

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 8 (133) ✧ 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.

Андреевский 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.

Петросянц 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

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

- Раткин Л. С. Перспективы развития мировой нанотехнологической промышленности. 2

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

- Глухова О. Е., Колесникова А. С. Полимеризация фуллеренов в углеродной нанотрубке в процессе ее изгиба 10
- Зайцев Н. А., Матюшкин И. В., Красников А. Г., Орлов С. Н., Пастухова Ю. М. Роль границ раздела в наноразмерных МДП-транзисторах с многослойными high-K-диэлектриками 15

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

- Смолин В. К., Герасимов В. А. Возможности оценки качества металлизации по стойкости к электромиграции 17
- Чернов В. А., Митерев А. М., Прудников Н. В., Сигейкин Г. И., Леонова Е. А. Оптимизация состава и размеров источников тока, основанных на прямом преобразовании ядерной энергии в электрическую с использованием эмиссии вторичных электронов. 21

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

- Войцеховский А. В., Несмелов С. Н., Кульчицкий Н. А., Мельников А. А. Влияние дислокаций на внутреннюю квантовую эффективность светоизлучающих структур на основе квантовых ям InGaN/GaN 27
- Гавашели Д. Ш., Рехвишвили С. Ш. Тепловое разрушение фрактальных наноструктур под действием импульсного лазерного излучения 36
- Мустафаев Аб. Г., Мустафаев Г. А., Мустафаев Ар. Г. Исследование гетерозипитаксии кремния на сапфире при создании транзисторных структур. 41

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

- Адамов Ю. Ф., Братов А. В., Братов В. А., Грюншпан А. А., Горшкова Н. М., Сибгатуллин А. Г. Универсальный приемник дифференциальных сигналов для программируемых микросхем. 44
- Мухуров Н. И., Ефремов Г. И., Жвавый С. П. Эффект предварительного деформирования упругих элементов электростатических микрореле. Часть 1. Деформированный якорь. 47

НОВОСТИ ФИАН

- Contents 51

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

ПОДПИСКА:

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

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

УДК 623.3

Л. С. Раткин, канд. техн. наук, директор по научной работе,
ООО "АРГМ", Москва,
e-mail: rathkeen@bk.ru

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ МИРОВОЙ НАНОТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Поступила в редакцию 14.06.2011

Третий Международный форум по нанотехнологиям проходил в Москве с 1 по 3 ноября 2010 года. На форуме рассматривались перспективы развития мировой наноиндустрии.

Научно-технологическая программа объединяла восемь ключевых направлений: наноэлектроника, нанотехнологии для энергетики, наноматериалы, нанобиотехнологии, нанофотоника, нанотехнологии в медицине, нанодиагностика и катализ и химическая промышленность.

Ключевые слова: *наноиндустрия, наноэлектроника, энергетика, наноматериалы, нанобиотехнологии, нанофотоника, медицина, нанодиагностика, катализ, химия, информационные технологии*

Третий Международный форум по нанотехнологиям "RUSNANOTECH 2010" открылся 1 ноября 2010 года в павильоне "Форум" Центрального выставочного комплекса "Экспоцентр" (Москва) выступлением Заместителя Председателя Правительства Российской Федерации С. Б. Иванова. Вице-премьер кратко охарактеризовал положительную динамику развития отечественной нанотехнологической промышленности и тот инвестиционный и инновационный потенциал, который может способствовать интеграции России в мировое нанотехнологическое пространство.

Выступление лауреата Нобелевской премии вице-президента Российской академии наук (РАН), заместителя академика-секретаря Отделения нанотехнологий и информационных технологий (ОНИТ) РАН, академика Ж. И. Алферова было посвящено проблематике сотрудничества академической и вузовской науки. Ректор академического физико-технологического университета — научно-образова-

тельного центра РАН — подчеркнул необходимость научно-технологической кооперации по ряду ключевых направлений [1].

Участникам и гостям форума, несомненно, запомнилось выступление генерального директора "Microsoft Corporation" Стивена Балмера. Подчеркнув неразрывную связь нанотехнологической промышленности со сферой информационных технологий, руководитель корпорации выразил заинтересованность в развитии сотрудничества с ведущими научными центрами РАН, в том числе ОНИТ РАН. Также отмечалась специфика функционирования системы академической мобильности и ее взаимодействия с международной нанотехнологической сетью.

О преобразовании Государственной корпорации (ГК) "Роснано" в ОАО в 2011 году напомнил участникам церемонии открытия генеральный директор ГК А. Б. Чубайс. К 2015 году Россия может войти в число нанотехнологических лидеров, что обусловливает развитие высокотехнологичного сектора экономики, интеграцию инновационного потенциала и консолидацию промышленных ресурсов.

Свыше двадцати мероприятий, сгруппированных в конференции, специальные семинары и симпозиумы, включала деловая программа Третьего Международного форума по нанотехнологиям.

Конференция **"Нанотехнологии и энергосбережение"** объединяла секции "Нанотехнологии в топливно-энергетическом комплексе", "Солнечная энергетика: инновации и финансирование", "Светодиодная индустрия: инновации и финансирование" и "Сверхпроводимость: новая экономика энергетики".

На секции **"Нанотехнологии в топливно-энергетическом комплексе"** были представлены доклады по инновациям в нефтегазовой отрасли, нанотехнологиям в нефтегазовом секторе, технологиям добычи трудноизвлекаемой нефти с применением нанотехнологий и использованию нанотехнологий и наноразмерных катализаторов для интенсификации добычи нефти и повышения коэффициента нефтеотдачи. Затрагивалась проблематика производства коррозионно-стойких труб с применением нанотехнологий, вентильных электроприводов для перекачки нефти, создания нанопокровов для нефтегазового оборудования и сооружений и наноиндустриальной продукции для превращения угля в моторное топливо.

Секция **"Солнечная энергетика: инновации и финансирование"** сфокусировала внимание докладчи-

ков на стратегии развития солнечной энергетики до 2020 года, отраслевых инновационных технологиях и инвестиционных возможностях, в том числе стратегическому инвестированию ГК "Роснано" в спецпроекты, и решении сложных задач для достижения энергетического паритета. Были представлены критерии оценки эффективности проектов в области альтернативной энергетики, исследования восточных региональных рынков и рынков фотовольтаики стран Среднего Востока и Северной Африки, прогнозы развития солнечной энергетики по отраслям и мировым регионам, тренды и технологии гибкой фотовольтаики. Затрагивалась проблематика финансирования прорывных энерготехнологий, влияющих на развитие экономики РФ, тонкопленочных кремниевых технологий, современных трендов для увеличения эффективности солнечных модулей, а также достижения высокой эффективности и низких затрат при производстве изделий для тонкопленочной фотовольтаики.

На секции *"Светодиодная индустрия: инновации и финансирование"* состоялись презентации инновационных светодиодных продуктов и решений, дорожной карты "Светодиоды" и инвестиционных проектов по развитию светодиодной индустрии в РФ. Перспективы светодиодной техники для общего освещения были представлены в докладах по развитию рынка светодиодов и практическим аспектам его внедрения, инновационные технологии и новые рынки светодиодной индустрии — в выступлениях, посвященных уникальной технологии создания линз и систем инкапсуляции сверхъярких диодов, возможностям математического моделирования при проектировании и оптимизации светодиодов на основе нитридов и применению ультрафиолетовых светодиодов. Также был организован круглый стол, посвященный анализу ситуации, связанной с локализацией производства светодиодов и светодиодных изделий в России.

Секция *"Сверхпроводимость: новая экономика энергетики"* включала доклады по перспективам применения нанотехнологий в промышленности и энергетике, влиянию сверхпроводимости на следующее поколение систем энергетики, возможностям производства наноиндустриальной продукции в России, в частности, на примере реализации инновационных проектов в сфере высокотемпературной сверхпроводимости для получения коммерческой продукции.

Конференция *"Нанотехнологии в электронике и коммуникациях"* включала секционные заседания по темам "Нанотехнологии и телекоммуникационная индустрия", "Полупроводники и фотоника" и "Некремниевая электроника: перспективы технологии и финансирование".

На секции *"Нанотехнологии и телекоммуникационная индустрия"* рассматривались ключевые тенденции развития телекоммуникационной отрасли

со сдвигом парадигмы в сторону создания новой информационной инфраструктуры, перспективы и возможности развития отраслевых специализированных НИОКР в России, государственные меры по стимулированию создания центров научно-исследовательских разработок и производства телекоммуникационного оборудования в РФ и прогнозы развития рынка телекоммуникационных систем. Современные технологии в развитии новой телекоммуникационной инфраструктуры были представлены докладами по инновационным разработкам и технологическим решениям в отрасли, новейшим технологиям создания микросхем для оптико-электрического преобразования на скорости до 100 Гбит/с и построенным по 45-нм технологии с пропускной способностью более 4 Гбит/с маршрутизаторным чипсетам, а также формированию единой распределенной сети для функционирования инфраструктуры. Ситуация с развитием институтов венчурного инвестирования в телекоммуникационной индустрии сопоставлялась с тенденциями и возможностями финансового кризиса 2008—2009 годов, развитием привлекательных для венчурных инвестиций ключевых сегментов индустрии и наиболее перспективных технических сфер для работы венчурных специалистов.

Секция *"Полупроводники и фотоника"* объединяла доклады по модернизации российской полупроводниковой индустрии, бизнес-моделированию для развития и функционирования полупроводниковых производств, моделям партнерства в рамках проведения НИОКР и методам создания конкурентоспособной экосистемы производства полупроводников. Затрагивались вопросы создания полупроводниковой экосистемы в России, экспорта инновационных продуктов, формирования сети высокотехнологичных кластеров и увеличения роли внутрисистемных соединений на рынке электронных компонентов, а также развития инновационной отраслевой среды.

На секции *"Некремниевая электроника: перспективы технологии и финансирование"* помимо панельной дискуссии на тему "Венчурное инвестирование для перспективных направлений электроники" состоялось обсуждение инновационной и инвестиционной отраслевой промышленной политики. Нанотехнологии для мобильных устройств, гибкие дисплеи и технологии электросмачивания для производства электронных ридеров рассматривались на заседании, посвященном ключевым аспектам применения некремниевой электроники на традиционных и новых рынках. Вопросы использования новых материалов в органической электронике и гибких солнечных батарей на полимерной пленке с эффективностью 18 % освещались на секционном заседании по применению новых материалов в различных исследованиях. Заседание, приуроченное к развитию технологий производства некремниевой электроники и трансферу технологий

из научных организаций в промышленные центры, объединило доклады по технологиям пластиковой электроники на пути к стандартному производственному процессу и технологиям производства микроэлектронных устройств большой площади с использованием смачивания, применению микроэлектроники в текстильной промышленности и использованию компонентов печатной электроники в одежде, а также венчурному финансированию для развития новых отраслевых направлений.

На конференции **"Нанотехнологии в здравоохранении"** состоялись доклады по инвестиционной деятельности в медицинские проекты и программы, венчурному инвестированию в здравоохранение, инновациям в сфере производства медицинского оборудования, достижениям в медицине и фармакологии, новым методам клинической диагностики на основе магнитных наномаркеров и клеточным технологиям для регенеративной медицины. Затрагивалась проблематика применения нанотехнологий для радиационной медицины, законодательного обеспечения коммерциализации проектов в области клеточной и регенеративной медицины, развития центров протонной и антипротонной терапии и публичного размещения акций для финансирования инвестиционных проектов в биотехнологической отрасли. Были представлены системы доставки биопрепаратов, методы организации и проведения доклинических исследований и принципы создания противоопухолевых онкопрепаратов с использованием платформы "Биотранспорт 1" и "Биотранспорт 2". Также состоялась панельная дискуссия "Низкорисковые инвестиции в высокорисковую инновационную фармацевтику".

Конференция **"Высокопроизводительные вычисления и нанотехнологии"** открылась циклом докладов о состоянии и перспективах развития рынка высокопроизводительных вычислений, глобальных трендах и российских разработках в области суперкомпьютинга, первых результатах проекта ГК "Роснано" по анализу и формированию рынка суперкомпьютерных сервисов для бизнес-проектов в нанотехнологической промышленности. В рамках программы презентаций "Крупнейшие российские суперкомпьютерные центры. Опыт работы и основные результаты" анонсировались новые разработки многоядерных процессоров для высокопроизводительных вычислений, основные задачи и планы развития суперкомпьютерных технологий в МГУ им. М. В. Ломоносова и информационно-коммуникационные платформы РНЦ "Курчатовский институт". Также были представлены суперкомпьютерные приложения для различных отраслей промышленности, в частности, в биологии, кораблестроении, топливно-энергетических комплексах (ТЭК) и медицине — например, при разработке лекарств и моделировании сердечной активности.

Секции **"Инновационные материалы: разработка, производство, применение"**, **"Нанотехнологии в химической, газохимической и нефтехимической промышленности"** и **"Инновационные строительные материалы"** были объединены в конференцию **"Наноматериалы в отраслях промышленности"**.

Секция **"Инновационные материалы: разработка, производство, применение"** включала доклады по принципам и подходам к созданию новых материалов, применению новых материалов в автомобилестроении, энергомашиностроении и авиастроении, производству новых материалов — металлов, пластиков и композитных наноматериалов. Также рассматривались инновационные технологии в материаловедении, перспективы применения дорожной карты "Углеволокно" и необходимость создания мощного современного производства дестонационных наноалмазов в России.

На секции **"Нанотехнологии в химической, газохимической и нефтехимической промышленности"** рассматривались тенденции в развитии нанотехнологий в нефтехимии и нефтепереработке в России, перспективы производства и потребления отечественных и импортных катализаторов в различных сегментах нефтеперерабатывающей и химической промышленности РФ, а также нефтехимические технологии на основе каталитических наноматериалов. Были представлены нанотехнологии для химической и смежных отраслей промышленности, инструменты оптимизации сроков реализации инвестиционных проектов, в том числе на крупных высокотехнологичных производствах, и методы организации проектного финансирования частными банками инноваций в нефтехимии, нефте- и газопереработке.

Секция **"Инновационные строительные материалы"** включала доклады по проектам ГК "Роснано" в области строительства, использованию строительных материалов для повышения энергоэффективности в соответствии с последними изменениями в законодательстве, сертификации и стандартизации строительных материалов, преимуществам применения низкоэмиссионного стекла, применению наноматериалов в цементных композитах и влиянию европейских и американских стандартов экологичности на выбор высокотехнологичных материалов. На секционной панельной дискуссии, в частности, обсуждались прогнозы совершенствования энергетической инфраструктуры России, перспективы реформирования фондов содействия развитию жилищного строительства и системы ЖКХ.

Конференция **"Институты развития"** объединяла секции **"Формы поддержки инновационного бизнеса институтами развития и венчурными фондами"**, **"Инновационный потенциал регионов: новые возможности для бизнеса"** и **"Нанотехнологические центры Роснано. Международный опыт создания инфраструктуры коммерциализации технологий"**.

На секции **"Формы поддержки инновационного бизнеса институтами развития и венчурными фон-**

дами" рассматривалась топология технологической и финансовой инфраструктуры, роль коммерциализации в посевном финансировании и инновациях, специфика развития экосистемы венчурного финансирования и форм поддержки инновационных компаний венчурными фондами. Обсуждались формы поддержки на примере нанотехнологических компаний, степень участия в инвестировании бизнес-ангелов, проблематика применения частногосударственных методов и проблематика применения частногосударственных методов и роль иностранных участников в создании инновационного бизнеса. Затрагивалась специфика реализации проекта "Сколково", системы поддержки инновационного бизнеса в России и поддержки развития инновационной экономики с учетом роли общественных институтов и возможных методов трансформации.

Секция *"Инновационный потенциал регионов: новые возможности для бизнеса"* включала презентации участников секции — глав субъектов РФ "Конкурентные преимущества субъектов Российской Федерации в части размещения инновационных проектов". Были представлены разработки Республики Мордовия и Республики Татарстан, Пензенской, Белгородской, Калужской, Ульяновской и Томской областей, Ставропольского и Пермского краев. На круглом столе, посвященном выработке направлений стратегической кооперации бизнеса и региональной власти, обсуждались проблемы и возможности стимулирования спроса на инновационную, в том числе нанотехнологическую, продукцию в регионах, реализации межрегиональных инфраструктурных проектов и коммерциализации перспективных инновационных разработок.

На секции *"Нанотехнологические центры Роснано. Международный опыт создания инфраструктуры коммерциализации технологий"* исследовались вопросы, связанные с формированием новых и реформированием существующих элементов инновационной инфраструктуры ГК "Роснано" и реализацией первых проектов нанотехнологических центров, созданием нанотехнологических центров совместно с ГК "Роснано" и международных центров прикладных разработок по нанотехнологиям. Обсуждалась проблематика технологического трансфера университетских разработок в регионе с активной предпринимательской средой, коммерциализации технологий в университетах с пересмотром традиционной модели технологического трансфера, а также опыт создания соответствующих центров с реализацией концепции Open Innovation.

На конференции *"Инновационные образовательные программы: спрос и предложение"*, открывшейся панельной дискуссией "Модернизация образования в условиях развития инновационной экономики", прозвучали выступления о необходимости концентрации инвестиционных ресурсов для трансформации институтов образования, новых требованиях к уровню подготовки кадров для

инновационных предприятий, мерах господдержки в сфере науки, образования и высоких технологий, международных аспектах университетского образования, коммерциализации нанотехнологических исследований в академических структурах и формировании инновационной среды для повышения качества подготовки современных специалистов. Были проведены ярмарки образовательных программ ГК "Роснано" и мастер-классы по формированию инновационной и предпринимательской культуры, презентации электронного реестра образовательных программ, проекта "Лига школ Роснано" и других образовательных инициатив ГК "Роснано", а также дискуссии по перспективам подготовки кадров для инновационной экономики.

Специальная сессия *"Техническое регулирование и метрология в наноиндустрии"* объединяла доклады по подходам к метрологическому обеспечению производства нанопроductии, влиянию референс-метрологии на контроль качества нанопроductии, сближению систем техрегулирования, участию бизнес-сообщества в реализации государственной политики технического регулирования, сертификации и стандартизации РФ и ЕС и ключевым инструментам расширения экономического пространства. Обсуждались особенности стандартизации в области солнечной энергетики, проблемы оценки и подтверждения соответствия и безопасности продукции наноиндустрии для бизнеса и регулирующих (надзорных) организаций, изменения в законодательстве о техническом регулировании в рамках таможенного союза, вопросы метрологического обеспечения производств в области нанотехнологий и гармонизации с международными стандартами в процессе выпуска инновационной продукции.

На панельной дискуссии *"Инструменты технического регулирования для повышения конкурентоспособности продукции наноиндустрии"* затрагивались различные аспекты ускорения разработки и введения в России гармонизированных международных стандартов, сближения систем технического регулирования РФ и ЕС и технического регулирования с учетом действующих европейских директив.

На специальной сессии *"Безопасность для здоровья человека продукции наноиндустрии и нанотехнологий"* были представлены доклады по инновациям в развитии системы регулирования для безопасного использования наноматериалов в косметике, стратегиям обеспечения безопасности нанопроductии и продвижения нанопроductии на рынок для защиты человека и окружающей среды, комплексной медико-биологической оценке безопасности наноматериалов и европейскому подходу к нанонауке и нанотехнологиям. Обсуждались примеры организации высокотехнологичных экологически чистых и безопасных производств наночернил, подходы международного Альянса по гармонизации стандартов нанопроductии и методо-

логии и результаты оценки безопасности нанопроductии и технических проектов ГК "Роснано".

На панельной дискуссии **"Нанобезопасность и выход на рынок нанотехнологической продукции"** рассматривались методы освоения нанотехнологической продукции в условиях недостаточности нормативно-правового обеспечения и результатов научных исследований нанобезопасности.

Специальная сессия **"Участие соотечественников, проживающих за рубежом, в совместных с российскими компаниями инновационных проектах, реализуемых в России. Вопросы и перспективы сотрудничества"** позволила в формате панельных дискуссий оценить степень готовности живущих за рубежом соотечественников реализовать опыт и профессиональные знания в совместных с российскими компаниями проектах на территории РФ. Обсуждались меры, предпринимаемые государственными органами, РАН, образовательными учреждениями и ГК "Роснано" для создания условий для стимулирования участия соотечественников за рубежом в развитии высоких технологий и инноваций в России. На сессии работал практикум в формате "one-2-one", на котором были представлены рекомендации по подаче зарубежных проектов в ГК "Роснано" и организованы консультации с представителями проектного офиса ГК "Роснано".

Помимо деловой программы в рамках Третьего Международного форума по нанотехнологиям были организованы пленарное заседание, российско-германский симпозиум, ряд панельных дискуссий и церемоний вручения премий и награждения лауреатов, а также научно-технологические секции.

Панельная дискуссия **"Стимулы и барьеры для инноваций"** с участием представителей научных и деловых кругов предваряла пленарное заседание Третьего Международного форума по нанотехнологиям, на котором выступил Президент Российской Федерации Д. А. Медведев. Глава государства подчеркнул открытость России для интеграции в мировое нанотехнологическое сообщество. Успешно развиваются совместные проекты со странами ближнего и дальнего зарубежья, в частности, в 2010 году в РФ состоялись Третьи Высшие курсы СНГ по нанотехнологиям. Важной целью является формирование нанотехнологической отрасли с участием государства и частного бизнеса, что предполагает развитие национальной нанотехнологической сети для решения комплексных задач — от производства современного оборудования до подготовки высококвалифицированных кадров. Востребованность продукции nanoиндустриальных предприятий на внутреннем рынке предполагает формирование государственного заказа. Для развития предприятий малого и среднего бизнеса необходимо функционирование nanoцентров. Целесообразно дальнейшее совершенствование налогового, административного и гражданского законодательства, в частности, процедура привлечения высококвалифицированных специали-

стов из-за рубежа значительно упростилась благодаря совершенствованию нормативно-правовой базы в миграционной сфере.

Конвергенция наук и технологий как основа нового технологического уклада была темой выступления директора Национального исследовательского центра (НИЦ) "Курчатовский институт", директора Института кристаллографии Российской академии наук (РАН) им. А. В. Шубникова, член-корреспондента РАН М. В. Ковальчука. Изменение парадигмы развития науки от анализа к синтезу способствует развитию новых направлений исследований. В отличие от индустриального общества, ориентированного на копирование модельных технических систем, постиндустриальное общество более предрасположено к воспроизведению систем живой природы. На первом этапе предполагается соединение технологических возможностей современной микроэлектроники с достижениями в сфере познания живой природы (нанобиотехнологии) для создания гибридных, антропоморфных технических систем бионического вида, что приведет к формированию платформы для создания принципиально новых гибридных систем — нанобиосенсоров. Второй этап предполагает интеграцию созданных нанобиосенсорных платформ для разработки технологий атомно-молекулярного конструирования и самоорганизации на основе атомов и биоорганических молекул для получения устойчивых к воздействиям внешней среды биоробототехнических систем. В настоящее время в НИЦ "Курчатовский институт" ведутся работы по направлениям формирования генетической базы, современных исследовательско-технологических платформ для синхротронной диагностики, лекарственных препаратов и средств их целевой доставки и создания гибридных материалов и систем.

Выход в "высшую лигу" мировых нанотехнологических лидеров был темой доклада генерального директора ГК "Роснанотех" А. Б. Чубайса. К капиталовложениям ГК в 94 проекта в 30 регионах РФ в объеме 4,1 млрд долл. привлечены средства инвесторов на сумму 6,0 млрд долл., что характеризует нанотехнологический рынок как перспективный и инвестиционно-привлекательный. По инновационным проектам планируется, в частности, производство светодиодов, RFID-оборудования, пластиковой электроники, продукции для солнечной энергетики, нанопокровов. Успешно развиваются проекты по медицинским нанотехнологиям, лазеростроению и новым углеродным наноматериалам.

Программа научно-технологических секций Третьего Международного форума по нанотехнологиям объединяла восемь мероприятий: "Наноматериалы", "Нанобиотехнологии", "Нанодиагностика", "Нанотехнологии в медицине", "Катализ и химическая промышленность", "Наноэлектроника", "Нанофотоника" и "Нанотехнологии в энергетике".

На секции *"Наноматериалы"* обсуждалась проблематика инвестирования в научные исследования по изучению свойств и сфер применения нанокристаллических алмазных пленок, термических свойств графена в контексте взаимодействия с ИК эмиссионными источниками излучения, углеродных наноструктур для конверсии термической и солнечной энергии. Были представлены новые разработки объемных наноструктурных металлов и сплавов, наноматериалов и приборов на основе полупроводниковых, графеновых и гибридных оболочек. С докладом о физических исследованиях и практическом применении изделий из графена в переполненном зале секционных заседаний перед гостями и участниками форума выступил лауреат Нобелевской премии профессор Манчестерского университета (Великобритания) К. С. Новоселов. На секции также состоялись выступления по вопросам получения и перспективам применения полимерных композитов, неорганических полимеров, наносистем, высокоэффективных биосенсоров на основе наноразмерных пленок и наноструктур электро- и биокатализаторов, гибридов металлических наночастиц и полимерных коллоидов и наноструктурных материалов.

Секция *"Нанотехнологии в медицине"* объединила доклады по комплексным решениям в сфере эффективного генерирования "наноантител", преимуществ аденовирусной системы доставки в целях разработки новых медицинских препаратов, инновационных технологий и новых наноконструкций для доставки полипептидов в мозг, лекарственных препаратов пролонгированного действия на базе рекомбинантных белков и технологий трансмембранного переноса частиц. Особое внимание уделялось оценке инвестиционной привлекательности проектов по синтезу наноматериалов и их влиянию на регуляторные пути экспрессии генов в клетках человека, низкоплотностного микрочипирования для диагностики инфекционных заболеваний и злокачественных новообразований, скрининга в контексте применения диверсифицированных биологических и нанофармацевтических препаратов. Обсуждались вопросы регуляции роста нервных волокон и кровеносных сосудов генно-терапевтическими методами, новые подходы к конструированию и доклиническим испытаниям противотуберкулезных вакцин, применения наночастиц для лечения и реабилитации онкологических больных. Дискуссионный формат сессии позволил сфокусировать внимание на перспективах применения в медицине адресованных в митохондрии антиоксидантов, расширенной диагностике с использованием инновационных биоидентификационных технологий и особенностях развития отечественной фармацевтической индустрии на примере производства противогриппозных нановакцин. Не обошлось без детального рассмотрения инвестиционных проектов, направленных на получение комплексной медико-биологической оценки безопасности наноматериалов,

особенно ее экспериментально-практических и информационно-аналитических компонентов, и степени токсичности углеродных наноструктур.

Секционное заседание *"Катализ и химическая промышленность"* позволило получить актуальную информацию по проектам формирования активных наночастиц металлов в структуре катализаторов восстановительного дехлорирования, конструирования функциональных материалов на базе наноразмерных систем металл—оксид с учетом роли анионного состава предшественника-оксида при управлении размером частиц переходного металла со степенью взаимодействия подложка—металл. Рассматривалось проектирование легких алканов для конверсионного катализа и их дегидрирование, конструирование наноструктурированных катализаторов для переработки сырья растительного происхождения, соединений для селективного оксидирования метанола, а также каталитический синтез и гетерометаллические карбоксилаты палладия. Часть докладов была посвящена разработке инвестиционных проектов по созданию катализаторов для получения биотоплива и конструированию оборудования для гетерогенного катализа, перспективам развития нанотехнологий для переработки нефти и газа. Был высказан ряд предложений по развитию ТЭК РФ, изучению селективного катализа с применением серебряных наночастиц, освоению новых мощностей малотоннажной газохимии на период до 2030 года.

На секции *"Нанопотоника"* обсуждалось инвестирование в разработки по отрицательной рефракции, лазерным нанотехнологиям для изучения материалов, оптическим метаматериалам, плазмам для нанопотоники, новым лазерно-плазменным нанотехнологиям, состоянию и перспективам развития атомной и квантовой оптики. Обсуждались результаты исследования резонанса Фано в фотонных кристаллах и плазмонных наноструктурах, методы конструирования нанопотонных устройств и оптических систем расширенной функциональности на базе импрегнированных наночастицами нано- и микросветоводных структур, принципы самоорганизации квантовых точек для лазерных диодов, манипуляции ближним полем в метаматериалах и индуцированной лазером модификации материалов.

Секция *"Нанoeлектроника"* была посвящена вопросам капиталовложений в изучение гетероструктур, основанных на InO/N и ZnO нановолокнах для сверхбыстрой электроники, кремниевой нанoeлектроники, новых технологий конструирования флеш-памяти на базе high-k диэлектриков, транспортных свойств носителей заряда в кремниевых наноразмерных полевых транзисторах и оптических модуляторов. Рассматривались проблемы динамического моделирования электронных состояний в элементах нового поколения энергонезависимой памяти на основе полупроводниковых гетероструктур,

конструирования материалов и структур нанометровой базы, наноструктур с квантовыми точками для спинтроники, сверхтонких цилиндрических тел и нанопроволок и двумерных тел и высокоомобильных приборов и устройств. Уделялось внимание практическому опыту производства наноматериалов, исследованию индуцированной терагерцовым излучением спиновой поляризации и механических свойств нанoeлектронных приборов, плазменной обработке в нано- и микроэлектронике при создании технологического оборудования и разработке процесса, а также развитию нанометрологии. Часть докладов затрагивала проблематику конструирования и изучения гибридных наноструктурированных солнечных батарей и наноразмерных микросхем (наносхем), комбинаторных подходов к проектированию наноматериалов. Докладчики касались различных аспектов изучения СВЧ свойств туннельно-резонансных гетероструктур для получения мультифункциональных СВЧ микросхем и генераторов терагерцового диапазона, процессов осаждения из газовой фазы и методов организации и проведения исследований в ведущих европейских научных центрах.

Секционное заседание *"Нанобиотехнологии"* включало научные сообщения по вопросам самосборки пептидных наночастиц, изучения малых молекул для терапии астмы, люминесцентных наноалмазов для биомедицинских приложений, клеточных наноструктур противовирусной защиты, оптического биоимиджинга с применением контрастирующих наноагентов, лазерно-информационных и сверхкритических флюидных технологий для нанобиотехнологий и светочувствительных белков — прообразов фотонанопереклюателей.

"На секции *"Нанодиагностика"* были представлены доклады по перспективам использования оборудования Курчатовского центра синхротронного излучения для нанобиодиагностики, возможностям современной рентгеновской нанодиагностики с применением импульсного рентгеновского лазера на свободных электронах и доклады Центра синхротронного излучения, электронной микроскопии наноматериалов, сканирующей зондовой микроскопии в нанотехнологических исследованиях по лазерным оптико-акустическим методам измерения локальных упругих модулей нанокмполитов, современным возможностям оборудования для наноструктурного анализа и особенностям метрологического обеспечения и стандартизационных процедур в нанотехнологической сфере. Также обсуждались особенности нанодиагностики промышленных компонентов и функциональных материалов, топологии поверхности Ферми, биотехнологической кристаллографии и функционирования уникального исследовательского инструмента — Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах.

Секция *"Нанотехнологии в энергетике"* была посвящена решению комплекса проблем инвестици-

онного и инновационного энергетического развития с применением нанотехнологий, в частности, теплообменным процессам на микро- и наноуровне, микроканальным течениям, совместимости нанобиоматериалов, нанотехнологиям в альтернативной энергетике, наномеханике и экстремальным состояниям вещества, микрофлюидическим миксерам и насосам, композиционным и гетерогенным материалам. Обсуждались степени влияния на свойства нанообъектов поверхностных напряжений, результаты моделирования взаимодействия газа и наноструктур и аномально упругого поведения нано- и микроусов кубического атомного строения, взаимодействия нанокмполитов в медицинской биотехнологии, особенности конструирования органических гибридных материалов и термомолекулярных реакторов.

Также в рамках Третьего Международного форума по нанотехнологиям состоялся Первый германо-российский симпозиум по наноматериалам *"Новые горизонты"*, на котором обсуждались проблемы развития химической наноскопии поверхностей и границ, исследования переноса энергии электронного возбуждения в отдельных молекулах, моделирования динамических процессов в единичных оптически детектируемых квантовых точках, конструирования наноуправляемых оптических волокон для сверхбыстрой фотоники, изучения магнетоплазмоники и наноплазмоники для оптических метаматериалов. Рассматривались применения наноструктурированных полупроводниковых материалов для биомедицины, молекулярной сенсорики и оптоэлектроники, принципы и приложения наноматериалов и наночастиц и жидкокристаллических полимеров как матрицы для неорганических полупроводниковых наночастиц. Оценивались влияния дефектов на свойства металлических частиц на оксидных подложках, супергидрофобные текстуры для нано- и микрофлюидики, структуры графитовых пленок нанометровой толщины для электронных и оптоэлектронных приложений и эпитаксиальных пленок оксида марганца. Подчеркивалась роль спектроскопии гибридных биологических наноструктур на различных этапах исследований (от синхротронов — к лазерам на свободных электронах), значимость нового семейства сверхбыстрых нелинейных оптических элементов на базе одностенных углеродных нанотрубок и специфика электронных и оптических свойств полученных методами химии растворов полупроводниковых нанопроводов.

На симпозиуме было уделено внимание физике и химии в режиме немасштабируемых размеров, квантовому и классическому молекулярно-динамическому моделированию наноматериалов, электронной теории, физическим свойствам и синтезу коррелированных трехмерных карбодиимидов, функционализации наночастиц методом микро-волновой активации с учетом новых материалов и

катализаторов, реакционной способности и структуре нанокластерных оксидов по сравнению с объемными материалами, инженерии гетерогенных катализаторов и изучению размерных эффектов в реакциях окисления нанесенных металлических катализаторов с наноструктурированным активным компонентом. Помимо аналитической химии сложных поверхностей (от порфиринов — к ионным жидкостям), макромолекулярных реакций на границах "полимер—полимер" и модельных подходов к наноматериалам в катализе на сессиях были представлены результаты изучения полимерных нанокомпозитов методом ядерно-магнитного резонанса с анализом динамики сшитых цепей в расплаве, суперструктур на основе наноматериалов, нанопористых органо-неорганических гибридных материалов, термодинамической пластической деформации стеклообразного полиэтилена и вирусоподобных наночастиц с неорганическим содержанием. Часть выступлений была посвящена самоорганизованным наноструктурам на основе новых триблок терполимеров, сформированным на паттернированной подложке тонким пленкам блоксополимера, амфифильным сополимерам для эффективной стабилизации коллоидных частиц, композитам на основе полимерных структур и белков. Докладчики уделили внимание функциональной характеристики наноматериалов в электрохимии, люминофор- и хромофорсодержащим полимерам для оптоэлектроники, синтезированным из газовой фазы полимеризацией на поверхности наноструктурированным гибридным и полимерным материалами, и фуллерен-полимерным смесям для фотовольтаики. Также в научных сообщениях затрагивалась проблематика трехмерного размещения наночастиц на поверхности с адресацией к ним с применением жидкофазной эпитаксии, использования в высокочувствительных сенсорах механических консольных датчиков на базе полимерных и биополимерных монослойных пленок, прямых микроскопических наблюдений осажденных из сверхкритического диоксида углерода полимерных наноструктур и исследования наноструктурированных наносистем с помощью одномолекулярных зондов — от нанопористых материалов до систем доставки лекарств в живые клетки.

