

Keywords: graphene, the application of graphene, graphene-based transistor, magnetometers based on graphene, graphene-based photodetector, the mass sensors based on graphene

Dudin A. A., Kustov E. F. *Geometric and Physical Properties of Magnetic Iron Nanoparticles* 30

We investigate the structure of coordination spheres or orbits of crystals with hexagonal and cubic structure, their size and coordination number. Computed the orbits of the atoms of all sublattices of octahedral and tetrahedral voids. As the basic structures are considered close-packed structures FCC- and HCP- oxygen ions of magnetic materials. The distribution of metal cations of both structures is carried out on the octahedral and tetrahedral voids. The obtained data can help pinpoint the physical properties of particles and materials based on magnetic nanoparticles.

Keywords: the structure, coordination sphere, orbit, crystal, magnetic clusters

Korpuhin A. S., Babayevsky P. G., Zhukov A. A., Kozlov D. V., Smirnov I. P. *Effect of Formation Conditions and Thickness of Bearing Polyimide Films and Functional Metal Layers on Thermodeformation Characteristics of Polyimide-Silicon Elastic-Hinge Laminated Cantilever Beams of Thermal Actuators* 34

Effect of formation conditions and thickness of polyimide bearing films as well as state of polyimide-silicon elastic-hinge laminated cantilever beams during their imidization process and different metal functional layers thickness on the beams initial deflection angle and its change at heating and cooling was studied. It was determined, that directional regulation of the beams thermodeformation characteristics depended most important on imidization temperature, polyimide film thickness in elastic-hinge region and the beam free or restricted states during imidization process. Functional metal layers with thickness about 0,1 μ have slight effect on the beam thermodeformation performances but with the thickness increased deteriorated them.

Keywords: thermal actuator, polyimide, silicon, metal, elastic-hinge laminated cantilever beams, formation conditions, thermodeformation characteristics

Voitsekhovskii A. V., Nesmelov S. N., Kulchitsky N. A., Melnikov A. A. *Uncooled Microbolometer Based on Polycrystalline SiGe for Infrared Spectral Range* 41

The features of the technology of uncooled microbolometer detectors based on polycrystalline films of germanium silicide, and the parameters of discrete and matrix detectors based on this material were considered. Potential benefits of this type of detectors can be realized by combining the technology of the detectors to silicon CMOS technology.

Keywords: infrared detectors, microbolometer, polycrystalline germanium silicide

Malyshev K. V., Chernyshev S. L. *Current-Voltage Characteristics of Figured AlGaAs Superlattices*. 48

A current-voltage characteristics of a new class of semi-conductor superlattices based on figured numbers is theoretically investigated. Figured superlattices are compared to standard periodic superlattices and quasiperiodic fibonacci superlattices. To compare the resonant tunneling properties of superlattices information value is applied.

Keywords: current-voltage characteristic, superlattice, quasiperiodic, nanostructure, 1D quasicrystal, figure number, Fibonacci number, information value

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. Погорелова. Техческий редактор Е. М. Патрушева. Корректор Т. В. Пчелкина

Сдано в набор 20.12.2010. Подписано в печать 24.01.2011. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,79. Заказ 67. Цена договорная

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