

# НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

№ 1(138) ✧ 2012

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.  
Андриевский 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.  
Тимошенко С. П.  
Тодуа П. А.  
Шубарев В. А.

**Отв. секретарь**

Лысенко А. В.

**Редакция:**

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

Учредитель:

Издательство  
"Новые технологии"

## СОДЕРЖАНИЕ

### НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

- Раткин Л. С.** Проблемы и перспективы развития нанотехнологий в России. . . . . 2  
**Глухова О. Е., Жничков Р. Ю., Слепченков М. М.** Программный комплекс для наноэлектроники . . . . . 5

### КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

- Ефимов В. В., Калинин В. А., Лихошерст В. В., Матвеев В. В., Распопов В. Я.** Информационно-аналитическое обеспечение начальных этапов проектирования микромеханических гироскопов и акселерометров . . . . . 11  
**Белогуров Е. А., Шукевич Я. И., Баркалин В. В., Хатько В. В., Таратын И. А.** Конечно-элементное моделирование термомеханических свойств нанопористых материалов. . . . . 18  
**Печерская Е. А., Метальников А. М., Вареник Ю. А., Бобошко А. В.** Метод измерения тока переключения и диэлектрических параметров сегнетоэлектриков **Бахвалова Т. Н., Белкин М. Е.** Моделирование фотонно-кристаллического спектрального демультиплексора . . . . . 27

### МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

- Самойлович М. И., Талис А. Л.** Кристаллические мультиферроики и симметричные особенности их магнитных подсистем . . . . . 31  
**Акопьян В. А., Захаров Ю. Н., Матвеев С. Ю., Панич А. А., Рожков Е. В.** Анализ стабильности электрофизических характеристик пьезокерамик различных составов, используемых для пьезоэлектрических генераторов повышенной мощности. . . . . 37

### ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

- Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е., Васильев В. А.** Повышение виброустойчивости тонкопленочных нано- и микроэлектромеханических систем и датчиков давления на их основе. . . . . 42  
**Ичкитидзе Л. П., Миронюк А. Н.** Топологический наноструктурированный пленочный сверхпроводниковый трансформатор магнитного потока. . . . . 47  
**Указатель статей, опубликованных в журнале** . . . . . 51  
**Contents** . . . . . 55

Аннотации на русском и английском языках с 1999 г. по настоящее время находятся в свободном доступе на сайтах журнала (<http://novtex.ru/nmst/>, <http://www.microsystems.ru>) и научной электронной библиотеки (<http://elibrary.ru>). Электронные версии полнотекстовых статей расположены на сайте журнала: с 1999 г. по 2010 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:

197076 Москва, Стромьинский пер., д. 4  
e-mail: [nmst@novtex.ru](mailto:nmst@novtex.ru)

# НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

УДК 623.3

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

## ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ НАНОТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ

*Поступила в редакцию 16.11.2011*

*Четвертый Международный форум по нанотехнологиям был организован и проведен в Москве с 26 по 28 октября 2011 года. На проведенных в рамках форума заседаниях рассматривался широкий круг проблем, связанный с проблемами и перспективами развития нанотехнологий и производства наноматериалов в России, капиталовложений в инновационные нанотехнологические проекты и инвестированием малых и средних nanoиндустриальных предприятий.*

**Ключевые слова:** *Российская академия наук, РАН, нанотехнологии, наноматериалы, инновации, инвестиции, электроника, строительство, здравоохранение, фармацевтика, медицина, нанофотоника, энергетика, машиностроение*

Форум открылся пленарным заседанием "Спрос на инновации". С приветственным словом к участникам и гостям обратились Президент Российской Федерации Д. А. Медведев, заместитель Председателя Правительства Российской Федерации С. Б. Иванов, Председатель Правления ОАО "Роснано" А. Б. Чубайс, Президент Фонда "Сколково" В. Ф. Вексельберг и ряд представителей крупного отечественного и зарубежного бизнеса. Известный американский ученый и популяризатор нанотехнологий Эрик Дрекслер представил доклад о развитии нанотехнологий. Заседание Комиссии по модернизации и технологическому развитию экономики состоялось в первый день работы Форума.

На круглом столе "Кремниевая электроника — основа инноваций" рассматривались проблемы поиска рынка сбыта отечественным товаропроизводителям, перспективы развития российского рынка микроэлектроники, меры стимулирования внутреннего спроса производством электронных устройств при локализации до уровня глубоких

технологических переделов, трансферта технологий с поиском баланса и оптимального решения между лицензированием и самостоятельной разработкой и государственной политики в сфере защиты интеллектуальной собственности. Проблематика придания инновационного импульса кластеру микроэлектронных предприятий в г. Зеленограде затрагивалась в рамках панельной дискуссии, на которой выступили вице-президент по развитию производства STMicroelectronics (Франция) Алан Астер, генеральный директор "НТ-МДТ" В. А. Быков, руководитель московского филиала "Особые экономические зоны" Ю. В. Васильев и представитель "НИИМЭ" и завода "Микрон" К. С. Абагян.

Обсуждению возможностей снижения уровня потенциальной опасности для здоровья человека содержащих наноматериалы строительных материалов, использованию в строительстве материалов с применением нанотехнологий и обсуждению результатов отраслевого технологического аналитического исследования "О развитии нанотехнологий в строительной отрасли" была посвящена секция "Развитие инновационных технологий в строительной отрасли". В частности, был представлен цикл презентаций инновационных строительных материалов и ассортимента продукции их производителей.

Секция "Светодиодная индустрия: потенциал российского рынка и конкурентные вызовы" была посвящена инфраструктуре и бизнес-аспектам внедрения светодиодных решений, обзорам российского и мирового рынка светодиодной продукции и инициативам отраслевого законодательного регулирования. Рассматривались инновации в сфере промышленного и бытового светодиодного освещения, потенциал роста инвестиционной активности в отрасли и возможности развития бизнеса в светодиодной промышленности. Обсуждались принципы формирования светотехнического кластера на базе сети региональных сборочных производств, этапы реализации программы по внедрению уличного светодиодного освещения на улицах Москвы, перспективы внедрения энергоэффективных программ, методы модернизации светотехнических производств на территории Томской области и результаты успешного опыта внедрения региональных светодиодных решений. Были также представлены инициативы по законодательному регулированию отрасли и комплекс нормативно-

правовых документов для выпуска светодиодной продукции в РФ, в частности, метрологическое обеспечение испытаний светодиодной продукции и гигиеническая оценка светодиодных источников света в образовательных учреждениях.

Проекты ГК "Ростехнологии", ОАО "Роснано", ОАО "Ростелеком" и ОАО "РЖД" были представлены на секции, посвященной реализации инновационных программ крупных отраслевых компаний. Рассматривались концепции и бизнес-стратегии развития производств телекоммуникационных и энергетических предприятий.

На секции "Наноцентры: возможности для коммерциализации научных разработок и поиска оптимальных технологических решений" обсуждались наборы основных сервисов в сфере нанотехнологий, этапы работы наноцентров ОАО "Роснано", примеры успешной деятельности международных наноцентров, условия выполнения НИР и ОКР в наноцентрах и методы решения технологических проблем средних и крупных промышленных предприятий. Отмечалась необходимость развития системы технологического менеджмента и *high-tech* стартапов на базе исследовательских университетов и важность совершенствования механизмов взаимодействия наноцентров с фондами ранних инвестиций. Обосновывалась целесообразность использования наноцентров ОАО "Роснано" как ключевых элементов инновационной инфраструктуры в сфере нанотехнологий РФ, инвестиционная привлекательность нанокompозитных материалов и перспективность трансферта университетских нанотехнологий в стартапы.

Основное заседание секции "Нанотехнологии в здравоохранении и фармацевтике" проходило под руководством директора Центра "Биоинженерия" РАН и РАСХН академика РАН и РАСХН К. Г. Скрябина и управляющего директора бизнес-единицы "Роснано" О. Ю. Шпичко. Доклады об особенностях принятия решений в фармацевтическом бизнесе, тенденциях, успехах и рисках системы венчурного инвестирования в медицине и биотехнологиях, первых итогах реализации "Стратегии развития фармацевтической отрасли РФ и стратегии партнерства при развитии инноваций в фармсекторе" состоялись на пленарной сессии "Фарма: от идеи к рынку". Технологии регенерации роговицы с помощью стволовых клеток лимба склеры, применение генетически репрограммированных стволовых клеток в регенеративной медицине, в том числе стволовых клеток сердца и мозга, аллогенной трансплантации стволовых клеток, применения стволовых клеток и тканевых эквивалентов как основы для новой биоинженерии, MIMS для исследования стволовых клеток, а также 3D-визуализации трансплантированных стволовых клеток в сердце крысы после инфаркта с помощью рентгеновской микротомографии высокого разрешения рассматривались на заседании "Регенеративная медицина — стволовые

клетки". Инновационные геномные методы и полупроводниковое секвенирование с применением технологии микросфер и новейшие достижения геномного секвенирования в персонализированной медицине были представлены на заседании "Нанотехнологии — прорыв в геномике". Выступления по применению результатов геномных исследований для лечения онкологических заболеваний, молекулярному транспорту и нанотехнологиям исследования мыслительных процессов объединила секция "Медицина XXI века".

Доклады по визуализации на субклеточном уровне новых молекулярных мишеней для таргетной терапии, полимерным наночастицам, применению адресных терапевтических наночастиц, нанотехнологиям лечения ран и воспалительных процессов, построению дифференцированной биотехнологической компании и прорывной антикоагулянтной системе для кардиоваскулярных вмешательств в реанимации и интенсивной терапии включала секция "Нанотехнологии в медицине и здравоохранении". Ряд выступлений был посвящен успехам в эпигенетической регуляции сигнальных путей резистентных опухолей, наностабилизаторам для гидрофобных фармпрепаратов, наноразмерным системам доставки для комбинированных препаратов, опухоль-специфичным генным векторам для диагностики и лечения онкологических заболеваний, современным нанотехнологиям в производстве вакцин, инновациям в лечении макулярной дистрофии сетчатки, применению нанотехнологий для терапии болезни Альцгеймера и исследованию противовирусных свойств кремниевых наночастиц.

В рамках заседания по органическим, неорганическим и углеродным наноструктурам на секции "Наноматериалы" были заслушаны выступления по применению спинтроники в энергетических, информационных и медицинских технологиях, химическому дизайну наноструктур, супрамолекулярным фотоактивными наноструктурам, электрическим и магнитным переходам в наноструктурах и нанокластерах, разработке металлических наночастиц для плазмонных сенсорных систем, управлению поверхностными свойствами детонационных наноалмазов и конформной металлизации методом термического и плазменного осаждения атомных слоев. Заседание по функциональным наноматериалам объединило доклады по анализу распределения редкоземельных легирующих примесей в YAG оптической керамике, получению тонкопленочных микробатарей, спектроскопии и генерации фторидной лазерной керамики, фторидной оптической нанокерамики, оптическому соединению лазерных нанокерамик и кристаллов иттрий-алюминиевого граната и разработке материалов с помощью вычислительного эксперимента с установлением связей между временной шкалой и размером. Секционная сессия по композитным

наноматериалам включала сообщения по распределению белков и наночастиц в самоорганизующихся поверхностных структурах, макромолекулярным наноккомпозитам, полимерным композициям и методам их создания, получению гибридных наноструктурных материалов и нанотехнологическим приложениям от ранней диагностики онкологических заболеваний до солнечной энергетики.

Под председательством член-корреспондента РАН, д-ра физ.-мат. наук, заместителя директора Института физики полупроводников СО РАН А. В. Двуреченского состоялось заседание секции "Наноэлектроника и нанофотоника", на котором были представлены доклады по перспективам развития кремниевой экономики, достижениям фирмы IBM в широкой терагерцовой области на основе SiGe, материалам со сверхнизкой диэлектрической проницаемостью для наноэлектронных приборов с топологическими размерами 22 нм и меньше, многоспектральным селективным сенсорным наноструктурам УФ и ИК излучения, волноводным устройствам на основе структур кремний-на-изоляторе, сенсорам и фильтрам на основе кремниевых микро- и наноканальных мембран для биомедицины.

Заседание, посвященное оптоэлектронике и нанофотонике, проведенное под председательством директора Института лазерной физики СО РАН, академика РАН С. Н. Багаева объединило выступления по органическим светоизлучающим устройствам с коллоидными квантовыми точками, кремниевой фотонике, спектромикроскопии одиночных молекул как инструменту для нанодиагностики твердых материалов, новым методам высокоэффективной управляемой генерации излучения ЖК наноструктурами в широком спектральном диапазоне и фотонным структурам в качестве оптических наноантенн. На итоговом заседании по новым наноэлектронным и нанофотонным устройствам и приборам под председательством директора ФТИ РАН академика РАН А. А. Орликовского прозвучали сообщения по трансферту технологии разработки перспективной энергонезависимой памяти в производство, NEMS-сенсорике, наногетероэпитаксиальным структурам CdHgTe на GaAs и Si для регистрации излучения ИК и терагерцовой областей спектра, туннельно-резонансным приборам и нанотранзисторам с ультратонкими кремниевыми и графеновыми каналами.