Награждение лауреатов Международной премии в области нанотехнологий "RUSNANOPRIZE", присуждаемой в 2010 году по направлению "Нанодиагностика" в трех категориях: исследования в фундаментальной науке, исследования в прикладной науке и внедрение в производство, также состоялось на Третьем Международном форуме по нанотехнологиям. Премия присуждена главному науч. сотр. Института кристаллографии РАН им. А. В. Шубникова профессору Л. А. Фейгину (Россия) и руководителю группы Европейской молекулярно-биологической лаборатории Д. И. Свергуну (Германия) за создание новой сферы приме-

нения рентгеновских лучей, связанной с определением структуры вещества в области наноразмеров с помощью рентгеновского малоуглового рассеяния. Наградной символ Премии был вручен генеральному директору компании "Necus X-ray Systems GmbH" (Австрия) профессору Питеру Лагнеру за серию разработок рентгеновской малоугловой аппаратуры для нанодиагностики материалов во многих исследовательских и технологических центрах. Старший науч. сотр. научно-исследовательской лаборатории проблем разработки и внедрения ионно-плазменных технологий Белгородского государственного университета Марина Галкина стала лауреатом Российской молодежной премии в области наноиндустрии в 2010 году. Третий Международный форум по нанотехнологиям завершился награждением лауреатов Международного конкурса научных работ молодых ученых в области нанотехнологий.

Выводы

- ♦ Поздний старт России в мировой нанотехнологической гонке не гарантирует поражения, если будет выбрана оптимальная стратегия поведения на трансконтинентальном наноиндустриальном рынке. Оптимальная промышленная политика, минимизация расходов, рациональная инновационная стратегия развития и расширение каналов финансирования отраслевых специализированных программ позволят сократить время на достижение ведущих позиций по ряду ключевых направлений в сфере нанотехнологий и наноматериалов.
- ♦ Третий Международный форум по нанотехнологиям, несомненно, является ведущим отраслевым мероприятием, ежегодным смотром достижений отечественной и мировой наноиндустрии. Крайне необходимо устранить ряд законодательных барьеров, регламентирующих отраслевое, межотраслевое и межгосударственное взаимодействие наноиндустриальных предприятий и инновационных научных центров, что предполагает дальнейшее совершенствование нормативно-правовой базы.
- ♦ Для повышения качества и уровня обслуживания и организации, прежде всего, целесообразно *восстановление количества тематических направлений и ряда льгот* участникам и гостям форума, предоставлявшихся на Первом и Втором Международном форумах по нанотехнологиям, проведенных в 2008 и 2009 годах соответственно [2]. Кроме того, необходимо *возобновление издания полной печатной версии тезисов докладов* на русском и английском языках участников и молодых ученых. Наконец, крайне важно существенно *расширить площади для экспозиции и проведения секционных заседаний* форума.
- ♦ Создание Отделения нанотехнологий и информационных технологий РАН на базе Отделения

информационных технологий и вычислительных систем РАН в 2007 году является экономически оправданным и стратегически выверенным решением, поскольку соответствует высокому уровню проводимых в академических институтах фундаментальных и прикладных исследований с использованием новейших достижений в нанотехнологической и информационно-технологической сфере и способствует формированию жизнеспособной наноинфраструктуры.

- ♦ Для повышения социального статуса профессий в наноиндустрии и сфере информационных технологий *предлагаю учредить профессиональные праздники с возможными названиями День нанотехнолога (День работника наноиндустрии) и День информационного технолога*. Данные мероприятия, отмечаемые как в России, так и в других

странах, могут иметь даты празднования, выбранные по согласованию с соответствующими органами законодательной и исполнительной власти. С данным предложением автор неоднократно выступал на конференциях и в СМИ.

Список литературы

1. Алферов Ж. И. О программе Российской академии наук в области нанотехнологий // Вестник Российской академии наук. 2008. Т. 78. № 5. С. 427–434.
2. Раткин Л. С. Принципы конструирования программных комплексов для систематизации данных об уровне нанотехнологических разработок по различным отраслям гражданской промышленности, форсайте, дорожных картах и индикаторах в наноиндустриальной сфере // Сборник тезисов докладов Второго Международного форума по нанотехнологиям. 2009. С. 686–687.

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

УДК 539.374

О. Е. Глухова, д-р физ.-мат. наук, проф.,
А. С. Колесникова, аспирант,
ГОУ ВПО "Саратовский государственный
университет имени Н. Г. Чернышевского",
e-mail: GlukhovaOE@info.sgu.ru

ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ В УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ В ПРОЦЕССЕ ЕЕ ИЗГИБА

Поступила в редакцию 17.04.2011

Исследован процесс изгиба полый углеродной нанотрубки (10,10) и трубки, заполненной фуллеренами C₆₀. Обнаружено, что полая нанотрубка не разрушается при изгибе на 270°, а в трубке, заполненной фуллеренами, наблюдается полимеризация фуллеренов и химическое взаимодействие между фуллеренами и стенкой трубки. При этом внутренняя сторона нанотрубок трансформируется в волнообразную. Использованы два метода: эмпирический и квантово-механический. Применялся масштабный подход: до процесса полимеризации моделирование осуществлялось эмпирическим методом, а сам процесс полимеризации моделировался с помощью квантово-химического метода сильной связи.

Ключевые слова: полимеризация, изгиб, стручок, полая нанотрубка

Введение

Известно, что внутри нанотрубок могут протекать различные физические и химические процессы: химические реакции с образованием новых веществ

[1]; димеризация фуллеренов [2] под действием давления; перескок молекулы фуллерена между потенциальными ямами во внешнем электрическом поле [2]; вращение отдельных фуллеренов, фуллеренов с закрепленной молекулой ретинола [3] и др. По сути нанотрубка играет роль капсулы, в замкнутом нанопространстве которой протекают процессы, не реализуемые в обычных условиях. В частности, в нанопространстве трубки линейные полимерные цепочки образуют фуллерены C₆₀ [4]. Для этого внутри трубки создается большое давление — около нескольких терапаскалей, либо трубку нагревают. В данной работе описано моделирование процесса полимеризации фуллеренов C₆₀, протекающего в ходе сгиба нанотрубки.

Нанотрубки, заполненные фуллеренами, называются наностручками. Наностручки широко применяют в наноэлектронных и оптических приборах в качестве элементов памяти [2], наноавтоклава [2], осциллятора [5], нанолазера [6]. На сегодняшний день наностручки можно синтезировать несколькими способами [7, 8]. Углеродные нанотрубки и фуллерены, помещенные в кварцевую ампулу и дегазированные при температуре 300...650 °С в течение 2 ч, образуют углеродный наностручок. Затем с помощью ультразвука удаляют фуллерены, которые находились вне нанотрубки [7]. Недавно развит способ синтеза наностручков при низких температурах. Нанотрубки заполняют фуллеренами в растворах. Например, в работе [7] использовали раствор гексана. Получен тип наностручков N@C₆₀@C + УНТ. Взаимодействие C₆₀ можно достичь с бор-азотной нанотрубкой [8]. Вначале синтезируется бор-азотная

нанотрубка, которая затем смешивается с бор-азотным порошком. Данная смесь проходит стадию отжига в течение 24...48 ч при температуре 550 и 630 °С.

Известны способы полимеризации фуллеренов в наностручках под действием давления, температуры и при добавлении атома углерода между соседними фуллеренами [1, 9, 10]. В работе [1] показано, что полимеризация фуллеренов C_{60} в наностручке происходит при давлении 1,5 ГПа и температуре 300 °С, а между фуллеренами C_{70} процесса полимеризации не наблюдается. В работе [9] показано, что процесс полимеризации между фуллеренами C_{60} происходит под действием давления без температуры. Первоначальное расстояние между центрами фуллеренов — 0,956 нм, а под действием давления 25 ГПа расстояние между центрами фуллеренов уменьшилось до 0,845 нм. Это соответствует расстоянию 0,145 нм между ближайшими атомами углерода соседних фуллеренов. Следовательно, происходит химическое взаимодействие и процесс полимеризации. В работе [10] показано, что при добавлении атома углерода между фуллеренами C_{60} , имеющими в своей структуре дефект SW (дефект Стоуна—Велса — дефект, основанный на повороте продольной связи) и находящимися на расстоянии 0,99 нм, фуллерены C_{60} начнут приближаться и образуют структуру C_{120} . Процесс полимеризации может происходить и между фуллеренами C_{20} в закрытой с двух концов нанотрубке под действием давления 5 ГПа, которое осуществляется фуллереном C_{60} [2].

Целью данной работы является теоретическое исследование влияния изгиба наностручка на процесс полимеризации фуллеренов C_{60} с помощью модели, эффективно сочетающей в себе молекулярно- и квантово-механические методы и хорошо зарекомендовавшей себя в исследованиях механических свойств углеродных наноструктур [11].

1. Методы математического моделирования

Эмпирический метод применялся для первоначального процесса оптимизации структуры путем минимизации энергии, когда расстояние приближается к 0,19 нм включается квантово-химический метод для оптимизации структуры с полимеризирующимися фуллеренами. Таким образом, процессы полимеризации фуллеренов и объединения со стенками нанотрубки исследовались квантовым методом.

1.1. Эмпирический метод

Полная энергия углеродной тубулярной наноструктуры в рамках эмпирической, или молекулярно-механической, модели представлялась как многочлен, каждая составляющая которого имеет свой весовой коэффициент. Весовые коэффициенты

были подобраны в результате обработки экспериментальных данных об упругости и жесткости бездефектных нанотрубок простых форм. За основу была взята модель валентного силового поля с учетом взаимодействия Ван-дер-Ваальса несвязанных атомов:

$$E_{\text{tot}} = \sum K_r (r - r_0)^2 + \sum K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum \left(\frac{K_a}{r^{12}} - \frac{K_b}{r^6} \right). \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое учитывает изменение длин связей в наноструктуре по отношению к длине связи в графите ($r_0 = 1,42$ Å), второе слагаемое — изменение углов между связями по отношению к углу между связями в графите ($\theta_0 = 120^\circ$), а третье — взаимодействие Ван-дер-Ваальса (потенциал Леннарда—Джонса); K_r , K_θ , K_a , K_b — весовые коэффициенты. Такой способ задания полной энергии углеродных тубулярных наноструктур был выбран, как один из наиболее оптимальных. Меньшее число весовых коэффициентов можно точнее подобрать под экспериментальные данные. С увеличением числа термов ошибка в подгоне весовых коэффициентов под экспериментальные данные возрастает и, как следствие, снижает точность рассчитываемых параметров наноструктуры.

Весовые коэффициенты были найдены как решения минимаксной задачи с ограничениями в следующей постановке:

$$\min \max S(A), \text{ где } S(A) = \sum_{i=1}^3 |r_i - r_i^0|. \quad (2)$$

Здесь $\{r_i\}$ — множество $C-C$ длин связей; $\{r_i^0\}$ — множество известных (расчетных или экспериментальных) значений; $A = (K_r, K_\theta, K_a, K_b)$ — вектор варьируемых параметров. Для нахождения глобального минимума для каждого набора (K_r, K_θ, K_a, K_b) строилась поверхность целевой функции и соответственно ее профилю смещалась базисная точка. Множество $\{r_i\}$ находили минимизацией полной энергии (1) нанотрубки по координатам всех атомов.

В результате решения минимаксной задачи (2) получены следующие значения весовых коэффициентов для углеродных соединений:

$$\begin{aligned} K_r &= 3,25 \cdot 10^2 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}; \quad K_\theta = 4,4 \cdot 10^{-19} \frac{\text{Дж}}{\text{рад}^2}; \\ K_a &= 4,0 \cdot 10^{-139} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^{12}}; \quad K_b = 1,5 \cdot 10^{-80} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^6}. \end{aligned} \quad (3)$$

1.2. Метод сильной связи

На основании гибридизации и определения характера связи в углеродной структуре строим полуэмпирический гамильтониан в приближении сильной связи. В нашей системе гамильтониан в

Значения параметров

ϵ_s , эВ	ϵ_p , эВ	$V_{ss\sigma}^0$, эВ	$V_{sp\sigma}^0$, эВ	$V_{pp\sigma}^0$, эВ	$V_{pp\pi}^0$, эВ	p_1	p_2 , нм	p_3 , нм	p_4	p_5 , эВ	p_6
-10,932	-5,991	-4,344	3,969	5,457	-1,938	2,796	0,232	0,154	22	10,92	4,455

приближении сильной связи учитывает $2s$ - и $2p$ -валентные электроны атомов углерода.

В нашей системе используют четыре типа матричных элементов перекрытия между электронными орбиталями атомов углерода $V_{ss\sigma}^0$, $V_{sp\sigma}^0$, $V_{pp\sigma}^0$, $V_{pp\pi}^0$. Электронная конфигурация определяется с учетом принципа запрета Паули.

Полная энергия системы находится как

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{rep}}, \quad (4)$$

где E_{bond} — энергия занятых электронных состояний с учетом спина; E_{rep} — энергия отталкивания, которая является результатом электронного взаимодействия между атомами углерода. Энергия занятых электронных состояний определяется по формуле

$$E_{\text{bond}} = 2 \sum_n \epsilon_n. \quad (5)$$

Это выражение является суммой энергий молекулярных орбиталей, полученных в результате диагонализации гамильтониана, где n — число занятых орбиталей; ϵ_n — энергия орбитали одиночной частицы, т. е. (5) учитывает вклад гамильтониана в метод сильной связи.

Энергия отталкивания

$$E_{\text{rep}} = \sum_{i < j} V_{\text{rep}}(|r_i - r_j|), \quad (6)$$

где i, j — номера взаимодействующих атомов; r_i, r_j — декартовы координаты.

Мы принимаем масштабирующие формы для зависимости от расстояния как элементов матрицы перекрытия, так и энергии взаимного отталкивания ядер:

$$V_{lm\alpha}(r) = V_{lm\alpha}^0 \left(\frac{p_3}{r}\right)^{p_1} \exp \left\{ p_1 \left[-\left(\frac{r}{p_2}\right)^{p_4} + \left(\frac{p_3}{p_2}\right)^{p_4} \right] \right\}, \quad (7)$$

$$V_{\text{rep}}(r) = p_5 \left(\frac{p_3}{r}\right)^{p_6} \exp \left\{ p_6 \left[-\left(\frac{r}{p_2}\right)^{p_4} + \left(\frac{p_3}{p_2}\right)^{p_4} \right] \right\},$$

где l, m — орбитальные моменты волновых функций; α — индекс, указывающий тип связи (σ или π). На главной диагонали гамильтониана находятся

атомные термы ϵ_s, ϵ_p , которые являются атомными орбитальными энергиями углерода; параметры p_n ($n = 1, 2, 3, 4, 5$) и V_{lm}^0 уравнения (7) и атомные термы представлены в таблице; p_2 — предельное расстояние для элементов матрицы перекрытия и энергии взаимного отталкивания, а коэффициенты p_5 и p_3 и показатели степеней p_4, p_1, p_6 определяют общую форму и крутизну функции. Для той же самой пары атомов первоначальное расстояние r является одним и тем же для элементов матрицы перекрытия и для энергии взаимного отталкивания ядер [12].

Коэффициенты, представленные в таблице, подбирались так, чтобы геометрические и энергетические параметры для УНТ и фуллеренов имели высокую точность совпадения с экспериментальными значениями длин связей и потенциала ионизации. Согласование с экспериментальными данными [13] и методом *ab initio* [14] показало, что длины связей и потенциал ионизации рассчитываются с точностью 0,002 нм и 0,02 эВ соответственно. Расстояние между атомами углерода и потенциал ионизация, полученные с помощью данного метода сильной связи, равны 0,14 нм и 7,61 эВ, соответственно.

Гамильтониан в приближении сильной связи полностью учитывает вклад электронов в полную энергию системы. Перекрытие волновых функций происходит в основном вдоль линии, соединяющей два атома, и преобладают двухцентровые интегралы электрон-электронного взаимодействия, в то время как трехцентровые и четырехцентровые интегралы не учитываются. Корреляционные эффекты, которые очень важны при определенных условиях, полностью отсутствуют в традиционной теории молекулярных орбиталей.

Метод сильной связи был адаптирован для параллельного вычисления с помощью компьютерного кластера. Этот кластер позволяет исследовать наноструктуры, содержащие от 10 до 1000 атомов. Модификация метода сильной связи позволяет воспроизводить локальную геометрию химических связей вокруг каждого атома, а также обеспечивает правильную оценку перекрытия σ - и π -орбиталей.

2. Процесс полимеризации углеродных наноструктур

Как упоминалось выше, равновесное состояние наностручка до изгиба и процесс изгиба изучаются в данной работе модифицированным эмпирическим методом, а квантовым методом исследуется только процесс полимеризации.

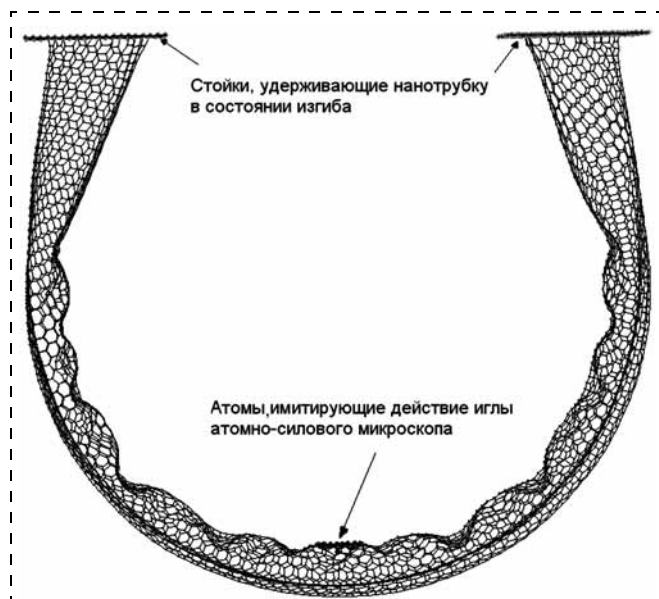


Рис. 1. Нанотрубка, изогнутая на 270°

В целях апробирования эмпирического метода при исследовании процессов изгиба нанотрубок рассчитана атомная структура углеродной нанотрубки (10,10) длиной 24,476 нм и диаметром $\sim 1,396$ нм, при изгибе на угол 270° . Концы нанотрубки были объединены химическими связями со стойками, которые моделировались в виде жестко зафиксированных графеновых листочков. После прогиба нанотрубки на 270° проводили оптимизацию изогнутой структуры. В центре нанотрубки, согнутой в дугу (с внутренней стороны дуги), была выделена небольшая область в виде окружности, которая симулировала соприкосновение трубки с иглой атомного силового микроскопа. Атомы, расположенные в этой области, жестко фиксировались, чтобы согнутая нанотрубка в процессе оптимизации не возвращалась в первоначальное положение. На рис. 1 представлена оптимизированная углеродная нанотрубка (10,10) при изгибе на угол 270° . Расстояние между прогибом и соседней стенкой нанотрубки составляла 0,19 нм. На рис. 2 это расстояние обозначено буквой d . Следовательно, если угол прогиба и амплитуда волн увеличатся, то в нанотрубке, возможно, будет происходить процесс образования новой структуры — соединение прогиба со стенкой.

Вид атомной сетки, полученной эмпирическим методом, полностью соответствует теоретической [15, 16] и экспериментальной [17] работам. В работе [15] показано, что угол 30° является критическим, в однослойной углеродной нанотрубке диаметром 1,2 нм и образуется прогиб в центральной части. При изгибе до 120° разрыва связей не наблюдается, но это происходит в тонких нанотрубках ($d < 1$ нм). В работе [16] атомная структура двухслойной нанотрубки (10,10) прогибалась от 0 до 75° , и каркас нанотрубки имел деформации, идентичные деформаци-

ям, описанным в работе [15]. Экспериментально показано [17], что нанотрубки изогнутой формы можно получить, нагревая полимер, на котором расположены углеродные нанотрубки, при температуре 70°C . Под действием температуры полимер станет волнообразным, а это вызовет искажение нанотрубок. Следовательно, атомная сетка при прогибе деформируется, но процесса разрушения и элиминирования атомов не происходит. В связи с хорошим согласованием полученных нами результатов симулирования прогиба нанотрубки с другими теоретическими и практическими результатами, предложенная здесь эмпирическая схема и способ симулирования изгиба могут быть применены к исследованию изгиба наностручков.

Модель нанотрубки стручкового типа образована бездефектной нанотрубкой (10,10) длиной 24,476 нм, заполненной 27 фуллеренами C_{60} . Молекулы C_{60} дисциplinированы от стенок трубки на расстояние $d_{\text{C}_{60}-\text{tube}} = 0,3389$ нм. Сравнение с другими численными результатами [1] показывает хорошее совпадение. Фуллерены располагаются на оси трубки с расстоянием между их центрами $d_{\text{C}_{60}-\text{C}_{60}} = 0,815$ нм. При изгибе наностручка на 270° наблюдается уменьшение расстояния между фуллеренами C_{60} .

Момент перекрытия электронных облаков фуллеренов C_{60} наблюдается на расстоянии 0,14...0,16 нм между атомами.

В результате, сблизившись на расстояние, достаточное для перекрытия π -электронных облаков, фуллерены C_{60} полимеризуются. Деформация каркаса наностручка не такая сильная, как у пустой нанотрубки, за счет фуллеренов, находящихся внутри нанотрубки. При этом изменение атомного каркаса наностручка такое, что наблюдается химическое взаимодействие между самими фуллерена-

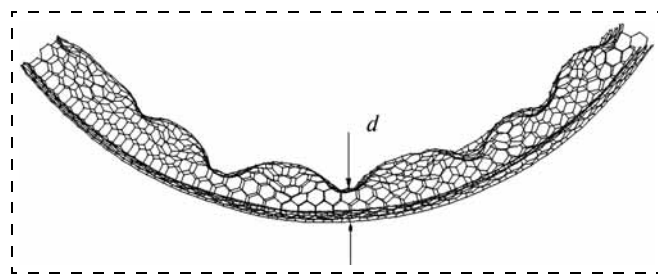


Рис. 2. Фрагмент нанотрубки с расстоянием между стенками d

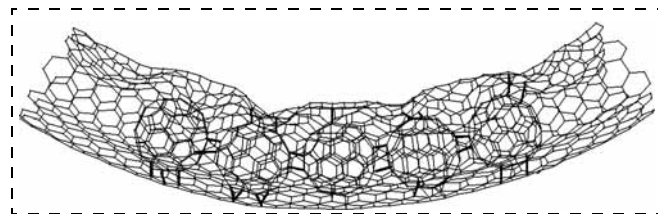


Рис. 3. Фрагмент наностручка после процесса полимеризации. Толстыми линиями показано химическое взаимодействие между фуллеренами и взаимодействием фуллеренов со стенкой трубки

ми, а также между некоторыми фуллеренами и стенкой трубки. На рис. 3 представлен фрагмент наностручка после полимеризации фуллеренов.

Установлено также, что если после процесса полимеризации фуллеренов C_{60} друг с другом и со стенками нанотрубки сформированную структуру не удерживать с двух концов, то она останется в том же состоянии. Можно сказать, что в результате изгиба наностручка на 270° наблюдается фазовый переход, сопровождающийся образованием новой дугообразной структуры.

Похожее моделирование процесса изгиба наностручка проводилось в работе [18]. Авторами работы [18] исследовался процесс изгиба нанотрубки с закрытыми краями длиной 12 нм с инкапсулированными фуллеренами $12C_{60}$. Расстояние между фуллеренами — 0,98 нм. Показано, что при критическом угле прогиба структуры, равного 38° , происходит перегиб структуры в центральной части нанотрубки со смещением фуллеренов к концам. Если угол изгиба становится выше критического, то происходит перелом в центре структуры. Надо отметить, что в работе [18] учитывалось только ван-дер-ваальсовое взаимодействие между объектами без образования химических связей, т. е. изучался процесс преломления структуры, а не процесс полимеризации.

Заключение

В результате исследования процесса полимеризации при изгибе наностручка на 270° с помощью эмпирического и полуэмпирического методов получены следующие результаты:

- атомная структура наностручка не разрушается;
- внутренняя поверхность дугообразной нанотрубки становится волноподобной и в отдельных местах прогиба соединяется с фуллеренами;
- фуллерены сближаются и полимеризуются.

Образовавшееся гибридное соединение нанотрубки сохраняет атомную структуру неизменной даже при снятии внешней нагрузки. Подобные углеродные нанотрубки можно применять в качестве наноструктурных элементов наноприборов. Можно предположить, что подобные структуры будут иметь высокую механическую прочность.

Список литературы

1. Chorro M., Cambedouzou J., Iwasiewicz-Wabnig A. et al. Discriminated structural behaviour of C_{60} and C_{70} peapods under extreme conditions // *Lett. J. Explor. Front. Phys.* 2007. V. 79. P. 56003-p1—56003-p5.
2. Глухова О. Е., Мешанов В. П., Салий И. Н. Функциональные наноприборы на базе углеродных гибридных соединений // *Нано- и микросистемная техника*. 2007. № 2. С. 71—75.
3. Glukhova O. E., Kirillova I. V., Saliy I. N., Slepchenkov M. M. Single-fullerene manipulation inside a carbon nanotube // *Proceeding of SPIE*. 2011. V. 7911. P. 79110R-1—79110R-11.
4. Ehlich R., Landenberger P., Prinzbach H. Coalescence of C_{20} fullerenes // *J. Chem. Phys.* 2001. V. 115. N 13. P. 5830—5836.
5. Wang M., Li C. M. An oscillator in a carbon peapod controllable by an external electric field: a molecular dynamics study // *Nanotechnology*. 2010. V. 21. N 3. P. 035704 1—5.
6. Shao-Long H., Jian-Qi S. Nanoscale lasers based on carbon peapods // *Chin. Phys. Lett.* 2006. V. 23. N 1. P. 211—213.
7. Simon F., Kuzmany H., Rauf H. et. al. Low temperature fullerene encapsulation in single wall carbon nanotubes: synthesis of $N@C_{60}@SWCNT$ // *Chem. Phys. Lett.* 2004. V. 383. P. 362—367.
8. Mickelson W., Aloni S., Han W. Q. et. al. Packing C_{60} in Boron Nitride Nanotubes // *Science*. 2003. V. 300. P. 467—469.
9. Kawasaki S., Hara T., Yokomae T. et. al. Pressure-polymerization of C_{60} molecules in a carbon nanotube // *Chem. Phys. Lett.* 2006. 418. P. 260—263.
10. Lee In-Ho, Jun S., Kim H. et. al. Addatom-assisted structural transformations of fullerenes // *Applied physics letters*. 2006. 88. P. 011913-1—011913-3.
11. Глухова О. Е. Жесткость Y-образных углеродных нанотрубок при деформации растяжения/сжатия // *Нано- и микросистемная техника*. 2009. № 1. С. 19—22.
12. Glukhova O. E., Zhdanov A. I. Equilibrium state of C_{60} , C_{70} and C_{72} nanoclusters and local defects of the molecular skeleton // *Solid State Phys.* 2003. V. 45. P. 189—196.
13. Copley J. R. D., Neumann D. A., Cappelletti R. L. et. al. Rotational dynamics of solid C_{70} : A neutron-scattering study // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 49. P. 2897—2903.
14. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A. et. al. General Atomic and Molecular Electronic Structure System // *Comp. Chem.* 1993. V. 14. P. 1347—1363.
15. Iijima S., Brabec C., Maiti A. et. al. Structural flexibility of carbon nanotubes // *J. Chem. Phys.* 1996. V. 104. P. 2089—2092.
16. Qian D., Liu W. K., Subramoney S. et. al. Effect of Interlayer Potential on Mechanical Deformation of Multiwalled Carbon Nanotubes // *J. Nanosci. Nanotech.* 2003. V. 3, N 1. P. 185—191.
17. Subramoney S., Ruoff R. S., Laduca R., Parvin K. Mechanical Deformation of Multiwalled // *Carbon Nanotubes*. 1996. P. 728—739.
18. Zhu J., Pan Z. Y., Wang Y. X. et. al. The effects of encapsulating C_{60} fullerenes on the bending flexibility of carbon nanotubes // *Nanotechnology*. 2007. V. 18. P. 275702-1—8.

Н. А. Зайцев, д-р техн. наук, проф.,
И. В. Матюшкин, канд. физ.-мат. наук, нач. лаб.,
 e-mail: imatyushkin@sitronics.com,
А. Г. Красников, аспирант,
С. Н. Орлов, нач. лаб.,
Ю. М. Пастухова, инженер,
 ОАО "НИИМЭ и Микрон", Москва, Зеленоград

РОЛЬ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В НАНОРАЗМЕРНЫХ МДП-ТРАНЗИСТОРАХ С МНОГОСЛОЙНЫМИ HIGH-K-ДИЭЛЕКТРИКАМИ

Поступила в редакцию 31.03.2011

Раскрывается тезис о необходимости управления структурой субоксидного слоя на границе high-K-диэлектрик/Si путем формирования ультратонкого слоя SiO_2 , а также на целесообразность использования буферного слоя на границе high-K-диэлектрик/металл.

Ключевые слова: граница раздела, МДП-структура, high-K-диэлектрик

Разработчики МОП интегральных схем еще в начале 60-х годов установили, что надежность и выход годных микросхем в значительной степени зависит от величины и стабильности заряда МДП системы, во многом определяемую свойствами границы раздела Si/SiO₂. С тех пор и до настоящего времени ведущие фирмы — разработчики и производители микросхем — проводят исследования свойств этой системы: изучают структурно-примесные, физико-химические и электрофизические параметры. Цель современных исследований — получение предельных технико-экономических характеристик наноразмерных приборов по степени интеграции, быстродействию, надежности, при одновременном резком сокращении потребляемой мощности.

Электрическое поле в диэлектрике $\sim 10^6$ В/см, и преобладающим механизмом переноса электронов является прямое туннелирование. В этом случае протекание тока не сопровождается появлением в разрешенной зоне диэлектрика инжектированных носителей заряда. Повышение тока утечки приводит к проблемам, связанным с потребляемой мощностью. Толщина подзатворного диэлектрика ($\sim 1,5\text{--}3$ нм) в полевых транзисторах вплотную приблизилась к туннельной. По оценкам фирмы Intel для КМОП-приборов, выполненных по традиционной технологии, эти проблемы начинаются с минимальных топологических размеров 30 нм. Так, при минимальном размере 10 нм рассеиваемая мощность транзистора, работающего на частоте 10 ГГц, составляет 500 Вт. В настоящее время многие ведущие фирмы пытаются решить задачу снижения потре-

ляемой мощности использованием диэлектриков с высокой диэлектрической проницаемостью (high-K). Создание подзатворной системы с использованием high-K-диэлектриков и металла оказалось для Intel сложнейшей задачей [1].

Целью данной статьи является рассмотрение влияния границ раздела в многослойной подзатворной системе high-K-диэлектрик/металлический затвор (HKMG) и обоснование тезиса о том, что применение туннельных слоев SiO₂ в качестве одного из подзатворных диэлектриков не только вполне возможно, но и позволяет существенно улучшить основные параметры прибора [2].

Данная подзатворная система должна удовлетворять следующим основным требованиям:

- минимальные затворные токи утечки;
- заданное воспроизводимое и стабильное значение фиксированного заряда;
- минимальное и воспроизводимое значения плотности ловушечных уровней с различной глубиной залегания в запрещенной зоне;
- минимальное и воспроизводимое значения поверхностных состояний;
- высокая стабильность, однородность и воспроизводимость электрофизических свойств данной структуры.

Использование high-K-диэлектриков приводит к резкому снижению токов утечки, однако подзатворная система должна обладать полным комплексом перечисленных выше параметров. В случае термически окисленного слоя кремния граница Si—SiO₂ формируется в глубине кремниевой пластины, поэтому подзатворная система обладает необходимым набором свойств (кроме токов утечки) для создания нанотранзисторов. При осаждении таких диэлектриков на кремниевую подложку удастся резко уменьшить затворные токи утечки, однако при этом не удастся получить минимальную и воспроизводимую плотность ловушечных уровней в запрещенной зоне кремния, а также фиксированный заряд и плотность поверхностных состояний.

В настоящее время в качестве high-K-диэлектрика широко используют оксиды циркония (ZrO₂) и гафния (HfO₂). Для создания подзатворных систем необходим выбор металлического затвора, материал которого не взаимодействует с оксидами ZrO₂ и HfO₂. Алюминий здесь нельзя использовать, так как он взаимодействует с ZrO₂ и HfO₂. В качестве таких электродов предполагается применять тугоплавкие металлы Mo/W. Технологический процесс получения таких металлических слоев достаточно сложен, кроме этого возникает сложность с получением необходимой величины адгезии в этих структурах.

Собственно в разработке такого сочетания high-K-диэлектрика и нового материала затвора и заключался революционный прорыв компании Intel. Сочетание high-K-диэлектрика и нового металлического затвора, в качестве которого используется

силицид никеля, позволяет более чем в 10 тыс. раз по сравнению с диоксидом кремния снизить токи утечки, сохранив при этом высочайшие рабочие параметры транзисторов. Использование high-K-диэлектриков предусмотрено и в техпроцессах с проектной нормой 32 и 22 нм. Однако естественно, что в 32-нм техпроцессе речь идет уже о втором поколении high-K-диэлектриков и новом металлическом затворе. Собственно, второе поколение high-K-диэлектриков — это тот же оксид гафния, но легированный особым образом. Пока Intel не раскрывает, чем именно легирован оксид гафния.

NEC Electronics и Toshiba заявили о расширении соглашения с IBM в области совместной разработки перспективных технологий, включая 28-нм техпроцесс, применение сочетаний диэлектриков с высоким значением диэлектрической постоянной и металлических затворов (High-K/Metal Gate, HKMG) [3, 4] и технологии производства чипов с низким уровнем энергопотребления для потребительской электроники.

Почему же потребовался переход к металлическому затвору? Использование металлических электродов устраняет истощение поликристаллического кремния и улучшает эксплуатационные характеристики транзистора. Кроме того, применение металлических электродов с работой выхода, близкой к середине ширины запрещенной энергетической зоны, позволяет снизить концентрацию примесей в подложке, что повышает подвижность транзистора, а следовательно, улучшает его общие эксплуатационные характеристики.