Программа секции "Инструменты финансирования инновационных проектов" включала доклады по типичным ошибкам инвесторов, поиску оптимальных форм инвестиционного сотрудничества в энергетике, инвестированию аэрокосмической отрасли и *high-tech* индустрии, отраслевым фондам Российской венчурной ярмарки, венчурным сделкам с проектами ранних стадий в России, частному инвестированию атомной отрасли, участию банков и бизнес-ангелов в финансировании инновационных нанотехнологических проектов, привлечению фи-

нансирования через выпуск акций и иностранному венчурному финансированию в российском регионе.

Заседание секции "Солнечная энергетика в России 2011" явилось одним из наиболее примечательных мероприятий форума.

На сессии 1 "Международный рынок и политика" рассматривался опыт Украины и Италии по развитию рыночных отраслевых механизмов, перспективы рынка в странах "солнечного пояса", возможности российско-болгарской отраслевой научной кооперации и рекомендации по планам поддержки устойчивого развития отрасли с введением в расчетную схему EPIA IRR и FIT.

Сессия 2 "Россия: развитие рынка солнечной энергетики, конкурентоспособность российской промышленности" включала доклады о регуляторах роста спроса на солнечную энергетику в России, конкурентоспособности российской отраслевой продукции на международных рынках и перспективах развития отрасли в РФ, создании нового закона о возобновляемых энергоисточниках.

На сессии 3 "Инвестиции и финансы: инвестирование в различные технологии фотовольтаики" прозвучали выступления по финансированию инновационных отраслевых бизнес-моделей, инновационному инвестированию, особенностям развития солнечной энергетики в условиях фьючерсов и анализу перспективности капиталовложений в фотовольтаические технологии.

Сессия 4 "Инновации и технологии. Сила технологических дорожных карт и альянсов" объединила сообщения по принципам формирования производства кристаллических модулей, проблемам инвестирования в новые технологии, инновационным методам реализации стратегии развития отраслевого производства, технологиям производства тонких пленок и технологическим дорожным картам. На секции, посвященной условиям для развития инновационного бизнеса в субъектах РФ, были организованы панельные дискуссии с участием представителей субъектов Федерации по проблематике роста объемов производства высокотехнологичной продукции в регионах и повышения инвестиционной привлекательности инновационного бизнеса.

Секция "Нанотехнологии в органической и печатной электронике" включала выступления по венчурному инвестированию отраслевых инноваций и научным исследованиям в сфере органической фотовольтаики, формированию экосистемы для развития бизнеса, принципам инвестирования ОАО "Роснано" новых типов электроники, снижению стоимости производства, особенностям производства ЖК электронной бумаги, правовым аспектам сопровождения отраслевых сделок, технологии выпуска тонкопленочной печатной перезаписываемой памяти, а также гибких органических дисплеев, и масштабированию производства печатной электроники.

На секции "Нанотехнологии в машиностроении" были представлены нанотехнологии в совре-

менном авиационном двигателестроении, методы определения инвестиционно-привлекательных технологий, особенности внедрения износостойких покрытий и принципы производства инструмента из нанотехнологического кубического нитрида бора. Также рассматривались методы оптимизации трансферта автомобилестроительных нанотехнологий и особенности стимулирования инноваций в отрасли за счет эффективной кооперации науки, образования и бизнеса.

Международной наноиндустриальной кооперации был посвящен российско-германский семинар для молодых ученых "Перспективные направления сотрудничества в области нанотехнологий между Россией и Германией", проведенный под руководством академика НАН Республики Беларусь, главного научного сотрудника Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники В. А. Лабунова [1]. В рамках форума также состоялся ряд других секционных заседаний, панельных дискуссий и круглых столов.

Церемония награждения лауреатов Международной премии в области нанотехнологий RUSNANOPRIZE-2011 состоялась в заключительный день форума. Наградной символ и памятный диплом лауреата премии по направлению "Наноматериалы" из рук лауреата Нобелевской премии, вице-президента РАН академика Ж. И. Алферова получили научный руководитель Института проблем химико-энергетических технологий СО РАН академик РАН Г. В. Сакович — за исследования, разработку технологии и создание производства функциональных наноразмерных синтетических алмазов из атомов углерода молекул взрывчатых веществ, и генеральный директор ОАО "ФНПЦ "Алтай", член-корреспондент РАН, профессор А. С. Жарков — за внедрение разработок академика Г. В. Саковича в промышленное производство, что

позволило наладить промышленное производство функциональных наноалмазов и продуктов на их основе и обеспечило экспорт наноразмерных алмазов в промышленно развитые мировые регионы. Вручение Российской молодежной премии в области наноиндустрии и подведение итогов конкурса научных работ молодых ученых предшествовало закрытию Форума.

## Выводы

1. В нормативно-правовой базе РФ присутствует ряд законодательных пробелов, препятствующих инвестированию наноиндустриальных проектов [2]. В числе необходимых мер следует отметить снижение налоговой нагрузки для малых предприятий и упрощение форм налоговой отчетности. Развитие малого бизнеса будет содействовать стимулированию капиталовложений в инновационные нанотехнологические проекты и повышению конкурентоспособности отечественной экономики на мировом рынке в преддверии вступления России в ВТО.

2. Международный нанотехнологический форум недостаточно полно представляет деятельность регионов РФ в нанотехнологической сфере. Целесообразно проведение форума по нанотехнологиям, начиная с 2012 года, в крупных наноиндустриальных центрах (Санкт-Петербург, Новосибирск, Екатеринбург) параллельно с московским форумом. Примером успешного параллельного проведения аналогичных мероприятий в разных городах является организация телекоммуникационных форумов.

## Список литературы

1. **Иванов В. В., Мароков А. В.** Концептуальные аспекты формирования единого научно-технологического пространства Беларуси и России // Вестник Российской академии наук. 2011. Том 81, № 10. С. 915—920.
2. **Раткин Л. С.** Перспективы развития наноиндустрии в России // Наноиндустрия. 2011. № 5. С. 40—43.

УДК 519.683:519.684:538.915:539.37

**О. Е. Глухова**, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
e-mail: glukhova@info.sgiu.ru,  
**Р. Ю. Жничков**, программист,  
**М. М. Слепченков**, аспирант,  
Саратовский государственный университет  
им. Н. Г. Чернышевского

## ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

*Поступила в редакцию 11.08.2011*

*Разработан программно-вычислительный комплекс, теоретическую основу которого составляет квантово-химический метод сильной связи. С помощью данного комплекса рассчитан электронный спектр сжатых на*

*различное число процентов графеновых нанолент. Установлено, что сжатые наноленты обладают улучшенными эмиссионными свойствами. С помощью разработанного комплекса можно исследовать атомное строение и свойства многоатомных наноструктур.*

**Ключевые слова:** нанолента, метод сильной связи, электронный спектр, параллельные вычисления, электронная плотность

## Введение

Современные нанотехнологии, обеспечивающие синтезирование наноструктур для конструирования устройств наноэлектроники и наномеханики, требуют предварительного анализа и прогнозирования свойств новых материалов, которые

обеспечили бы необходимые технические параметры и эксплуатационные характеристики. Для конструирования устройств нанoeлектроники (наноэмиттеров, нанотранзисторов, наноответвителей, наносенсоров и др.) необходимо предварительно знать характеристики электронной структуры, в том числе энергетический спектр электронов, ионизационный потенциал, энергетическую щель спектра, электронную проводимость, электро- и магнитосопротивление, модули упругости, а также влияние внешнего электрического поля на атомную структуру и свойства. Задача предварительной оценки этих параметров, а также прогнозирования изменения электронных и механических свойств наноструктур в электрическом поле может быть решена с помощью компьютерного моделирования наноструктур с учетом особенностей топологических сеток их атомного каркаса.

Среди известных программных продуктов наибольшим успехом пользуются:

- Gamess (расчеты электронной структуры атомно-молекулярных систем методами функционала плотности и *ab initio*) [1];
- NDDO/sp-spd (полуэмпирические расчеты в sp- и spd-базисах структурных, электронных, энергетических, деформационных и спектроскопических характеристик атомно-молекулярных систем размером до 1000 атомов) [2];
- Priroda (квантово-химические расчеты *ab initio*, метод функционала плотности) [3];
- Gaussian (молекулярно-механические методы, квантово-химические расчеты *ab initio*, метод функционала плотности).

Однако, эти программные продукты либо не содержат параллелизма, либо параллелизм реализован только на этапе формирования гамильтониана и расчета полной энергии системы. При этом некоторые из перечисленных приложений являются коммерческими, что делает их ограниченно доступными для учебно-образовательного и научно-исследовательского процессов.

Цель данной работы заключается в создании программно-вычислительного комплекса для исследования атомного строения и физико-химических свойств многоатомных наноструктур. Теоретическую основу комплекса составляет квантово-химический метод сильной связи — апробированный и хорошо себя зарекомендовавший в исследованиях электронных [4–7] и механических [6, 8] свойств многоатомных молекулярных и кластерных структур, а также в моделировании физических процессов в наноструктурах [9].

### Теоретическая основа программно-вычислительного комплекса

Общая схема изучения наноструктур квантово-механическим методом сильной связи заключается

в следующем: вычисляется полная энергия объекта исходной геометрической конфигурации, для чего формируется гамильтониан и решается алгебраическая проблема собственных значений матрицы, и рассчитывается отталкивательный потенциал взаимодействия ядер и электронов; выполняется оптимизация атомной структуры.

Равновесные интегралы перекрывания (недиагональные элементы гамильтониана) определяются выражением

$$t_{\alpha\beta}(r) = t_{\alpha\beta}(r_0) \left(\frac{r_0}{r}\right)^{n_a} \exp \left[ -n_b \left(\frac{r}{r_t}\right)^{n_c} + n_b \left(\frac{r_0}{r_t}\right)^{n_c} \right], \quad (1)$$

а отталкивательный потенциал — выражением

$$E_{core}(r) = E_{core}(r_0) \left(\frac{r_0}{r}\right)^{m_a} \exp \left[ -m_b \left(\frac{r}{r_c}\right)^{m_c} + m_b \left(\frac{r_0}{r_c}\right)^{m_c} \right]. \quad (2)$$

Здесь  $r_t$  и  $r_c$  — радиусы отсечки для интегралов перекрывания и отталкивательного взаимодействия, а параметры  $n_a$ ,  $n_b$ ,  $n_c$  и  $m_a$ ,  $m_b$ ,  $m_c$  задают форму и крутизну масштабирующих функций (1) и (2); индексы  $\alpha$  и  $\beta$  задают тип взаимодействующих электронных облаков;  $r_0$  — равновесное межъядерное расстояние (характерное для данного типа взаимодействующих атомов);  $r$  — межъядерное расстояние.

Полной энергией структуры является сумма энергии занятых энергетических уровней  $E_{bond}$  и энергии отталкивательного взаимодействия  $E_{rep}$ :

$$E_{tot} = E_{rep} + E_{bond}; \quad (3)$$

$$E_{bond} = \sum_{i=1}^{N_{level}} (n_i E_i + U \delta_{n_i, 2}), \quad (4)$$

где  $E_i$  — энергия заполненного состояния с номером  $i$ ; число  $n_i$  определяет занятость данного уровня (для незанятых оно равно нулю, при полной занятости — двум);  $N_{level}$  — число энергетических уровней; терм  $U$  определяет обменно-корреляционное взаимодействие между двумя электронами, находящимися на одной и той же орбитали ( $U = 3$  эВ [4]);  $\delta_{n_i, 2}$  принимает ненулевое значение, только если  $n_i = 2$ .

Энергия отталкивательного взаимодействия рассчитывается с помощью формулы (2), определяющей ион-ионное взаимодействие атомов  $i$  и  $j$ :

$$E_{rep} = \sum_{i < j} E_{core}(r_{ij}).$$

## Численные методы, реализуемые в программно-вычислительном комплексе

Целевой функцией для задачи оптимизации при исследовании структуры будет являться функция полной энергии объекта, зависящая от координат атомов. Учитывая неизвестный характер поведения функции цели, доступными для использования оказываются прямые методы поиска минимума, например, метод Хука—Дживса.

Метод Хука—Дживса предназначен для безусловного поиска минимума функции многих переменных. Процедура состоит из последовательности шагов исследующего поиска вокруг базисной точки, за которой в случае успеха следует поиск по образцу.

Описание этой процедуры представлено ниже.

А. Выбрать начальную базисную точку  $b_1$  и шаг длиной  $h_j$  для каждого из аргументов  $x_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$ .

Б. Вычислить  $f(x)$  в базисной точке  $b_1$  в целях получения сведений о локальном поведении функции  $f(x)$ . Эти сведения будут использоваться для нахождения подходящего направления поиска по образцу, с помощью которого можно надеяться достичь большего убывания значения функции. Функции  $f(x)$  в базисной точке  $b_1$  находится следующим образом:

1. Вычисляется значение функции  $f(b_1)$  в базисной точке  $b_1$ .