Использование же структуры "high-K/поликремний" приводит к возникновению высокого порогового напряжения в планарных транзисторах. Возникновение дефектов на этой границе раздела приводит к так называемому эффекту закрепления уровня Ферми (*Fermi level pinning*), что ведет к сбою переключения транзисторов при низких управляющих напряжениях. Возникновение этого эффекта связано с генерацией О-вакансий и, что критичнее для материалов затвора с низкой работой выхода, О-междоузлий и последующим формированием диполей на границе high-K/затвор [5]. Кроме того, наблюдается значительное снижение активности движения электронов через канал из-за возникновения так называемого поверхностно-оптического фонового режима (SO) и связанного с ним снижения эксплуатационных характеристик транзистора вследствие поляризации high-K-слоя и инверсии заряда материала канала. В гораздо меньшей степени эти недостатки присущи и HKMG-структуре [4]. В целях термической стабилизации границы HKMG и устранения эффекта захвата уровня Ферми используют тонкий межслойный (*cap*) диэлектрик, обычно в паре с HfO_2 , HfSiO или HfAlO материалом для такого диэлектрика служит Al_2O_3 или La_2O_3 .

Для решения этих проблем, по нашему мнению, перспективна подзатворная система $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{high-K}/\text{cap-диэлектрик}/\text{металл}$ (*cap* — в значении "покрывающий"). Известно, что на границе "Si/high-K-диэлектрик" формируется естественным образом слой субоксидов с включениями атомов металла, при этом толщина этого слоя колеблется в пределах 0,2...4 нм [6], а его свойства неконтролируемы. Поэтому нанесение специального ультратонкого слоя SiO_2 позволит решить задачу стабилизации границы раздела Si/high-K-диэлектрик. Сходную функцию выполняет и *cap*-диэлектрик, стабилизируя границу раздела high-K-диэлектрик/металл.

В настоящее время все чаще встречаются исследования, посвященные технологиям формирования подзатворных систем с применением фазового расслоения [7]. В данной работе исследовалась задача изготовления затворной структуры нанотранзистора с металлическим затвором и диэлектриком, полученным методом фазового расслоения, аналогично исследованиям, проводимым в работе [2]. В качестве возможной модельной системы предложена структура $(\text{CoSi}_2\text{—TiSi}_2)/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$. В результате термического отжига формируется многослойная структура $\text{Si}/\text{Co}/\text{Ti}\dots/\text{Co}/\text{Ti}/\text{SiO}_2/\text{Si}$. Выбор оксида титана в качестве подзатворного диэлектрика объясняется тем, что этот материал имеет исключительно высокую диэлектрическую проницаемость ($\epsilon = 50\text{...}86$). Несмотря на относительно узкую запрещенную зону 1,5 эВ и потенциальный барьер 0,3 эВ для носителей заряда слой TiO_2 в сочетании со слоем SiO_2 может образовывать эффективный подзатворный блок. Анализ трехкомпонентных фазовых диаграмм для структуры Ti—Si—O показывает, что в системе Ti/SiO_2 возможны два варианта развития процесса фазообразования. Какой из вариантов будет реализован, зависит от температуры отжига. При температуре 700 °С гомогенная смесь $\text{TiO}_2\text{—SiO}_2$ нестабильна, и вследствие расслоения должен образовываться стек из двух последовательных слоев $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$. Вместе с тем, при температуре 900 °С смесь $\text{TiO}_2\text{—SiO}_x$ термодинамически стабильна, и может образовываться промежуточный слой TiSiO_x . Последний вариант интересен, если необходимо получить материал со смешанными свойствами TiO_2 и SiO_2 .

Однако после получения SiO_2 его приповерхностный слой обогащен металлическими примесями (например, натрием). Поэтому при нанесении второго диэлектрика эти примеси надо удалить или стабилизировать, т. е. сделать их неподвижными. В качестве стабилизирующей атмосферы нами ранее были использованы фосфоросодержащие среды [8]. Вместе с тем, применение дисилицидов кобальта и титана, обладающих достаточно низким удельным сопротивлением около 20...25 мкОм·см может служить одним из слоев металлической разводки.

Таким образом, при переходе к проектным нормам менее 45 нм роль границ раздела в МДП-структурах (в составе наноразмерных полевых транзисторов) возрастает, а в целях стабилизации их электрофизических свойств целесообразно использовать буферные слои, которые можно получать методом фазового расслоения.

Список литературы

1. **Техническая** информация компании Intel. Intel White Paper: Introducing the 45 nm Next-Generation Intel Core Microarchitecture. URL: <http://www.intel.com/technology/intel64/index.htm>
2. **Гриценко В. В., Шаймеев С. С., Агутин В. В., Григорьева Т. И.** Двухзонная проводимость TiO_2 // ФТТ. 2006. Т. 48, вып. 2. С. 210–213.
3. **Ragnarsson L. et al.** Ultralow-EOT (5 Å) Gate-First and Gate-Last High Performance CMOS Achieved by Gate-Electrode Optimization // IEDM Tech. Dig. 2009. P. 663–666.

4. **Choi K. et al.** Extremely Scaled Gate-First High-K/Metal Gate Stack with EOT of 0,55 nm Using Novel Interfacial Layer Scavenging Techniques for 22 nm Technology Node and Beyond // VLSI Tech. Dig. 2009. P. 138–139.

5. **Shiraishi K., Takeuchi H., Akasaka Y.** Theory of Fermi Level Pinning of High-K-Dielectrics // Proc. of Int. Conf. on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, 2006. Monterey, 6–8 Sept. 2006.

6. **Красников Г. Я., Зайцев Н. А., Матюшкин И. В.** К вопросу определения эквивалентной толщины оксида в МДП-транзисторах нанометровых размеров // Микроэлектроника. 2011. Т. 40, № 1. С. 1–6.

7. **Орликовский А. А., Лукичев В. Ф., Руденко К. В.** Критические элементы нанотранзисторов; физика, технология и материалы // Межотраслевой научно-практический журнал "Интеграл". 2010. Т. 54, № 4 (июль — август). С. 10–17. URL: <http://journal-integral.com/load/>

8. **Зайцев Н. А., Красников Г. Я., Неустроев С. А.** Воздействие паров PCl_3 на свойства структур Si-SiO_2 // Неорганические материалы. 1989. Т. 25, № 3. С. 403–405.

КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 621.3.049.77.002

В. К. Смолин, канд. техн. наук, ст. науч. сотр.,
В. А. Герасимов, инженер-технолог,
Федеральный научно-производственный центр
"Научно-исследовательский институт
измерительных систем им. Ю. Е. Седакова",
Нижний Новгород,
e-mail: achepel@niiis.nnov.ru

ВОЗМОЖНОСТИ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА МЕТАЛЛИЗАЦИИ ПО СТОЙКОСТИ К ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ

Поступила в редакцию 06.04.2011

Рассмотрены вопросы, связанные с методами оценки качества тонкопленочной металлизации по стойкости к электрическим нагрузкам с высокой плотностью тока. Показаны особенности применения при операционном контроле металлизации детерминированных электрических импульсов.

Ключевые слова: металлизация, электромиграция, электродиффузия, тонкопленочные структуры, импульсное воздействие

Каждый процесс производства изделий включает в себя контрольные операции (как правило, сюда относятся входной контроль материалов и комплектующих, операционный и приемочный контроль). Основное требование к форме и содержанию контрольной операции можно определить как

(пользуясь разговорной лексикой) "ненавязчивость". Под этим следует понимать, что процедура оценки качества должна быть информативной, объективной, использовать минимальное число переходов, обладать малыми продолжительностью и трудоемкостью.

Тонкопленочные проводящие структуры в интегральной электронике выполняют функции контактных площадок для монтажа компонентов и контроля электрофизических параметров пленочных элементов, коммутационных проводников, металлизированных переходов с одного уровня на другой, элементов конденсаторов и индуктивностей, вспомогательных элементов (экранов, реперных знаков и т. п.). Уменьшение топологических норм проектирования и создание более плотноупакованных многоуровневых микроэлектронных структур обуславливают возрастающую актуальность развития методов контроля качества металлизации интегральных схем.

Многообразие технических характеристик и применяемых методов и средств контроля требует выбора оптимальных решений. Одним из примеров разумного подхода к проблеме могут служить исследования методов оценки морфологии пленок алюминиевых сплавов [1]. Рельеф поверхности и размер зерен пленок влияют на качество процессов формирования топологического рисунка в фоторезистивной маске, последующего травления этих пленок, а также на стойкость сформированных на их основе проводников интегральных схем (ИС) к электромиграции и образованию вторичного рельефа при термообработках. Исследовались возмож-

ности таких методов измерений, как спектрофотометрия, профилометрия, измерение рассеяния излучения поверхностью пленок. Установлено, что из рассмотренных методов контроля качества наибольшей чувствительностью к изменению структурных параметров и информативностью обладает метод измерения характера рассеяния сканирующего лазерного излучения с длиной волны 650 нм поверхностью пленочных структур, реализуемый в режиме матовости на установке Reflex 300. Время измерения и обработки результатов на одной пластине составляет в среднем 150 с, что приемлемо для процедуры операционного контроля. Таким образом, принцип "ненавязчивости" в данном случае соблюдается.

Одной из характеристик пленочной коммутации является стойкость к явлению электромиграции. Согласно общепринятому определению, электромиграция (электродиффузия, электроперенос) — перенос массы, наблюдающийся в металле при прохождении постоянного электрического тока большой плотности, — является основной формой проявления ионной проводимости. Механизм перемещения ионов является диффузным, но силы, вызывающие дрейф, главным образом обусловлены взаимодействием электронов проводимости с ионами [2]. Явлению электромиграции, особенно в алюминиевых проводниках, посвящены многочисленные обзоры и публикации [2–6]. Актуальность проблемы обеспечения и оценки качества металлизации по стойкости к электромиграции подтверждается тем, что, например, для медной металлизации уже первое значение плотности тока в ряду прогнозов маршрутной карты ITRS-2007, равное $1,72 \cdot 10^6 \text{ A} \cdot \text{см}^{-2}$, превышает допустимое предельное значение плотности тока, провоцирующее процесс электродиффузии меди, — $1,0 \cdot 10^6 \text{ A} \cdot \text{см}^{-2}$ [7].

При исследовании электродиффузии в тонких пленках имеется два основных вида измерений:

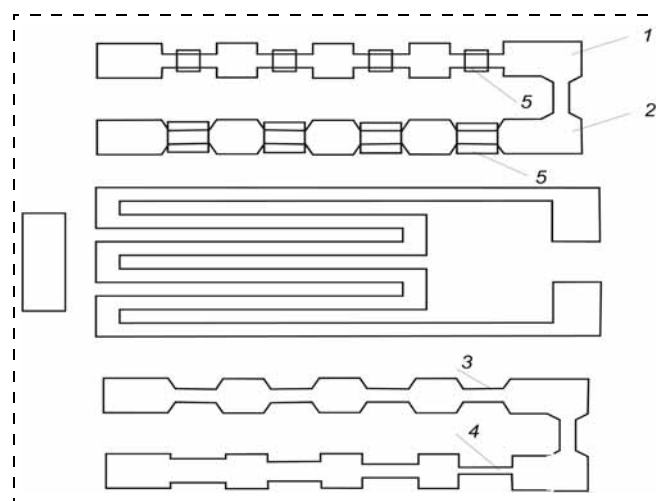
- прямое измерение потока ионов или таких параметров, связанных с массопереносом, как службы проводника и измерение его сопротивления;
- измерение изменений в распределении состава проводника, вызванных прохождением постоянного тока.

Измерения потока позволяют определить только произведение коэффициента диффузии на эффективный заряд, но не каждую из этих величин в отдельности. Чтобы разделить эти два параметра, требуется дополнительное измерение — обычно коэффициента диффузии. К основным относятся следующие методы измерений [4]:

- *Измерение накопления и истощения массы.* Непосредственно измеряется полное количество материала, переносимого в направлении тока через образец. Образец обычно выполняется в виде полоски с большими контактными площадками на концах. Измерения осуществляются с использованием методов просвечивающей электронной микроскопии, электронного зонда.

- *Определение срока службы проводников.* Определяют время, за которое отказывают 50 % (или более) испытываемых проводников.
- *Измерение электросопротивления.* Для измерений используется полоска с несколькими потенциальными отводами.
- *Метод поперечной полоски.* Могут быть определены независимо эффективный заряд и коэффициент диффузии.
- *Метод скорости дрейфа.* Для измерений берется образец в виде полоски материала, нанесенной на подложку с высоким сопротивлением и низким коэффициентом диффузии. О массопереносе можно судить по скорости перемещения концов полоски под действием протекающего тока.

В работе [8] рассмотрен способ контроля качества металлизации, в котором анализируют распределение температуры вдоль проводника, определяют координаты точек, имеющих максимум температуры, по амплитуде каждого максимума судят о размере дефекта, по числу максимумов — о степени технологической дефектности металлизации. Для каждой из определенных точек находят значения производных температуры по длине проводника, по производной судят о времени наработки до электродиффузионного отказа [8]. По знаку производной определяют места возникновения и тип электродиффузионных дефектов, связанных с истощением и накоплением материала проводника. Однако данный способ не пригоден для плотноупакованных ИС, типичные размеры проводящих линий которых в поперечном сечении составляют от 50–100 нм до нескольких микрометров и в длину — от 10 до 1000 мкм [10]; пространственное же



Топология тестовой структуры с различными вариантами перехода от контактной площадки:

1 — металлическая дорожка проходит через ступеньку оксида; 2 — металлическая дорожка проходит через ступеньку оксида в месте изменения ее конфигурации; 3 — металлическая дорожка не проходит через ступеньку оксида; 4 — металлическая дорожка переменного сечения не проходит через ступеньку оксида; 5 — металлическая дорожка проходит через ступеньку оксида (контакт с кремнием)

разрешение датчиков температуры ИК радиометров составляет примерно 25 мкм.

Каждый из методов характеризуется конструкцией тестовой структуры (чаще всего это полоска пленочного проводникового материала с контактными площадками на концах), способами регистрации информативных параметров и обработки результатов измерений, температурными и иными условиями выполнения измерений. На рисунке представлена топология тестовой структуры, учитывающая особенности выполнения металлизации определенного вида ИС [2]. Собственно сам процесс электродиффузии не может привести к обрыву проводника, так как для этого необходимо нарушение непрерывности ионного потока. Последнее возможно при наличии градиентов коэффициента диффузии и температуры. В пленочной металлизации такие градиенты имеют место, например, в местах соединения проводников из различных материалов или местах соединения пленочного и объемного проводников [11].

Наиболее распространенным на практике является метод определения времени наработки на отказ в условиях повышенной температуры и плотности электрического тока с последующей экстраполяцией этого параметра на нормальные условия.

Энергия активации процессов, приводящих к отказам, для всех металлов, применяемых в изделиях электронной техники, с достаточной для практики точности определяется линейной зависимостью от температуры плавления [12]:

$$E_a \sim CT_{пл},$$

где C — постоянная, зависящая от вида процесса: $C = 34 R$ для самодиффузии (R — газовая постоянная), $C = 29 R$ для сублимации, $C = 8,63 R$ для образования вакансий.

Алюминий является наиболее легкоплавким из основных материалов пленочных проводников и поэтому наиболее подвержен воздействию процессов электромиграции. Электродиффузия в тонкопленочных проводниках из алюминия может привести к двум видам отказов. Первый из них связан с разрывом в алюминиевых проводниках вследствие образования и слияния пустот, когда размеры образующихся полосей сравнимы с поперечным сечением пленки. Второй вид отказов вызван накоплением алюминия в виде "буторков" и "усов", которые могут привести к замыканиям между проводящими дорожками. В общем случае соотношение, определяющее среднее медианное время t_M отказов тонкопленочных металлических проводников вследствие электромиграции, имеет вид

$$bd/t_M = AJ^n \exp(-E_a/kT), \quad (1)$$

где bd — площадь сечения проводника; A — постоянная, учитывающая конкретные характеристики пленки металла; E_a — энергия активации электродиффузии; J — плотность тока; n — поправочный коэффициент, находится в диапазоне от 1 до 5

($n = 1$, если главное влияние на электроперенос оказывают структурные дефекты, $n = 3$, если определяющим является неравномерность температурного поля проводника).

Для алюминиевых проводников энергия активации процесса электромиграции совпадает по величине с энергией активации межгранулярной диффузии в пленках алюминия и находится в пределах 0,5—0,7 эВ. На электромиграцию влияют как конструктивное выполнение элементов коммутации, так и факторы, обуславливающие невоспроизводимость параметров структур в процессе изготовления (дефекты, размеры зерен и свойства границ зерен, вносимые примеси и загрязнения и т. п.).

В процессе разработки и изготовления ИС, согласно нормативной документации [13], при сдаче ОКР и при изменении металлизации (конфигурации разводки, материала, числа слоев, метода нанесения, толщины, температурных режимов) оценивается устойчивость металлизации к явлению электромиграции в интегральных микросхемах по результатам кратковременных испытаний в форсированных режимах.

Контроль проводится на тестовых структурах с тонкопленочными проводниками и характерными для данного типа микросхем рельефом подложки. Тестовая структура должна воспроизводить конструкцию аттестуемого класса микросхем, в том числе с максимальным рельефом, и изготавливаться в соответствии с технологией аттестуемого типоминнала микросхем, надежность металлизации которых оценивается по данному методу. Длина металлизации тестовой структуры должна быть не менее 400 мкм. Кристаллы с тестовыми структурами устанавливаются в корпуса.

Используют две партии тестовых образцов (не менее 20 образцов в каждой партии), которые отбираются из не менее чем пяти технологических партий в равных пропорциях. Испытания проводят в фиксированных режимах при двух температурах окружающей среды (в диапазоне 125—250 °С; отличаются друг от друга не менее чем на 50 °С). В процессе испытаний фиксируются времена наработки на отказ; в качестве критериев отказа принимается полный обрыв проводника. Испытания каждой партии продолжают до наступления не менее 70—80 % отказов проводников от первоначальной выборки. Далее определяют энергию активации процесса и коэффициент ускорения, по которым рассчитывают ожидаемое значение гамма-процентного ресурса. Продолжительность испытаний составляет около 1000 ч. При проведении подобных испытаний предполагается, что энергия активации электродиффузии является постоянной величиной в рассматриваемом диапазоне температур.

Идеальным техническим решением явился бы контроль стойкости к электромиграции, проводимый на тестовых структурах в составе неразделенной пластины; время испытания не должно при этом превышать время контроля других электрических параметров элементов схем. В [14—16]

рассмотрены некоторые вопросы контроля качества металлизации при протекании через тестовую структуру импульсного тока (измерения проводились при температуре окружающей среды 20 °С).

В работе [17] показано, что для тонкопленочных резисторов микросборок условия отсутствия теплообмена между резистором и подложкой выполняются при длительности импульса порядка 10^{-8} – 10^{-9} с, при этом температура резистора линейно зависит от длительности импульса. Для импульсов большей длительности ($\tau \leq 10^{-2}$ с) может быть использована следующая зависимость:

$$\Delta T = \frac{2P_{0и}}{\sqrt{\pi\lambda_{п}}} \sqrt{\alpha_{п}\tau}, \quad (2)$$

где ΔT — величина перегрева резистора; $P_{0и}$ — удельная импульсная мощность; $\lambda_{п}$ и $\alpha_{п}$ — коэффициенты теплопроводности и температуропроводности материала подложки; τ — длительность импульса.

Тепловое сопротивление резисторов при этом определяется лишь размерами резистора и характеристиками подложки. Более точно условия применимости формулы для ΔT выглядят следующим образом:

$$\frac{w}{\sqrt{\pi\alpha_{п}\tau}} > 3 \text{ и } \frac{d_{п}}{\sqrt{\alpha_{п}\tau}} > 2,35...2,5, \quad (3)$$

где w — размер меньшей стороны прямоугольника, образующего резистивный элемент; $d_{п}$ — толщина подложки.

Таким образом, при испытаниях следует использовать импульсы длительностью менее 10 мс. В работах [14–16] использовались импульсы длительностью в диапазоне 0,1–10 мкс (при этом плотность тока составляла $(1 - 3) \cdot 10^7 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2}$).

Вообще говоря, действие прямоугольного импульса можно рассматривать как действие постоянного тока в ограниченном интервале времени, т. е. формально это подпадает под определение явления электромиграции. Однако энергия активации процессов, происходящих под действием импульсного тока, отличается от энергии активации, характерной для "чистой" электродиффузии. В работе [17] показано, что изменения сопротивления резистивных элементов на основе кермеса К50-С при различных видах электрической нагрузки (постоянный ток, импульсный детерминированный ток, импульсный случайный ток) одинаковой мощности отличаются как по величине, так и механизму протекания диффузионных процессов. Значение энергии активации процесса старения под действием постоянного тока составляло ~0,5 эВ; импульсного детерминированного — 0,63 эВ. Для импульсного воздействия, наряду с электродиффузией, имеет место и диффузия по границам зерен.

Практическое использование импульсной отбраковки в процессе операционного контроля ка-

чества металлизации ИС требует проведения исследований процессов деградации пленочных проводников и систем многоуровневой коммутации при протекании через них униполярных импульсов тока с различными характеристиками. Кроме того, необходимо установить информативные параметры и критерии оценки качества, по которым будет определяться результат импульсного воздействия.

При разработке методики выполнения измерений принципиальным является вопрос о применимости зондовых устройств в условиях действия сравнительно мощных электрических импульсов. Альтернативным решением является применение технологических приспособлений многоразового использования для монтажа кристаллов.

Список литературы

1. Бабкин С. И., Киреев В. Ю., Козырева Т. В. и др. Возможности оценки качества систем металлизации интегральных микросхем на основе алюминиевых сплавов различными методами // *Электроника*. 2003. № 5. С. 38–44.
2. Миллер Ю. Г. Физические основы надежности интегральных схем. М.: Сов. радио, 1976. 320 с.
3. Колешко В. М., Белицкий В. Ф. Массоперенос в тонких пленках. Минск: Наука и техника, 1980. 250 с.
4. Поуга Д. Ж., Ту К., Мейера Дж. Тонкие пленки — взаимная диффузия и реакции. М.: Мир, 1982. 576 с.
5. Д'Эрль Ф., Розенберг Р. Электромиграция в тонких пленках. Физика тонких пленок. 1977. Т. 8. С. 284–339.
6. Смолин В. К. Особенности применения алюминиевой металлизации в интегральных схемах // *Микроэлектроника*. 2004. Т. 33, № 1. С. 10–16.
7. Архипов А. В., Шопин Г. П., Арефьев В. В. и др. Способ контроля качества металлизации // Пат. РФ № 2 383 080, опубл. 27.02.2010, бюл. № 6.
8. Silsbee R. A. Failure model for electro migration // 10th Annual Proceedings Reliability Physics. 1972. P. 171–174.
9. Валиев К. А., Гольдштейн Р. В., Житников Ю. В. и др. Теория и моделирование нано- и микропроцессов разрушения тонкопленочных проводников и долговечность металлизации интегральных микросхем. Часть 1. Общая теория переноса вакансий, генерация механических напряжений и зарождения микрополостей при электромиграции, деградация и разрушение многоуровневой металлизации // *Микроэлектроника*. 2009. Т. 38, № 6. С. 404–427.
10. Воженин И. Н., Блинов Г. А., Коледов Л. А. и др. Микроэлектронная аппаратура на бескорпусных интегральных микросхемах. М.: Радио и связь, 1985. 264 с.
11. Гродзенский С. Я. Физические методы обеспечения и оценки надежности электронных приборов // *Обзоры по электронной технике*. 1981. № 1 "Электроника СВЧ". Вып. 8. С. 797.
12. ОСТ 11 14 1012–99. Микросхемы интегральные. Технические требования к технологическому процессу. Система и методы операционного контроля.
13. Kinsbron E., Melliar-Smith C. M., English A. T., Chynoweth T. Failure of small thin film conductors due to high current-density pulses // 16th Annual Proceedings Reliability Physics. 1979. V. 1. P. 248–254.
14. Dicken H. K. Reliability test patterns may prevent LSI field failures // *Det. Elektron*. 1980. № 10. P. 115–116, 118.
15. Рубаха Е. А., Иванова Л. И., Родионов А. В. и др. Способ контроля качества металлизации // А. с. СССР, № 1152449, опубл. 27.12.96, бюл. № 36.
16. Жуков Г. Ф., Смолин В. К. Особенности применения импульсного метода намерения ТКС тонкопленочных резисторов // *Организация производства и прогрессивная технология*. 1982. Вып. 4. С. 35–37.
17. Князева С. С., Герасимова Т. А., Садеков А. С. Стабильность пленочных резистивных элементов на основе сплава К50-С на результаты длительных и ускоренных испытаний // Казань: КАИ, 1980. С. 81–87.

В. А. Чернов*, канд. физ.-мат. наук, доц.,
e-mail: vasc.lnfi@ipre.ru,
А. М. Митерев**, канд. физ.-мат. наук,
Н. В. Прудников***, д-р техн. наук, проф.,
директор, e-mail: mzairan@ipiran.ru,
Г. И. Сигейкин***, д-р хим. наук, ст. науч. сотр.,
советник, e-mail: mzairan@ipiran.ru,
Е. А. Леонова***, ст. науч. сотр.,
e-mail: mzairan@ipiran.ru
* ФГУП "ГНЦ РФ-Физико-энергетический
институт им. А. И. Лейпунского"
** Филиал ФГУП "НИФХИ им. Л. Я. Карпова"
*** Межведомственный центр аналитических
исследований при Президиуме РАН

ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА И РАЗМЕРОВ ИСТОЧНИКОВ ТОКА, ОСНОВАННЫХ НА ПРЯМОМ ПРЕОБРАЗОВАНИИ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГИИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭМИССИИ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Поступила в редакцию 12.05.2011

Проведены измерения тока вторичных электронов в МДМ-структурах $W-Al_2O_3-Al$ как элементах источников тока, основанных на прямом преобразовании ядерной энергии в электрическую с использованием эмиссии вторичных электронов. Выполнены расчеты энергетических потерь осколков деления и альфа-частиц в слоях МДМ-структур. Проведенные эксперименты и расчеты позволили оптимизировать состав и размеры этих источников тока.

Ключевые слова: прямое преобразование ядерной энергии, вторичные электроны, структуры металл—диэлектрик—металл, метод магнетронного распыления, метод электронно-лучевого распыления

Введение

В качестве миниатюрных источников энергии с большим сроком службы для нано- и микросистемной техники предложены источники тока, основанные на прямом преобразовании ядерной энергии в электрическую с использованием эмиссии вторичных электронов [1, 2]. Основой источников тока являются наноструктуры металл—диэлектрик—металл (МДМ-структуры) с характерной толщиной слоев 10 нм, преобразующие энергию первичных заряженных частиц в электрическую энергию. С точки зрения электродинамики МДМ-структуры являются структурами эмиттер—диэлектрик—коллектор (ЭДК-структуры), в которых вторичные электроны рождаются преимущественно в слое тяжелого металла (эмиттере) и поглощаются преимущественно в слое легкого металла (коллекторе). Рас-

полагая на длине пробега первичной заряженной частицы несколько сотен подобных МДМ-структур, в которых эмиттеры и коллекторы соединены параллельно, получают источник энергии, обладающий следующими прогнозируемыми характеристиками:

- КПД — до 20...30 %;
- энергетическая емкость — до 10 ГДж/кг;
- мощность — до 25...30 Вт/кг;
- объем — от 10^{-3} ... 10^{-2} см³ и выше.

Ранее авторами были получены и исследованы МДМ-структуры $W-Al_2O_3-Al$ с толщиной слоев 10, 100 и 10 нм соответственно как преобразователи ядерной энергии в электрическую на вторичных электронах; изготовлены и апробированы экспериментальные макеты источников тока на основе МДМ-структур [1, 2]. На текущем этапе работ проведены расчеты и эксперименты в обоснование оптимального состава и размеров источников тока для достижения наибольшего КПД. Данная статья посвящена описанию и анализу полученных результатов.

Краткое описание МДМ-структур для исследуемых источников тока

Для исследований источников тока использовались МДМ-структуры, в которых в качестве материала эмиттера использовался вольфрам, в качестве материала коллектора — алюминий, в качестве диэлектрика — оксид алюминия (рис. 1, см. третью сторону обложки). В используемом наборе МДМ-структур слой вольфрама имел толщину 10 и 20 нм, слой Al_2O_3 — 50 и 100 нм, слой алюминия — 10 и 30 нм. МДМ-структуры были изготовлены комбинированным методом электронно-лучевого и магнетронного ионно-плазменного напыления [2]. Электрическая емкость МДМ-структур, измеренная стандартными приборами при переменном токе, составила 150 ± 6 нФ для образцов с толщиной слоя Al_2O_3 100 нм и 290 ± 10 нФ для образцов с толщиной слоя Al_2O_3 50 нм.

Условия изготовления МДМ-структур $W-Al_2O_3-Al$ представлены в работе [2]. Сопротивления утечки МДМ-структур, в которых первым напылен слой алюминия, приведены в табл. 1. Сопротивления утечки МДМ-структур, в которых первым напылен слой вольфрама, превышали 40 МОм (предел измерения прибора М-3860D (Metex)).

Таблица 1

Сопротивления утечки МДМ-структур
(первым напылен слой алюминия)

№ образца	Толщина слоя, нм			Сопротивление образцов, Ом
	W	Al_2O_3	Al	
1	10	100	10	650
2	10	50	10	410
3	20	100	10	1160
4	10	100	30	820

Экспериментальное обоснование оптимальных размеров источников тока

Для экспериментальных исследований источников тока использовались три лабораторных образца. Образец № 1 включает в себя МДМ-структуру, медные контакты, диэлектрик из слюды, источник альфа-частиц в виде слоя изотопа америций-241 диаметром 20 мм на подложке из алюминия. Энергия альфа-частиц равна 5,49 МэВ, активность источника — 0,5 мКи. Образец № 2 аналогичен образцу № 1, но не содержит слоя изотопа америций-241, поскольку предназначен для облучения ионами, в том числе альфа-частицами, на электростатическом ускорителе. Образец № 3 (рис. 2) включает в себя два слоя металлического урана-235 толщиной 1 мкм, нанесенных по обе стороны алюминиевой подложки, две МДМ-структуры $W-Al_2O_3-Al$, изоляторы из слюды толщиной 0,1 мм, электрические контакты. Образец № 3 предназначен для облучения на реакторной установке, при этом вторичные электроны в МДМ-структурах обусловлены потоком осколков деления из слоя урана.

Для проведения измерений использовались следующие приборы:

- источники питания постоянного тока (Б5-30, LR-6 AA);
- прибор комбинированный цифровой Ц300;
- прибор универсальный М-3860D (Metex);
- гальванометр.

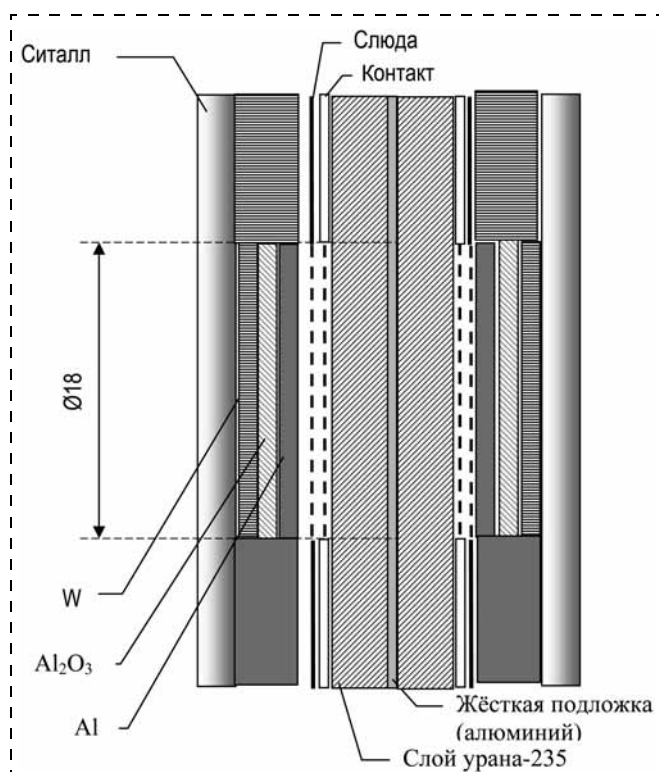


Рис. 2. Схема образца № 3

Таблица 2

Значение силы тока в МДМ-структуре $W-Al_2O_3-Al$ при облучении осколками деления с потоком $6,5 \cdot 10^6$ оск/с

№ образца	Толщина слоя, нм			Сила тока, нА, в зависимости от последовательности напыления слоев	
	W	Al_2O_3	Al	Первым напылен слой вольфрама	Первым напылен слой алюминия
1	10	100	10	0,15	0,39
2	10	100	30	0,19	0,44
3	10	50	10	0,17	0,42
4	20	100	10	0,17	0,40

Силу тока в МДМ-структуре измеряли либо непосредственно, либо вычисляли на основе измеряемого падения напряжения на сопротивлении нагрузки. Диапазон сопротивлений нагрузки составил от 1 кОм до 1 МОм. Схема непосредственного измерения тока приведена на рис. 3.

Исследования МДМ-структур на образце № 3 проводили при их облучении в метрологически аттестованном поле тепловых нейтронов физического стенда. Измеренное значение потока осколков деления на МДМ-структуру составило $6,5 \cdot 10^6$ оск./с; измерения проводили гамма-спектрометрическим методом по активности осколка деления La-140. Ток вторичных электронов в МДМ-структуре с толщиной слоя вольфрама, оксида алюминия и алюминия 10, 100, 10 нм соответственно (слой вольфрама был напылен первым) составил 0,15 нА (табл. 2). При уменьшении толщины слоя диэлектрика до 50 нм ток в МДМ-структуре составил 0,17 нА. При увеличении толщины слоя вольфрама в 2 раза (до 20 нм) ток в МДМ-структуре составил 0,17 нА, при увеличении толщины слоя алюминия в 3 раза (до 30 нм) — 0,19 нА.

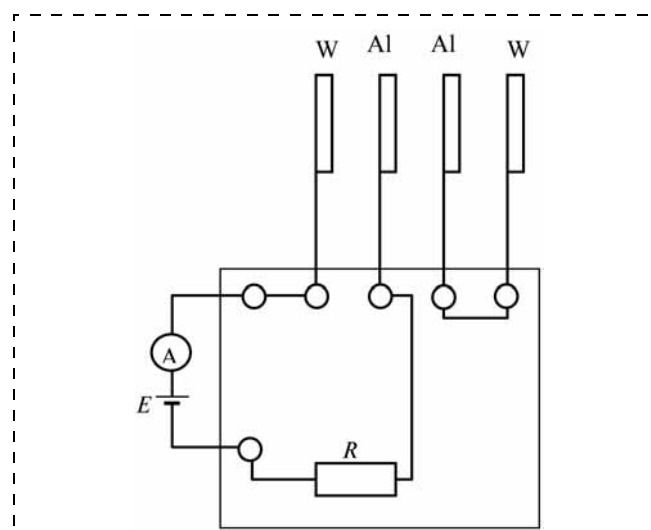


Рис. 3. Схема для непосредственного измерения тока в МДМ-структуре

Таблица 3

Значение силы тока в МДМ-структуре W—Al₂O₃—Al (первым напылен слой вольфрама) с толщиной слоев вольфрама, оксида алюминия и алюминия 10, 100 и 10 нм соответственно при облучении альфа-частицами

Ток альфа-частиц, нА	Сила тока в МДМ-структуре в зависимости от энергии альфа-частиц, нА		
	1 МэВ	2 МэВ	2,5 МэВ
10	24	26	26
30	76	80	82
100	230	250	250

Ток вторичных электронов в МДМ-структуре с толщиной слоя вольфрама, оксида алюминия и алюминия 10, 100, 10 нм соответственно (слой алюминия был напылен первым) составил 0,39 нА. При уменьшении толщины слоя диэлектрика до 50 нм ток в МДМ-структуре составил 0,42 нА. При увеличении толщины слоя вольфрама в 2 раза (до 20 нм) ток в МДМ-структуре составил 0,40 нА, при увеличении толщины слоя алюминия в 3 раза (до 30 нм) — 0,44 нА.

Типичная зависимость силы тока в МДМ-структуре от сопротивления нагрузки (для образца № 3) приведена на рис. 4.

В образце № 2 МДМ-структуры с толщиной слоев вольфрама, оксида алюминия и алюминия 10, 100 и 10 нм соответственно облучались альфа-частицами на электростатическом ускорителе ЭГ-2,5. Энергия альфа-частиц составила 1...2,5 МэВ, ток альфа-частиц — 10...100 нА, диаметр пучка был равен диаметру слоя алюминия в МДМ-структуре (18 мм). Полученные результаты приведены в табл. 3. При энергии альфа-частицы 1,8 МэВ и величине тока альфа-частиц 10 нА ток в МДМ-структуре, где первым был напылен слой вольфрама, составил 24 нА. Ток в МДМ-структуре практически линейно зависит от плотности потока альфа-частиц и практически не зависит от энергии альфа-частиц.

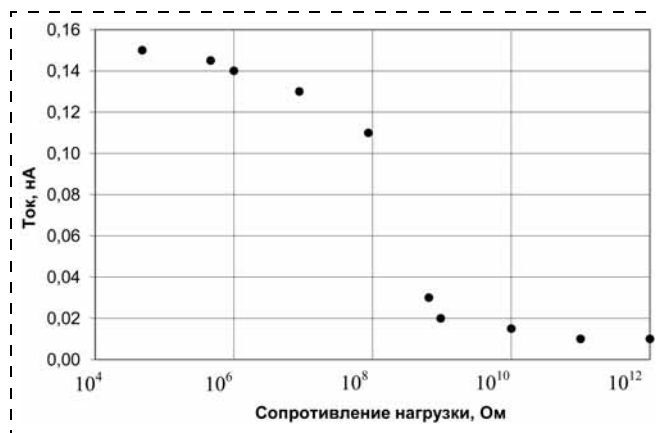


Рис. 4. Типичная зависимость силы тока в МДМ-структуре (первым напылен слой W) от сопротивления нагрузки при облучении образца № 3

Расчеты в обоснование оптимальных размеров источников тока

Расчеты в обоснование оптимальных размеров источников тока проведены с использованием современных теоретических представлений о переносе первичных заряженных частиц и вторичных электронов в веществе, а также расчетных программ TRIM и SRIM [3].

В качестве первичных заряженных частиц рассматривались осколки деления и альфа-частицы. Делящийся изотоп ²³⁵U распадается, как правило, на два осколка с массовыми числами A_L (осколок легкой группы) и A_H (осколок тяжелой группы). При исследовании переноса осколков деления тяжелой группы ориентировались на изотоп ¹⁴⁰Ba₅₆. В качестве наиболее вероятного осколка легкой группы принят средний изотоп из трех наиболее вероятных, а именно ⁹⁴Y₃₉. Энергия осколка деления ¹⁴⁰Ba₅₆ составляет E_H = 66,7 МэВ, энергия осколка деления ⁹⁴Y₃₉ E_L = 101,5 МэВ. Энергия альфа-частицы была принята равной E_α = 5,593 МэВ (распад изотопа ²³⁸Pu).

Для расчета энергетических потерь альфа-частицы и осколков деления использована методика, представленная в работе [3]. Согласно этой методике массовая тормозная способность вещества представляется суммой из составляющих энергетических потерь на ионизацию и возбуждение молекул среды S_{i1}, на образование квазисвязанных состояний при соударении иона с атомами среды S_{i2} и на упругие соударения иона с атомами среды S_n. Энергетические потери на ионизацию рассчитываются по модифицированной формуле Бете. Для расчета энергетических потерь на образование квазисвязанных состояний используется модифицированная формула теории LSS, предложенная в работе [4]. Расчет энергетических потерь при упругих процессах рассеяния осуществляется по формуле работы [5].

В табл. 4 для начальных энергий рассматриваемых ионов (наиболее вероятных осколков деления легкой и тяжелой групп и альфа-частиц, представленных ионами гелия) приведены расчетные значения по энергетическим потерям s и возможным пробегам R в материалах слоев МДМ-структур. Дополнительно был проведен расчет энергетических потерь и пробегов по программе SR, входящей в пакет SRIM (версия 2006 г.) [6]. Полученные по программе SR значения также приведены в табл. 4. Следует учитывать, что методика [3] позволяет получать линейные пробеги ионов, а программа SR — проективные пробеги, значения которых меньше линейных.

Первичные заряженные частицы обладают высокими значениями пробегов по сравнению с толщинами слоев. При прохождении в слое энергия частицы уменьшается незначительно, и распределение энергетических потерь по толщине слоя от

Средние энергетические потери и пробеги ионов в Al, Al₂O₃ и W

Ион, энергия, МэВ	Al		Al ₂ O ₃		W		Источник, откуда был взят метод расчета
	s, кэВ/нм	R, мкм	s, кэВ/нм	R, мкм	s, кэВ/нм	R, мкм	
⁴ He ₂ , 5,593	0,158 0,152	29,1 25,16	0,226 0,248	19,77 15,36	0,347 0,446	15,71 9,28	[3] [6]
⁹⁴ Y ₃₉ , 101,5	9,5 10,34	14,7 15,4	13,42 14,65	10,1 9,57	24,69 29,9	6,65 5,86	[3] [6]
¹⁴⁰ Ba ₅₆ , 66,7	10,57 9,02	11,6 11,87	15,15 15,22	7,89 7,49	25,28 23,92	5,36 4,58	[3] [6]

ионов будет однородным. Для подтверждения данного заключения выполнен расчет распределения энергетических потерь в слоях для ионов ¹⁴⁰Ba₅₆, обладающих наименьшей удельной энергией (< 0,5 МэВ/а. е. м.*). Для расчета использована программа TRIM, входящая в пакет SRIM. Эта программа дает возможность исследовать методом Монте-Карло прохождение ионов с учетом взаимодействий с элементами многослойных сложных мишеней. Представленные результаты получены усреднением по 2000 историям (или ионам).

Распределение энергии в МДМ-структурах от осколков деления определяется суммой распределений от осколков, падающих на мишень под разными углами. Чтобы проследить характер изменения распределения энергетических потерь с изменением угла входа в мишень были проведены расчеты таких распределений по программе TRIM для осколка ⁹⁴Y₃₉ при углах падения первичного иона на поверхность образца $\varphi = 0, 30, 60, 85^\circ$.

Как следует из результатов расчета, с увеличением угла падения иона энергетические потери в слоях возрастают. Это возрастание обусловлено следующим обстоятельством. Из-за небольших толщин слоев энергетические потери на единицу длины пути практически не меняются по толщине слоя как при нормальном падении иона на мишень, так и при большом угле падения. Но при угле падения $\varphi > 0$ расстояние, которое проходит ион в слое, увеличивается согласно выражению

$$\lambda(\varphi) = \lambda_0 / \cos(\varphi),$$

в котором λ_0 есть толщина слоя. Потери энергии иона в слое составят

$$S(\varphi) = s\lambda(\varphi) = s\lambda_0 / \cos(\varphi),$$

и, следовательно, зависимость энергетических потерь на единицу длины от угла падения будет определяться выражением

$$s(\varphi) = s / \cos(\varphi). \quad (1)$$

* а. е. м. — атомная единица массы.

Полученная угловая зависимость энергетических потерь позволяет вычислить суммарное распределение энергетических потерь с учетом равновероятного распределения ионов по углам. Число частиц, приходящееся на единицу элемента телесного угла $d\Omega = 2\pi \sin\varphi d\varphi$ при плотности потока частиц n есть $dn = 2\pi n \sin\varphi d\varphi$. Умножая $s(\varphi)$ на dn и интегрируя по всем углам, получим выражение, определяющее энергетическое распределение в слое. В расчете на один ион оно будет определяться выражением

$$S = \int_0^{\pi/2} [s / \cos(\varphi)] 2\pi \sin\varphi d\varphi / \int_0^{\pi/2} 2\pi \sin\varphi d\varphi. \quad (2)$$

Интеграл $\int \sin\varphi d\varphi = -\cos(\varphi)$, а $\int \sin\varphi d\varphi = -\cos(\varphi)$. Ограничиваемся интегрированием до $\varphi = 89,99^\circ$, при котором $\cos 89,99 = 1,745 \cdot 10^{-4}$. В результате приближенно получаем $S \approx 8,65s_0$. Таким образом, распределение энергетических потерь от всех ионов, летящих под разными углами, в расчете на один ион будет в 8,65 раз больше, чем от иона, падающего нормально на мишень. Введем некоторый эффективный угол φ_{eff} согласно равенству $1/\cos(\varphi_{eff}) = 8,65$. Из этого равенства получаем значение угла $\varphi_{eff} = 83,36^\circ$. В результате реальные распределения энергетических потерь с учетом углового распределения ионов можно рассчитать по программе TRIM, полагая, что все ионы летят под углом $\varphi_{eff} = 83,36^\circ$.

В табл. 5 приведены данные по средним потерям энергии в слоях МДМ-структур в расчете на одно деление.

В табл. 6 приведены данные по максимальной энергии вторичных электронов ϵ_{max} в зависимости от энергии первичного иона, а также возможные линейные пробеги электронов, обладающих энергией ϵ_{max} . Эти значения получены по программе, представленной в работе [7]. Но в общем спектре выбитых электронов с энергией ϵ число таких электронов невелико, поскольку вероятность выбивания электрона $P(\epsilon) \sim 1/\epsilon^2$, и, следовательно, спектр выбитых электронов $N_{BT}(\epsilon) \sim 1/\epsilon^2$. Направление движения выбитых электронов выглядит

Таблица 5

Средние потери энергии осколков деления в слоях образцов МДМ-структур (в расчете на одно деление)

S в слое вольфрама, кэВ/нм			S в слое оксида алюминия, кэВ/нм			S в слое алюминия, кэВ/нм		
$^{94}\text{Y}_{39}$	$^{140}\text{Ba}_{56}$	Y + Ba	$^{94}\text{Y}_{39}$	$^{140}\text{Ba}_{56}$	Y + Ba	$^{94}\text{Y}_{39}$	$^{140}\text{Ba}_{56}$	Y + Ba
258,635	206,91	465,543	126,7	113,9	240,6	89,44	78,023	167,463

Таблица 6

Максимальная энергия выбитого первичным ионом электрона, линейные пробеги и средние потери энергии

Энергия, иона, МэВ/а.е.м.	Максимальная энергия ε_{max} , кэВ	Линейные пробеги и потери энергии					
		Al		Al_2O_3		W	
		R_e , нм	s_e , эВ/нм	R_e , нм	s_e , эВ/нм	R_e , нм	s_e , эВ/нм
1,5 (He)	3,26	218	10	151,4	14	75,2	30,9
1,0 ($^{94}\text{Y}_{39}$)	2,16	114,3	12	78,5	17,5	41,9	38,6
0,5 ($^{140}\text{Ba}_{56}$)	1,08	37,9	18,9	25,6	28	17,8	54

следующим образом. Электроны с высокой энергией распространяются вдоль движения первичного иона с небольшим углом отклонения от траектории иона. С уменьшением энергии выбитого электрона угол отклонения возрастает и стремится к 90° . Высокоэнергетические вторичные электроны создают дополнительные ионизации и образуют третичные электроны со спектром также $N_{\text{тр}}(\varepsilon) \sim 1/\varepsilon^2$.

Оптимизация состава источников тока

Оптимизацию состава источников тока, основой которых являются тонкослойные МДМ-структуры, проводили с учетом эмиттерных и коллекторных свойств различных металлов, удельных сопротивлений диэлектриков и способов изготовления МДМ-структур. Наилучшими эмиттерными свойствами обладают тяжелые металлы, наилучшими коллекторными свойствами — легкие металлы. На предыдущем этапе работ [2] были выявлены особенности получения слоев вольфрама (тяжелый металл) методом электронно-лучевого напыления. Особенности связаны с наличием примесей углерода в вольфраме, которые приводят к образованию углеродных проводящих каналов, а также свойствами оксида вольфрама WO_3 , который может присутствовать в качестве переходного слоя на границе слоев W и Al_2O_3 . В связи с этим сопротивление образцов, в которых ближайшим к подложке был слой из алюминия, составляет несколько сотен омов (см. также табл. 1) при расчетном сопротивлении порядка 10 ГОм.

Для решения проблемы низкого сопротивления МДМ-структур слой вольфрама может быть заменен на слой золота. Проведены напыления тонких слоев из алюминия, оксида алюминия и золота с использованием наиболее распространенных методов напыления: электронно-лучевого, магнетронного ионно-плазменного и ионного резистивного напыления (установки L-560Q (Leybold-Heraeus), Булат-6 и JFC 1100). Выяснено, что

МДМ-структуры с требуемыми характеристиками (толщина слоев порядка 10 нм и сопротивление порядка 1 ГОм) могут быть изготовлены методами электронно-лучевого напыления и магнетронного ионно-плазменного напыления.

В качестве диэлектрика оптимальным материалом является Al_2O_3 , который обладает наибольшим удельным сопротивлением (до 10^{16} Ом·см) и технологичен при изготовлении тонких слоев.

Анализ полученных результатов

Анализ полученных экспериментальных и расчетных результатов позволяет сделать следующие выводы.

1. Число вторичных электронов в МДМ-структуре с толщиной слоя вольфрама, оксида алюминия и алюминия 10, 100 и 10 нм соответственно (слой алюминия был напылен первым), которые выходят из слоя алюминия и приходят в слой вольфрама при облучении осколками деления, по данным эксперимента составляет 144 в расчете на один осколок деления. Для МДМ-структуры, в которой первым напылен слой алюминия, число вторичных электронов на один осколок составляет примерно 400, что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными по выходу вторичных электронов из тонких пленок тяжелых металлов (порядка 500 электронов на один осколок).

2. Число вторичных электронов в МДМ-структуре с толщиной слоя вольфрама, оксида алюминия и алюминия 10, 100 и 10 нм соответственно (слой вольфрама напылен первым), которые выходят из слоя алюминия и приходят в слой вольфрама при облучении альфа-частицами с энергией 2,5 МэВ, по данным эксперимента составляет 2,4 в расчете на одну альфа-частицу, т. е. в 60 раз меньше, чем при облучении осколками деления. Согласно теоретическим данным энергетические потери на единицу длины в алюминии для осколков деления и альфа-

частиц различаются тоже в 60 раз, а согласно другим экспериментальным данным — в 50 раз.

3. Ток в МДМ-структуре практически линейно зависит от плотности потока альфа-частиц и практически не зависит от их энергии. Линейная зависимость от плотности потока альфа-частиц рассматривается как критерий достоверности экспериментальных данных. Отсутствие зависимости тока от энергии альфа-частиц подтверждается теоретическими данными, согласно которым число вторичных электронов, выходящих из данного вещества, определяется типом первичной заряженной частицы и не зависит от ее энергии.

4. Ток в МДМ-структуре при облучении осколками деления практически не изменяется при изменении толщины слоя вольфрама от 10 до 30 нм, изменении толщины слоя оксида алюминия от 100 до 50 нм, изменении толщины слоя вольфрама от 10 до 20 нм. Это согласуется с теоретическими данными по пробегам вторичных электронов в веществе. В слоях вольфрама и алюминия толщиной более 10 нм практически наступает равновесие между числом рожденных и поглощенных вторичных электронов. Оптимальная толщина слоя вольфрама (золота) как эмиттера и алюминия как коллектора составляет 10 нм, оптимальный материал эмиттера — золото. Оптимальная толщина слоя оксида алюминия как диэлектрика должна быть уточнена дополнительно после изготовления МДМ-структур $\text{Au}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Al}$ оптимальным методом и определения сопротивления этих образцов. На данный момент сопротивление МДМ-структур $\text{W}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Al}$, в которых первым напылен слой вольфрама, составляет 0,2...0,3 ГОм, что ниже расчетного сопротивления (порядка 10 ГОм). Сопротивление определяет напряжение в МДМ-структуре при облучении первичными заряженными частицами. Необходимо учитывать также возможный поверхностный ток утечки между металлическими слоями. Для изучения этого эффекта в методических целях целесообразно изготовить МДМ-структуры с другими площадями слоев, а также с "толстым" диэлектриком — порядка 1 мкм.

5. На основе данных по энергетическим потерям первичных заряженных частиц в веществе можно оценить число слоев в многослойной МДМ-структуре. Из табл. 5 следует, что потери энергии осколка деления со средней массой в МДМ-структуре, включающей в себя слой вольфрама, алюминия и два слоя оксида алюминия толщиной 10 нм каждый, составляет 665 кэВ. Средняя энергия осколка деления составляет около 80 МэВ. Отсюда следует, что при перпендикулярном падении осколка деления на МДМ-структуру число МДМ-структур составит $84 \text{ МэВ}/665 \text{ кэВ} \approx 125$. Оцененное число слоев металла в многослойном источнике составляет 250 (по 125 слоев эмиттера и

коллектора) при облучении осколками деления и около 1000 слоев при облучении альфа-частицами. Число слоев диэлектрика равно числу слоев металла. Аналогично при перпендикулярном падении альфа-частицы на МДМ-структуру число МДМ-структур составит $5,59 \text{ МэВ}/10,9 \text{ кэВ} \approx 500$. Оцененное число слоев металла в многослойном источнике составляет 1000 (по 500 слоев эмиттера и коллектора), число слоев диэлектрика равно числу слоев металла.

Заключение

На данном этапе работ по созданию источников тока, основанных на прямом преобразовании ядерной энергии в электрическую с использованием эмиссии вторичных электронов, проведена оптимизация состава и размеров источников тока с использованием расчетных и экспериментальных методов.

Следующим этапом является создание и исследование многослойных источников тока, которые содержат не одну МДМ-структуру, а несколько десятков или сотен МДМ-структур. На этом этапе предполагается решение следующих задач:

- изготовление многослойных МДМ-структур с оптимальными параметрами, исследование характеристик многослойных МДМ-структур;
- экспериментальные исследования радиационной стойкости МДМ-структур с требуемым составом и параметрами;
- изготовление образца источника тока, включающего в себя тонкослойный источник первичных заряженных частиц и многослойную МДМ-структуру, исследование характеристик образца источника тока.

Список литературы

1. Ануфриенко В. Б., Крыжановский Б. В., Михайлова А. М., Палагушкин А. В., Сигейкин Г. И., Сомов И. Е., Чернов В. А. Использование сверхмногослойных (СМС) наноструктур для прямого преобразования ядерной энергии в электрическую // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 8. С. 30—38.
2. Палагушкин А. Н., Прудников Н. В., Сергеев А. П., Сигейкин Г. И., Чернов В. А. Изготовление и исследования свойств наноструктур $\text{W}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Al}$ для прямого преобразования ядерной энергии в электрическую с использованием эмиссии вторичных электронов // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 11. С. 2—9.
3. Митерев А. М. Энергетические потери и пробеги тяжелых ионов в аморфных средах // Химия высоких энергий. 1996. Т. 30. № 6. С. 414.
4. Sugiyama H. Electronic stopping power formula for intermediate energies. Radiat // Eff. 1981. V. 56. N 2. P. 205.
5. Мартыненко Ю. В. О радиационном повреждении кристаллов при облучении атомными частицами // Физика твердого тела. 1969. Т. 11. № 7. С. 320.
6. Ziegler J. F. The Stopping and Range of Ions in Matter, SRIM. 2006.
7. Митерев А. М. Энергетические потери и линейные пробеги электронов в аморфных средах // Химия высоких энергий. 1996. Т. 30. № 2. С. 98.

УДК 621.315.592

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 Томский государственный университет, Томск,
e-mail vav@elefot.tsu.ru

² Московский государственный институт
радиотехники, электроники и автоматики
(технический университет),
e-mail n.kulchitsky@gmail.com, a.melnikov@mirea.ru

ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НА ВНУТРЕНнюю КВАНТОВую ЭФФЕКТИВНОСТЬ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ КВАНТОВЫХ ЯМ InGaN/GaN

Поступила в редакцию 11.05.2011

Проанализированы способы определения внутренней квантовой эффективности светоизлучающих структур на основе квантовых ям InGaN/GaN. Рассмотрены рекомбинационные свойства структур на основе квантовых ям InGaN/GaN, а также влияние дислокаций на внутреннюю квантовую эффективность таких светоизлучающих структур.

Ключевые слова: внутренняя квантовая эффективность, нитриды III группы, квантовые ямы, светоизлучающие структуры, дислокации

Введение

Одним из практически важных свойств полупроводников с прямой запрещенной зоной является свечение в ответ на возбуждение при электрической инжекции неосновных носителей заряда. В частности, излучение света при электрической инжекции неосновных носителей заряда (электролюминесценция) используется при создании светодиодов. Использование в светоизлучающих структурах квантовых ям (КЯ) позволяет локализовать носители заряда в тонком слое активной области, что повышает вероятность рекомбинации и сводит до минимума поглощение излучения в полупроводниковой структуре, обеспечивая тем самым высокую внешнюю квантовую эффектив-

ность. Тройные соединения InGaN используют в основном для создания квантовых ям, до некоторой степени напряженных в зависимости от уровня фазовой сегрегации, в активных областях светодиодов и лазеров, которые могут излучать в ультрафиолетовом, голубом и зеленом спектральных диапазонах. Традиционно активная область светодиодов представляет собой последовательность нескольких квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ толщиной 2–3 нм, разделенных барьерами GaN. Тонкий слой InGaN, с одной стороны, является демпфером между $p\text{-AlGaIn}$ и $n\text{-GaIn}$, сводя к минимуму рассогласование решеток, а с другой стороны, формирует квантовую яму, где происходит эффективная излучательная рекомбинация.

Важнейшей характеристикой светодиода является внутренняя квантовая эффективность, которая определяется соотношением процессов излучательной и безызлучательной рекомбинации. Рекомбинационные процессы, происходящие с испусканием фотонов, называются излучательной рекомбинацией. Рекомбинационные процессы, происходящие без испускания фотонов (например, с участием состояний дефектов в полупроводниках с прямой запрещенной зоной или Оже-процессов), называются безызлучательной рекомбинацией, в этом случае происходит обмен энергией с решеткой в виде теплообмена посредством эмиссии фононов.

Цель данной работы — анализ методов определения внутренней квантовой эффективности светоизлучающих структур на основе КЯ InGaN/GaN, а также влияния плотности дислокаций на внутреннюю квантовую эффективность таких структур.

Внутренняя квантовая эффективность и рекомбинационные свойства

Внутренняя квантовая эффективность (IQE) — это отношение числа излученных фотонов к числу электронов, введенных в устройство. Внешняя квантовая эффективность $\eta_{\text{внеш}}$ (EQE) связана с внутренней квантовой эффективностью $\eta_{\text{внутр}}$ и эффективностью выхода излучения $\eta_{\text{вых}}$ следующим соотношением [1]:

$$\eta_{\text{внеш}} = \eta_{\text{внутр}} \cdot \eta_{\text{вых}} \quad (1)$$

При анализе рекомбинационных процессов в КЯ InGaN/GaN широко используется ABC-модель [2, 3]. В этой модели учитывается, что при бипо-

лярном возбуждении скорость рекомбинации Шокли—Рида пропорциональна первой степени концентрации электронов в квантовой яме, скорость излучательной рекомбинации — второй степени концентрации, а скорость Оже-рекомбинации — третьей степени концентрации. Согласно ABC-модели

$$\eta_{\text{внеш}} = \frac{Bn^2}{An + Bn^2 + Cn^3 + f(n)} \eta_{\text{внут}} \quad (2)$$

где параметры A , B и C — коэффициенты, характеризующие мономолекулярную рекомбинацию (рекомбинацию Шокли—Рида), бимолекулярную (излучательную) рекомбинацию и Оже-рекомбинацию, соответственно; n — концентрация носителей; $f(n)$ характеризует утечку носителей.

При низких уровнях возбуждения в знаменателе выражения (2) часто можно пренебречь слагаемыми, характеризующими Оже-рекомбинацию носителей заряда в квантовой яме [2]. При таком приближении проведены исследования процессов рекомбинации, происходящие в светоизлучающей структуре $n\text{-GaN}/\text{In}_{0,13}\text{Ga}_{0,87}\text{N}/p\text{-Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/p\text{-GaN}$, выращенной методом газовой фазной эпитаксии с участием металлоорганических соединений (МОСГФЭ) на сапфировой подложке (c -плоскость) [2]. Рекомбинационные процессы, происходящие в активной области светоизлучающих структур при таком приближении, схематически представлены на рис. 1. Активная область состояла из пяти периодов слоев InGaN толщиной 2,4 нм и барьерных слоев GaN , легированных кремнием, толщиной 7,5 нм. Структуры имели размеры 200×200 мкм и характеризовались максимумом излучения на длине волны 440 нм. Отмечено, что представление в виде произведения $A \cdot n$ для мономолекулярной безызлучательной рекомбинации верно только при одинаково высоком уровне инжекции в активную область электронов и дырок. Более точное выражение для слагаемого, характеризующего мономолекулярную рекомбинацию, должно включать умножение на экспонен-

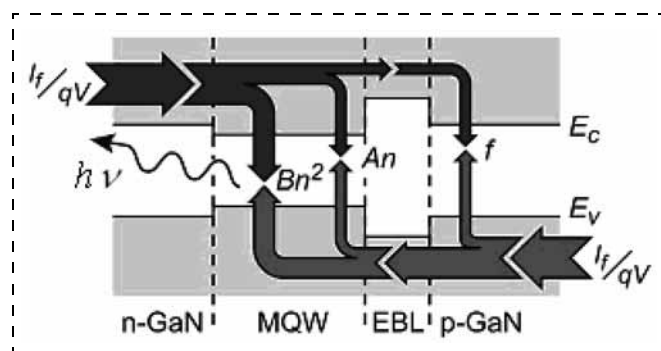


Рис. 1. Схематическое представление трех рекомбинационных механизмов в светоизлучающих структурах с квантовой ямой InGaN/GaN (I_f — инжекционный ток, f — утечка носителей заряда; MQW — множественные квантовые ямы, V — напряжение смещения, q — заряд электрона, EBL — слой AlGaIn , блокирующий электроны) [2]

ту, причем для различных исследованных образцов значения экспоненты составляли 1,2 и 0,76 [2].

На рис. 2, а в предположении, что $B = 10^{-10}$ см³/с, рассчитаны зависимости от значения прямого тока скоростей излучательной и мономолекулярной безызлучательной рекомбинации, а также и скорости утечки носителей из квантовой ямы. Обнаружено, что при малых прямых токах доминирует слагаемое An в выражении (2), а при больших прямых токах слагаемое, характеризующее утечку, дает существенный вклад в полную скорость рекомбинации (51,5 % при 100 мА).

В дальнейшем ABC-модель была дополнена при разложении слагаемого, характеризующего утечку, в ряд Тейлора [4]. Так, слагаемое, определяющее утечку, может быть записано в виде

$$f(n) = \alpha n + \beta n^2 + \gamma n^3 + \delta n^4 + \varepsilon n^5 + \dots, \quad (3)$$

где α , β , γ , δ , ε — коэффициенты, соответствующие слагаемым ряда Тейлора первого, второго, третьего, четвертого и пятого порядков, соответственно. В этом случае полная скорость рекомбинации (R_{total}) может быть представлена в следующем виде:

$$R_{\text{total}} = A^*n + B^*n^2 + C^*n^3 + D^*n^4 + E^*n^5 + \dots, \quad (4)$$

где $A^* = A + \alpha$, $B^* = B + \beta$, $C^* = C + \gamma$, $D^* = \delta$, $E^* = \varepsilon$.

Теоретические и экспериментальные исследования рекомбинационных процессов и внутренней квантовой эффективности проведены в светоизлучающих структурах с активной областью из пяти периодов КЯ InGaN/GaN (3 нм/12 нм), выращенных на сапфировой подложке (c -плоскость) [4]. Структуры имели максимум излучения при длине волны около 465 нм. При расчетах полагалось, что $B = 10^{-10}$ см³/с. Найдено, что $f(n)$ имеет слагаемые более высокого порядка, чем третий, которые дают вклад в общую скорость рекомбинации около 14 % при плотности тока 111 А/см² (рис. 2, а). Определен полный безызлучательный коэффициент третьего порядка (учитывающий процессы утечки и Оже-рекомбинации), который составил $8 \cdot 10^{-29}$ см⁶/с. Предполагается, что существенный вклад в безызлучательный коэффициент третьего порядка может вносить слагаемое γn^3 , характеризующее утечку носителей заряда из активной области, поскольку теоретическое значение коэффициента Оже-рекомбинации намного меньше ($10^{-31} \dots 10^{-34}$ см⁶/с). На рис. 2, б показана зависимость внутренней квантовой эффективности от концентрации носителей и аппроксимации в рамках различных моделей.

Для подтверждения вклада Оже-рекомбинации проведена оценка коэффициента Оже-рекомбинации в квантовых ямах $\text{In}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{N}/\text{GaN}$, излучающих на длине волны 407 нм, и выполнен расчет скорости рекомбинации для такой структуры при различных плотностях инжекционного тока [5]. Предполагался высокий уровень инжекции и равные концентрации электронов и дырок, которые намного превышали собственную концентрацию.

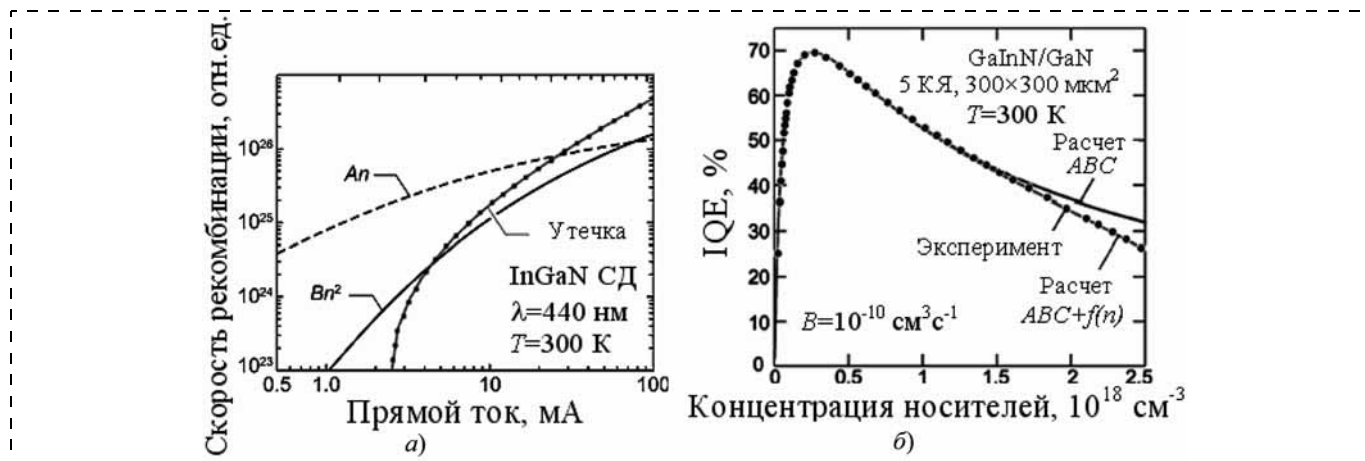


Рис. 2. Рассчитанные из экспериментальных данных зависимости составляющих полной скорости рекомбинации от значения прямого тока при плотности пронизывающих дислокаций в образце $5,7 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ [2] (а), а также зависимости внутренней квантовой эффективности от концентрации носителей заряда и аппроксимационные кривые, рассчитанные в рамках различных приближений [4] (б)

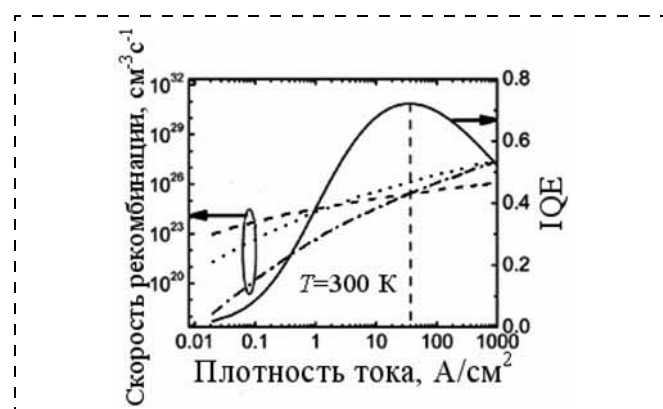


Рис. 3. Расчетные зависимости скорости рекомбинации Шокли-Рида (штриховая линия), излучательной рекомбинации (пунктирная линия) и Оже-рекомбинации (штрих-пунктирная линия) от плотности инжекционного тока [5]

Значение коэффициента A оценивалось по результатам измерений методом нестационарной спектроскопии глубоких уровней и составило $A = 10^7 \text{ с}^{-1}$. Значение коэффициента B , рассчитанное с учетом электрического поля спонтанной поляризации и поверхностных напряжений в активном слое, составило $2 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3/\text{с}$. Коэффициент Оже-рекомбинации C составил $1,5 \cdot 10^{-30} \text{ см}^6/\text{с}$ при 300 К, что хорошо согласуется со значениями $(1,4...2,0) \cdot 10^{-30} \text{ см}^6/\text{с}$, определенными из экспериментальных данных для одиночных слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0,09 < x < 0,15$) [5]. На рис. 3 приведены расчетные зависимости скоростей рекомбинации различных типов, а также внутренней квантовой эффективности от плотности тока. Из рис. 3 видно, что Оже-рекомбинацию необходимо учитывать при больших плотностях тока через светодиод. Пересечение кривых, характеризующих рекомбинации Шокли—Рида и Оже-рекомбинации, соответствует максимуму расчетной IQE.