2. Каждая переменная по очереди изменяется прибавлением длины шага. Таким образом, вычисляем значение функции  $f(b_1 + h_1 e_1)$ , где  $e_1$  — единичный вектор в направлении оси  $x_1$ . Если это приводит к уменьшению значения функции, то  $b_1$  заменяется на  $b_1 + h_1 e_1$ . В противном случае вычисляется значение функции  $f(b_1 - h_1 e_1)$ , и если ее значение уменьшилось, то  $b_1$  заменяем на  $b_1 - h_1 e_1$ . Если ни один из проделанных шагов не приводит к уменьшению значения функции, то точка  $b_1$  остается неизменной и рассматриваются изменения в направлении оси  $x_2$ , т. е. находится значение функции  $f(b_1 + h_2 e_2)$  и т. д. Когда будут рассмотрены все  $n$  переменные, будем иметь новую базисную точку  $b_2$ .

3. Если  $b_2 = b_1$ , т. е. уменьшение функции не было достигнуто, то исследование повторяется вокруг той же базисной точки  $b_2$ , но с уменьшенной длиной шага. На практике удовлетворительным является уменьшение шага в десять раз от начальной длины.

4. Если  $b_2 \neq b_1$ , то проводится поиск по образцу.

В. При поиске по образцу используется информация, полученная в процессе исследования, и минимизация функции завершается поиском в направлении, заданном образцом. Эта процедура выполняется следующим образом:

1. Разумно двигаться из базисной точки  $b_2$  в направлении  $b_2 - b_1$ , поскольку поиск в этом направ-

лении уже привел к уменьшению значения функции. Поэтому вычислим функцию в точке образца

$$P_1 = b_1 + 2(b_2 - b_1).$$

В общем случае

$$P_i = b_i + 2(b_{i+1} - b_i).$$

2. Затем исследование следует продолжить вокруг точки  $P_1(P_i)$ .

3. Если наименьшее значение на шаге В.2 меньше значения в базисной точке  $b_2$  (в общем случае  $b_{i+1}$ ), то получают новую базисную точку  $b_3(b_{i+2})$ , после чего следует повторить шаг В.1. В противном случае не проводить поиск по образцу из точки  $b_2(b_{i+1})$ .

Г. Завершить этот процесс, когда длина шага будет уменьшена до заданного малого значения.

Данный метод возможно модифицировать для учета ограничений: достаточно возвращать заведомо большое значение при вычислении целевой функции в недопустимой точке.

Реализация описанной схемы исследований приводит к трудностям, связанным с большим временем счета и, вследствие этого, невозможности анализа структур со значительным (1000 и более) числом атомов. Решением может быть использование параллельных вычислительных машин для расчетов и соответствующая адаптация алгоритма исследования.

Формирование гамильтониана представляется относительно быстрой операцией. С учетом перспективы возрастания накладных расходов на передачу сообщений между узлами кластера параллельное исполнение данного этапа схемы исследований было признано не первостепенной задачей.

Решение алгебраической проблемы нахождения собственных значений гамильтониана допускает решение с помощью параллельных вычислений посредством алгоритма RRR (Relatively Robust Representations), который подробно изложен в работах [10—12]. Программная реализация указанного алгоритма присутствует в пакете подпрограмм линейной алгебры ScaLAPACK.

Для применения метода Хука—Дживса в параллельной оптимизации энергии структуры возможна следующая модификация его алгоритма: при исследующем поиске вокруг базовой точки вычисляется значение целевой функции не в одной точке за один шаг алгоритма, а сразу в  $p - 1$ , где  $p$  — число узлов в параллельной вычислительной системе. В этом случае уже за один шаг алгоритма может быть найдена новая базисная точка и будет возможно провести исследование по образцу.

Блок-схема модифицированного алгоритма приведена на рис. 1.

Блок-схема подпрограммы исследования по образцу приведена на рис. 2.

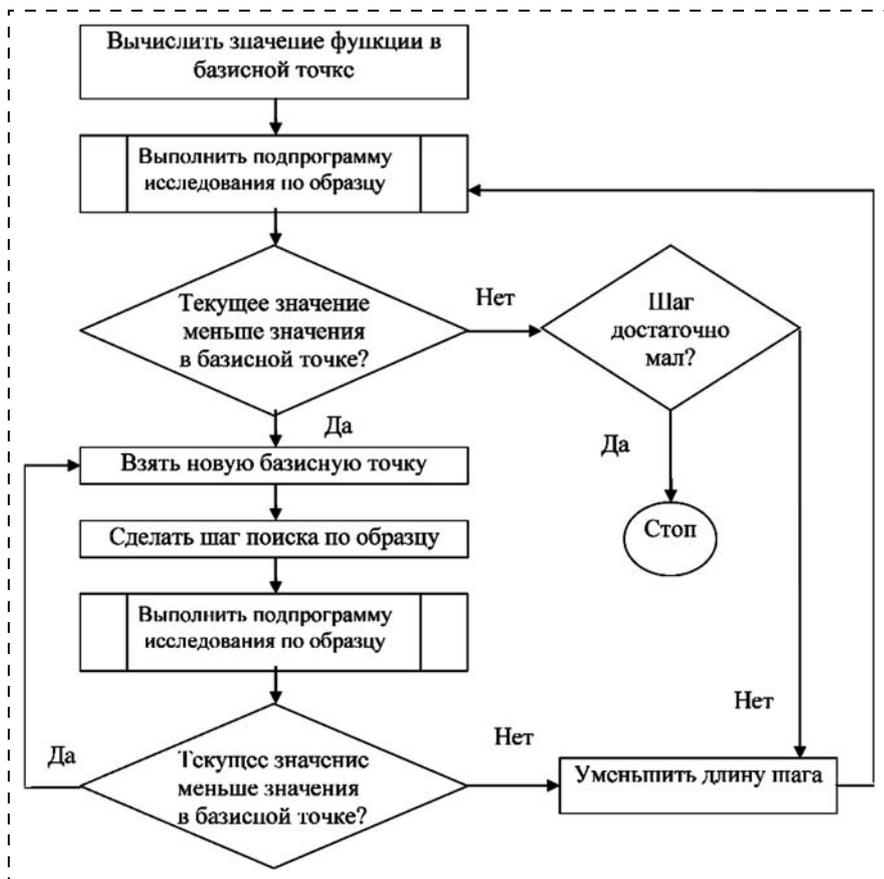


Рис. 1. Блок-схема метода Хука—Дживса

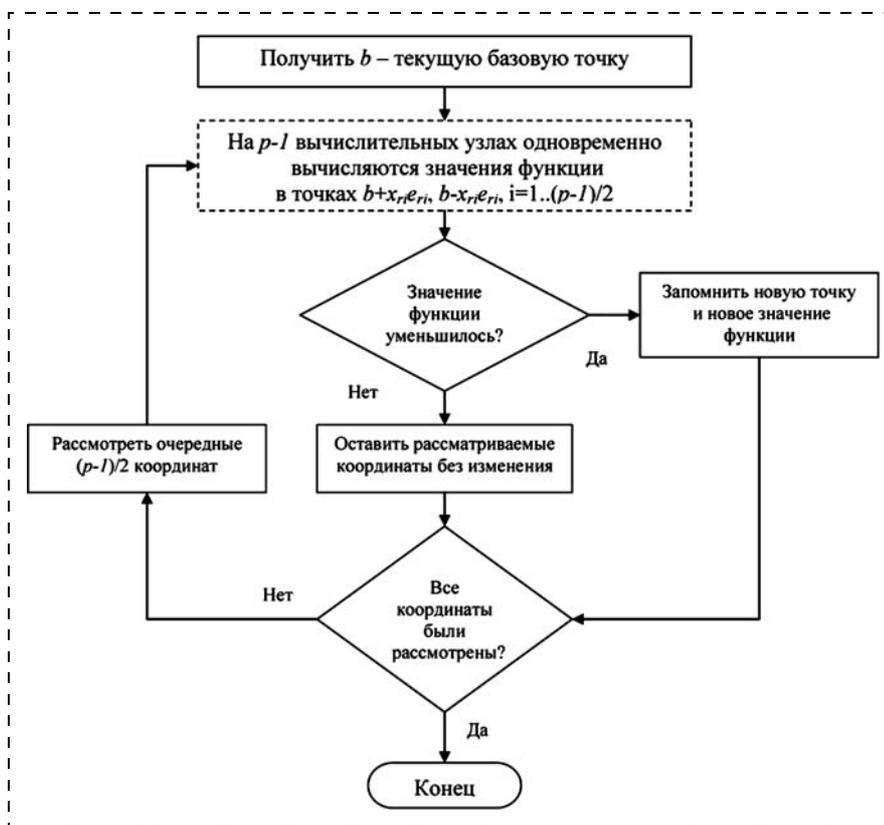


Рис. 2. Блок-схема подпрограммы исследования по образцу

Описанные меры повышения производительности были реализованы в программно-вычислительном комплексе, предназначенном для исследования атомного строения и свойств многоатомных наноструктур квантово-химическим методом сильной связи. Комплекс представляет собой программу для операционных систем семейства GNU/Linux, написанную на языке высокого уровня Python с использованием библиотек для научных расчетов SciPy и NumPy. В качестве пакета ScaLAPACK используется набор оптимизированных библиотек Intel Math Kernel Library. Комплекс реализует гибридную модель параллелизма MPI/OpenMP: процесс оптимизации распараллелен в рамках модели передачи сообщений между узлами кластера (стандарт MPI), целевая функция при этом рассчитывается с использованием модели с общей памятью (стандарт OpenMP).

К возможностям комплекса следует отнести:

- оптимизацию энергии атомных структур, для объектов с известным геометрическим законом построения атомной решетки предусмотрена возможность генерации координат на основании такого закона, что значительно снижает время вычислений за счет уменьшения числа параметров целевой функции в задаче минимизации энергии;
- расчет энергии структуры без запуска процесса оптимизации;
- возможность сохранения промежуточных результатов для оценки.

Программный комплекс имеет модульную структуру и позволяет использовать различные методы оптимизации с гибкой настройкой таких параметров, как требуемая точность, скорость сходимости, начальное состояние. Для метода Хука—Дживса реализованы следующие типы ограничений:

- ограничение на длину связей;
- фиксация координат выбранных атомов;
- движение определенных атомов только вдоль указанных прямых либо в выбранных плоскостях.

## Решение тестовых задач и оценка производительности

Для проверки эффективной работы разработанного программно-вычислительного комплекса была решена тестовая задача, в качестве которой была выбрана задача оптимизации полной энергии углеродных нанотрубок с различным числом атомов (от 100 до 4000). Оптимизация структур проводилась на четырехузловом и на восьмиузловом кластерах. Энергия структуры вычислялась для случая последовательного и для параллельного в четыре потока расчета.

Анализ результатов расчетов времени на решение задачи показал, что производительность расчетов оптимизации структуры при переходе с четырехузлового кластера на восьмиузловой возрастает в 1,4 раза (рис. 3, а). При сравнении времени

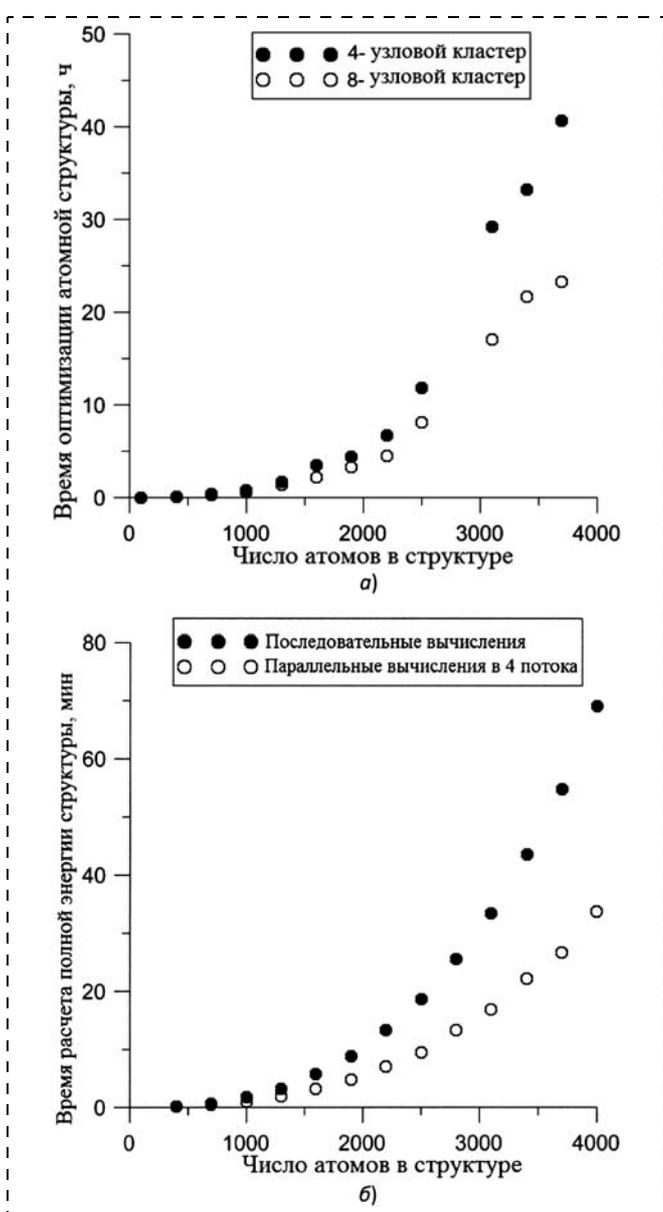


Рис. 3. Зависимость времени оптимизации структуры (а) от числа ее атомов; зависимость времени вычисления полной энергии структуры от числа ее атомов (б)

расчета полной энергии структуры, выполненного последовательным способом, и времени расчета, выполненного параллельным способом в четыре потока, оказалось, что производительность вычислений возрастает в среднем в 1,8 раз (рис. 3, б). Полученные результаты решения тестовой задачи подтверждают эффективность предложенного программно-вычислительного комплекса.