Для измерения внутреннего квантового выхода светоизлучающих структур используют измерения фотолюминесценции (ФЛ) [6–9] или электролюминесценции (ЭЛ) [10, 11].

Простейшим и наиболее распространенным способом определения IQE является измерение фотолюминесценции в широком диапазоне температур [6]. При этом предполагается, что безызлучательная рекомбинация подавляется при достаточно низких температурах и для этого случая $\eta_{\text{внутр}} = 1$. Для определения IQE при комнатной температуре можно воспользоваться следующим соотношением [6, 10]:

$$\eta_{\text{внутр}}(T) = \frac{I_R(RT)}{I_R(LT)}, \quad (5)$$

где $I_R(RT)$, $I_R(LT)$ — интегральная интенсивность фотолюминесценции при комнатной и при низкой температуре, соответственно.

Предложено оценивать $\eta_{\text{внутр}}$ по виду температурной зависимости интенсивности фотолюминесценции [7]:

$$\eta_{\text{внутр}}(T) = I_R(T)/I_0 = \frac{1}{1 + \eta_0 e^{T/T_0}}, \quad (6)$$

где $I_R(T)$ — интегральная интенсивность фотолюминесценции; I_0 — интенсивность оптического возбуждения; $1/T_0 = 1/T_R + 1/T_{NR}$, $\eta_0 = \tau_R(T=0)/\tau_{NR}(T=0)$. В последних выражениях $\tau_R(T) = \tau(T=0)\exp(T/T_R)$ и $\tau_{NR}(T=0)\exp(-T/T_R)$ — излучательное и безызлучательное рекомбинационные времена жизни, соответственно. При этом для описания температурных зависимостей фотолюминесценции используются следующие параметры: T_0 — характеристическая температура и η_0 — параметр, характеризующий собственные безызлучательные потери. Предполагается, что $\eta_{\text{внутр}}$ при $T = 0 \text{ К}$ равна $1/1 + \eta_0$. Малое значение η_0 свидетельствует о высокой скорости излучательной рекомбинации. Значения T_0 и η_0 могут быть определены из зависимостей интегральной интенсивности

фотолюминесценции от температуры и мощности возбуждения.

Внутренняя квантовая эффективность может быть также определена из зависимости интегральной интенсивности фотолюминесценции от мощности возбуждения [9]. Для расчета $\eta_{\text{внутр}}$ использовалась ABC-модель рекомбинации, с учетом того, что при невысоком уровне возбуждения можно пренебречь слагаемым, характеризующим Оже-рекомбинацию. Скорость генерации носителей заряда и $\eta_{\text{внутр}}$ тогда определяются следующими выражениями:

$$G = R_{\text{total}} = An + Bn^2; \quad (7)$$

$$\eta_{\text{внутр}} = Bn^2 / (An + Bn^2) = Bn^2 / G. \quad (8)$$

Интегральная интенсивность фотолюминесценции может быть записана в следующем виде:

$$I_{PL} = \eta Bn^2, \quad (9)$$

где η — постоянная, определяемая объемом активной области и общей эффективностью сбора люминесценции. С помощью приведенных выше выражений (7–9) можно выразить скорость генерации через интегральную интенсивность фотолюминесценции:

$$G = \frac{A}{\sqrt{B\eta}} \sqrt{I_{PL}} + \frac{1}{\eta} I_{PL}. \quad (10)$$

Скорость генерации может быть рассчитана из экспериментальных параметров при использовании следующего выражения:

$$G = P_{\text{laser}}(1 - R)\alpha l / (A_{\text{spot}}\hbar\nu) = P_{\text{laser}}(1 - R)\alpha / (A_{\text{spot}}\hbar\nu), \quad (11)$$

где P_{laser} — пиковая оптическая мощность излучения, падающего на образец; $R = 18\%$ — коэффициент френелевского отражения от поверхности образца; $l = 12$ нм — общая толщина квантовых ям; $A_{\text{spot}} = 3,5 \cdot 10^{-3}$ мкм² — площадь поверхности образца, освещенная лазером; $\hbar\nu = 3,07$ эВ — энергия фотонов с длиной волны 405 нм и $\alpha = 5,4$ мкм⁻¹ — коэффициент поглощения квантовой ямы In_{0,13}Ga_{0,87}N на длине волны 405 нм [8]. На рис. 4 показана экспериментальная зависимость G от интенсивности ФЛ I_{PL} . Из рис. 4 видно, что плотность дислокаций существенно влияет на данную зависимость. Это определяется, прежде всего, влиянием плотности дислокаций на значение коэффициента безызлучательной рекомбинации A , что будет рассмотрено более подробно далее. Из параметров аппроксимирующей кривой можно определить коэффициенты $P_1 = A(B\eta)^{-1/2}$ и

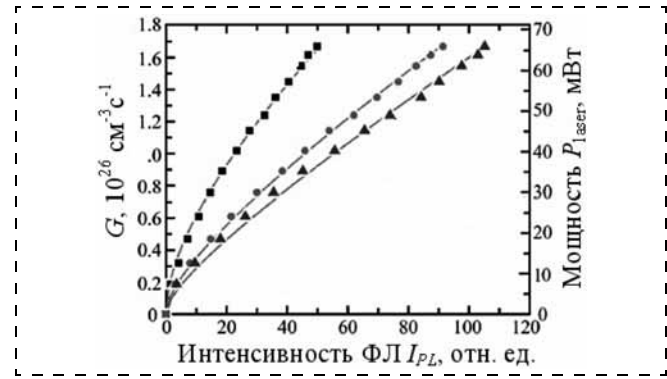


Рис. 4. Зависимость скорости генерации G от интегральной интенсивности ФЛ I_{PL} слоев СД InGaN/GaN, выращенных на шаблонах GaN на сапфире, и аппроксимирующие кривые. Черными квадратами показана зависимость для образца с плотностью пронизывающих дислокаций $5,7 \cdot 10^9$ см⁻², серыми кружками — $1,2 \cdot 10^9$ см⁻², серыми треугольниками — $5,3 \cdot 10^8$ см⁻² [9]

$P_2 = 1/\eta$. Исключая A из $P_1 = A(B\eta)^{-1/2}$ и пользуясь приведенными выше выражениями, можно получить

$$G = P_1 \sqrt{\eta} \sqrt{Bn} + (\sqrt{Bn})^2. \quad (12)$$

Решив это выражение относительно $\sqrt{Bn}$ и делая подстановку в выражение для внутренней квантовой эффективности (8), можно найти $\eta_{\text{внутр}}$. При сильном возбуждении, когда скорость генерации равна $1,7 \cdot 10^{26}$ см⁻³/с, внутренняя квантовая эффективность находится в диапазоне 31...64 % для образцов с различной плотностью дислокаций. Исключая η из двух коэффициентов P_1 и P_2 , можно найти значение $A(B)^{-1/2}$, а затем и коэффициент A (значение B можно принять равным 10^{-10} см³/с).

Для решения некоторых исследовательских задач достаточно построить зависимости $\eta_{\text{внутр}}$ в относительных единицах, что часто применяется на практике. Так, применение зависимости фотолюминесценции от температуры для определения $\eta_{\text{внутр}}$ предполагает, что значения эффективности поглощения, инжекции и экстракции не зависят от температуры [10]. Оценка $\eta_{\text{внутр}}$ светодиодов таким способом также предполагает, что $\eta_{\text{внутр}}$ при фотолюминесценции и электролюминесценции близки несмотря на фундаментальные различия между ФЛ и ЭЛ. Они различаются механизмом ввода носителей в квантовую яму, профилем зон, который изменяется при подаче смещения при ЭЛ (по сравнению с профилем без смещения при ФЛ), что вызывает результирующее изменение длины волны излучения, а также эффективной шириной ямы и степенью перекрытия волновых функций в полярных материалах, в которых проявляется квантово-размерный эффект Штарка.

При использовании методики определения $\eta_{\text{внутр}}$ при измерении электролюминесценции [10] для плотности тока $7,9 \text{ А/см}^2$ получено значение $\eta_{\text{внутр}}$, равное 43 % для светодиодов на основе InGaN/GaN (*c*-плоскость), излучающих на длине волны 443 нм. Недостатками данного метода является необходимость изготовления специальных образцов для измерений и возможные ошибки при численном моделировании коэффициента вывода излучения.

В целях анализа соотношений внутренней квантовой эффективности для светодиодов (при ФЛ и ЭЛ) проведены сравнительные исследования ультрафиолетовых светодиодов на основе InGaN/GaN, изготовленных на профилированных сапфировых подложках [11]. Использование профилированных подложек позволяет улучшить кристаллическое качество активной области светодиодов и снизить плотность дислокаций [11]. Образцы изготавливались методом МОСГФЭ при низком давлении и содержали 16 периодов слоев, состоящих из квантовых ям $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ толщиной 2 нм и барьеров из GaN толщиной 16 нм. Длина волны излучения составляла 400 нм при токе 20 мА. Исследованы зависимости $\eta_{\text{внутр}}$ в относительных единицах от тока для светодиодов, изготовленных на профилированных подложках и непрофилированных подложках; $\eta_{\text{внутр}}$ в относительных единицах определялась как отношение выходной оптической мощности к входному току.

На рис. 5 сравниваются $\eta_{\text{внутр}}$ в относительных единицах, определенные из измерений ФЛ и ЭЛ, при различных концентрациях носителей и температуре.

Видно, что $\eta_{\text{внутр}}$, определенное из измерений ФЛ, больше, чем $\eta_{\text{внутр}}$, определенное с помощью измерений ЭЛ [11]. Это свидетельствует о большей утечке носителей при инжекции с использованием источника тока, который приводит к неоднородному распределению дырок. Эффективность ЭЛ

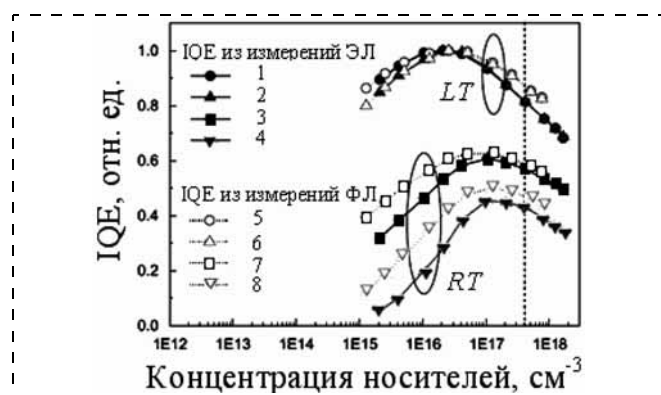


Рис. 5. Зависимости $\eta_{\text{внутр}}$ в относительных единицах, определенные с помощью ЭЛ (кривые 1–4) и ФЛ (кривые 5–8), от концентрации носителей при низких (LT) температурах (кривые 1, 2, 5, 6) и комнатной (RT) температуре (кривые 3, 4, 7, 8) для СД, выращенных на профилированных (кривые 1, 3, 5, 7) и непрофилированных (кривые 2, 4, 6, 8) подложках [11]

уменьшается быстрее при высокой концентрации инжектированных носителей. Светодиоды, изготовленные на профилированных подложках, имеют лучшие электролюминесцентные характеристики, чем светодиоды, изготовленные на непрофилированных подложках, вследствие лучшего качества эпитаксиальных слоев. Показано, что в отличие от $\eta_{\text{внутр}}$, определяемой из ФЛ, $\eta_{\text{внутр}}$, определяемая из ЭЛ, сильно зависит от эффективности инжекции носителей, особенно при низких температурах, когда к *p*–*n*-переходу приложено большое напряжение смещения.

Влияние дислокаций на внутреннюю квантовую эффективность

В настоящее время установлено, что эффективные светодиоды на основе нитридов группы III могут быть созданы при плотности дислокаций в активном слое InGaN до 10^{10} см^{-2} , в то время как плотность дислокаций, превышающая 10^4 см^{-2} , недопустима для светодиодов, созданных на основе других соединений групп III–V, например на основе (AlGa)As. Общеизвестно, что в сплавах InGaN может эффективно проходить излучательная рекомбинация при высокой плотности дислокаций вследствие флуктуаций состава In в активном слое InGaN, которые приводят к изменению профиля потенциала в плоскости активного слоя и изоляции носителей от безызлучательных рекомбинационных центров.

Для выявления влияния дислокаций на внутреннюю квантовую эффективность проведены измерения при комнатной температуре фотолюминесценции для множественных квантовых ям (МКЯ) InGaN/GaN, выращенных на шаблонах GaN-сапфир, при различной плотности пронизывающих дислокаций [9]. Внутренняя квантовая эффективность определялась из зависимости интегральной интенсивности ФЛ от мощности возбуждения. Плотность пронизывающих дислокаций изменялась за счет управления технологическими режимами при выращивании затравочного слоя. МКЯ-структуры, выращенные методом МОСГФЭ, имели пять квантовых ям $\text{In}_{0,13}\text{Ga}_{0,87}\text{N}$ толщиной 2,4 нм, которые были размещены между барьерами из GaN, легированного кремнием, толщиной 7,5 нм. Три изготовленных образца А, В и С на основе МКЯ $\text{In}_{0,13}\text{Ga}_{0,87}\text{N/GaN}$ имели плотность пронизывающих дислокаций $5,7 \cdot 10^9$, $1,2 \cdot 10^9$ и $5,3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$, соответственно. При сильном возбуждении, когда скорость генерации равна $1,7 \cdot 10^{26} \text{ см}^{-3}/\text{с}$ IQE составила 31, 55 и 64 % для образцов А, В и С, соответственно. На рис. 6, а представлены зависимости $\eta_{\text{внутр}}$ от концентрации носителей *n* для трех образцов при возбуждении лазерным излучением с $\lambda = 405 \text{ нм}$, а на рис. 6, б показана зависимость коэффициента безызлучательной рекомбинации *A* от плотности дислокаций.

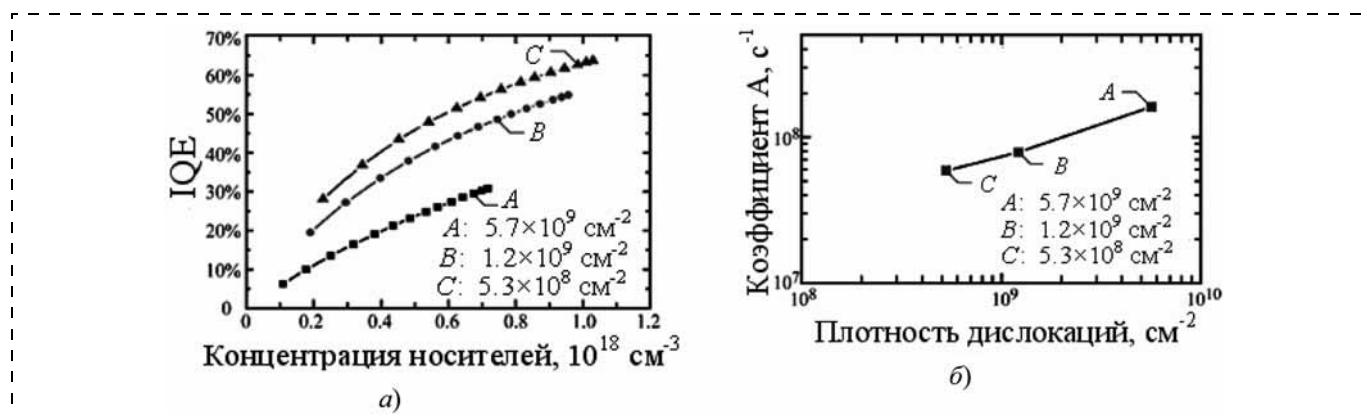


Рис. 6. Зависимость $\eta_{\text{внутр}}$ от концентрации носителей для образцов с различной плотностью дислокаций (а) и зависимость безызлучательного коэффициента A от плотности пронизывающих дислокаций (б) [9]

Как видно из рис. 6, а плотность пронизывающих дислокаций существенно влияет на эффективность МКЯ из InGaN/GaN [9]. Высокие значения $\eta_{\text{внутр}}$ можно объяснить, если предположить, что пронизывающие дислокации действуют как безызлучательные каналы, но при этом сильная пространственная локализация экситонов в структурах с квантовыми ямами препятствует их захвату дислокациями.

Процессы эпитаксиального латерального наращивания (*ELO*-процессы) в буферном слое GaN могут быть использованы для уменьшения плотности пронизывающих дислокаций [12], что позволяет определить влияние дислокаций на интенсивность излучения светодиодов. Исследованы зависимости относительной выходной мощности УФ светодиодов на основе InGaN, созданных на подложках из сапфира и *ELO*-подложках, от значения прямого тока. Известно, что GaN, выращенный на *ELO*-подложках, и GaN, выращенный на сапфире, имеют среднюю плотность дислокаций $7 \cdot 10^6$ и $1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, соответственно.

УФ светодиоды с длиной волны 380 нм на основе InGaN на *ELO*-подложке характеризуются повышением выходной мощности (на 25 %) по сравнению со светодиодами на основе InGaN на сапфире при токе 20 мА. Относительно небольшое повышение выходной мощности для последнего варианта светодиодов может быть объяснено флуктуациями состава сплава InGaN и, как следствие, локализацией носителей. Снижение доли InN вызывает уменьшение глубины локализованных энергетических состояний, что снижает эффективность локализации носителей заряда и способствует проявлению центров безызлучательной рекомбинации. Однако, когда мольная доля InN увеличивается до значения, соответствующего длине волны около 470 нм, эффективность вновь ухудшается, предположительно в связи с увеличением несоответствия решетки между буферным слоем GaN и излучательным слоем InGaN.

В светодиодах на основе InGaN имеются также дислокации несоответствия, которые локализованы на интерфейсе квантовой ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и GaN [13]. Эти дислокации действуют как безызлучательные центры рекомбинации и уменьшают квантовую эффективность. Но эти дислокации частично снимают механические напряжения в квантовых ямах, что уменьшает встроенные пьезоэлектрические поля, а следовательно, увеличивает оптический матричный элемент для излучательной рекомбинации, тем самым повышая квантовую эффективность. Для нитридных соединений III группы с низкосимметричной кристаллической решеткой типа вюрцита характерно наличие макроскопической поляризации, в том числе и в равновесии — спонтанной поляризации. Кроме того, нитриды III группы обнаруживают высокую для полупроводников пьезоэлектрическую поляризацию. Сильные пьезоэлектрические поля в гетероструктурах AlGaIn/InGaIn/GaN приводят к влиянию квантово-размерного эффекта Штарка. Пьезоэлектрическое поле практически полностью разделяет электроны и дырки в яме, подавляя тем самым излучательную рекомбинацию. При этом разность энергии между основными уровнями квантования электронов и дырок оказывается меньше, чем в квантовой яме такой же ширины в отсутствие поля, а также уменьшается вероятность излучательной рекомбинации вследствие уменьшения степени перекрытия волновых функций носителей. При низких плотностях дислокаций несоответствия (порядка 10^5 cm^{-2}) квантовая эффективность повышается более чем в 10 раз за счет снижения встроенного электрического поля. При больших плотностях дислокаций несоответствия они подавляют квантовую эффективность, поскольку создают дополнительный канал безызлучательной рекомбинации. Оптимальная плотность дислокаций несоответствия зависит от уровня инжекции и параметров квантовой ямы. Теоретический анализ степени релаксации напряжений на характери-

ки светоизлучающих структур на основе КЯ InGaN/GaN проведен, например, в работе [14].

Несмотря на высокую плотность дислокаций ($>10^8 \text{ см}^{-2}$), эффективность излучения светодиодов на основе нитридов достаточно высока, особенно при малых инжекционных токах и низком содержании In. Высокие излучательные характеристики светодиодов для синего или ближнего ультрафиолетового диапазона позволяют сделать предположение, что плотность дислокаций не полностью определяет характеристики таких светодиодов [15]. В целях определения роли дислокаций проведено моделирование процессов переноса носителей заряда в структурах InGaN/GaN. Использовалась система уравнений Пуассона, диффузионно-дрейфового уравнения и уравнения Шредингера для описания вертикального и латерального транспорта носителей относительно плоскости КЯ InGaN (с-плоскость) светоизлучающих диодов. При этом применялся двумерный формализм рассеяния при использовании метода Монте-Карло для учета процессов рассеяния носителей на полярных оптических фононах, акустических фононах, на неровностях границы раздела, на неоднородностях состава, на заряженных дислокациях, а также электрон-электронного рассеяния. Это позволило определить подвижность носителей, а также исследовать процессы диффузии, захвата и рекомбинации носителей. В предложенной модели носители диффундируют в латеральном направлении, пока не произойдет излучательная рекомбинация, если до этого носители не будут захвачены дефектами (дислокациями). В реальных приборах расстояния между дефектами распределены случайным образом, что учитывалось в расчете при использовании метода Монте-Карло.

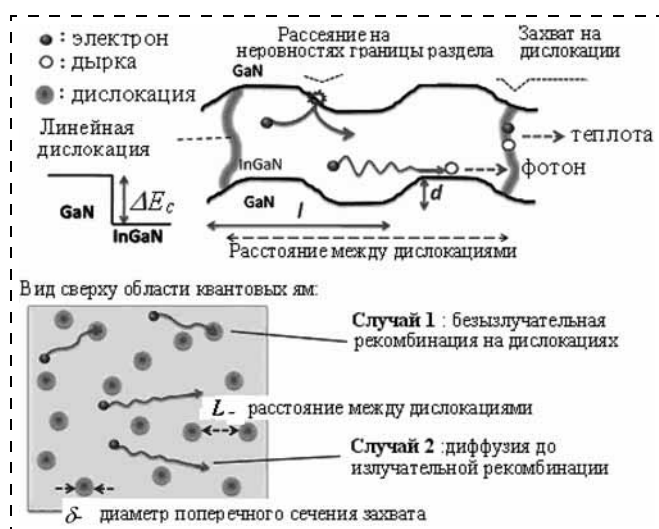


Рис. 7. Схема рассеяния на неровностях границы раздела, а также механизмов излучательной и безызлучательной рекомбинации. Диаграмма также показывает определение потенциала неровности в квантовых ямах InGaN [15]

При моделировании (рис. 7) учитывалось, что электроны диффундируют случайным образом в плоскости квантовых ям в течение рассчитанного излучательного времени жизни. В процессе диффузии при попадании электрона в поперечное сечение дислокационных дефектов происходит захват электронов на дислокации и их безызлучательная рекомбинация. На рис. 7 также показано, как определяется длина неровностей границы раздела l , их ширина d , разрыв зоны проводимости ΔE_c . Размер неровностей на границе раздела и флуктуации потенциала оказывают значительное влияние на подвижность носителей и ограничивают диффузию, при этом ширина квантовой ямы W принималась равной 3 нм.

В результате расчетов найдено, что максимальная эффективность достигается, когда плотность носителей в квантовой яме n_{2D} близка к $8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, поскольку в этом случае влияние квантово-размерного эффекта Штарка сводится к минимуму вследствие экранирования поля носителями. Рассчитаны зависимости подвижности и излучательного времени жизни от содержания индия. Если граница раздела совершенна, то подвижность при большом составе индия выше вследствие меньшего значения эффективной массы электрона. При этом рассеяние на неоднородностях сплава при большом содержании In будет препятствовать значительному увеличению подвижности. Если граница раздела несовершенна, то подвижность быстро уменьшается при увеличении неровностей границы раздела, особенно для случая высокого состава In. Уменьшение подвижности составляет 20...80 % при больших неровностях в зависимости от содержания In. Кроме того, сильное пьезоэлектрическое поле прижимает носители к границе раздела и ее неровности начинают играть более важную роль.

Также проведены расчеты латеральной диффузионной длины при разном содержании индия. Установлено, что при содержании индия, равном 10 %, которое типично для светодиодов, действующих в ультрафиолетовом и синем диапазоне, диффузионная длина близка к 1 мкм вследствие слабого проявления квантово-размерного эффекта Штарка (QSCE) и малого излучательного времени жизни. Поэтому для такого содержания можно реализовать высокие значения IQE, если плотность дислокаций менее 10^8 см^{-2} . Однако при увеличении содержания In до значений, превышающих 20 %, что типично для светоизлучающих структур, действующих в зеленом и желтом диапазоне, излучательное время жизни значительно увеличивается вследствие квантово-размерного эффекта Штарка. Поэтому общая диффузионная длина становится больше, чем 2 мкм, и в структуре будут доминировать безызлучательные процессы, если плотность дислокаций достаточно велика. Например, для случая, когда содержание In близко

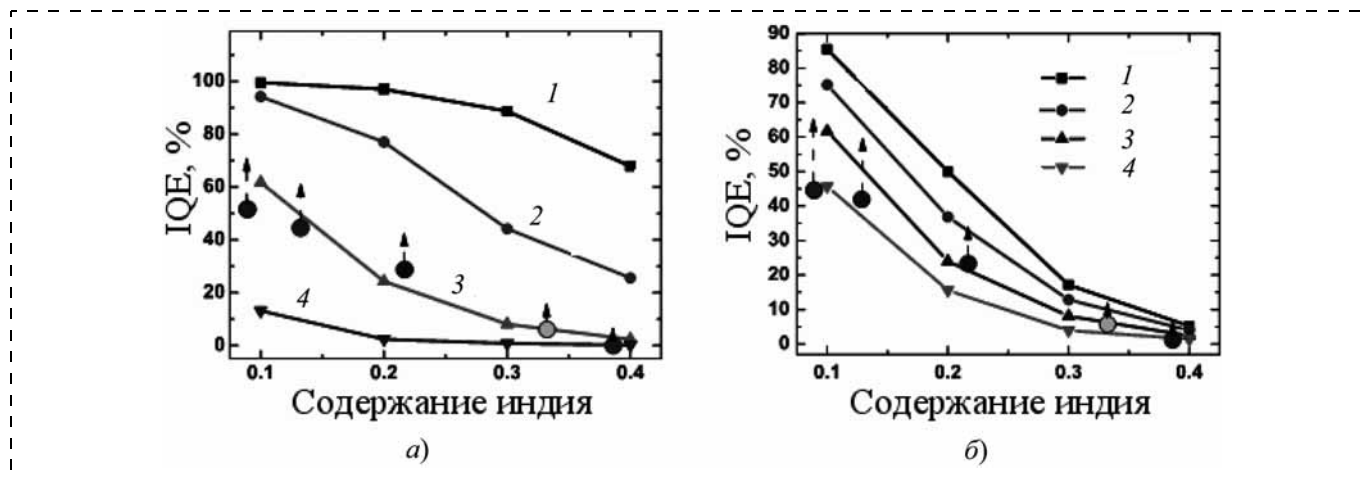


Рис. 8. Расчетные зависимости максимальной внутренней квантовой эффективности от состава индия для различных плотностей дислокаций (кривая 1 — 10^6 см^{-2} ; 2 — 10^7 см^{-2} ; 3 — 10^8 см^{-2} ; 4 — 10^9 см^{-2}) (а) и для различных диаметров поперечного сечения захвата δ (кривая 1 — 0,5 нм; 2 — 1 нм; 3 — 2 нм; 4 — 4 нм) (б). Кружками представлены экспериментальные значения внешней квантовой эффективности, а стрелками показан возможный диапазон значений внутренней квантовой эффективности в предположении, что эффективность вывода излучения составляет 70 % [15]

к 40 %, диффузионная длина превышает 10 мкм без рассеяния на неровностях, при этом плотность дислокаций не должна превышать 10^6 см^{-2} для минимизации влияния безызлучательных процессов. Кроме того, найдено, что при очень неровной границе раздела, когда происходит кластеризация индия в структуре, диффузионная длина и скорость безызлучательных процессов уменьшаются. Это частично объясняет причину того, почему приборы могут излучать при высоком содержании индия и большой плотности дислокаций. Однако внутренняя квантовая эффективность в этом случае будет очень низкой.

На рис. 8, а показаны расчетные зависимости внутренней квантовой эффективности от содержания индия при различных плотностях дислокаций, при этом принято, что $n_{2D} = 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, $l = 7 \text{ нм}$, $d = 3 \text{ нм}$, а диаметр поперечного сечения захвата носителей дефектами $\delta = 2 \text{ нм}$. Видно, что если улучшить качество изготовления приборов, а плотность дислокаций при этом снизится до 10^6 см^{-2} , то IQE может быть значительно увеличена. Например, IQE может быть повышена до 90 % при содержании индия, равном 30 %, и до 70 % при содержании индия, равном 40 %, для плотности дислокаций, близкой к 10^6 см^{-2} . Для обеспечения высоких характеристик светодиодов, излучающих в зеленом или желтом диапазонах, необходимо снижать плотность дислокаций до значений, не превышающих 10^5 см^{-2} . Для типичной плотности дислокаций (10^8 см^{-2}) наблюдается хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных в предположении, что среднее значение поперечного сечения захвата составляет 2 нм.

Результаты расчета зависимости IQE от содержания индия при различных значениях поперечного сечения захвата носителей дислокациями в

диапазоне от 0,5...4 нм приведены на рис. 8, б (плотность дислокаций составляла 10^8 см^{-2} , $l = 7 \text{ нм}$, $d = 3 \text{ нм}$). Из рис. 8, б видно, что при изменении поперечного сечения захвата в рассматриваемом интервале при $n_{2D} = 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ расчетная IQE изменяется от 85 до 45 % при содержании индия, равном 10 %. Для случая содержания In, равного 40 %, IQE уменьшится от 5 до 1 % при увеличении поперечного сечения захвата носителей дислокациями.

Заключение

Таким образом, внутренняя квантовая эффективность является важной характеристикой светоизлучающих структур на основе квантовых ям InGaN/GaN. Точное определение внутренней квантовой эффективности является достаточно сложной задачей, хотя разработаны методы ее оценки с помощью измерений фотолюминесценции и электролюминесценции. Показано, что значения внутренней квантовой эффективности, полученные из измерений фотолюминесценции и электролюминесценции, несколько различаются, но определение внутренней квантовой эффективности из измерений фотолюминесценции позволяет делать качественные оценки о влиянии разных факторов на характеристики светодиодов. Наибольшие значения внутренней квантовой эффективности реализованы для светоизлучающих структур, действующих в голубом и ближнем ультрафиолетовом диапазонах.

Общепризнано, что центрами безызлучательной рекомбинации в светоизлучающих структурах на основе квантовых ям InGaN/GaN являются пронизывающие дислокации. Экспериментально показано, что уменьшение плотности пронизывающих дислокаций приводит к увеличению внут-

ренней квантовой эффективности (например, от 31 до 64 % при уменьшении плотности дислокаций от $5,7 \cdot 10^9$ до $5,3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ для структур на основе квантовых ям $\text{In}_{0,13}\text{Ga}_{0,87}\text{N}/\text{GaN}$), а также к уменьшению безызлучательного коэффициента рекомбинации. В то же время установлено, что достаточно эффективные светодиоды на основе квантовых ям InGaN/GaN могут быть созданы при относительно высокой плотности дислокаций. Отметим, что плотность дислокаций, превышающая 10^4 см^{-2} , недопустима для светодиодов, созданных, например, на основе $(\text{AlGa})\text{As}$. Это свидетельствует о том, что механизм формирования внутренней квантовой эффективности в светоизлучающих структурах на основе квантовых ям InGaN/GaN более сложен и включает следующие, влияющие на $\eta_{\text{внутр}}$, эффекты: локализация экситонов, наличие спонтанной и пьезоэлектрической поляризации, квантово-размерный эффект Штарка и рекомбинационный канал посредством дислокаций. Следует отметить, что определенная плотность дислокаций в светоизлучающих структурах на основе квантовых ям InGaN/GaN желательна для снижения роли квантово-размерного эффекта Штарка, который уменьшает вероятность излучательной рекомбинации вследствие снижения степени перекрытия волновых функций носителей.

Работа была выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, договор № 13.G25.31.0042, постановление 218 Правительств РФ, а также в рамках АВЦП "Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2011 годы)" (рег. № 2.1.2/12459), ФЦП "Научные и научно-инновационные кадры инновационной России" (проекты ГК 02.740.11.0444, ГК 02.740.11.0562) и проектом по гранту НШ-4297.2010.2.

Список литературы

1. Wang J., Wang L., Zhao W., Hao Z., Luo Y. Understanding efficiency droop effect in InGaN/GaN multiple-quantum-well blue light-emitting diodes with different degree of carrier localization // *Appl. Phys. Lett.* 2011. Vol. 97. P. 201112-(1–3).
2. Schubert M. F., Chhajed S., Kim J. K., Schubert E. F., Koleske D. D., Crawford M. H., Lee S. R., Fischer A. J., Thaler G., Banas M. A. Effect of dislocation density on efficiency droop in GaInN/GaN light-emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 91. P. 231114–231116.
3. Shen Y. C., Mueller G. O., Watanabe S., Gardner N. F., Munkholm A., Krames M. R. Auger recombination in InGaN measured by photoluminescence // *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 91. P. 141101–141103.
4. Dai Q., Shan Q., Wang J., Chhajed S., Cho J., Scubert E. F., Crawford M. H., Koleske D. D., Kim M.-H., Park Y. Carrier recombination mechanisms and efficiency droop in GaInN/GaN light-emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* 2010. Vol. 97. P. 133507-(1–3).
5. Zhang M., Bhattacharya P., Singh J., Hinckley J. Direct measurement of auger recombination in $\text{In}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells and its impact on the efficiency of $\text{In}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{N}/\text{GaN}$ multiple quantum well light emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* 2009. Vol. 95. P. 201108-(1–3).
6. Lee J. W., Tak Y., Kim J.-Y., Hong H.-G., Chae S., Min B., Jeong H., Yoo J., Kim J.-R., Park Y. Growth of high-quality InGaN/GaN LED structures on (111) Si substrates with internal quantum efficiency exceeding 50 % // *Journal of Crystal Growth*. 2011. Vol. 315. P. 263–265.
7. Sasaki A., Shibakawa S.-I., Kawakami Y., Nishizuka K., Narukawa Y., Mukai T. Equation for internal quantum efficiency and its temperature dependence of luminescence, and application to $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ multiple quantum wells // *Jap. Journal of Applied Physics*. 2006. Vol. 45, № 11. P. 8719–8723.
8. Lin E. Y., Chen C. Y., Lay T. S., Peng Z. X., Lin T. Y., Wang T. C., Tsay J. D. Optical polarization and internal quantum efficiency for InGaN quantum wells on a-plane GaN // *Physica B*. 2010. Vol. 405. P. 1857–1860.
9. Dai Q., Schubert M. F., Kim M. H., Kim J. K., Schubert E. F., Koleske D. D., Crawford M. H., Lee S. R., Fischer A. J., Thaler G., Banas M. A. Internal quantum efficiency and nonradiative recombination coefficient of GaInN/GaN multiple quantum wells with different dislocation densities // *Appl. Phys. Lett.* 2009. Vol. 94. P. 111109-(1–3).
10. Getty A., Matioli E., Iza M., Weisbuch C., Speck J. S. Electroluminescent measurement of the internal quantum efficiency of light emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* 2009. Vol. 94. P. 181102-(1–3).
11. Wang C. H., Ke C. C., Chiu C. H., Li J. C., Kuo H. C., Lu T. C., Wang S. C. Study of the internal quantum efficiency of InGaN/GaN UV LEDs on patterned sapphire substrate using the electroluminescence method // *Journal of Crystal Growth*. 2011. Vol. 315. P. 242–245.
12. Mukai T., Nagahama S., Iwasa N., Senoh M., Yamada T. Nitride light-emitting diodes // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2001. Vol. 13. P. 7089–7098.
13. Шпретер Ю. Г., Ребане Ю. Т., Зыков В. А. Широкозонные полупроводники. СПб.: Наука, 2001. 125 с.
14. Son J.-H., Lee J.-L. Numerical analysis of efficiency droop induced by piezoelectric polarization in InGaN/GaN light-emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* 2010. Vol. 97. P. 032109–032111.
15. Lu I. L., Wu Y.-R., Singh J. A study of the role of dislocation density, indium composition on the radiative efficiency in InGaN/GaN polar and nonpolar light-emitting diodes using drift-diffusion coupled with a Monte Carlo method // *Journal of Applied Physics*. 2010. Vol. 108. P. 124508-(1–6).

Д. Ш. Гавашели, науч. сотр.,
С. Ш. Рехвиашвили, д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., e-mail: rsergo@mail.ru
Учреждение Российской академии наук Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации Кабардино-Балкарского научного центра РАН, г. Нальчик

ТЕПЛОВОЕ РАЗРУШЕНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Поступила в редакцию 07.04.2011

Проведено моделирование процесса разрушения фрактальных наноструктур под действием лазерного излучения конечной длительности на основе нелинейного дифференциального уравнения в частных производных. Фрактальность учитывается при расчете коэффициента теплопроводности, изохорной теплоемкости и интенсивности теплового излучения вещества. Строится зависимость критической интенсивности лазерного излучения от длительности импульса. Продемонстрировано качественное согласие результатов моделирования с известными экспериментальными результатами.

Ключевые слова: фрактальные наноструктуры, тепловые свойства, лазерное разрушение наноматериалов

Введение

При облучении твердотельных наноструктур лазерным излучением происходит поглощение излучения. Этот процесс связан с диэлектрическими свойствами вещества и может приводить к его нагреву, плавлению или испарению. Моделирование процесса лазерного нагрева различных твердых тел описано во многих работах (см. работы [1–8] и ссылки в них) и продолжает оставаться актуальным, особенно применительно к твердотельным наноструктурам, так как их применение имеет большие перспективы в энергосберегающих технологиях, электронике и медицине.

Чаще всего наноструктуры из различных немагнитных материалов (например, нанотрубки, висеры, нитевидные кристаллы и т. п.) проявляют полупроводниковые и диэлектрические свойства. При этом их нагрев обусловлен, главным образом, переносом фононов. Если вещество считать сплошным и макроскопическим, то нагрев будет описываться уравнениями в частных производных параболического типа [9]. Для моделирования нагрева фрактальных структур эти уравнения иногда модифицируют с использованием дробного интегро-дифференцирования [10–12], что, однако, сопряжено со значительными математическими трудностями. В настоящей статье предлагается достаточно

простая и наглядная модель нагрева наноструктуры, в основе которой лежит нелинейное уравнение теплопроводности; свойство фрактальности учитывается только в расчетах радиационных потерь энергии и в зависимости коэффициента теплопроводности от температуры, что приводит к нелинейному уравнению теплопроводности.

Расчет физических характеристик фрактальных наноструктур

Рассмотрим предварительно необходимые для моделирования физические характеристики твердотельных наноструктур, которые зависят от фрактальности. В работе [13] получено выражение для изохорной теплоемкости, которое запишем в виде

$$C_V = \frac{k_B N_A}{M_A} G(T/\theta), \quad (1)$$

$$G(y) = D^2 y^D \int_0^{1/y} \frac{x^{D+1} \exp(x) dx}{(\exp(x) - 1)^2},$$

где D — спектральная фрактальная размерность; k_B и N_A — постоянные Больцмана и Авогадро; M_A — молярная масса; T — абсолютная температура; θ — характеристическая температура Дебая. Здесь предполагается, что фрактальные свойства сказываются на фононном спектре. В квантово-статистическом приближении для коэффициента теплопроводности имеем [14]

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{1}{3V} \int_0^{\omega_0} \hbar \omega c_s^2 \tau_p g(\omega) \left(\frac{\partial N}{\partial T} \right) d\omega = \\ &= \frac{\hbar c_s^2 \tau_p}{3V} \int_0^{\omega_0} g(\omega) \left(\frac{\partial N}{\partial T} \right) \omega d\omega, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\hbar$ — постоянная Планка; ω — частота фононов; $\omega_0 = k_B \theta / \hbar$ — характеристическая частота; $\tau_p = \text{const}$ — время свободного пробега фононов; V — молярный объем; $g(\omega)$ — плотность фононных состояний; c_s — скорость звука; N — число фононов. Учитывая распределение Бозе—Эйнштейна и выражение для плотности фононных состояний из работы [13], для коэффициента теплопроводности из выражения (2) находим

$$\kappa = \frac{c_s^2 \tau_p k_B n_V}{3} G(T/\theta), \quad (3)$$

где $n_V = N_A/V$ — объемная концентрация атомов.

При нагреве наноструктуры лазерным излучением часть поглощенной энергии должна расходоваться

ваться на тепловое излучение [9]. Вещество будет непрерывно остывать за счет радиационных потерь энергии даже в отсутствие конвективного теплообмена. Чтобы учесть этот механизм, вычислим интегральную интенсивность теплового излучения. Для этого воспользуемся известным выражением [15]

$$dI = 4\pi c E \sigma d\omega, \quad (4)$$

где c — скорость света в вакууме; ω — частота излучения; σ — сечение поглощения фотонов; E — спектральная плотность черного излучения, отнесенная к единице объема и единичному интервалу телесного угла. Сечение фотопоглощения наноструктуры объемом V примем в виде [16]

$$\sigma = \frac{\int_V \frac{1}{2} \omega \epsilon_0 \operatorname{Im} \epsilon |\mathbf{E}|^2 dV}{S}, \quad (5)$$

где ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума; $\mathbf{E}$ — вектор напряженности электрического поля; S — амплитуда вектора потока плотности мощности падающей волны; $\operatorname{Im} \epsilon$ — мнимая составляющая диэлектрической функции, которая характеризует поглощение излучения.

Если линейный размер наноструктуры меньше длины волны падающего излучения, то можно считать, что граничные условия для электромагнитной волны совпадают с граничными условиями для сплошной частицы, т. е. происходит некоторое усреднение поляризуемости и наноструктура ведет себя как изотропное вещество с плотностью и диэлектрическими свойствами, зависящими от фрактальной размерности. Если принять $S = c \epsilon_0 |\mathbf{E}|^2 / 2$ и считать, что подынтегральное выражение в формуле (5) не зависит от объема, то получим

$$\sigma = \frac{V \omega \operatorname{Im} \epsilon}{c}. \quad (6)$$

Для распределения Планка имеем

$$E = \frac{\hbar}{4\pi^3 c^3} \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (7)$$

Подставляя (6), (7) в выражение (4), находим полную интенсивность излучения

$$I = \frac{\hbar V}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^4 \operatorname{Im} \epsilon d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (8)$$

Заметим, что интеграл в формуле (8) расходится, если при низких частотах мнимая составляющая диэлектрической функции имеет степенную

асимптотику и стремится к бесконечности быстрее, чем $1/\omega^4$.

Специфические свойства, связанные с частотной дисперсией поляризуемости и диэлектрической проницаемости, характерны для полимеров, композитов и стекол, имеющих фрактальную структуру. Для описания комплексной диэлектрической восприимчивости и, соответственно, комплексной диэлектрической проницаемости в таких материалах принято использовать формулы Коула—Коула, Коула—Дэвидсона и Гаврилияка—Негами [12, 17], адекватность которых неоднократно подтверждалась опытами по диэлектрической и емкостной спектроскопии, ядерному магнитному резонансу, рассеянию нейтронов. Наиболее общий вид имеет комплексная диэлектрическая функция Гаврилияка—Негами [12, 17]:

$$\epsilon = \epsilon_1 + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\left(1 + (i\omega\tau_d)^a\right)^b}, \quad (9)$$

$$0 < a, b \leq 1,$$

где a и b — полуэмпирические параметры, косвенно учитывающие фрактальную структуру; τ_d — время диэлектрической релаксации; ϵ_1 и ϵ_2 — высокочастотная и низкочастотная диэлектрические проницаемости ($\epsilon_2 > \epsilon_1$). Выражение (9) описывает в качестве частых случаев процессы диэлектрической релаксации Дебая при $a = b = 1$, Коула—Коула при $b = 1$ и Коула—Дэвидсона при $a = 1$. Мнимая часть функции (9) есть

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \epsilon &= (\epsilon_2 - \epsilon_1) \times \\ &\times \frac{\sin \left(\operatorname{arctg} \left[\frac{(\omega\tau_d)^a \sin(\pi a/2)}{1 + (\omega\tau_d)^a \cos(\pi a/2)} \right] \right)}{1 + 2(\omega\tau_d)^a \cos(\pi a/2) + (\omega\tau_d)^{2a} \cos^2(\pi a/2)}, \end{aligned} \quad (10)$$

где учтено, что $\operatorname{Im} \epsilon > 0$. После подстановки (10) в (8) и последующего интегрирования с учетом условия $k_B T \gg \hbar/\tau_d$ находим

$$\begin{aligned} I &= \frac{\hbar(\epsilon_2 - \epsilon_1) \sin(\pi ab/2) \Gamma(5 - ab) \zeta(5 - ab) V}{\pi^2 c^3 \tau_d^5} \times \\ &\times \left(\frac{k_B T \tau_d}{\hbar} \right)^{5 - ab}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\Gamma(5 - ab)$ и $\zeta(5 - ab)$ — гамма-функция Эйлера и дзета-функция Римана. При высоких температурах интенсивность излучения становится степен-

ной функцией температуры с нецелым показателем. Такая функция характерна для многих физических процессов при наличии свойств самоподобия и фрактальности. Уместно отметить, что степенные температурные зависимости с дробными показателями появляются при фрактальном обобщении теории теплоемкости твердых тел Дебая [13].

Моделирование лазерного разрушения

При моделировании процессов нагрева и разрушения наноструктур будем учитывать следующие процессы: 1) поглощение лазерного излучения; 2) отражение лазерного излучения от поверхности; 3) тепловое излучение нагретого вещества. Конвективный теплообмен с окружающим пространством в данной задаче не учитывается. Это справедливо, если облучение материала осуществляется в вакуумных условиях. При экспериментах в воздушной среде с лазерными импульсами короткой длительности конвективный теплообмен также представляется незначительным ввиду малой теплоотдачи. С учетом выражений (1), (3), (11), а также закона Бугера—Ламберта—Бера, одномерное уравнение теплопроводности принимает вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\alpha \exp(-\beta z) \Phi(t_0 - t) - \gamma u^m + 1}{G(u)}, \quad (12)$$

где $u = u(z, t)$ — безразмерная (отнесенная к температуре Дебая) температура; t и z — безразмерные время и координата; $\Phi(t_0 - t)$ — функция Хевисайда, моделирующая лазерный импульс длительностью t_0 . Безразмерные параметры в уравнении (12) равны

$$\alpha = \frac{I_L(1-R)}{I_0}, \quad \beta = \sqrt{\frac{\delta c_s^2 \tau_p k_B \theta n_V}{3 I_0}},$$

$$\gamma = (\theta/T_0)^m, \quad m = 5 - ab, \quad (13)$$

где δ и R — коэффициенты поглощения и отражения лазерного излучения; I_L — интенсивность лазерного пучка; I_0 — интенсивность теплового излучения, вычисляемая по формуле (11) при температуре окружающей среды T_0 . Время и координата в уравнении (12) отнесены соответственно к следующим размерным константам:

$$\frac{\rho k_B \theta N_A}{\delta I_0 M_A} \text{ и } \beta/\delta.$$

При записи уравнения (12) предполагалось также, что при нагреве объем фрактальной наноструктуры меняется незначительно, поэтому $C_V \approx C_p$, где C_p — изобарная теплоемкость. Кроме того, в

целях упрощения из уравнения (12) исключено слагаемое, содержащее $(\partial u/\partial z)^2$. С физической точки зрения это оправдано лишь при высоких температурах; согласно полученным выше результатам (формула (3) при $T/\theta \sim 1$), коэффициент теплопроводности κ при высоких температурах меняется слабо так, что производная $\kappa'_u \rightarrow 0$.

Будем предполагать, что на концах облучаемого образца поддерживается одна и та же температура, равная температуре окружающей среды:

$$u(z, 0) = u(0, t) = u(l, t) = u_0, \\ t \in [0, t_c], \quad z \in [0, l], \quad (14)$$

где u_0 и l — задают температуру окружающей среды и размер образца; t_c — время, до которого осуществляется счет. Отметим, что при численном моделировании представляет интерес отдельно рассматривать два случая: $t_c \leq t_0$ и $t_c > t_0$. Условие, при котором обязательно произойдет лазерное разрушение имеет вид

$$u(z, t) \geq u_m, \quad (15)$$

где $u_m = T_m/\theta$ — безразмерная (отнесенная к температуре Дебая) температура плавления образца. Для оценки u_m использовался результат работы [18], который в нашем случае записывается в виде:

$$u_m = 1,75 \cdot 10^{-5} (2n^2 + 1)^2 \theta, \quad (16)$$

где n — главное квантовое число. Примечательно, что зависимость u_m от n , построенная на основе данных работы [18], обнаруживает линейный характер с коэффициентом корреляции 0,86 (рис. 1).

Итак, суть нашей модели сводится к численному решению краевой задачи (14) для уравнения (12) и различных значений параметров t_0 и α при выполнении условия (15) с некоторой наперед заданной

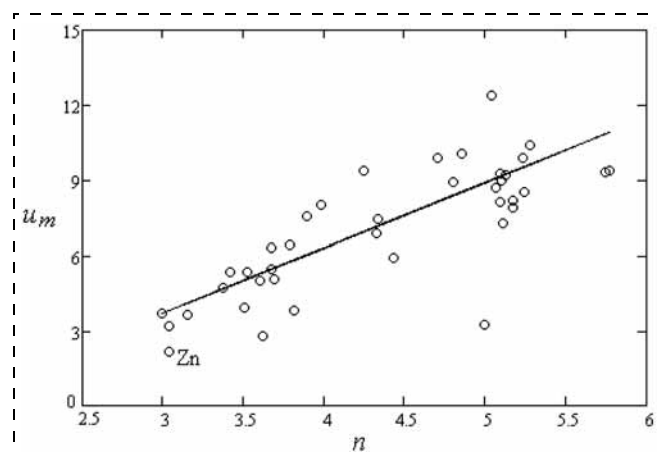


Рис. 1. Зависимость предельного нагрева металлических образцов от главного квантового числа

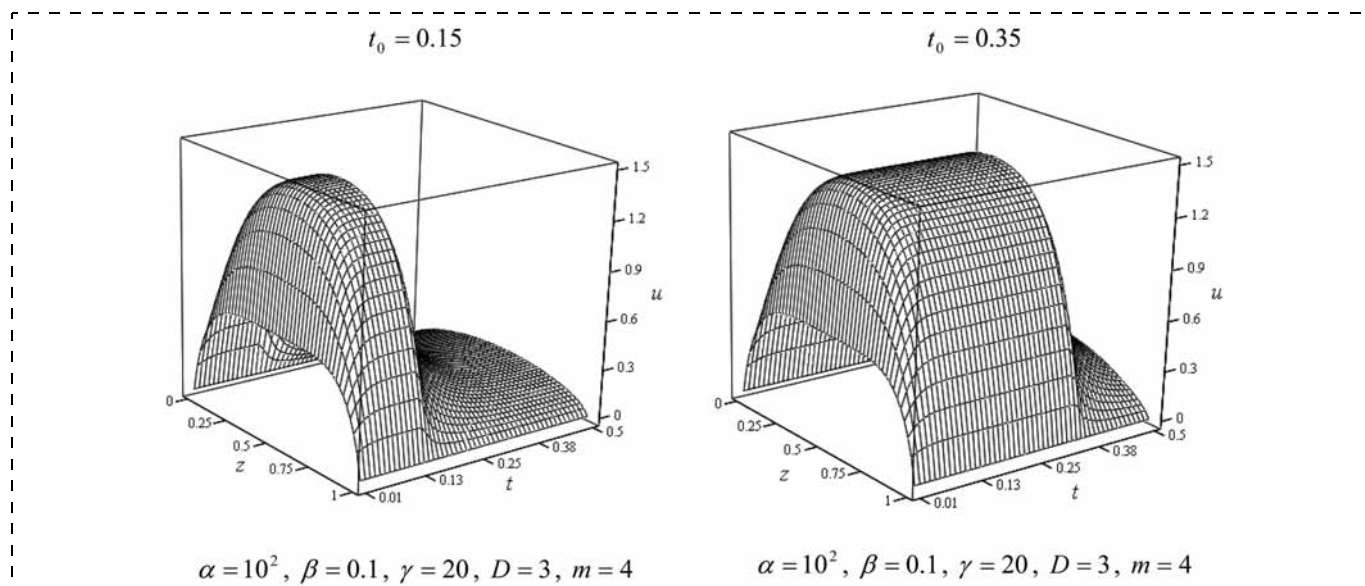


Рис. 2. Влияние конечной длительности лазерного импульса на нагрев

погрешностью (не более 5 %). Вычислительный эксперимент проводился с помощью программы MathCad 14 и встроенного оператора Pdsolve. Общие для всех рассмотренных случаев исходные данные имели следующие значения: $u_0 = 0,01$, $l = 1$ и $t_c = 0,5$. В качестве максимального значения безразмерной температуры плавления было принято значение $u_m = 2$.

На рис. 2 показаны результаты моделирования импульсного лазерного нагрева наноструктуры ниже температуры плавления. Видно, что действие лазерного излучения в течение конечного промежутка времени приводит к появлению теплового импульса в образце. При этом передний и задний фронты этого импульса размыты за счет нестационарных процессов нагрева и остывания. Заметная инерционность нагрева на начальной стадии является причиной зависимости критической интенсивности лазерного излучения от длительности импульса: если лазерное излучение действует в течение очень короткого промежутка времени t_0 , то наноструктура не успевает нагреться до критического значения u_m , поэтому для ее разрушения требуется увеличивать интенсивность излучения (в нашем случае параметр α).

При моделировании одновременно уменьшалась длительность лазерного импульса t_0 и увеличивалась интенсивность α с тем, чтобы обеспечить требуемое значение u_m . На рис. 3 показан пример построенной таким образом зависимости критической интенсивности α , при которой происходит плавление наноструктуры, от длительности импульса t_0 . В целом, как показал вычислительный

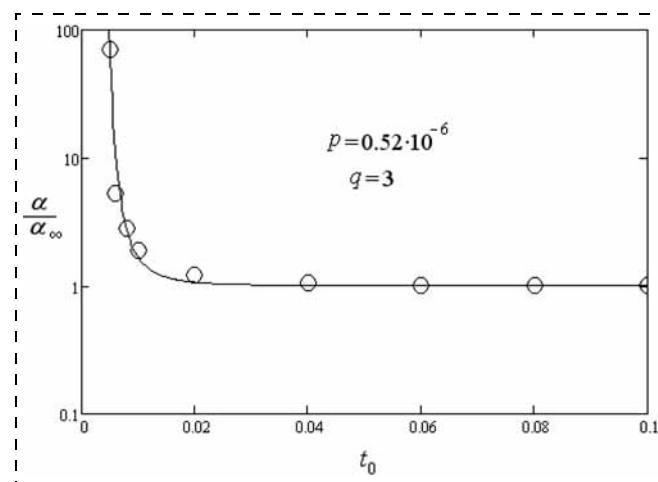


Рис. 3. Зависимость критической интенсивности лазерного излучения от времени импульса при $\beta = 0,1$; $\gamma = 20$; $D = 3$; $m = 4$

эксперимент, данная зависимость с приемлемой точностью аппроксимируется формулой

$$\alpha = \alpha_{\infty} \exp(p t_0^{-q}), \quad (17)$$

где p и q — параметры, зависящие от свойств вещества; α_{∞} — критическая интенсивность при непрерывном действии лазера ($t_0 \rightarrow \infty$). Следует обязательно отметить, что зависимость вида (17) также описывает экспериментальные данные, представленные в работе [4], хотя и с меньшими значениями параметра q . Различие численных значений этого параметра связано, по-видимому, с выбором безразмерных параметров (13), а также с постановкой идеализированных краевых условий (14). Не ис-

ключено также, что в случае наноструктур важную роль играет радиационный теплообмен, задаваемый выражением (11), влияние которого не обсуждалось в работе [4]. В действительности, на практике может происходить смена механизмов оптического разрушения материалов при изменении длительности лазерного импульса [19], однако есть основания полагать, что формула (17) останется справедливой и в этом случае, только при других значениях параметров p и q .

Из результатов моделирования следует, что увеличение интенсивности лазерного излучения приводит к возрастанию температуры и сокращению времени выхода на стационарный режим нагрева. Поглощение лазерного излучения в начальные моменты времени обуславливает неравномерный температурный профиль и увеличивает время наступления стационарного режима нагрева наноструктуры. Образец, кроме того, может эффективно остывать за счет радиационного теплообмена. При переходе от частотно-независимой диэлектрической проницаемости к комплексной диэлектрической проницаемости, описываемой формулой Гаврильяка—Негами (9), показатель степени m в температурной зависимости интенсивности теплового излучения меняется от 5 до 4. Такое изменение влечет за собой незначительное увеличение температуры нагрева. В низкоразмерных системах атомы или молекулы связаны между собой слабо и поэтому более подвижны. По этой причине снижение фрактальной размерности приводит к возрастанию температуры нагрева. Кроме того, учет функции $G(u)$ в уравнении (12) заметно уменьшает время установления стационарного режима нагрева.

Заключение

Фрактальные наноструктуры, например некоторые полимеры, гели, керамические соединения и дендриты, обладают разнообразными свойствами, причем их размерность может принимать как целые, так и дробные значения. Так, недавно в работе [20] экспериментально обнаружена фрактальная макромолекула полимера. По нашим оценкам ее фрактальная размерность составляет $D = \ln 6 / \ln 3 \approx 1,631$ и близка к золотому сечению. Наноматериалы с фрактальной структурой отличаются разнообразием физико-химических свойств, что делает их перспективными с практической точки зрения. В настоящей статье нами реализован подход к анализу кинетики теплофизических процессов во фрактальных наноструктурах и их предельных характеристик. Модель применима в отсутствие газодинамических эффектов, а также эффектов, связанных с ионизацией и образованием плазмы. Несмотря на все упрощения, в данной статье сделаны кор-

ректные и важные с физической точки зрения выводы, хотя часть из них носит качественный характер.

Список литературы

1. Маненков А. А., Прохоров А. М. Лазерное разрушение прозрачных твердых тел // УФН. 1986. Т. 148, № 1. С. 179—211.
2. Stuart B. C., Feit M. D., Herman S., Rubenchik A. M., Shore B. W., Perry M. D. Optical ablation by high-power short-pulse lasers // J. Opt. Soc. Am. B. 1996. V. 3, N 2. P. 459—468.
3. Колдунов М. Ф., Маненков А. А., Покотило И. Л. Термоупругий и абляционный механизмы лазерного повреждения поверхности прозрачных твердых тел // Квантовая электроника. 1998. Т. 25, № 3. С. 277—281.
4. Маненков А. А. Проблемы физики взаимодействия мощного лазерного излучения с прозрачными твердыми телами в области сверхкоротких импульсов // Квантовая электроника. 2003. Т. 33, № 7. С. 639—644.
5. Карбалло Санчес А. Ф., Гуревич Ю. Г., Логвинов Г. Н., Дрогобицкий Ю. В., Титов О. Ю. Распространение теплового импульса в ограниченной проводящей среде: термоэлектрическое детектирование // ФТТ. 1999. Т. 41, № 4. С. 606—611.
6. Carballo Sanchez A. F., Gonzalez de la Cruz G., Gurevich Yu. G., Logvinov G. N. Transient heat transport by carriers and phonons in semiconductors // Phys. Rev. B. 1999. V. 59, N 16. P. 10630—10638.
7. Gurevich Yu. G., Logvinov G. N., Carballo Sanchez A. F., Drogobitskiy Yu. V., Salazar J. L. Electron and phonon temperature relaxation in semiconductors excited by thermal pulse // J. Appl. Phys. 2002. V. 91, N 1. P. 183—191.
8. Логвинов Г. Н., Дрогобицкий Ю. В., Luis Nino de Rivera, Гуревич Ю. Г. Разогрев образца лазерным импульсом // ФТТ. 2007. Т. 45, № 5. С. 785—790.
9. Карслоу Г., Ереп Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
10. Бабенко Ю. И. Метод дробного дифференцирования в прикладных задачах теории тепломассообмена. СПб.: НПО "Профессионал", 2009.
11. Нахушев А. М. Дробное исчисление и его применение. М.: Физматлит., 2003.
12. Учайкин В. В. Метод дробных производных. Ульяновск: Артишок, 2008.
13. Рехвиашвили С. Ш. К вопросу о теплоемкости нанокристаллических веществ // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30, № 22. С. 65—69.
14. Драбл Дж., Голдсмит Г. Теплопроводность полупроводников. М.: ИЛ, 1963.
15. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1982.
16. Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. Т. 1. — М.: Мир, 1981.
17. Блайт Э. Р., Блур Д. Электрические свойства полимеров. М.: Физматлит., 2008.
18. Ошерин Б. Н., Шевчук А. М. Полуэмпирический метод расчета характеристических температур на ЭВМ // Физические свойства металлов и сплавов. Межвузовский сборник. Вып. 5. Свердловск: Изд. УПИ им. С. М. Кирова, 1986. С. 129—132.
19. Savintsev A. P., Gavasheli D. Sh., Gavasheli Yu. O. Study of breakdown mechanism of fused quartz by focused laser beam // Physics of Extreme States of Matter. Chernogolovka, 2011. P. 43—45.
20. Newkome G. R., Wang P., Moorefield Ch. N., Cho T. J., Mohapatra P. P., Li S., Hwang S.-H., Lukoyanova O., Echegoyen L., Palagallo J. A., Iancu V., Hla S.-W. Nanoassembly of a Fractal Polymer: A Molecular Sierpinski "Hexagonal Gasket" // Science. 2006. V. 312, N 5781. P. 1782—1785.

Аб. Г. Мустафаев¹, канд. техн. наук, ст. преподаватель,
Г. А. Мустафаев¹, д-р техн. наук, проф.,
Ар. Г. Мустафаев², канд. техн. наук, доц.,
 e-mail: arslan_mustafaev@mail.ru

¹ ГОУ ВПО "Кабардино-Балкарский государственный университет"

² ГОУ ВПО "Дагестанский государственный технический университет", г. Махачкала

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОЭПИТАКСИИ КРЕМНИЯ НА САПФИРЕ ПРИ СОЗДАНИИ ТРАНЗИСТОРНЫХ СТРУКТУР

Поступила в редакцию 27.04.2011

Исследуется механизм гетероэпитаксии кремния на сапфире для последующего создания транзисторных структур с низкой дефектностью. Методом резерфордовского обратного рассеяния изучались эпитаксиальные слои Si на сапфировой подложке. В эпитаксиальных слоях заметно увеличение дефектности в тех областях спектра, которые соответствуют промежуточной области между слоем и подложкой и дают максимальный вклад в каналирование. Оже-анализом определен состав и глубина переходного слоя. Разработан способ создания полупроводникового прибора с улучшенными параметрами.

Ключевые слова: кремний на сапфире, кремний на изоляторе, резерфордовское обратное рассеяние

Определение механизма гетероэпитаксии кремния на сапфире (КНС) является необходимым условием создания интегральных схем на этой изолирующей подложке. Известно, что при обычном химическом осаждении кремния из паровой фазы на сапфировую подложку между Si и Al_2O_3 образуется промежуточный слой, благодаря чему становится возможным сопряжение по решетке выращенного материала с подложкой. Структура промежуточного слоя является алюмосиликатной Al_2SiO_5 , что означает образование дополнительных Si—O и новых Al—O связей. Толщина промежуточного слоя определяется условиями химического осаждения. При многолучевом изображении решетки в просвечивающем электронном микроскопе над промежуточным слоем в пленке Si наблюдаются дефекты упаковки, микродвойники, дислокации, упругие напряжения. В соответствии с кристаллографическими принципами следует ожидать, что для успешной гетероэпитаксии между напыляемым материалом и подложкой должно быть:

- подобие их симметрии, координации и типа связи;
- сопряжение по решеточным параметрам.

КНС-структура не соответствует этим принципам (рис. 1), хотя слои кремния успешно выращиваются на плоскостях сапфира (1012), (1124), (0001) и (1120) [1]. Предполагается, что связь между кремнием и сапфиром осуществляется через тетраэдрически координированный кислород. Даже при слабом травлении сапфира на его поверхности можно обнаружить кислород, связанный в $[\text{SiO}_4]$ и $[\text{AlO}_4]$ тетраэдры или подобные конфигурации. Длина связей O—O в этих тетраэдрах подобна аналогичной длине связей в объеме Al_2O_3 . Благодаря специфическим свойствам таких тетраэдров (возможность вращательного движения тетраэдра как целого, варьирование длины связей и углов между ними, замещаемость катионов (Al—Si)) становится реальным подогнать параметры решетки между Si и сапфировой подложкой.

С помощью обратного рассеяния ионов He^+ с энергией 1,4 МэВ анализировались эпитаксиальные слои Si на сапфировой подложке Al_2O_3 , особенно в области, граничащей с подложкой. Кремний выращивался методом химического осаждения из паровой фазы пиролизом SiH_4/H_2 . Изучалась функция деканалирования $A(d)$:

$$A(d) = \frac{\Delta\chi_{\min}(d)}{\Delta d[1 - \chi_{\min}(d)]} - \frac{\Delta\chi_{\min}^0(d)}{\Delta d[1 - \chi_{\min}^0(d)]},$$

где $\chi_{\min}(d)$ — нормированный минимальный выход; d — глубина проникновения ионов, по которой, согласно модели деканалирования ионов, можно оценить концентрационный профиль распределения дефектов по глубине при условии известной информации о типе дефектов. Величина $\chi_{\min}$ определяется из соотношения

$$Y_{(100)} = \chi_{\min}(d) Y_{\text{random}},$$

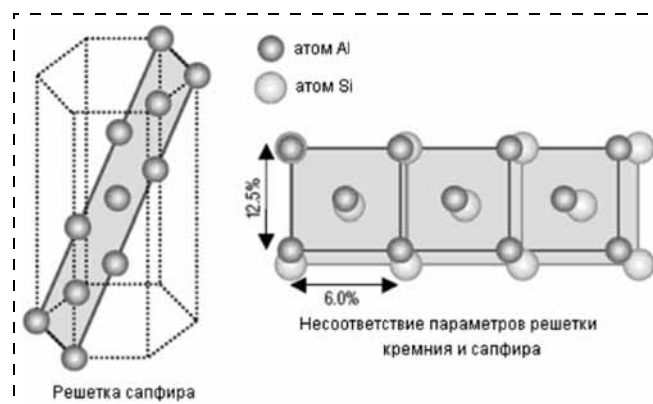


Рис. 1. Кристаллическая структура сапфира и несоответствие параметров решетки кремния и сапфира

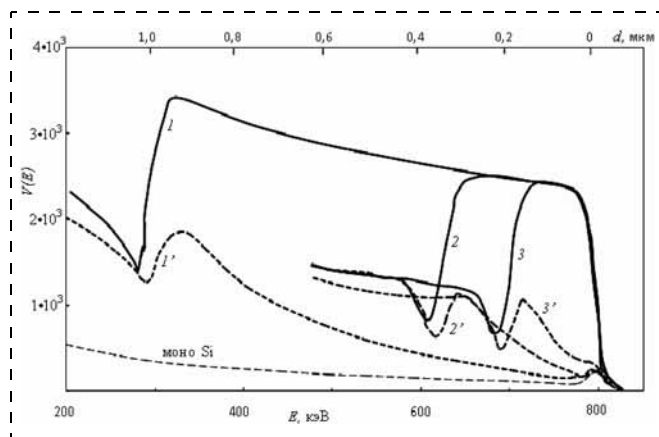


Рис. 2. Спектр обратного рассеяния ионов He^+ КНС-структуры (1012) при различных толщинах пленки кремния

которое связывает спектральные характеристики обратного рассеяния первичных ионов He^+ , падающих в произвольном Y_{random} и в каналированном $Y[100]$ вдоль оси $[100]$ направлениях; χ_{min} — минимальное значение для недеформированного (100) Si. Эпитаксиальные слои последовательно утоньшались с помощью анодного окисления и химического травления оксида с регистрацией изменений $A(d)$.