## Решение задач нанoeлектроники с помощью программно-вычислительного комплекса

Одной из важнейших задач нанoeлектроники является определение электронных свойств наноструктур в целях прогнозирования возможного для реализации потенциала их применения. В последнее время внимание исследователей привлекают графеновые наноленты. Для выявления особенностей электронной структуры графеновых нанобъектов и поиска способов управления их электронными свойствами проводятся исследования влияния внешнего воздействия различного рода на энергетические характеристики нанобъектов: потенциал ионизации, энергетическую щель, электронную плотность заряда. В данной работе в качестве внешнего воздействия было выбрано осевое сжатие в диапазоне от 1 до 75 %. Объектом исследования были графеновые наноленты, состоящие из 550 атомов углерода с длиной 6,62 нм и шириной 2 нм. С помощью оригинального разработанного вычислительного комплекса по указанному выше алгоритму изучения наноструктур квантовомеханическим методом сильной связи был рассчитан электронный спектр сжатых графеновых нанолент. По рассчитанному электронному спектру находились значения потенциала ионизации (последнего заполненного энергетического уровня) и энергетической щели (интервал между последним заполненным энергетическим уровнем и первым вакантным).

По результатам расчетов были построены графики зависимостей потенциала ионизации (рис. 4) и энергетической щели (рис. 5) от осевого сжатия, выраженного в процентах.

Из графика на рис. 4 видно, что потенциал ионизации графеновой наноленты по мере ее сжатия нелинейно убывает. Следовательно, для того чтобы электрон покинул поверхность искривленной графеновой наноленты, нужно затратить меньше энергии по сравнению с энергией, необходимой для отрыва электрона с поверхности недеформированного графена. Это свидетельствует о снижении работы выхода сжатых графеновых нанолент, а значит, можно говорить об их улучшенных эмиссионных свойствах.

Из графика на рис. 5 видно, что энергетическая щель графеновой наноленты с ростом процентного

сжатия ведет себя не монотонно. Уже при незначительном сжатии (порядка 1–7 %) наблюдается резкий спад энергетической щели, который сменяется нелинейным ростом при сжатии на 20 %. Принимая во внимание полученный диапазон значений энергетической характеристики, можно заключить, что проводимость сжатых графеновых нанолент остается близкой к проводимости металлов.

В рамках квантово-химического метода сильной связи было исследовано распределение электронной плотности по координатам атомов сжатой на 60 % графеновой наноленты (рис. 6).

График, представленный на рис. 6, а, наглядно демонстрирует, что наиболее значительное перераспределение электронной плотности происходит

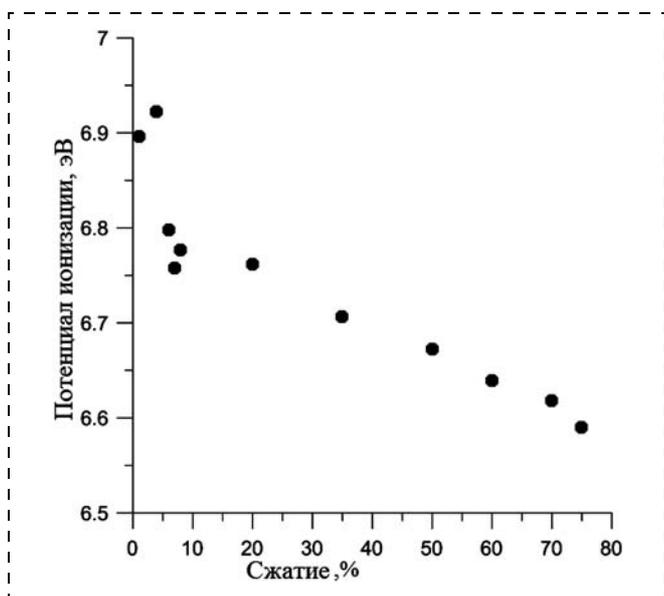


Рис. 4. Зависимость потенциала ионизации графеновой наноленты от осевого сжатия

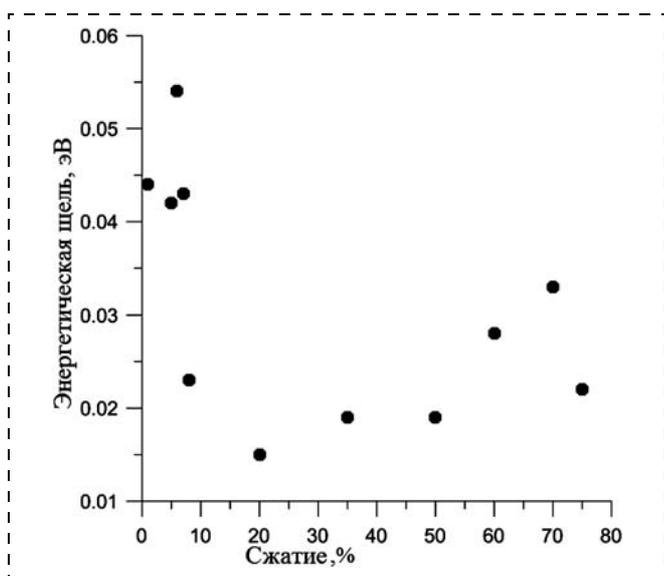


Рис. 5. Зависимость энергетической щели графеновой наноленты от осевого сжатия

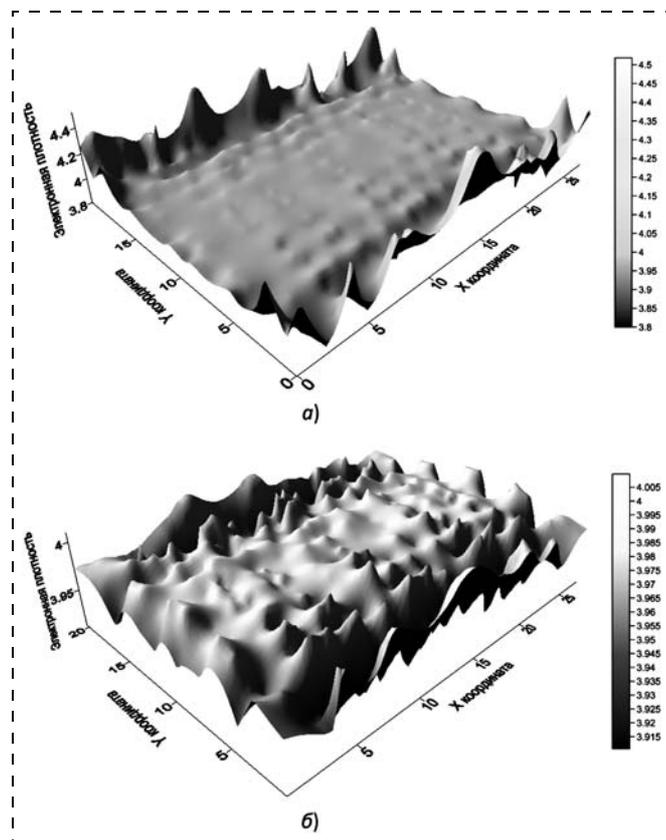


Рис. 6. Распределение электронной плотности по координатам атомов сжатой на 60 % графеновой наноленты:

а — с учетом краевых атомов; б — без учета краевых атомов

на краях сжатой графеновой наноленты. Причиной этому служит наличие ненасыщенных связей краевых атомов углерода. В центральной же области структуры плотность заряда меняется в значительно меньшей степени, о чем свидетельствует график, представленный на рис. 6, б.

## Выводы

Разработан программно-вычислительный комплекс, теоретическую основу которого составляет квантово-химический метод сильной связи. Эффективность этого метода подтверждена высокой производительностью расчетов.

Установлено, что потенциал ионизации графеновой наноленты по мере ее сжатия нелинейно убывает (с 7 до 6,6 эВ), на основании чего можно заключить, что сжатые графеновые наноленты обладают улучшенными эмиссионными свойствами.

Выявлено, что проводимость сжатых графеновых нанолент остается близкой к проводимости металлов, о чем свидетельствует довольно низкое значение энергетической щели спектра (0,01–0,05 эВ).

Обнаружено, что на краях сжатой графеновой наноленты перераспределение электронной плотности между атомами углерода наибольшее, причиной чему служат ненасыщенные связи у краевых атомов.

### Список литературы

1. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A. et al. General atomic and molecular electronic structure system // J. Comput. Chem. 1993. Vol. 14. P. 1347–1363.
2. Карнет Ю. Н., Никитин С. М., Никитина Е. А., Яновский Ю. Г. Компьютерное моделирование механических свойств углеродных наноструктур // Изв. РАН. МТТ. 2010. № 4. С. 121–137.
3. Laikov D. N., Ustynyuk Yu. A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // Russian Chemical Bulletin, International Edition. 2005. Vol. 54. N 3. P. 820–826.
4. Wang Y., Mak C. H. Transferable tight-bonding potential for hydrocarbons // Chemical Physics Letters. 1995. Vol. 235, N 1–2. P. 37–46.
5. Глухова О. Е., Жбанов А. И. Равновесное состояние нанокластеров  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{72}$  и локальные дефекты молекулярного остова // Физика твердого тела. 2003. Т. 45. Вып. 1. С. 180–186.
6. Глухова О. Е., Терентьев О. А. Теоретическое исследование электронных и механических свойств C–N одно-

слойных нанотрубок // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2007. Т. 10. № 4. С. 85–89.

7. Глухова О. Е. Тонкие углеродные тубулярные нанокластеры в однородном электростатическом поле // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 7. С. 8–12.

8. Glukhova O. E., Saliy I. N., Zhnichkov R. Y., Khvatov I. A., Kolesnikova A. S., Slepchenkov M. M. Elastic properties of graphene-graphane nanoribbons // Journal of Physics: Conference Series. 2010. 248. P. 1–8.

9. Glukhova O. E. Dimerization of miniature  $C_{20}$  and  $C_{28}$  fullerenes in nanoautoclave // Journal of Molecular Modeling. 2011. Vol. 17. N 3. P. 573–576.

10. Bientinesi P., Dhillon I. S., Van de Geijn R. A. A parallel eigensolver for dense symmetric matrices based on multiple relatively robust representations // SIAM J. SCI. COMPUT. 2005. Vol. 27. N. 1. P. 43–66.

11. Dhillon I. S., Parlett B. N., Vomer C. Glued matrices and the MRRR algorithm // SIAM J. SCI. COMPUT. 2005. Vol. 27. N 2. P. 496–510.

12. Petschow M., Bientinesi P. The Algorithm of Multiple Relatively Robust Representations for Multi-Core Processor // AICES. 2010. Vol. 9. P. 1–4.

## КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 531.383

**В. В. Ефимов**<sup>1</sup>, д-р техн. наук, проф., зам. дир-ра,  
**В. А. Калинин**<sup>1</sup>, канд. техн. наук, нач. отд.,  
**В. В. Лихошерст**<sup>2</sup>, канд. техн. наук, доц.,  
**В. В. Матвеев**<sup>2</sup>, канд. техн. наук, доц.,  
**В. Я. Распопов**<sup>2</sup>, д-р техн. наук, проф., зав. каф.

<sup>1</sup> ОАО "Авангард", г. Санкт-Петербург,

<sup>2</sup> ФГБОУ ВПО "Тульский государственный университет"

### ИНФОРМАЦИОННО- АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ЭТАПОВ ПРОЕКТИРОВАНИЯ МИКРОМЕХАНИЧЕСКИХ ГИРОСКОПОВ И АКСЕРОМЕТРОВ

Поступила в редакцию 29.08.2011

*Рассмотрено информационно-аналитическое обеспечение процесса проектирования микромеханических гироскопов и акселерометров, включающее классификации, базовые схемы и базовые математические модели.*

**Ключевые слова:** микромеханика, гироскоп, акселерометр, проектирование, классификация, базовые конструктивные схемы, базовые математические модели

### Введение

В процессе проектирования решается задача создания прибора (изделия), соответствующего требованиям технического задания, под существующую или прогнозируемую технологическую базу. Наибольшее значение задача имеет на начальных этапах проектирования, когда происходит выбор схемно-конструктивного решения будущего прибора.