На рис. 2 представлен спектр обратного рассеяния ионов He^+ : эпитаксиальным слоем кремния (100) толщиной 0,9; 0,3 и 0,2 мкм соответствуют спектры 1, 2 и 3 для произвольного падения ионов He^+ и спектры 1', 2' и 3' для каналированных ионов. Величина $V(E)$ — число конкретного вида ионов с энергией E . Из сравнения спектров каналированных ионов He^+ для эпитаксиального и монокристаллического кремния следует, что в эпитак-

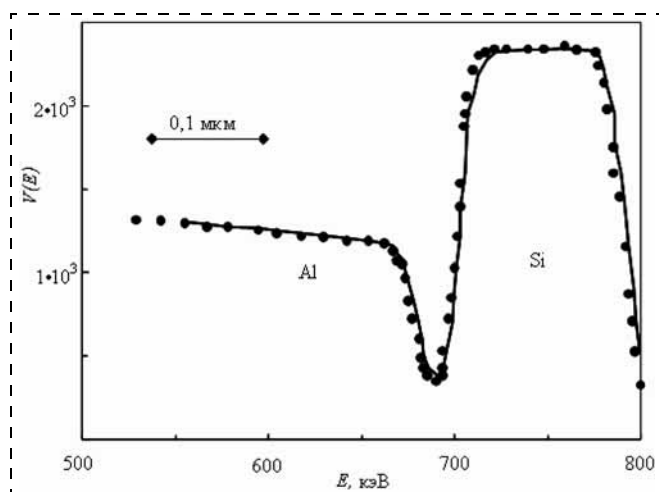


Рис. 3. Спектры обратного рассеяния при произвольном падении ионов He^+ для КНС (измеренный (•) и рассчитанный (—))

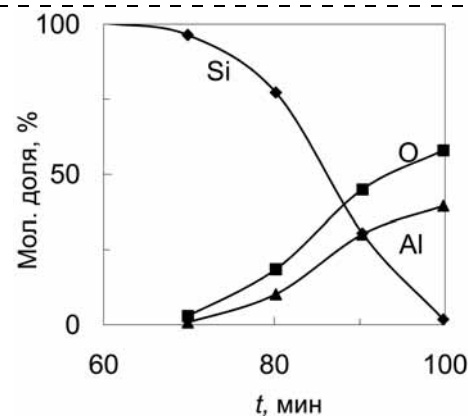


Рис. 4. Распределение основных компонентов структуры КНС в зависимости от времени ионного травления

сиальных слоях присутствует значительное число дефектов решетки. Заметен резкий подъем в тех областях спектра обратного рассеяния, которые соответствуют промежуточной области между слоем и подложкой. Очевидно, что именно в этой области локализованы дефекты, которые дают максимальный вклад в каналирование ионов He^+ .

На рис. 3 показаны измеренный и рассчитанный спектры обратного рассеяния при произвольном падении ионов He^+ для эпитаксиального слоя Si толщиной 0,18 мкм на сапфире. Незначительные расхождения могут быть объяснены тем, что при расчете не учитывалось среднеквадратичное отклонение в спектре энергетических потерь для падающих ионов He^+ . Из хорошего совпадения измеренного и рассчитанного спектров следует, что можно оценить только предельную толщину возможного промежуточного слоя, значение которой определяется разрешением детектора (~15 кэВ) и должно быть меньше 0,03 мкм. Тем не менее, этот слой, содержащий Al, Si и O, оказывает значительный эффект на форму спектра обратного рассеяния.

На рис. 4 представлены результаты Оже-анализа структуры КНС с толщиной слоя кремния n -типа 0,5 мкм. Между эпитаксиальным слоем кремния и сапфировой подложкой хорошо выявляется переходный слой. Оценка толщины этого слоя по времени ионного травления дает значение примерно 10 нм, а анализ его состава допускает предположение об аморфной природе всего переходного слоя или его части.

Переход кремний—сапфир представляет область переменного состава — со структурой мозаичного монокристалла, толщиной 10 нм и более, включающую кремний и алюмосиликатные соединения.

Переходная область, образующаяся в результате наращивания на поверхности сапфира эпитакси-

ального кремниевого слоя, состоит преимущественно из алюмосиликатов и представляет в целом сильно неупорядоченную систему со значительным содержанием аморфной фазы. Наряду с алюмосиликатами в составе переходной области присутствует кремний, вероятно, в виде мозаичных кристаллов или (и) поликристаллов. Известно [2], что материал с таким неупорядоченным строением обладает высокой плотностью локализованных состояний, энергетически расположенных в зазоре подвижности, ширина которого, как следует полагать, значительно больше ширины запрещенной зоны эпитаксиального кремния.

Плотность и энергетическое распределение локализованных состояний непосредственно связаны со структурой и должны в сильной степени зависеть от технологических особенностей формирования переходной области. Важно подчеркнуть, что наличие между кремнием и сапфиром прослойки широкозонного материала с высокой плотностью локализованных состояний оказывает сильное влияние на электрофизические процессы в структурах КНС. Так, перераспределение носителей заряда между локализованными состояниями и зонами в кремнии при термодинамическом равновесии приводит к появлению в кремнии области пространственного заряда (ОПЗ), эквивалентной наличию на границе раздела сосредоточенного заряда. Такое представление о природе заряда на границе кремний—сапфир хорошо согласуется с результатами работ по исследованию влияния технологических факторов на характеристики границы раздела [3, 4].

В случае полевого транзистора на КНС неупорядоченная прослойка создает дополнительный канал утечки между стоком и истоком. Преобладающий механизм прохождения тока в такой системе связан с инжекцией носителей заряда из контактных областей и их переносом с участием ловушек в объеме, в качестве которых выступают локализованные состояния. Проводимость канала зависит как от плотности локализованных состояний в переходной области, так и от инжекционных характеристик контакта и по этим причинам мо-

жет сильно различаться для контактов *n*- и *p*-типов. Проводимость канала в режиме ОПЗ изменяется от степенной в области малых полей к экспоненциальной при больших полях (10^4 В/см) вследствие эффекта Пула—Френкеля.

Таким образом, учет неупорядоченного характера строения перехода кремний—сапфир устанавливает причинную связь между зарядом на границе в структуре КНС и током утечки полевого транзистора и позволяет с единых позиций объяснить совокупность экспериментальных фактов, относящихся к этим вопросам.

Для снижения токов утечки, снижения напряжений в КНС-структурах и улучшения параметров приборов разработан способ создания полупроводникового прибора, основанный на формировании изолирующей подложки под слоем кремниевой пленки слоя диоксида кремния со скоростью осаждения 0,02 мкм/мин, толщиной 0,2...0,4 мкм при температуре подложки 700... 1080 °С. При этом на границе раздела кремниевая пленка—изолирующая подложка происходит снижение плотности структурных дефектов вследствие уменьшения несоответствия решеток. Предложенная конструкция обеспечивает создание полупроводникового прибора с улучшенными параметрами. Способ изготовления полупроводникового прибора защищен патентом РФ [5].

Список литературы

1. Тихов С. В., Шенгуров В. Г., Павлов Д. А. и др. Электрофизические свойства тонких слоев кремния на сапфире, полученных методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. 2010. № 2 (1). С. 60—65.
2. Burgener M. L., Reedy R. E. Minimum Charge FET Fabricated on an Ultrathin Silicon on a Sapphire Wafer. US Patent № 5416043, 1995.
3. Nagatomo Y., Reedy R. E. Latest Trends of SOS (Silicon on Sapphire) Technology // Denshi Zairyo. 2003. Vol. 42, N 5.
4. Nakamura T., Matsuhashi H., Nagatomo Y. Silicon on sapphire device technology // Oki tech. rev. 2004. Vol. 71, N 4. P. 66—69.
5. Мустафаев А. Г., Кармоков А. М., Мустафаев А. Г., Мустафаев Г. А. Способ изготовления полупроводниковой структуры. Патент РФ № 2292607. М., 2007.

УДК 621.382

Ю. Ф. Адамов¹, д-р техн. наук, проф., зав. сектором,
А. В. Братов², ведущий инженер,
В. А. Братов², канд. техн. наук, гл. инженер,
А. А. Грюншпан², ведущий инженер,
Н. М. Горшкова¹, канд. техн. наук, ст. науч. сотр.,
А. Г. Сибагатуллин¹, канд. техн. наук, науч. сотр.,
¹ Учреждение Российской академии наук
Институт проблем проектирования в
микроэлектронике РАН
² ADSANTEC, Калифорния, США

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ПРИЕМНИК ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СИГНАЛОВ ДЛЯ ПРОГРАММИРУЕМЫХ МИКРОСХЕМ

Поступила в редакцию 20.05.2011

Описана новая схема приемника дифференциальных сигналов, работоспособная в диапазоне синфазного смещения сигналов от нуля до напряжения питания. Схема реализована в тестовом кристалле на основе БиКМОП-технологии с гетероструктурными биполярными транзисторами со слоями кремний—германий.

Ключевые слова: приемник дифференциальных сигналов, программируемые микросхемы, цифровые последовательные интерфейсы, гетероструктурные биполярные транзисторы

Введение

В последние годы все большее распространение получают высокоскоростные цифровые последовательные интерфейсы. Их применение обеспечивает увеличение скорости и надежности передачи информации, уменьшает число выводов микросхем и проводников на платах. Проблема интеграции последовательных интерфейсов в структуру универсальных микросхем состоит в разнообразии стандартов для используемых каналов связи. Основные отличия касаются уровня синфазного смещения дифференциального информационного сигнала и схемы подключения согласующих резисторов. Например, спецификация на интерфейсы типа USB (*Universal Serial Bus*) требует подключе-

ния согласующих резисторов к общей шине питания и уровень синфазного смещения сигналов — 230 мВ; спецификация на LVDS (*Low Voltage Differential Signaling*) требует подключения согласующих резисторов между сигнальными проводниками и уровень синфазного смещения — 1,2 В; прямые каналы связи между быстродействующими микросхемами типа CML (*Current Mode Logic*) характеризуются подключением резисторов к положительному источнику питания +3,3 В и уровнем синфазного смещения на 200 мВ ниже напряжения питания.

Цель настоящей работы — создание универсального быстродействующего приемника входных дифференциальных сигналов, работающего в диапазоне синфазного смещения от нуля до напряжения питания и имеющего программируемое подключение внутренних согласующих резисторов.

Для реализации проекта использованы БиКМОП-технология с минимальными размерами элементов 0,18 мкм и гетероструктурными биполярными транзисторами (ГБТ) со слоями кремний—германий. ГБТ характеризуются граничной частотой усиления 120 ГГц.

Блок программируемого подключения согласующих резисторов

В схеме предусмотрены четыре варианта подключения резисторов (рис. 1, см. третью сторону обложки). Вариант А соответствует спецификации на интерфейс типа LVDS. Все программируемые ключи разомкнуты, а резисторы подключены между сигнальными проводниками. Вариант Б соответствует требованиям к каналу связи типа CML, общая точка резисторов подключена к положительной шине питания. Вариант В соответствует спецификации на интерфейс типа USB, общая точка резисторов подключена к общей шине. Вариант Г допускает произвольное значение синфазного смещения сигналов, согласующие резисторы подключены к до-полнительной шине смещения.

Проходные ключи построены с использованием NМОП и PМОП транзисторов с шириной более 1 мм. Соотношение размеров NМОП и PМОП транзисторов обеспечивает сопротивление открытого ключа 5...6 Ом во всем диапазоне синфазных напряжений. Технологический разброс парамет-

ров элементов и изменение температуры от 20 до 125 °С приводят к максимальному отклонению суммарного сопротивления резистора и ключа +16 и –22 % от номинального значения.

Паразитные емкости, присутствующие в структуре микросхемы, снижают входной импеданс на 25 % с увеличением частоты от 0 до 2 ГГц.

Номинальное значение согласующего сопротивления 50 Ом достигается при температуре +25 °С и частоте входного сигнала 1 ГГц. Суммарное номинальное сопротивление поликремниевых резистора и открытого ключа на нулевой частоте равно 56 Ом.

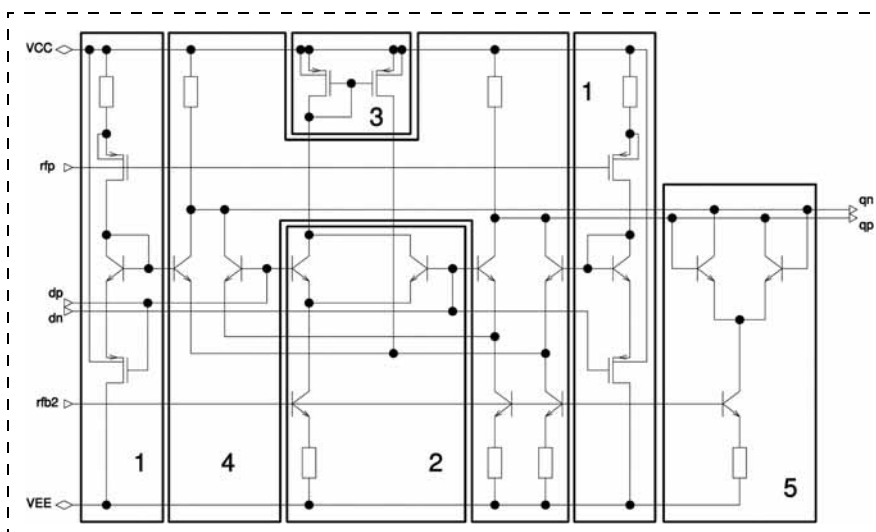


Рис. 2. Электрическая схема универсального приемника

Блок регистрации дифференциального сигнала

Блок регистрации должен принимать дифференциальный сигнал с амплитудой не менее ± 150 мВ в диапазоне входных частот от нуля до 2 ГГц. Для снижения влияния помех и предотвращения возбуждения передаточная характеристика приемника должна иметь гистерезис не менее 25 и не более 125 мВ. Допустимое смещение синфазного уровня от 0,1 В до $U_{пит}$ — 0,1 В.

При построении электрической схемы в быстродействующих переключателях тока использованы гетероструктурные биполярные транзисторы с резистивной нагрузкой. Статические цепи источников тока и формирователей опорных напряжений включают как ГБТ, так и КМОП транзисторы (рис. 2).

Наиболее сложная проблема — это большой диапазон синфазного смещения сигнала, почти равный значению напряжения питания. Для регистрации дифференциального сигнала на уровне синфазного смещения, равном напряжению питания, необходимо, чтобы ГБТ не входили в режим насыщения, когда прямое смещение на переходе база—коллектор превышает 400 мВ. Для регистрации дифференциального сигнала на уровне синфазного смещения, близком к нулю, необходимо обеспечить положительное смещение входных сигналов на значение большее напряжения эмиттер—база. В отсутствие смещения биполярные транзисторы будут закрыты и тока в нагрузке не будет.

В блоке регистрации использованы два дифференциальных переключателя тока, один со смещением входного сигнала, другой без смещения. Оба дифференциальных переключателя подключены к общим нагрузочным резисторам. При отсутствии управления током переключателей изменение синфазного смещения сигнала приводит к изменению тока общих нагрузочных резисторов, а увеличение

тока и напряжения на резисторах — к насыщению биполярных транзисторов.

Для стабилизации режимов работы в схему введена цепь перераспределения токов переключателей. В эту цепь входят: дополнительный источник тока; эквивалент первого переключателя без смещения входного сигнала; токовое зеркало на РМОП-транзисторах и перехватывающая связь источником тока второго переключателя. При высоком синфазном смещении первый переключатель работает в нормальном режиме, а ток эквивалента через токовое зеркало полностью компенсирует ток второго переключателя. Ток в нагрузке равен току первого переключателя. При низком синфазном смещении ток первого переключателя уменьшается, а ток второго увеличивается на то же значение. При равенстве токов первого и второго переключателей, ток в нагрузке не зависит от смещения входного сигнала и равен току одного переключателя.

Триггер Шмитта — формирователь гистерезиса передаточной характеристики

Устойчивость приемника к помехам обеспечивается гистерезисной передаточной характеристикой. При допустимом значении гистерезиса 25... 125 мВ — номинальное значение 60 мВ.

Триггер Шмитта построен на дифференциальном переключателе тока, охваченном цепью положительной обратной связи, который подключен к общим нагрузочным резисторам входных переключателей. Значение гистерезиса регулируется соотношением токов триггера и входных переключателей. Номинальное значение тока триггера равно одной трети тока входного переключателя. Суммарный ток переключателя и триггера создает в общей нагрузке логический перепад 300 мВ, соответствующий требованиям к библиотеке логических элементов типа CML на основе ГБТ.

Преобразователь уровней сигналов CML в уровни КМОП

В случае необходимости согласования дифференциальных сигналов приемника с КМОП-логикой в схему включается каскад преобразования уровней (рис. 3). Каскад включает два эмиттерных повторителя на основе ГБТ, два каскадных усилителя на РМОП-транзисторах с автосмещением опорного напряжения и триггер на КМОП-транзисторах. Нагрузочные РМОП-транзисторы триггера включены по схеме с общим затвором. Опорным напряжением служит напряжение питания КМОП-элементов (1,8 В). Постоянный ток потребляется только цепью автосмещения. Схемы преобразователя обеспечивают быстроедействие не менее 1,5 ГГц.

Экспериментальные исследования

Универсальный преобразователь входных дифференциальных сигналов практически реализован в составе тестового кристалла. Измерения образцов подтверждают адекватность модели преобразователя и соответствие измеренных параметров их расчетным значениям. Результаты измерений и

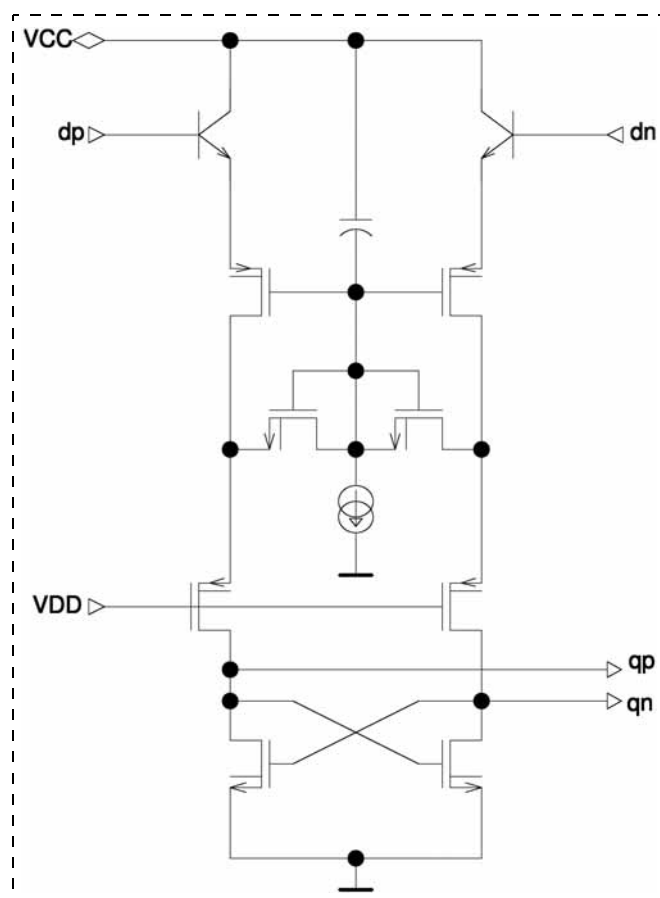


Рис. 3. Электрическая схема каскада преобразования уровней

Параметры универсального преобразователя

Параметр	Обозначение	Расчетные значения		Измеренные значения	
		мин.	макс.	мин.	макс.
Напряжение питания, В	V_{CC}	2,75	3,5	2,7	3,5
Синфазное напряжение, В	V_{CM}	-0,4	$V_{CC} + 0,1$	-0,7	$V_{CC} + 0,1$
Дифференциальный гистерезис, мВ	V_{hyst}	40	—	60	—
Чувствительность, мВ	ΔV_{In_SE}	± 20	—	± 30	—
Частота сигнала, ГГц	f_{IN}	0	1	0	1,5
Токопотребление, мА	I_{VCC}	0,5	0,6	—	0,56

расчетные значения параметров приведены в таблице.

Заключение

Универсальный преобразователь входных дифференциальных сигналов обеспечивает совместимость с любыми типами высокоскоростных последовательных интерфейсов (LVDS, USD и др.). Выходные уровни преобразователя адаптируются к уровням внутренних логических элементов микросхем типа CML, CMOS и др. Максимальная рабочая частота не менее 1,5 ГГц, потребляемая мощность не более 2 мВт.

Список литературы

1. **IEEE Standard** of Low-Voltage Differential Signals (LVDS) for Scalable Coherent Interface (SCI). IEEE Std. 1596.3—1996. 21 Mar., 1996.
2. **Electrical** Characteristics of Low Voltage Differential Signaling (LVDS) Interface Circuits, ANSI/TIA/EIA-644-1995. Telecommunications Industry Association, March 1996.
3. **I/O Interface** Standards. IDT Application Notes AN-230, IDT, 6024 Silver Creek Valley Road. San Jose, CA 95138.
4. Ahlgren D. C., Gilbert M., Greenberg D., Jeng S. J., Malinowski J., Nguyen-Goc D., Schonenberg K., Stein K., Groves R., Walter K., Hueckel G., Colavito D., Freeman G., Sunderland D., Harame D. L. Manufacturability Demonstration of an Integrated SiGe HBT Technology for the Analog and Wireless Marketplace // IEEE IEDM Digest of Technical Papers. 1996. P. 859—862.
5. Onge S. A. St., Harame D. L., Dunn J. S., Subbanna S., Ahlgren D. C., Freeman G., Jagannathan B. et al. A 0,24 μm SiGe BiCMOS Mixed-Signal RF Production Technology Featuring a 47 GHz ft HBT and 0,18 μm Leff CMOS // Proc. of the IEEE Bipolar/BiCMOS Circuits and Technology Meeting (BCTM), 1999. P. 117—120.
6. Joseph A., Coolbaugh D., Zierak M., Wuthrich R., Geiss P., He Z., Liu X. et al. A 0,18 μm BiCMOS Technology Featuring 120/100 GHz (fT/fMAX) HBT and ASICCompatible CMOS Using Copper Interconnect // Proc. of the IEEE BCTM, 2001. P. 143—146.

Н. И. Мухуров, д-р техн. наук,
e-mail: mukhurov@inel.bas-net.by,
Г. И. Ефремов, канд. техн. наук,
С. П. Жвавий, д-р физ.-мат. наук,
Государственное научное учреждение "Институт
физики имени Б. И. Степанова Национальной
академии наук Беларуси"

ЭФФЕКТ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ УПРУГИХ ЭЛЕМЕНТОВ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ МИКРОРЕЛЕ.

ЧАСТЬ 1. ДЕФОРМИРОВАННЫЙ ЯКОРЬ

Поступила в редакцию 10.05.2011

Рассмотрен эффект создания внутренних механических напряжений в электростатических микрореле за счет деформирования упругих подвижных элементов. Исследованы варианты с упругодеформированным якорем в объемном и планарном конструктивном исполнении. Приведены основные математические соотношения и примеры конструкций.

Ключевые слова: электростатическое микрореле, планарная и объемная конструкция, активные электростатические и реактивные механические силы, деформирование упругих элементов

Перспективность электростатических микрореле (ЭСР) подтверждается постоянно растущими объемом номенклатуры и областями применения [1]. Объяснением и обоснованием востребованности ЭСР являются, в первую очередь, практически нулевая потребляемая электроэнергия, минимальные массогабаритные показатели, базирование на интегральной микроэлектронной технологии. Кроме того, преимуществами таких устройств, применяемых в современных электрических схемах, является возможность реализации разнообразных конструктивных вариантов.

В качестве материала для базовых элементов ЭСР, как известно, широко применяются кремний и его модификации. В некоторых конструкциях используются полимерные материалы. По нашему мнению, многообещающей альтернативой этим материалам является анодный оксид алюминия [2]. Его самоорганизующиеся пористые слои наряду с высокими электромеханическими свойствами позволяют осуществлять прецизионное формирование сложных планарных и объемных устройств, успешно функционирующих в широком интервале температур от -50 до $+600$ °С.

В настоящее время известен ряд конструктивных схем ЭСР. Наиболее распространены плоскопараллельные, консольные, торсионные варианты

компоновки. Они характеризуются наличием электродов на корпусных деталях и подвижных элементах, соединенных между собой упругими держателями. Параметры ЭСР во многом определяются соотношением активных сил F , создаваемых при подаче электрического напряжения на электроды, и реактивных сил P деформируемых держателей. Вопросу взаимосвязи этих сил посвящено значительное число теоретических работ, в которых рассмотрены типовые и оригинальные конструкции держателей, выявлен ряд закономерностей и критические значения основных функциональных параметров [3–6]. Но исследования проводились исходя из ненапряженного состояния упругих элементов в начальном состоянии. Между тем известно положительное влияние создания напряженных зон в механических, гидравлических, электротехнических и других системах.

В данной статье рассматривается эффект создания внутренних механических напряжений в ЭСР за счет деформирования упругих подвижных элементов. Теоретически исследуются варианты с упругодеформированным якорем и с упругодеформированными держателями в объемном и планарном конструктивном исполнении.

Как известно, при *объемной* компоновке микрореле успешно срабатывают при более низких значениях управляющих параметров, в частности, рабочего напряжения срабатывания U_p , за счет большей площади электродов. Но их "слоеная" конструкция обуславливает значительную погрешность межэлектродного расстояния t , являющегося замыкающим звеном размерной цепи, а также сложность сборки и монтажа.

Планарные, имея повышенные значения U_p , обладают прецизионностью размеров, малым разбросом выходных параметров, технологической и конструктивной простотой.

Выбор конструкции определяется условиями эксплуатации, конкретными заданными параметрами.

Принципиальная электрокинематическая схема ЭСР с упругодеформированным якорем (ЭСРЯ) (рис. 1) содержит основание 1, на котором размещен неподвижный электрод 2 и закреплены упругие консольные держатели 3 [7]. Между свободными концами предварительно изогнутых держателей размещен плоский якорь 4, который сжат держателями с усилием, превышающим критическую силу, и поэтому *в исходном состоянии якорь и держатели находятся в упругодеформированной криволинейной форме равновесия* [8, 9]. Упругая линия якоря согласно теории устойчивости описывается синусоидой. Максимальное межэлектродное расстояние при этом составляет

$$t_0 = H_0 + c, \quad (1)$$

где H_0 — максимальная исходная стрела прогиба в центре якоря; c — смещение концов якоря отно-

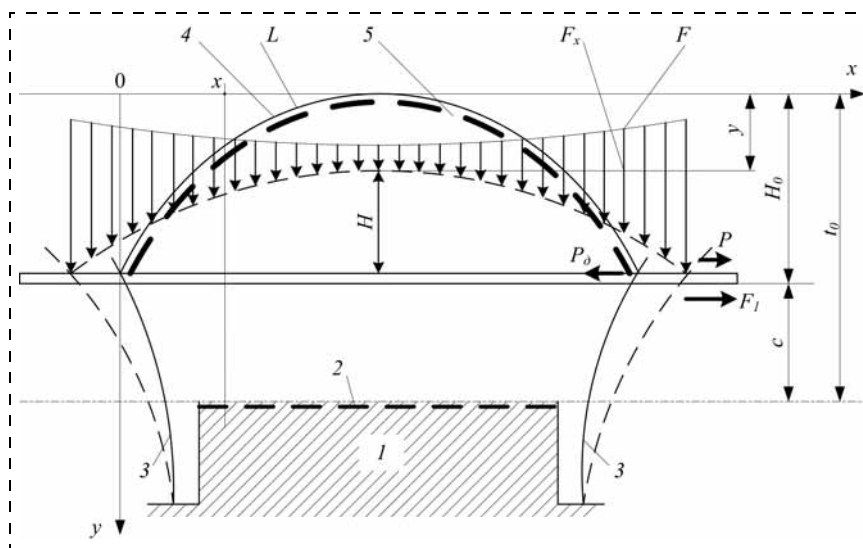


Рис. 1. Электрокинематическая схема ЭСРЯ

сительно неподвижного электрода, высота ступеньки.

На внутренней поверхности якоря 4 расположен подвижный электрод 5. При подаче на электроды плавно возрастающей от нуля разности потенциалов U по длине якоря возникают электростатические распределенные силы F_x , которые, отжимая концы держателей, "помогают" якорю выпрямиться, т. е. отклонение держателей достигается суммарным действием упругих механических сил P якоря и электростатических сил F . При этом действие электростатических сил принципиально отличается от их действия в традиционных конструкциях. В последних они прилагаются к держателям, не изменяя своего значения. В приводимой схеме они воздействуют на держатели через концы выпрямляемого якоря с большим передаточным отношением, трансформируясь благодаря малой кривизне якоря в многократно увеличенную суммарную силу F_1 . При этом, как видно из рис. 1, при одной и той же расчетной величине H_0 суммарные силы F_x вследствие криволинейной формы якоря существенно больше, чем у плоских и консольных электродных систем.

Смещение концов стержня малой кривизны, как известно, составляет ничтожно малую часть перемещения середины, практически в реальных размерах ЭСРЯ она составляет доли микрон. Поэтому усилие и положение держателей, раздвигаемых только теоретически, практически остаются постоянными, что увеличивает их долговременную стабильность.

При подаче электрического напряжения U электростатические силы F при его повышении начинают выпрямлять якорь, с большим передаточным отношением преобразуясь в силы F_1 на концах якоря. Таким образом, якорь выполняет роль механического усилителя электрических сил, а воздейст-

вие его на держатели является дополнительной активной силой. Равновесное состояние характеризуется соотношением

$$F_1 + P = P_d, \quad (2)$$

где P_d — суммарная реактивная сила держателей.

Соотношение (2) определяет условие постепенного перемещения якоря в межэлектродном промежутке. Усилия P и P_d определяются механическими и геометрическими параметрами элементов микрореле и вычисляются по теории упругости в функции изменения прогиба якоря [8] H или смещения его средней точки

$$y = H_0 - H = H_0 \left(1 - \frac{H}{H_0} \right) = H_0 (1 - m), \quad (3)$$

где m — относительное смещение.

Сила F_1 с учетом некоторых конструктивных параметров является известной функцией напряжения U . Теоретическое решение задачи взаимодействия активных и реактивных сил в процессе срабатывания ЭСРЯ дает следующую формулу [7]:

$$U = Q \sqrt{\frac{m(1-m^2)}{\int_0^1 \frac{n(1-n)dn}{\sin \pi n \left(\frac{c}{H_0} + m \sin \pi n \right)}}} = QU^*. \quad (4)$$

Сомножитель $U^*(m, n)$ является базовой функцией, характеризующей изменения напряжения в процессе срабатывания ЭСРЯ при $Q = 1$. Она не зависит от параметров Q , так как содержит относительные (нормированные) значения переменных в цикле величин m и n (линейного коэффициента):

$$m = \frac{H}{H_0}; n = \frac{x}{L}. \quad (5)$$

Значения коэффициентов в процессе прямого хода от начала до конца меняются в пределах: $m = 1 \dots 0$; $n = 0 \dots 1$.

Высота ступеньки с конструктивно может изменяться в широких пределах, но реально по результатам анализа отношение c/H_0 ограничивается диапазоном $0,1 \dots 0,3$, так как при отношениях $< 0,1$ мал реактивный момент, а при $> 0,3$ значительно возрастает электрическое напряжение.

Параметры, входящие в константу Q , в частности длина якоря L , в процессе цикла не изменяются, но корректировкой конструкции достаточно про-

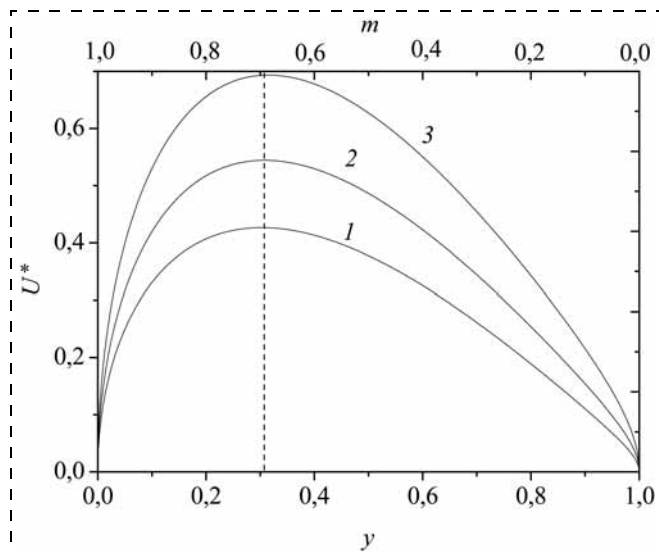


Рис. 2. Зависимость $U^* = f(m, n)$ и значения U_p в ЭСРЯ при $c/H_0 = 0,13$ (1), 0,2 (2), 0,3 (3)

Экстремальные значения m_0 и U_0^* в зависимости от c/H_0

Параметр	c/H_0		
	0,13	0,2	0,3
m_0	0,7	0,69	0,69
U_0^*	0,426	0,544	0,694

сто, используя $U_0^* = U_{\max}^*$, можно обеспечить требуемое значение рабочего напряжения.

В таблице и на рис. 2 приведены результаты расчета базовых кривых U^* . Графически они представляют собой плавные кривые типа несимметричной параболы с нулевыми значениями при $m = 1$ и $m = 0$ и максимальной величиной U^* у всех вариантов отношений c/H_0 при $m_0 \approx 0,7$. Максимальное значение U_0^* увеличивается от 0,43 до 0,69, т. е. в 1,6 раза. Экстремальные значения U_0^* и m_0 остаются постоянными при соответствующих размерах c/H_0 и могут непосредственно использоваться при конструировании и корректировке ЭСРЯ.

Прямой ход рабочего цикла ЭСРЯ согласно приведенным данным содержит две области:

- управляемую до $m_0 \approx 0,7$ ($y = 0,3H_0$), $U_0^* = 0,43...0,69$, которая характеризуется равновесным состоянием;
- неуправляемую при $m = 0,7...0$, в которой активные силы значительно превосходят реактивные, так как за пределами m_0 величина $U_0^* = \text{const}$.

В зависимости от конструктивного исполнения по расчетам снижение U_p за счет деформирования якоря и снижения жесткости упругих элементов достигается в 5...10 раз.

Таким образом, в реальных условиях эксплуатации, которые характеризуются возрастающим напряжением, включение микрореле произойдет при рабочем напряжении $U_p^* = U_0^*$ в момент, когда якорь

сместится на $m = 0,3$, так как далее под действием нарастающего превосходства сил F над P при $U_0^* = \text{const}$ якорь мгновенно преодолевает оставшееся межконтактное расстояние. На участке $m = 1...0,7$ сохраняется равенство (1). Далее при $m = 0,7...0$ сила P увеличивается незначительно, F резко возрастает, но еще интенсивнее повышается F_1 (при $H_0 = 20$ мкм, $L = 5,6$ мкм отношение $F_1/F \approx 55$).

Эффект деформирования якоря обеспечивает снижение рабочего электрического напряжения ЭСР с аналогичными габаритными размерами.