Возможны два этапа проектирования: поиск конструктивного исполнения прибора, изготовление которого возможно на имеющемся либо прогнозируемом к приобретению технологическом оборудовании; определение соответствия прогнозируемых характеристик прибора при выполнении ограничений, накладываемых технологическим оборудованием, требованиям технического задания.

Объединение обозначенных этапов в рамках единого информационно-аналитического обеспечения позволит снизить сложность работ, выполняемых на начальных этапах проектирования, уменьшив при этом время, затрачиваемое на выполнение работ. В открытой, доступной информации отсутствует описание подобного обеспечения, что позволяет предложить его структуру, объединяющую поисковый модуль с модулем анализа динамических характеристик.

Поисковый модуль должен определять конструктивный облик прибора. Аналитический модуль должен содержать необходимые расчетные выражения для определения величин, входящих в математические модели микромеханических прибо-

ров. Математические модели созданы для базовых кинематических схем чувствительных элементов и функциональных схем съема и обработки сигналов приборов. Базовые кинематические схемы являются обобщающими для чувствительных элементов группы однотипных приборов. Базовые схемы электронных блоков съема и обработки сигнала на функциональном уровне обеспечивают все режимы работы чувствительных элементов приборов.

Создание информационно-аналитического обеспечения начальных этапов проектирования микромеханических приборов включает разработку классификаций и базовых конструктивных схем приборов с соответствующим математическим описанием. Известны различные подходы к классификации микромеханических приборов [1–3].

Цель работы заключается в формировании классификационных признаков микромеханических акселерометров (ММА) и микромеханических гироскопов (ММГ), на основе которых могут быть идентифицированы существующие и перспективные конструкции данных типов приборов, а также соответствующие им базовые схемы и математические модели, на основе которых могут быть разработаны расчетные модули. Цель создания расчетных модулей — предоставление разработчику микромеханических приборов инструмента для предварительной оценки технических характеристик ММА и ММГ.

## Классификации ММА, ММГ

На рис. 1 представлена классификация микромеханических акселерометров для идентификации конкретного типа исполнения прибора в целях поиска конструктивных решений на начальных этапах проектирования. Данные признаки однозначно определяют необходимое для предварительного анализа математическое описание.

Классификация ММГ, приведенная на рис. 2, позволяет определять конструктивные исполнения микромеханических гироскопов.

На рис. 2 приняты следующие сокращения: РД — режим движения, РЧ — режим чувствительности, *LL* (*linear-linear*) — ММГ, в процессе функционирования которых чувствительный элемент совершает в РД и РЧ поступательные движения; *RR* (*rotate-rotate*) — вращательные перемещения; *LR* (*linear-rotate*) — различные комбинации поступательных и вращательных перемещений чувствительного элемента.

## Базовые конструктивные схемы и математические модели ММА

**Осевые ММА.** Основным конструктивным узлом большинства [4–8] выпускаемых (разрабатываемых) ММА осевого исполнения являются чувствительные элементы, принципиальные схемы которых приведены на рис. 3 [9]. Чувствительный элемент (ЧЭ) включает инерционную массу  $1$ , упругие элементы  $2$  подвеса и опорную рамку (основание)  $3$ .

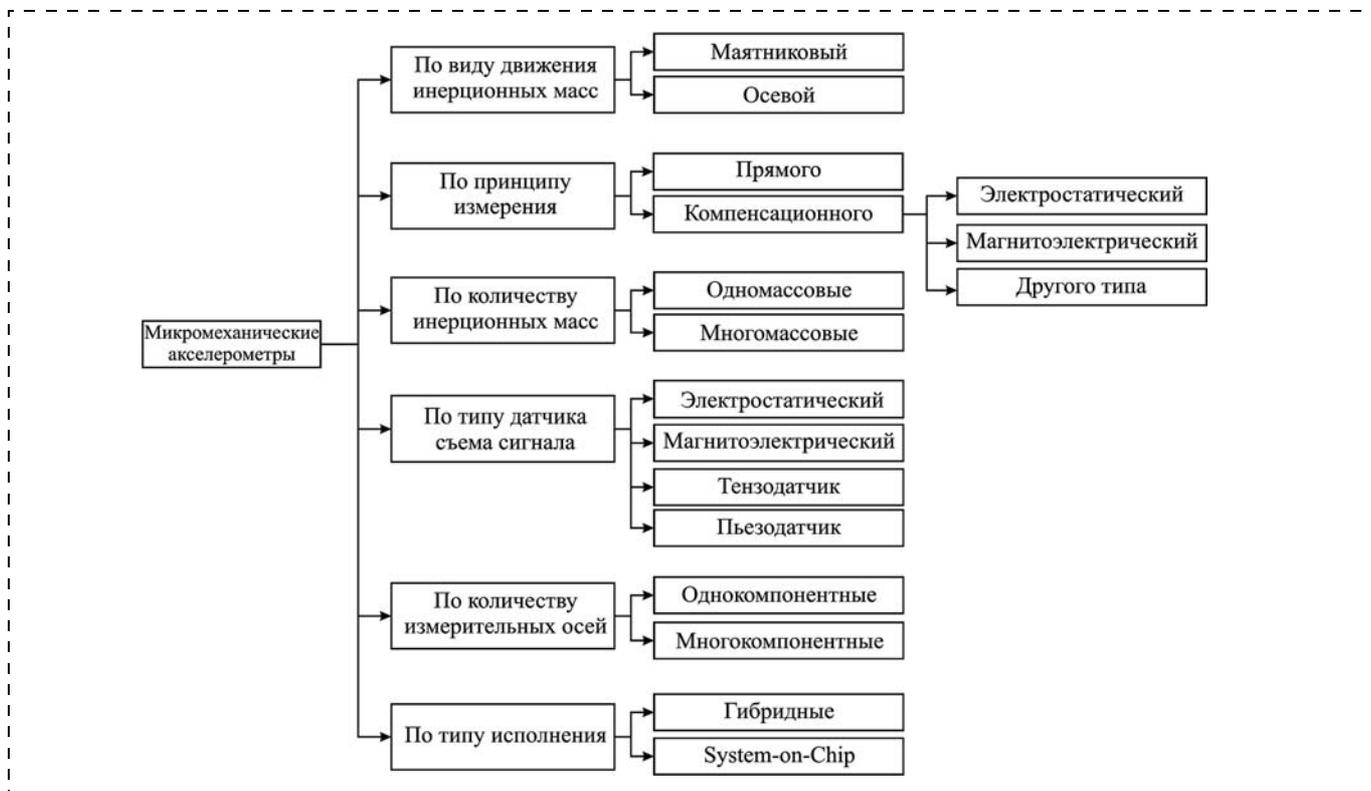


Рис. 1. Классификация ММА

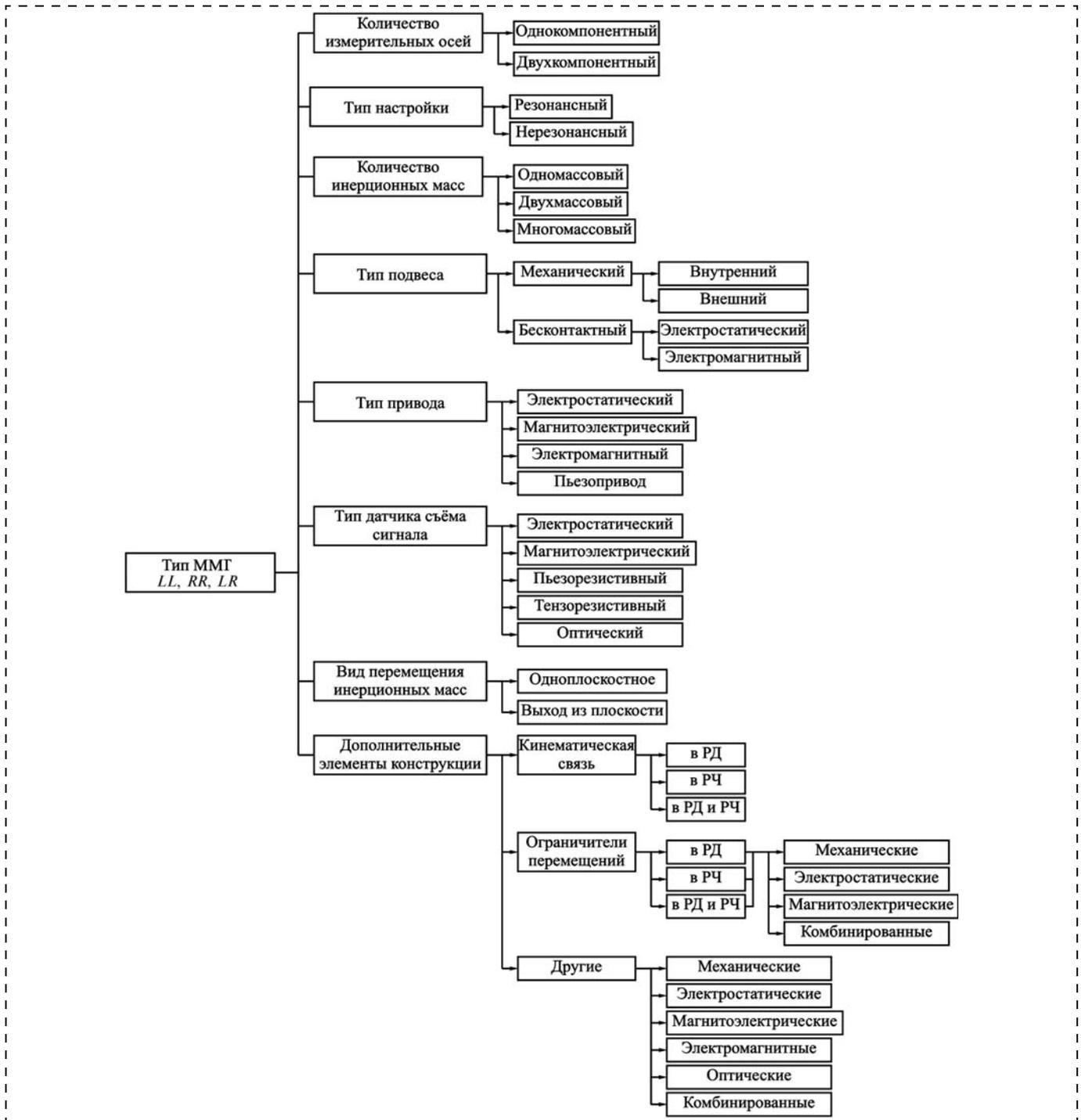


Рис. 2. Классификация ММГ

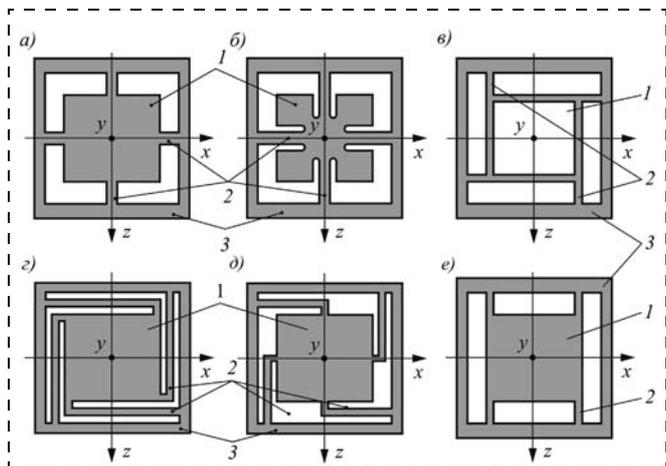
Уравнение движения инерционной массы (ИМ) при условии, что центр масс и геометрический центр подвеса совпадают и направление действующего ускорения совпадает с одной из осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , которая является осью чувствительности, например с осью  $y$ , имеет вид

$$m\ddot{y} + b_y\dot{y} + G_y y = m a_y, \quad (1)$$

где  $m$  — масса ИМ;  $b_y$ ,  $G_y$  — коэффициент демпфирования и суммарная жесткость повеса в направлении оси  $y$ ;  $a_y$  — действующее ускорение.

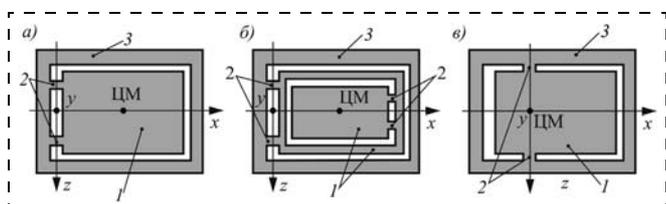
В реальных ММА перемещение ИМ измеряется либо емкостным преобразователем (датчиком) перемещений, либо с помощью пьезорезистивных преобразователей деформаций (напряжений) упругих элементов, либо с помощью каких-то других датчиков, например оптических. В связи с этим в литературе можно встретить такие определения: емкостный ММА, пьезорезистивный ММА.

**Маятниковые ММА.** Базовые принципиальные схемы чувствительных элементов маятниковых ММА [10–18] приведены на рис. 4 [9].



**Рис. 3. Принципиальные схемы чувствительных элементов осевых микроакселерометров:**

*a, б* — ЧЭ с крестообразным подвесом; *в, г* — ЧЭ с *z*-образным кососимметричным подвесом; *д* — ЧЭ с *z*-образным симметричным подвесом; *е* — ЧЭ с параллельным подвесом. 1 — инерционная масса; 2 — упругие элементы; 3 — опорная рамка



**Рис. 4. Базовые принципиальные схемы чувствительных элементов маятниковых микроакселерометров:**

*a* — одинарный маятник с упругими элементами — "балками"; *б* — двойной маятник с упругими элементами — "балками"; *в* — одинарный маятник с упругими элементами — торсионами. 1 — инерционная масса; 2 — упругие элементы; 3 — опорная рамка; ЦМ — центр масс

Уравнения движения ИМ маятниковых ММА по структуре аналогичны уравнениям движения осевых ММА. Например, уравнение движения ИМ ЧЭ по схеме рис. 4, *в* при условии, что ускорение  $a_y$  совпадает с осью  $y$  имеет вид:

$$J_z \ddot{\vartheta} + b_\vartheta \dot{\vartheta} + G_{кр} \vartheta = m a_y l, \quad (2)$$

где  $J_z$  — момент инерции ИМ относительно оси колебаний  $z$ ;  $b_\vartheta$  — коэффициент демпфирования по угловой координате;  $G_{кр}$  — жесткость торсионов на кручение;  $l$  — расстояние от ЦМ до оси  $z$ ;  $\vartheta$  — угол поворота ИМ вокруг оси  $z$ .

Измерение перемещений ИМ аналогично осевым ММА может осуществляться емкостными, пьезорезистивными либо другого типа преобразователями. Можно отметить далее, что пьезорезистивные преобразователи размещаются на балках или торсионах в местах, где возникают наибольшие изгибные или крутильные напряжения. На этом основании некоторые авторы называют упругие элементы подвеса концентраторами (напряжений, деформаций). Эта терминология применяется и к осевым ММА.

## Базовые конструктивные схемы и математические модели ММГ

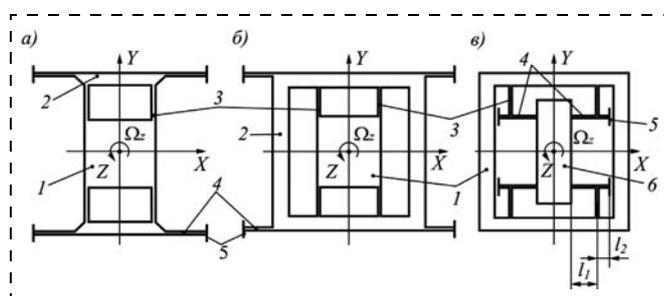
**Микромеханические гироскопы LL-типа.** Базовые конструктивные схемы и математические модели ММГ LL-типа рассмотрим на примере одномассовых ММГ. На рис. 5 приведены конструктивные схемы чувствительных элементов (ЧЭ) ММГ LL-типа [9], на базе которых построено большинство известных конструкций одномассовых ММГ [19–24]. В схеме ЧЭ по рис. 5, *a* подвес ИМ 1 относительно основания 5 выполнен в виде упругих элементов 3, 4, расположенных вне контура ИМ. Элементы подвеса связаны между собой с помощью жестких элементов 2.

В схеме по рис. 5, *б* ЧЭ имеет ИМ 1, соединенную упругими элементами 3 с элементом подвеса 2 в форме рамки, который упругими элементами 4 соединен с основанием 5.

Во всех схемах ЧЭ измерительной является ось  $Z$ , вокруг которой действует измеряемая угловая скорость  $\Omega_z$ . В схемах рис. 5 *a, б* режим движения может быть организован вдоль любой из осей  $X$  и  $Y$ . В случае, если режим движения (РД) организован вдоль оси  $X$ , то ось  $Y$  является осью режима чувствительности (РЧ) и простейшая математическая модель, описывающая движение ИМ ММГ, имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} m_1 \ddot{x} + b_x \dot{x} + G_x x &= F_0 \sin pt; \\ (m_1 + m_2) \ddot{y} + b_y \dot{y} + G_y y &= -2m_1 \Omega_z V, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где  $m_1$  — масса ИМ 1;  $m_2$  — суммарная масса элементов 2 по схеме рис. 5, *a* или масса рамки 2 по схеме рис. 5, *б*;  $b_x$  — коэффициент демпфирования ИМ 1 вдоль оси  $X$ ;  $b_y$  — коэффициент демпфирования всей структуры вдоль оси  $Y$ ;  $G_x$  — суммарная жесткость элементов 3 в направлении оси  $X$ ;  $G_y$  — суммарная жесткость элементов 4 в направлении оси  $Y$ ;  $F_0, p$  — амплитуда силы и частота ее генерации.



**Рис. 5. Принципиальные схемы одномассовых чувствительных элементов ММГ:**

*a* — ЧЭ со спаренными упругими элементами внешнего подвеса; *б* — ЧЭ с разделенными упругими элементами внешнего подвеса и промежуточной рамкой; *в* — ЧЭ с сопряженными упругими элементами внутреннего подвеса с функцией механического усиления выходного сигнала; 1 — ИМ; 2 — жесткие элементы подвеса; 3, 4 — упругие элементы подвеса; 5 — основание; 6 — кинематический элемент

Уравнения движения для случая РД, организованного вдоль оси  $y$  и осью РЧ вдоль оси  $x$ , имеют вид

$$\left. \begin{aligned} (m_1 + m_2)\ddot{y} + b_y\dot{y} + G_y y &= F_0 \sin pt; \\ m_1\ddot{x} + b_x\dot{x} + G_x x &= -2m_1\Omega_z V, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где обозначения соответствуют системе (3).

Заметим, что системы уравнений (3, 4) записаны без учета квадратурных возмущающих сил, которые в реальных конструкциях ММГ должны иметь место.

Рассмотрим ЧЭ по схеме рис. 5, в. В этой схеме подвес ИМ 1 относительно основания 5 выполнен в виде упругих элементов 3 и 4. Упругие элементы 4 обеспечивают также подвес элемента 6. "Точка" сопряжения элементов 3 и 4 делит последний на два отрезка длиной  $l_1$  и  $l_2$ .

РД выполняется вдоль оси  $X$  и перемещения ИМ 1 обеспечиваются упругими элементами 3. Элемент 6 при этом остается неподвижным. При появлении угловой скорости  $\Omega_z$  силы инерции Кориолиса вызывают перемещения ИМ 1 вдоль оси  $y$  на величину  $y_1$ . Кориолисовы силы преодолевают силы упругости элементов 4, обусловленные их жесткостью и длиной элемента  $l_2$ , а также инерционные силы и силы демпфирования. Элемент 6 при этом перемещается на расстояние

$$y_2 = y_1(1 + l_1/l_2), \quad (5)$$

пропорционально которому может быть сформирован выходной сигнал ММГ.

Упрощенные уравнения движения ИМ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} m_1\ddot{x} + b_x\dot{x} + G_x x &= F_0 \sin pt; \\ \left[ m_1 + m_2 \left( 1 + l_1/l_2 \right) \right] \ddot{y}_1 + \\ + \left[ b_{y1} + b_{y2} \left( 1 + l_1/l_2 \right) \right] \dot{y}_1 + G_y y_1 &= -2m_1 V \Omega_z, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $m_1, m_2$  — массы элементов 1 и 6 соответственно;  $b_x$  — коэффициент демпфирования ИМ 1 в направлении оси  $x$ ;  $G_x$  — суммарная жесткость элементов подвеса в направлении оси  $x$ ;  $b_{y1}, b_{y2}$  — коэффициенты демпфирования элементов 1 и 6 в направлении оси  $y$ ;  $G_y$  — суммарная жесткость элементов подвеса в направлении оси  $y$ .

Таким образом, для анализа динамических характеристик большинства ММГ LL-типа достаточно иметь математические модели (3), (4), (6) и расчетные выражения для определения величин, входящих в данные выражения.

**Микромеханические гироскопы LR-типа.** Базовые конструктивные схемы и математические мо-

дели гироскопов LR-типа рассмотрим на базе конструкций, изображенных на рис. 6.

Принципиальные схемы чувствительных элементов ММГ (без приводов инерционных масс, обеспечивающих РД), иллюстрирующие две конструкции с различными вариантами взаимных перемещений ИМ в режимах движения и чувствительности, приведены на рис. 6 [9]. В схеме ЧЭ на рис. 6, а перемещения ИМ в РД и РЧ происходят в одной плоскости, а в схеме на рис. 6, б — в разных плоскостях.

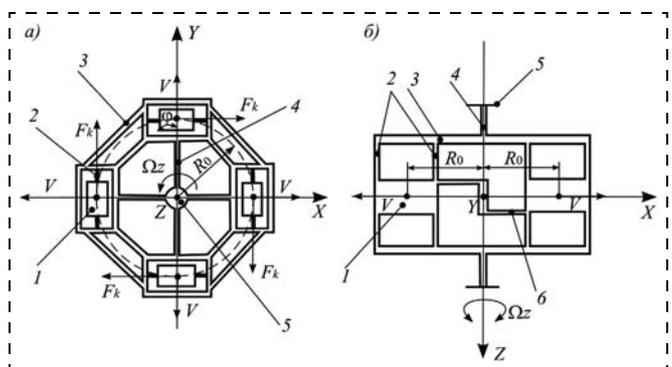
В обеих схемах инерционные массы 1 связаны упругими элементами 2 с жесткими элементами 3 подвеса, которые, в свою очередь, через упругие элементы 4 подвеса и анкеры (элементы крепления) 5 связаны с подложкой. Микроструктуры ЧЭ располагаются на некотором расстоянии над подложкой.

В предположении, что все инерционные массы (рис. 6, а) одинаковы, конструкция ЧЭ симметрична, упругие свойства всех элементов 2 и элементов 4 между собой идентичны, простейшая система уравнений, описывающая линейные перемещения одной ИМ в РД, например, по координате  $X$ , и угловые колебания ЧЭ вокруг оси  $Z$  по координате  $\varphi$  в РЧ, имеет вид

$$\left. \begin{aligned} m\ddot{x} + b_x\dot{x} + G_x x &= F_0 \sin pt; \\ J_\varphi \ddot{\varphi} + b_\varphi \dot{\varphi} + G_\varphi \varphi &= -8mV\Omega_z R_0, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

где  $b_x, G_x$  — коэффициент демпфирования и жесткость упругих элементов 2 для одной ИМ;  $F_0, p$  — параметры силы, генерирующей РД;  $J_\varphi$  — момент инерции всей микроструктуры ЧЭ относительно оси  $Z$ ;  $b_\varphi, G_\varphi$  — коэффициент демпфирования и жесткости всех упругих элементов 4 при движении ЧЭ по координате  $\varphi$ .

Работа ЧЭ по схеме 6, б происходит следующим образом. Привод обеспечивает синхронное противофазное движение инерционных масс 1 в направлении оси  $x$ . Кинематическая связь 6, которая по



**Рис. 6. Принципиальные схемы ЧЭ элементов:**

а — перемещения ИМ в РД и РЧ — в одной плоскости; б — перемещения ИМ в РД и РЧ в разных плоскостях; 1 — инерционные массы; 2 — упругие элементы подвеса РД; 3 — жесткие элементы подвеса; 4 — упругие элементы подвеса РЧ; 5 — анкеры; 6 — кинематическая связь

принципу работы аналогична антипараллелограмму, способствует синхронизации противофазных движений ИМ в РД. Кинематическая связь  $b$  не обязательна. При появлении угловой скорости  $\Omega_z$  возникают кориолисовы силы. Для принятого мгновенного направления векторов  $V$  и  $\Omega_z$  для правой ИМ сила  $F_k$  направлена перпендикулярно плоскости  $XZ$  в отрицательном направлении оси  $y$ , а для левой ИМ — наоборот. В результате вокруг оси  $Z$  возникает момент сил Кориолиса  $M_z = 4mV\Omega_z R_0$ , вектор которого направлен в отрицательную сторону оси  $Z$ . При изменении направления векторов  $V$  изменится и направление вектора  $M_z$ , который вызывает колебательные движения ЧЭ в РЧ вокруг оси  $Z$ . Очевидно, что в РЧ упругие элементы  $4$  работают как торсионы, т. е. на кручение вокруг оси  $Z$ .