Объемный вариант (ЭСРЯо)

ЭСРЯо содержит (рис. 3) диэлектрическую базовую подложку 1 с неподвижным управляющим электродом 2 и контактами 3, упругий диэлектрический якорь 4 с подвижными управляющими электродами 5 и контактной перемычкой 6, диэлектрическую рамку 7. В подложке выполнена полость 8 с дном 9, на двух противоположных сторонах которого сформированы выступы 10. С наружной стороны обоих выступов и параллельно им сформировано по два сквозных паза 11 и 12, образующих между собой по два упругих симметричных консольных держателя 13. Якорь выполнен из тонкой плоской прямоугольной пластины. Он расположен на выступах между четырьмя упругими держателями, отжатыми при сборке в наружную сторону так, что в собранном виде они сжимают якорь с силой $2P_d$, превышающей критическую нагрузку $P_{кр}$. Таким образом, якорь в ЭСРЯо находится в напряженном упругодеформированном изогнутом состоянии. Положение концов якоря в микрореле фиксируется рамкой, в средней части ее выполнено окно 14, в котором размещается изогнутая часть якоря. Между выступами и прилегающими сторонами рамки предусмотрены зазоры 15 и 16, равные толщине якоря. Требуемый зазор обеспечивается конструктивными размерами и технологией, зазора 16 — ступеньками 17.

При подаче на ЭСРЯо напряжения якорь, как изложено в описании кинематической схемы, легко раздвигает держатели. Постепенно преодолевая соответственно нарастающему напряжению расстояние, равное $0,3 H_0$, мгновенно затем переходит в прямолинейную форму и перегибается в сторону основания. Контакты соединяются, замыкая управляемую цепь. Концы якоря защемляются в зазорах 16, что создает реактивные моменты M . Ступеньки и выступы, замкнувшиеся контакты, моменты M исключают замыкание электродов. После снятия напряжения реактивные моменты вначале возвращают якорь в прямолинейное положение, затем он по инерции перегибается дальше от основания и под действием сжимающих сил P_d держателей возвращается в исходное положение.

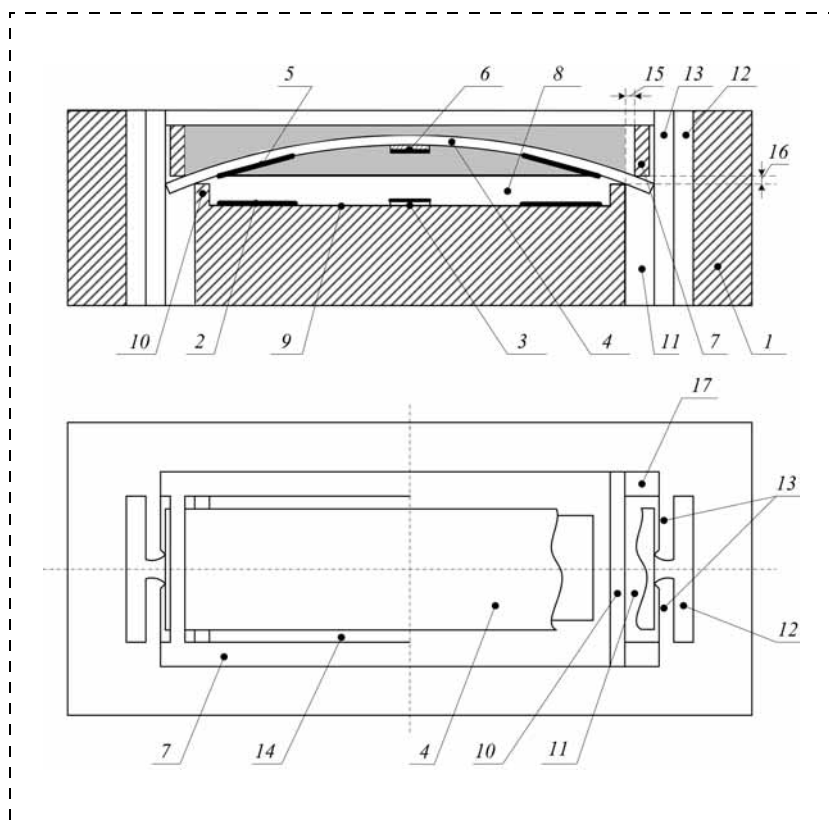


Рис. 3. Объемный вариант ЭСРЯо

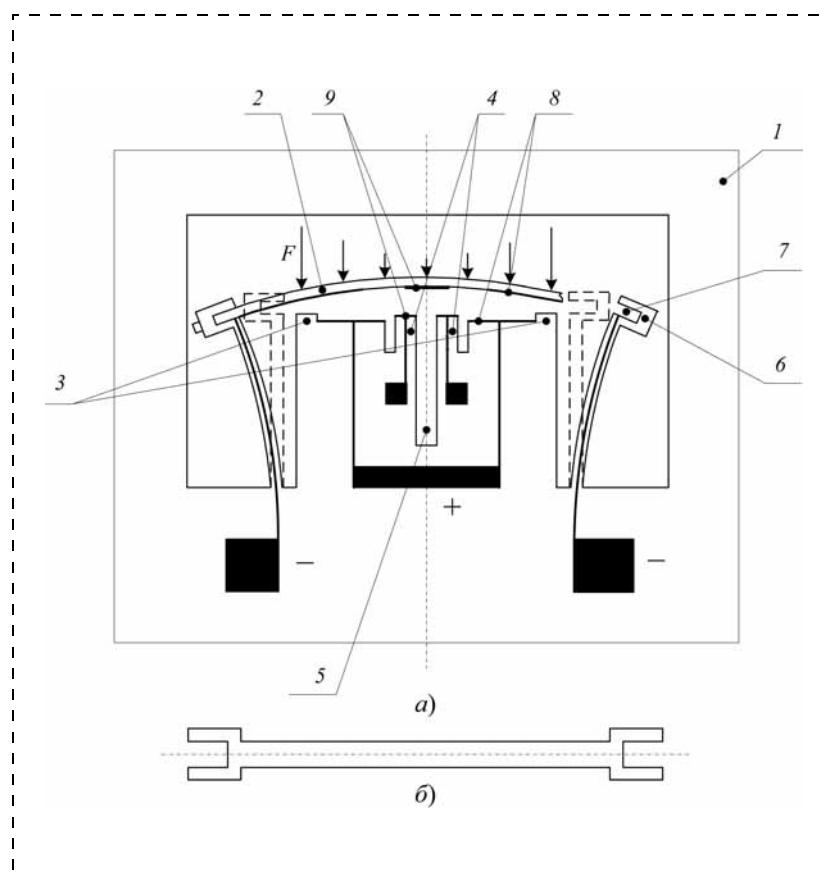


Рис. 4. Планарный вариант ЭСРЯп (а) с якорем (б)

Планарный вариант (ЭСРЯп)

ЭСРЯп содержит подложку 1 и якорь 2 (рис. 4), выполненные из плоских диэлектрических пластин. В подложке сформирован П-образный выступ. На его торцевой части по краям размещены опоры 3, а в центре расположены симметрично две ступеньки 4, разделенные щелью 5. Высота ступенек меньше высоты опор. Вдоль боковых сторон выступа расположены упругие консольные держатели 6. На их концах выполнены обращенные к оси микрореле пазы держателя 7, ширина которых равна толщине якоря. В исходном (не деформированном) состоянии держатели расположены параллельно боковым сторонам выступа.

Якорь (рис. 4, б) выполнен прямоугольной формы. На его концах предусмотрены пазы шириной, равной толщине подложки. В собранном виде пазы держателей и якоря соединены в замок, а детали находятся в напряженном деформированном криволинейном состоянии равновесия.

На подложке и якоре сформированы электроды 8, контакты 9, электропроводящие дорожки.

Функционирование ЭСРЯп аналогично работе ЭСРЯо.

Список литературы

1. Нано- и микросистемная техника. От исследований к разработкам / Под ред. П. П. Мальцева. М.: Техносфера, 2005. 592 с.
2. Мухуров Н. И. Аллюмооксидные микро-наноструктуры для микроэлектромеханических систем. Мн.: Бестпринт, 2004. 166 с.
3. Hah D., Yoon E. A Low-Voltage Actuated Micromachined Microwave Switch Using Torsion Springs and Leverage // IEEE. Microwave theory and techniques. 2000. Vol. 48, N 12. P. 2540–2545.
4. Chan K. E., Dutton R. W. Electrostatic Micromechanical Actuator with Extended Range of Travel // MEMS. 2000. V. 9, N 3. P. 321–328.
5. Алексеев А. Г., Болян Н. Н. Анализ эффекта схлопывания электродов электростатических актюаторов в MENS- и HEMS-устройствах // Нано- и микросистемная техника. 2005. № 7. С. 31–41.
6. Gugliotta A., Soma A., Manro S. et al. Non-linear analysis of beams under electrostatic loads // Design, Test, Integration and Packaging MEMS/MOEMS. Paris, France. 2000. Vol. 4019. P. 372–378.
7. Efremov G. I., Mukhurov N. I., Chodin A. V. Modeling of electromechanical forces in electrostatic microrelay with elastically deformed anchor // Proc. of SPIE. 2001. Vol. 4593. P. 255–262.
8. Пономарев С. П. и др. Расчеты на прочность в машиностроении. М.: Наука, 1956. 569 с.
9. Тимошенко С. П. Устойчивость стержней, пластин и оболочек. М.: Наука, 1971. 808 с.

Ученые оптимистически смотрят на возможность достичь комнатной сверхпроводимости

Учеными из Физического института имени П. Н. Лебедева РАН (ФИАН), химического факультета МГУ и Института физики высоких давлений РАН впервые в России синтезирован однофазный высокотемпературный сверхпроводник на основе арсенида железа, обладающий чрезвычайно высоким значением критического магнитного поля (оценивается в 130 Тл).

Начало истории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) было положено в 1986 г., когда в соединениях на основе оксида меди были обнаружены сверхпроводящие свойства. На сегодняшний день ленточные сверхпроводники на основе оксида меди YBaCuO , пригодные для практических применений при температуре жидкого азота (77 К), производятся промышленностью в нескольких странах для конкретных энергетических и электротехнических проектов или в режиме опытного производства.

В начале 2008 г. физики синтезировали новый класс сверхпроводников с общей химической формулой ReFeAsO (Re — редкоземельный металл). Можно сказать, что монополия оксидов меди была нарушена. Само по себе явление сверхпроводимости в соединении на основе железа уже антагонизм. Железо, как известно, обладая свойством спонтанной намагниченности атомов, концентрирует в материале магнитное поле, в то время как одно из определяющих свойств сверхпроводимости — это выталкивание магнитного поля из объема материала (эффект Мейснера).

На базе отдела "Высокотемпературная сверхпроводимость и сверхпроводниковые наноструктуры" ФИАН, которым заведует доктор физ.-мат. наук Владимир Пудалов, также проводятся синтез и исследования новых "железных" сверхпроводников. Группа физиков ФИАН в кооперации с химиками из МГУ и физиками из Института физики высоких давлений разработала метод синтеза и успешно синтезировала соединения этого же класса с магнитными ионами Gd с различным содержанием кислорода и фтора. Было обнаружено, что наиболее высокой критической температурой (53 К) обладает состав $\text{GdFeAsO}_{0,88}\text{F}_{0,12}$ с замененной (допированной) частью атомов кислорода атомами фтора.

"Наиболее трудным делом было получить материал в чистом виде — так называемый однофазный, с прак-

тически 100 %-ным содержанием желаемой сверхпроводящей фазы", — рассказывает Владимир Пудалов.

Такой материал российским ученым удалось получить впервые в мире, до этого экспериментаторы довольствовались в лучшем случае 10 %-ным содержанием сверхпроводящей фазы. В результате этого достижения высококачественные образцы новых перспективных материалов станут доступными для физиков не только ФИАН, но и других научных институтов России.

Тем временем, "железные" сверхпроводники обладают удивительной особенностью — не так давно в области сверхпроводимости был обнаружен еще один фазовый переход — антиферромагнитный. Антиферромагнетизм — одно из магнитных состояний вещества, при котором элементарные магнетики (в данном случае — соседних атомов Gd) направлены антипараллельно, сводя общую намагниченность материала к нулю. Стоит отметить, что антиферромагнетизм возникает в этих, а также многих других соединениях при высоких температурах, как фаза, предшествующая сверхпроводимости при более высокой температуре, или в прародительских недопированных соединениях". Как считают ряд теоретиков, это означает, что "клеем", соединяющим электроны в сверхпроводящие пары, является их взаимодействие с помощью магнитных флуктуаций.

Оценивая из полученных результатов критическое магнитное поле, которое способно выдержать соединение, оставаясь сверхпроводником, ученые ФИАН получили огромное значение около 130 Тл. Это почти такое же значение, что и у наиболее изученного купратного сверхпроводника YBaCuO с почти вдвое большей критической температурой — 92 К. Для сравнения, максимальное магнитное поле, получаемое в лабораторных условиях с помощью "традиционных" промышленно выпускаемых сверхпроводников (Nb_3Sn , NbTi), на сегодня едва достигает 21 Тл. Этот предел связан с тем, что критическое магнитное поле для лучшего из традиционных сверхпроводников Nb_3Sn составляет 28 Тл, т. е. в 5 раз меньше, чем у синтезированного в ФИАН "железного" сверхпроводника. Нужно провести еще множество измерений, расчетов и аналитических умозаключений, однако уже сейчас понятно, что обнаруженные полифункциональные свойства новых "железных" сверхпроводников-магнетиков и их высокие критические поля найдут свое применение в технике.

"Это подобно ситуации, когда ребенку дают красочную коробку с новой игрушкой, он еще не знает,

как ей пользоваться, но уже находится в радостном предвкушении предстоящей игры с ней", — делится эмоциями Пудалов.

Открытие нового класса сверхпроводников, несомненно, даст новую подсказку теории, более 20 лет ищущей ответ на вопрос о механизме высокотемпературной сверхпроводимости. Возможно также, что эти исследования подскажут путь к повышению температуры сверхпроводящего перехода до комнатной.

Получены результаты эксперимента, критического для определения природы ВТСП

Один из самых актуальных вопросов современной физики твердого тела — отличается ли механизм высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) от классического механизма БКШ и если да, то чем? Главный научный сотрудник Физического института им. П. Н. Лебедева РАН (ФИАН) чл.-корр. РАН Евгений Максимов и его коллега профессор МГУ Ярослав Пономарев рассказывают о результатах эксперимента, вносящего некоторую ясность в этот вопрос.

Сверхпроводимость — явление полного исчезновения сопротивления электрическому току в металлах при низких температурах. Его "расшифровка" оказалась весьма непростым делом: само явление обнаружено в 1911 году, а понимание его механизма, так называемая теория Бардина—Купера—Шриффера (БКШ), пришло только в 1956 году. Оказалось, что сверхпроводимость — движение электронов в металле без сопротивления возникает в результате взаимодействия электронов с фононами (от греческого "фонос" — звук). Такое красивое название для колебаний кристаллической решетки придумал основатель отдела теоретической физики ФИАН и нобелевский лауреат Игорь Тамм.

За два последних десятилетия было открыто большое число так называемых высокотемпературных сверхпроводников, в том числе в 2008 году — новый класс материалов на основе арсенидов железа. Рекордные температуры сверхпроводящего перехода, которыми отличились эти новые сверхпроводники, резко обострили дискуссию о природе их сверхпроводимости.

Наиболее существенным отличием сверхпроводника от нормального (то есть несверхпроводящего) металла является наличие в его электронном спектре так называемой "сверхпроводящей щели", т. е. области, в которой нет разрешенных электронных состояний. Образно эту щель можно уподобить воздушной подушке, позволяющей судну резко увеличить свою скорость. Одним из наиболее надежных способов определения параметров сверхпроводящей щели является измерение вольт-амперной характеристики туннельного контакта — зависимости тока от напряжения. Когда материал находится в нормальном состоянии, эта зависимость линейна, т. е. подчиняется закону Ома, занимающему почетное место в школьной программе. Но в случае сверхпроводника вид вольт-амперной характеристики контакта резко меняется.

"Для изучения сверхпроводящей щели, — рассказывает Евгений Максимов, — нужно измерять вольт-амперную характеристику контакта двух сверхпроводников или так называемую туннельную характеристику. Исследование туннельных характеристик — очень мощное оружие, их много изучали в случае старых классических сверхпроводников. Для этого необходимо напылить одну сверхпроводящую пленку, положить на нее какой-то довольно тонкий изолятор (или просто окислить металлическую пленку, подержав ее на воздухе), а затем напылить сверху вторую пленку. Но сделать все это нужно очень качественно, чтобы не допустить прокола — соприкосновения сверхпроводящих слоев".

Подобные проколы неоднократно приводили к возникновению хитроумных моделей, придуманных в ответ на интерпретации неадекватных экспериментов. А в ряде классов высокотемпературных сверхпроводников ситуация усугубляется.

"Сделать классические контакты в новых сверхпроводниках невозможно, — сетует Максимов. — Но люди придумали выход: берут пленку и, напирая на нее, ломают. Все новые сверхпроводники еще и слоистые, пленка трескается, и возникает тот самый туннельный контакт, который нужен для измерений".

Но и эта процедура не решила всех проблем — для надежных измерений нужен набор статистики, т. е. необходимо делать и измерять десятки таких контактов в одном образце. И первым научился это делать профессор МГУ Ярослав Пономарев. Под его руководством была создана установка, включающая быстродействующий автоматический цифровой мост, который позволяет записывать вольт-амперные характеристики с очень высокой точностью.

Вот что рассказал Ярослав Пономарев о технологии эксперимента: "Сначала из заготовок вырезаем прямоугольные образцы миллиметровой ширины и толщиной 0,2—0,3 мм. Потом в центральной части образца пропиливаем небольшое углубление, и кладем его на специальную подложку с токовыми и потенциальными контактами из жидкого индий-галлиевого припоя. Получается, что образец как бы плавает на контактах и благодаря этой уловке он остается целым при монтаже столика в криостате. При гелиевой температуре индий-галлиевый припой затвердевает, и образец жестко закрепляется. Если с помощью микрометрического винта деформировать подложку, то в образце, в месте углубления, образуется микротрещина. Этим же винтом можно смещать криогенные сколы в малых пределах относительно друг друга и тем самым перестраивать микроконтакт непосредственно в процессе измерений. За одну такую заливку удастся записать около 20—30 (!) качественных характеристик микроконтактов".

По виду вольт-амперных характеристик получаемые микроконтакты можно разделить на два основных типа: туннельные контакты сверхпроводник—изолятор—сверхпроводник и, так называемые, андереевские баллистические наноконтакты. Последние возникают при туннелировании электронов между пленками, разделенными нормальным металлом, а не диэлектриком.

Через контакт сверхпроводник—изолятор—сверхпроводник может протекать сверхпроводящий ток, называемый джозефсоновским (за открытие этого эффекта в 1973 году была присуждена Нобелевская премия). В этом случае напряжению оказывается пропорциональна не сила тока, а его частота. При совпадении джозефсоновской частоты с частотами определенных фононных колебаний на характеристике джозефсоновского ВТСП контакта возникает ряд особенностей, которые хорошо заметны. Это позволяет определять энергию фононных колебаний с очень высокой точностью. Таким образом, получается новый метод исследования ВТСП — терагерцевая фононная спектроскопия.

Методика эксперимента позволяет также использовать уникальное явление — внутренний эффект Джозефсона, который обнаруживается в слоистых ВТСП типа $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_8$. Такой сверхпроводник представляет собой естественную "стопку" джозефсоновских контактов — здесь сверхпроводящие блоки из CO_2 -плоскостей толщиной порядка $2,5 \text{ \AA}$ ($0,25 \text{ нм}$) чередуются с изолирующими слоями SrO—BiO—BiO—SrO толщиной около $12,5 \text{ \AA}$ ($1,25 \text{ нм}$). Как говорит профессор Пономарев, "наноступеньки" на поверхности криогенных сколов монокристаллов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_8$ обладают великолепными многоцветными вольт-амперными характеристиками при гелиевых температурах! В частности, благодаря этому мы установили, что при совпадении удвоенного значения щели (2Δ) с энергией одной из оптических фононных мод в наноступеньках возникает резонансное возбуждение 2Δ -фононов. На вольт-амперных характеристиках при этом появляются гигантские неустойчивости, которые сопровождаются излучением электромагнитных волн в терагерцевом диапазоне.

Благодаря исключительной результативности созданной установки сотрудничество МГУ с ФИАН вылилось в систематические исследования высокотемпературной сверхпроводимости. Такие исследования методами туннельной и андреевской спектроскопии проводятся совместно с сотрудниками ФИАН доктором физ.-мат. наук Е. Г. Максимовым и С. И. Красносвободцевым в течение последних 10 лет, а в 2009 году были начаты исследования и новых железосодержащих сверхпроводников совместно с сотрудниками ФИАН доктором физ.-мат. наук В. М. Пудаловым и канд. физ.-мат. наук Ю. Ф. Ельцевым.

Евгений Максимов с удовлетворением резюмирует результаты законченного эксперимента: "Нам удалось наблюдать и доказать, что в высокотемпературных сверхпроводниках с электронами взаимодействуют фононы, т. е. по сути эти сверхпроводники ничем радикально не отличаются от старых. А все предлагаемые на роль фононов некие спиноны и прочее — они здесь просто не видны. То есть в новых сверхпроводниках работает все то же электрон-фононное взаимодействие".

Создан алгоритм безлинзового определения поля излучения произвольного направления

Безлинзовая оптика — техника получения изображения объектов компьютерным методом, позволяющая обойтись без оптических приборов (линз). Существовавшие до недавнего времени алгоритмы, позволяли работать только с излучением, распространяющимся перпендикулярно исследуемому объекту.

Отражательная микроскопия особенно актуальна для диапазона мягкого рентгеновского излучения, где уже работают лабораторные рентгеновские лазеры и лазеры на свободных электронах. В связи с этим специалистами Лаборатории рентгеновской оптики ФИАН разрабатываются методы решения параболического уравнения с начальными условиями, заданными на поверхностях произвольной формы и ориентации. В результате впервые получена точная формула, обобщающая известный интеграл Френеля, позволяющая решить данную задачу в случаях произвольного направления излучения относительно предмета. На основе этой формулы в лаборатории создана компьютерная программа, являющаяся основным инструментом новой безлинзовой технологии контроля изображения.

К настоящему времени получен усовершенствованный вариант компьютерной программы, позволяющий, в рамках допустимых приближений параболического уравнения, с высокой точностью определять поля излучения неплоских объектов. Полученные результаты позволяют расширить поле численных и реальных экспериментов с лазерным излучением.

В настоящее время в рентгеновской оптике, как правило, приходится иметь дело с отражениями под малым углом, при том, что существующий метод получения изображений путем восстановления фазы волн разработан только для геометрии нормального падения пучка на прозрачный объект. Очевидно, что столь сложная задача как определение формы поверхностей с помощью существующего метода восстановления фазы решена быть не может. Поиск такого решения стал одной из основных тем исследований Лаборатории рентгеновской оптики.

Комментирует научный сотрудник Лаборатории рентгеновской оптики ФИАН, кандидат физико-математических наук Николай Попов: "Удивительно, что этой задачей до сих пор никто не занимался. Польза от ее решения для рентгеновской оптики кажется очевидной. В ходе проведенной работы выяснились интересные аналитические детали, в частности, выяснилось, что решение задачи не сводится к масштабированию интеграла Френеля".

Полученные результаты планируется использовать для контроля рентгеновских зеркал в международном проекте XFEL — проекте создания рентгеновского лазера на свободных электронах.

Лазерное охлаждение атомов — задачи такого класса всегда решаются на границе чувствительности

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (ФИАН) — один из мировых лидеров в области лазерного охлаждения атомов. Сотрудники ФИАН, работающие в этом направлении, активно сотрудничают со специалистами Всероссийского научно-исследовательского института физико-технических и радиотехнических измерений (ФГУП ВНИИФТРИ) — главного метрологического центра страны. Полученные результаты исследований позволили приступить к решению немыслимой ранее задачи — созданию уникального лазера с шириной спектра менее одного герца.

Процесс лазерного охлаждения связан с замедлением атомов в лазерном поле. Находящиеся в постоянном движении атомы рассеивают фотоны (кванты света). Именно поэтому свет (поток фотонов) воздействует на атомы. А если частота его излучения правильно настроена относительно перехода в атоме, частица, попавшая в такой специально подготовленный свет, замедляется. Частица "вязнет" в световом потоке, тормозится и, соответственно, охлаждается до очень низких температур, существенно ниже тех, что удастся получить любым другим способом, например в криостатах.

Установка лазерного охлаждения — это вакуумная камера, в которую с шести сторон направлены лазерные пучки. Ведь для охлаждения атом надо затормозить по всем трем координатам (возможным направлениям движения). Горячие атомы запускаются в камеру либо в виде пара, либо как пучок. После охлаждения облачко из холодных и пойманных атомов, парящих в вакууме ("левитирующих"), выглядит как светящаяся точка. Можно менять число атомов в облачке от единиц до нескольких миллионов. При отключении излучения лазеров облачко начинает падать под действием силы тяжести.

Говорит доктор физ.-мат. наук Николай Колачевский: "Если охлаждать (при помощи холодильника) газ, он превратится сначала в жидкость, а затем в твердое тело. А у него совершенно другие характеристики по сравнению с отдельными атомами — вследствие сильных взаимодействий в решетке вместо тонких уровней возникают зоны, и свойства меняются радикальным образом. Поэтому для решения задачи глубокого охлаждения отдельных частиц криостаты не подходят. Кроме того, предельно достижимые температуры, которые обеспечивают современные криостаты, — порядка 50 мК, то есть 0,05 К. А в задачах лазерного охлаждения речь идет о микрокельвинах, что на три порядка величины ниже. Охлажденные атомы представляют собой разреженный газ в управляемом режиме, что дает возможность наблюдать ряд специфических эффектов, например переход в Бозе-конденсированное состоя-

ние, изучать квантовую природу этих атомов, а также использовать их в ряде прикладных задач".

Охлаждение нового элемента (а из таблицы Менделеева охлаждена лишь небольшая часть) — отдельная исследовательская работа, ведь у каждого элемента свои специфические уровни энергии, что требует использования лазеров с определенными характеристиками. Такая работа всегда отмечается в профессиональном сообществе. В ФИАНе был впервые охлажден лантаноид тулий (Tm). Результаты работы будут использованы в исследованиях квантовых взаимодействий при сверхнизких температурах и в прецизионной метрологии.

Для этих исследований есть прикладные задачи, например, связанные с развитием программ ГЛОНАСС и прецизионным позиционированием. Но основное — метрология. Самые точные эталоны частот, самые точные в мире часы, которые снабжают частотой международные лаборатории, базируются сегодня на холодных атомах. Совместные работы в этой области ведут ФИАН и ФГУП ВНИИФТРИ — национальный метрологический институт России.

Наибольший исследовательский интерес в этой области, по словам Николая Колачевского, представляют оптические стандарты. Например, цезиевый фонтан — установка для стандартов частоты, в которой облако холодных атомов цезия подбрасывается вверх и проходит через радиочастотный резонатор лазерного охлаждения, — работает в радиочастотном диапазоне, на лазерном переходе. Если же добиться повышения несущей частоты, можно повысить стабильность и точность, что и достигается в оптических стандартах, базирующихся на лазерных переходах в холодных атомах.

В ФИАНе начинаются опытно-конструкторские работы для стандартов частоты по созданию лазера с шириной спектра менее одного герца. Частота его составит 500 терагерц ($5 \cdot 10^{14}$ колебаний в секунду), а электронная стабилизация по специальному резонатору позволит добиться стабильности менее одного "неправильного" колебания в секунду. Луч такого лазера можно было бы послать на Луну и получить обратно — он сохранил бы свою когерентность и позволил бы наблюдать интерференцию. В прикладном аспекте такие характеристики будут использованы, прежде всего, при работе со стандартами частоты. Кроме того, возникают совершенно новые возможности при передаче частот. Это может быть сверхстабильная синхронизация приемника-передатчика, особенно при больших потоках информации, без применения синхронизирующих импульсов. Или, например, настройки для считывания сигналов ускорителя частиц с очень высоким синхронным временным разрешением.

По материалам АНИ "ФИАН-информ"
(<http://www.fian-inform.ru/>)

CONTENTS

Rathkeen L. S. *The Prospective of Development of World Nanotechnological Industry* 2
The Third international nanotechnological forum took place in Moscow November 1—3, 2010. On the forum were discussed the prospective of development of world nanoindustry. Scientific & technological program consists of 8 main directions: nanoelectronics, nanotechnologies for energy, nanomaterials, nanobiotechnologies, nanophotonics, nanotechnologies in healthcare, nanodiagnostics and catalysis and chemical industry.

Keywords: nanoindustry, nanoelectronics, energy, nanomaterials, nanobiotechnologies, nanophotonics, healthcare, nanodiagnostics, catalysis, chemistry, information technologies

Glukhova O. E., Kolesnikova A. S. *Theoretical Investigation of the Peapod Bending Influence on the Polymerization Process* 10

We have studied the process of bending of the empty carbon nanotube (10,10) and the tube filled by fullerenes C_{60} . We have shown that the empty nanotube is not break at the bending of 270 degrees, and the polymerization of fullerenes and the chemical interaction between the fullerenes and the tube wall is observed in the tube filled with fullerenes. The inside of the nanotubes is transformed into a wave-like. We used two methods: the empirical and the quantum — mechanical methods. We used the multi-dimensional approach. The simulation until the polymerization of fullerenes is carried out by the empirical method, and the polymerization process is modeled by the tight binding method.

Keywords: the polymerization process, the bending, peapod, the empty nanotubes

Zaitsev N. A., Matyushkin I. V., Krasnikov A. G., Orlov S. N., Pastuhova Yu. M. *The Significance of Interfaces in the Nanoscale MISFETs with Multilayer High-K Dielectrics* 15

The paper deals with the thesis of the necessity to control the structure suboxide layer at the high-K dielectric/Si interface by forming an SiO_2 ultrathin layer as well as the feasibility of using a buffer layer at the high-K dielectric/metal interface.

Keywords: interfaces, MIS-structure, high-K dielectrics

Smolin V. K., Gerasimov V. A. *Quality Evaluation Possibilities of Metallization Electromigration Tolerance* . . . 17

There are reviewed issues referred to evaluation methods of thin film metallization tolerance to electric loadings with high current density. There are shown the aspects of determined electrical impulses application at metallization operation control.

Keywords: metallization, electromigration, electrodiffusion, thin film structures, impulse action

Chernov V. A., Miterev A. M., Prudnikov N. V., Sigeikin G. I., Leonova E. A. *Optimization of Structure and the Sizes of Current Sources Based on Direct Nuclear-Electrical Energy Converting with Use of Secondary Electrons* 21

Measurements of secondary electrons current in metall-isolator-metall structures (MIM-structures) $W-Al_2O_3-Al$ as the elements of current sources based on direct nuclear-electrical energy converting with use of secondary electrons are executed. Calculations of fission fragments and alpha particles power losses in MIM-structures layers are executed. The made experiments and calculations have allowed to optimize the structure and the sizes of current sources based on direct nuclear-electrical energy converting with use of secondary electrons.

Keywords: direct nuclear-electrical energy conversion, secondary electrons, metal-isolator-metal structures, method of magnetron ionic-plasma dispersion, electronic beam dispersion method

Voitsekhovskii A. V., Nesmelov S. N., Kulchitsky N. A., Melnikov A. A. *Influence of Dislocations on the Internal Quantum Efficiency of Light-Emitting Structures Based on Quantum Wells InGaN/GaN* 27

The different methods to determine the internal quantum efficiency of light-emitting structures based on quantum wells InGaN/GaN were analyzed. Recombination properties of structures based on quantum wells InGaN/GaN and the influence of dislocations on the internal quantum efficiency of light-emitting structures based on quantum wells InGaN/GaN were examined.

Keywords: internal quantum efficiency, group III nitrides, quantum wells, light-emitting structures, dislocation

Gavasheli D. Sh., Rekhviashvili S. Sh. *Thermal Destruction of Fractal Nanostructures under Pulsed Laser Radiation* 36

We performed a simulation of the destruction of fractal nanostructures by laser radiation of finite duration, based on nonlinear partial differential equations. Fractality is taken into account when calculating the thermal conductivity coefficient, isochoric heat capacity and intensity of thermal radiation of the substance. The dependence of the critical laser intensity of the pulse duration is construct. Demonstrated a qualitative agreement of simulation results with experimental results.

Keywords: fractal nanostructure, thermal properties, laser destruction of nanomaterials

Mustafaev Ab. G., Mustafaev G. A., Mustafaev Ar. G. *Silicon on Sapphire Heteroepitaxy Study for Creation Transistor Structures* 41

In work investigated mechanism of silicon on sapphire heteroepitaxy, for the subsequent creation low defect level transistor structures. By RBS method were studied epitaxial silicon layers on sapphire substrate. In these layers defects increase in those areas of a spectrum is appreciable which correspond to intermediate area between a layer and substrate and give the maximal contribution in channeling. Auger analysis determines structure and depth of a transitive layer. The way of creation of the semi-conductor device with the improved parameters is developed.

Keywords: silicon on sapphire, silicon on insulator, Rutherford back scattering

Adamov Yu. F., Bratov A. V., Bratov V. A., Grunshpan A. A., Gorshkova N. M., Sibagatullin A. G. *Universal Differential Signal Receiver for Programable ICs* 44

The article content description of differential signal receiver with high range common mode displacement. Receiver based on the BiCMOS technology with heterostructure SiGe bipolar transistors.

Keywords: receiver of differential signal, FPGA, CPLD, serial interface, heterostructure bipolar transistor

Mukhurov N. I., Efremov G. I., Zhvavyi S. P. *Effect of Preliminary Deformation of Elastic Elements of Electrostatic Microrelays. Part 1. The Deformed Anchor* 47

The effect of creation of internal mechanical stresses in electrostatic microrelays is considered due to deformation of elastic mobile elements. Variants are investigated with elastically deformed anchor in the bulk and planar design. The basic mathematical equations and examples of designs are resulted.

Keywords: electrostatic microrelay, planar and volumetric structure, active electrostatic and reactive mechanical forces, elastic deformation of the elements

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://novtex.ru/nmst

Адрес редакции журнала: 107076, Москва, Стромынский пер., 4. Телефон редакции журнала **(499) 269-5510. E-mail: nmst@novtex.ru**

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.

Дизайнер *Т. Н. Погорелова*. Технический редактор *Е. М. Патрушева*. Корректор *Е. В. Комиссарова*

Сдано в набор 17.06.2011. Подписано в печать 20.07.2011. Формат 60×88 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 6,86. Уч.-изд. л. 8,01. Заказ 548. Цена договорная

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