Уравнения движения ИМ (рис. 6, б) в РД аналогичны первому уравнению системы (7), а уравнение ЧЭ в РЧ аналогично второму уравнению:

$$J_\phi \ddot{\phi} + b_\phi \dot{\phi} + G_\phi \phi = -4mV\Omega_z R_0, \quad (8)$$

где  $G_\phi$  — жесткость упругих элементов  $4$  на кручение вокруг оси  $Z$ .

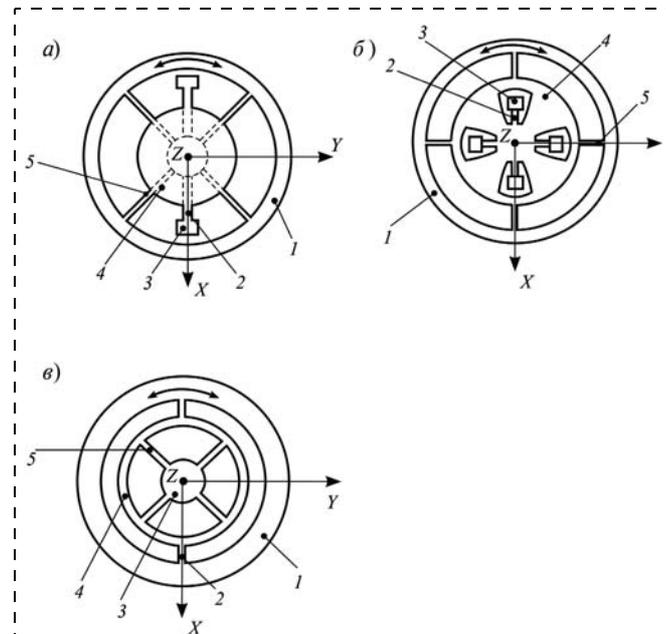
Следует обратить внимание на то, что схема рис. 6, б является общей и по отношению к схеме рис. 6, а при условии выполнения элементов  $4$  с малой изгибной жесткостью вокруг оси  $Y$ , при измерении угловой скорости вокруг этой оси движение ЧЭ будет в плоскости  $XZ$ .

Анализ известных конструктивных решений [25, 26] позволяет говорить о применимости приведенного математического описания для анализа динамических характеристик ММГ данного типа.

**Микромеханические гироскопы RR-типа.** В ММГ RR-типа реализуется колебательное движение инерционной массы (ротора) в режимах первичных и вторичных колебаний. Типовые схемы роторных ММГ RR-типа приведены на рис. 7 [9].

В схемах рис. 7, а, б передача вращающего момента привода осуществляется непосредственно на ротор. Элементы статора привода располагаются, как правило, снаружи ротора. Промежуточный элемент  $4$  имеет размеры, зависящие от элементов, располагающихся на нем, а также от размеров упругих элементов  $5$ . На рис. 7, а штриховыми линиями показано возможное изменение размеров элементов  $2, 4, 5$ .

В схеме рис. 7, в привод, обеспечивающий РД ротору  $1$ , предпочтительно должен располагаться в пространстве, ограниченном внутренним контуром элемента  $4$ . В этом случае передача вращающего момента привода на ротор реализуется через элемент  $4$  и торсионы  $2$ . Очевидно, что возможна и непосредственная передача вращающего момента привода на ротор.



**Рис. 7. Принципиальные схемы чувствительных элементов ММГ:** а, б — с непосредственной передачей момента привода на ротор (а — однокомпонентный, б — двухкомпонентный); в — однокомпонентный с возможностью передачи момента привода на ротор непосредственно и через промежуточный элемент. 1 — инерционная масса (ротор); 2, 5 — упругие элементы подвеса; 3 — анкер (элемент крепления микроструктуры к подложке); 4 — промежуточный (кинематический) элемент подвеса

ЧЭ по схемам рис. 7, а, в служат для измерения одной переносной угловой скорости основания и на их базе могут быть построены однокомпонентные ММГ. Осью чувствительности для них является ось  $Y$ , вокруг которой основание вращается со скоростью  $\Omega_y$ . РД происходит вокруг оси  $Z$ , вдоль которой направлены векторы переменного кинетического момента  $H$  ротора. Переменные гироскопические моменты  $H\Omega_y$  вызывают колебания ротора в РЧ вокруг выходных (измерительных) осей  $X$ .

ЧЭ по схеме рис. 7, б служит для измерения двух угловых скоростей основания, и на его базе могут быть построены двухкомпонентные ММГ. Осью чувствительности может быть любая из осей  $X, Y$ . РД вокруг оси  $Z$  создает переменный кинетический момент  $H$  и при появлении угловых скоростей  $\Omega_x, \Omega_y$  возникают гироскопический момент  $H\Omega_x$ , генерирующий РЧ<sub>x</sub>, и гироскопический момент  $H\Omega_y$ , генерирующий РЧ<sub>y</sub>.

Движение ротора двухкомпонентного ММГ описывается системой уравнений вида

$$\left. \begin{aligned} J_\alpha \ddot{\alpha} + b_\alpha \dot{\alpha} + G_\alpha \alpha &= H\Omega_y; \\ J_\beta \ddot{\beta} + b_\beta \dot{\beta} + G_\beta \beta &= H\Omega_x; \\ J_\gamma \ddot{\gamma} + b_\gamma \dot{\gamma} + G_\gamma \gamma &= M_B(t), \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где  $\alpha, \beta, \gamma$  — углы поворота ротора вокруг осей  $X, Y$  и  $Z$  соответственно;  $J_\alpha, J_\beta, J_\gamma$  — моменты инерции всех элементов (тел), вращающихся вокруг осей  $X,$

$Y, Z$ ;  $b_\alpha, b_\beta, b_\gamma$  — коэффициенты демпфирования относительно соответствующих осей;  $G_\alpha, G_\beta, G_\gamma$  — жесткости всех элементов подвеса при их деформациях относительно осей  $X, Y, Z$  соответственно;  $M_B(t)$  — вибрационный момент привода.

Динамика однокомпонентного ММГ также описывается системой (1), путем удаления из нее второго уравнения.

Наряду с ЧЭ микрогироскопов, в которых РД ротора происходит в его плоскости, в "Draper Laboratory" (США) был разработан так называемый рамочный ММГ, принципиальная схема ЧЭ которого приведена на рис. 8 [27].

Схема образована соединением двух рамок, конструктивно выполненных в виде внешнего 1 и внутреннего 2 плоских элементов, соединенных между собой и с основанием 6 с помощью торсионов 3 и 4, оси которых перпендикулярны друг другу. Для увеличения инерционности на внутреннем элементе расположена дополнительная масса 5. С помощью электростатических датчиков силы наружному элементу 1 сообщаются первичные угловые колебания относительно оси  $Y$  (РД). Эти колебания через торсионы 3 передаются и на внутренний элемент, сообщая ему колебательный кинетический момент  $H$ . При вращении прибора со скоростью  $\Omega_z$  относительно оси  $Z$  возникают моменты сил Кориолиса  $H\Omega_z$ , которые заставляют колебаться внутренний элемент относительно оси  $X$  (РЧ). Амплитуда этих колебаний, измеряемая расположенным под внутренним элементом емкостным преобразователем, будет пропорциональна измеряемой угловой скорости.

Движение ЧЭ в простейшем случае описывается уравнениями, аналогичными системе (9). В работах [28–30] описана конструкция гироскопа, аналогичная гироскопу рис. 8, но с дополнительной рамой (*torsional 3-DOF gyroscope*) (рис. 9). Гироскоп komponуется из трех связанных масс: активной рамы 2 (*active gimbal*), пассивной рамы 3

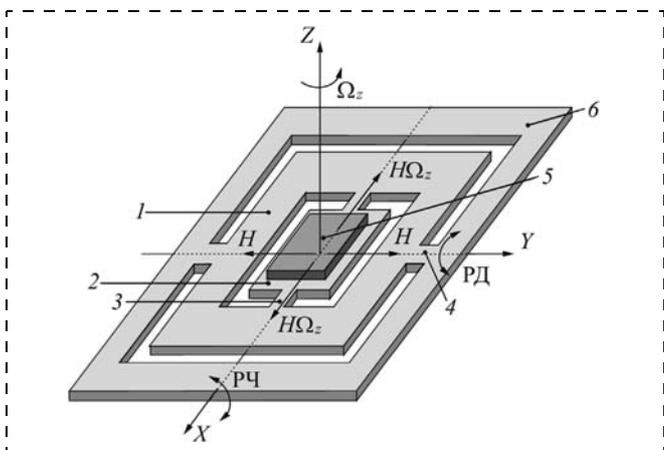


Рис. 8. Принципиальная схема "рамочного" чувствительного элемента ММГ: 1, 2 — наружная и внутренняя рамки; 3, 4 — упругие элементы (торсионы); 5 — дополнительная масса; 6 — основание

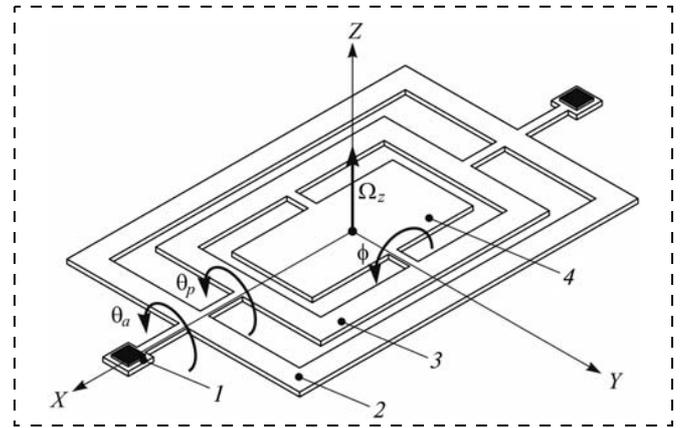


Рис. 9. Микромеханический гироскоп с дополнительной рамой: 1 — анкер; 2 — активная рама; 3 — пассивная рама; 4 — чувствительная пластина (*sensing plate*)

(*passive gimbal*) и чувствительной пластины 4 (рис. 9). Структура крепится к корпусу посредством анкеров 1. Активная рама приводится в колебательное движение вокруг оси  $X$  под действием привода и вызывает колебания пассивной рамы. Чувствительная пластина совершает колебания вместе с пассивной рамой вокруг оси  $X$ , но может и независимо колебаться вокруг оси чувствительности  $Y$ , как реакция на измеряемую угловую скорость  $\Omega_z$ .

Комбинирование пассивной рамы и чувствительной пластины позволяют поглотить нежелательные вибрации активной рамы. Динамика ММГ с дополнительной рамкой может быть описана следующей линеаризованной системой уравнений:

$$\begin{aligned} J_y^s \ddot{\phi} + b_y \dot{\phi} + G_y^s \phi &= (J_z^s + J_y^s - J_x^s) \dot{\theta} \Omega; \\ (J_x^p + J_x^s) \ddot{\theta}_p + (b_x^p + b_x^s) \dot{\theta}_p + G_x^p \theta_p &= G_x^p \theta_a; \\ J_x^a \ddot{\theta}_a + b_x^a \dot{\theta}_a + G_x^p \theta_a &= G_x^p (\theta_p - \theta_a) + M_d, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $J_x^a, J_x^p, J_y^s$  — моменты инерции активной рамы, пассивной рамы и чувствительной пластины относительно соответствующих осей;  $\theta_a, \theta_p, \phi$  — углы поворота активной рамы, пассивной рамы и чувствительной пластины;  $G_x^a, G_x^p, G_y^s$  — жесткости элементов подвеса,  $b_x^a, b_x^p, b_y$  — коэффициенты демпфирования;  $M_d$  — момент привода.

Максимум динамических характеристик ММГ достигается при совпадении собственных частот колебаний активной рамы, пассивной рамы и чувствительной пластины:

$$\sqrt{\frac{G_x^p}{J_x^p + J_x^s}} = \sqrt{\frac{G_y^s}{J_y^s}} = \omega_d, \quad (11)$$

где  $\omega_d$  — частота возбуждения привода.

## Заклучение

Создание информационно-аналитического обеспечения, объединяющего информацию о схемно-конструктивном исполнении с математическим описанием, позволяющим оценить ожидаемые характеристики прибора, дает возможность повысить эффективность работы на начальных этапах проектирования. Информационно-аналитическое обеспечение может быть построено по предложенной структуре на базе приведенных классификаций, базовых конструктивных схем и математических моделей, описывающих динамику приборов.

### Список литературы

1. Евстифеев М. И. Классификационные признаки микромеханических гироскопов // Гироскопия и навигация. 2004. № 3. С. 30–37.
2. Распопов В. Я., Никулин А. В., Лихошерст В. В. Классификация конструкций микромеханических гироскопов // Изв. вузов. Приборостроение. 2005. Т. 48, № 8. С. 5–9.
3. IEEE Std 1431™ — 2004. IEEE Standard Specification Format Guide and Test Procedure for Coriolis Vibratory Gyros.
4. Mescheder U., Majer S. Micromechanical inclinometer // Sensor and Actuators. 1997. N 4. P. 134–138.
5. Патент 5591910 США. Texas Instruments Inc США, дата патентования 7.01.1997.
6. Патент 6199874 США. Cornell Research Foundation Inc. дата патентования 13.03.2001.
7. Патент 5817942 США. The Charles Stark Draper Laboratory США, дата патентования 6.10.1988.
8. Липень А. Монолитные акселерометры Analog Devices ADXL 150/250 // Электронные компоненты. 2003. № 2. С. 61–63.
9. Распопов В. Я. Микромеханические приборы: учеб. пособие. М.: Машиностроение, 2007. 400 с.
10. Sundstrand Data Control: проспект фирмы. Арзамас: ОНТИ ОКБА "Темп-Авиа", 1981.
11. В-290 "TRIAD". Three Axis Accelerometer: рекламный лист фирмы LITEF GmbH (Германия), 1996.
12. Патент 5616844 Япония. Hitachi, Ltd, дата патентования 1.04.1997.
13. Патент 5504032 Германия. LITEF GmbH, дата патентования 2.04.1996.
14. Патент 6308569 Канада. Litton Systems, Inc, дата патентования 30.10.2001.
15. Шелепин Н. А. Датчики и микросистемы на базе технологии производства микросхем // Электронные компоненты. 2003. № 2. С. 40–42.
16. Лукьянов Д. П., Филатов Ю. В., Шевченко С. Ю. и др. Разработка и исследование микроакселерометра на поверхностных акустических волнах // Материалы XI С.-Петербургской международной конференции по интегрированным навигационным системам. 24–26 мая 2004. С.-Пб.: ГНЦ РФ ЦНИИ "Электронприбор". С. 181–188.
17. Barbour N., Connelly J., Gilmore J. Micro-Electromechanical Instrument and Systems Development at Draper Laboratory // Trans. 3<sup>rd</sup> St.-Petersburg Intern. Conf. On Gyroscopic Technology and Navigation, May 28–29, 1996. St.-Petersburg: CSRI "Elektropribor". Pt. 1. P. 3–10.
18. Будкин В. Л., Паршин В. А., Прозоров С. А., Саломатин А. К., Соловьев В. М. Разработка кремниевых датчиков первичной информации для систем навигации и управления // Гироскопия и навигация. 1988. № 3. С. 149–153.
19. Патент 5734105 США. Nippondenso Co., дата патентования 31.03.1998.
20. Патент 8349855 США. The Charles Stark Draper Lab, дата патентования 27.09.1994.
21. Патент 6122961 США. Analog Devices Inc, дата патентования 26.09.2000.
22. Патент 6327907 США. Samsung Electro. Mechanics Co., Ltd., дата патентования 11.12.2001.
23. Патент 5728966 США. Robert Bosch GmbH, дата патентования 17.03.1998.
24. Патент 6089089 США. Microsensors, Inc., дата патентования 18.07.2000.
25. <http://www.microfabrica.com/>
26. Патент 1098170 Евр. Samsung Electronics, дата патентования 5.09.2001.
27. Патент 5349855 США. The Charles Stark Draper Laboratory, Inc, дата патентования 27.09.1994.
28. Cenk A., Shkel A. MEMS Vibratory Gyroscopes Structural Approaches to Improve Robustness. Springer Science + Business Media, LLC. 2009. 257 p.
29. Schofield A. R., Trusov A. A., Shkel A. M. Effects of Operational Frequency Scaling in Multi-Degree of Freedom MEMS Gyroscopes // IEEE Sensors Journal. 2008. Vol. 8, N 10. P. 1672–1680.
30. Acar C., Schofield A. R., Trusov A. A., Costlow L. E., Shkel A. M. Environmentally Robust MEMS Vibratory Gyroscopes for Automotive Applications // IEEE Sensors Journal. 2009. Vol. 9, N 12. P. 1895–1906.

УДК 51-73

**Е. А. Белогуров**, инженер,  
e-mail: e.belogurov@gmail.com,  
**Я. И. Шукевич**, инженер,  
**В. В. Баркалин**, канд. физ.-мат. наук,  
**В. В. Хатько**, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
**И. А. Таратын**, канд. техн. наук, доц.,  
Белорусский национальный технический университет

## КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Поступила в редакцию 28.07.2011

Разработана методика определения тензоров модулей упругости и теплопроводности нанопористых материалов на основе имитационного моделирования стандартных

экспериментальных методик методом конечных элементов. Рассчитаны зависимости компонентов указанных тензоров для  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  и кремния от пористости. В качестве примера применения полученных результатов рассчитано влияние пористости на распределение температуры в структуре химического сенсора на основе  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ .

**Ключевые слова:** метод конечных элементов, тензор модуля упругости, тензор теплопроводности, нанопористые материалы

### Введение

В последнее время наблюдается интенсивное развитие технологий создания наноматериалов и наноструктур, которые проявляют новые электронные и оптические свойства, определяемые пониженной размерностью и квантовыми размерными эффектами. Уникальные свойства наноразмерных электронных систем уже используются в ряде лазерных

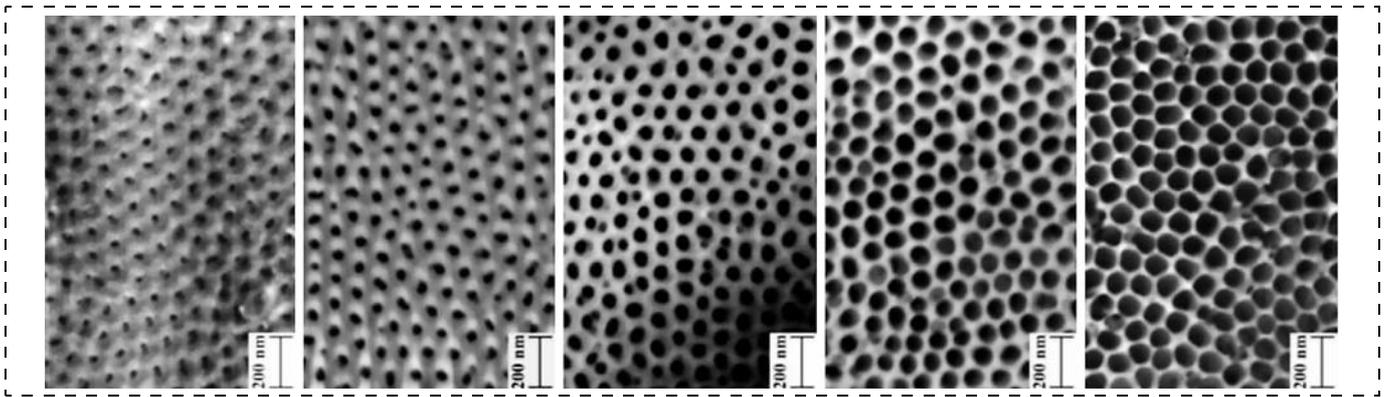


Рис. 1. Изображения пленок из  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  с различной пористостью, полученных на сканирующем электронном микроскопе [1]

структур, оптоэлектронных устройствах, датчиках и системах мониторинга окружающей среды, МЭМС-датчиков угловых скоростей, в каталитических и биохимических технологиях. Использование наноструктурированных материалов является одним из важнейших направлений развития МЭМС/НЭМС. В связи с этим большой интерес представляют нанопористые материалы, в частности, анодный оксид алюминия и пористый кремний [1, 2].

Одним из наиболее перспективных путей увеличения чувствительности газовых сенсоров является увеличение эффективной поверхности активного газочувствительного слоя. Практически чувствительность пропорциональна отношению поверхности газочувствительного слоя к ее объему. Альтернативными путями увеличения эффективной поверхности активного слоя являются применение нанопорошков, использование специальных методов структурирования поверхности, а также пористых материалов в качестве основы для нанесения активных слоев. Больше всего для этой цели подходит анодный оксид алюминия (АОА), представляющий собой периодическую матрицу параллельных ячеек гексагональной симметрии с центральной цилиндрической порой, возникающих при анодировании алюминия в процессе самоорганизации (рис. 1).

Важно отметить, что размеры самой ячейки и диаметр поры могут варьироваться в достаточно широком интервале. Нанопористая структура оксида улучшает целый ряд механических свойств: упругость, твердость, износостойкость и др. [3]. Это делает возможным применять пленки из АОА в качестве пассивной диэлектрической маски, матрицы для заполнения определенным материалом, подложки для чувствительных элементов химических сенсоров.

Пористый кремний получается при анодной электрохимической обработке монокристаллического кремния в растворах на основе плавиковой кислоты. В настоящее время удается варьировать пористость в кремнии от 5 до 90 %. На сегодняшний день основное применение пористого кремния в электронике — это использование в качестве толстых изолирующих слоев [2].

При проектировании устройств на основе пористого анодного оксида алюминия и пористого кремния важное значение имеет получение достоверных зависимостей их термомеханических параметров от пористости. В данной статье представлена методика определения этих зависимостей для модулей упругости и коэффициентов теплопроводности на основе моделирования стандартных экспериментальных методик методом конечных элементов.

### Методика расчета

Определение модулей упругости и коэффициентов теплопроводности пористых материалов экспериментальным методом, особенно для анизотропных материалов, представляет собой достаточно сложную задачу для образцов малых размеров, часто многофазных. В связи с этим приобретают особую актуальность методы компьютерного моделирования, основанные на использовании различных подходов [4].

Наиболее прямым подходом к вычислению материальных констант наноструктурированных материалов является использование алгоритмов молекулярной динамики и механики с феноменологическими межатомными потенциалами и алгоритмов *ab initio* [5]. Расчет модулей упругости в этом случае обычно предполагает вычисление энергии образца как функции компонентов тензора макроскопических деформаций и использование определения модулей упругости в виде [6]

$$C_{IJ} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E(\epsilon)}{\partial \epsilon_I \partial \epsilon_J}, \quad (1)$$

где  $C_{IJ}$  — компонента тензора модулей упругости;  $\epsilon$  — тензор деформаций;  $\epsilon_I$  — компоненты тензора макроскопической упругой деформации в матричных обозначениях,  $I, J = 1 \dots 6$ ;  $E(\epsilon)$  — энергия упругой деформации;  $V$  — объем образца.

Коэффициенты теплопроводности материалов в методе молекулярной динамики определяются на основе формул Кубо, требующих расчета автокорреляционной функции локального теплового потока в равновесном состоянии системы [7].

Следует, однако, отметить, что метод молекулярной динамики, особенно в его *ab initio* варианте, очень требователен к компьютерным ресурсам и дает хорошие результаты только при тщательно выбранном потенциале межатомных взаимодействий. Для определения зависимости термомеханических параметров наноструктурированных материалов с регулярной структурой, какими являются пористый кремний и анодированный оксид алюминия, в данной работе используется гораздо менее требовательный к компьютерным ресурсам метод конечных элементов, причем для определения модулей упругости используется энергетический подход, основанный на использовании соотношения (1), в котором в качестве  $E(\varepsilon)$  берется упругая энергия периодической ячейки пористого материала, вычисляемая при заданном смещении точек границ ячейки в соответствии с выражениями

$$\begin{aligned} x &= (1 + \varepsilon_1)x_0 + \frac{1}{2}\varepsilon_6y_0 + \frac{1}{2}\varepsilon_5z_0; \\ y &= \frac{1}{2}\varepsilon_6x_0 + (1 + \varepsilon_2)y_0 + \frac{1}{2}\varepsilon_4z_0; \\ z &= \frac{1}{2}\varepsilon_5x_0 + \frac{1}{2}\varepsilon_4y_0 + (1 + \varepsilon_3)z_0, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $(x_0, y_0, z_0)$  — координаты точек границ в недеформированном состоянии, с использованием модулей упругости сплошного материала. Определение коэффициентов продольной и поперечной теплопроводности пористых материалов осуществлялось имитационным моделированием экспериментальной методики, которая заключается в пропускании стационарного единичного теплового потока через торец образца и снятии разницы температур с противоположных торцов в соответствии с ГОСТ 7076—99:

$$k = \frac{W}{l\Delta T}, \quad (3)$$

где  $W$  — мощность теплового потока, Вт;  $\Delta T$  — разность температур на противоположных торцах образца, К;  $l$  — длина образца, м.

### Описание расчетной модели

При расчете упругих модулей использовалось допущение, что матрица пор в образце имеет идеальную периодичность. На рис. 2 показаны геометрические модели структурной ячейки кремния и  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ .

Для  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  рассматривалась ячейка с семью порами для учета периодичности и взаимодействия соседних пор. Диаметр описанной окружности вокруг шестиугольника составлял 150 нм, высота ячейки — 750 нм, диаметр поры варьировался от 20 до 120 нм. Ячейка подвергалась воздействиям полей механических деформаций величиной  $10^{-3}$ , прикладываемых ко всем узлам сетки конечных элементов (КЭ). По всей площади поверхности поры задавалось условие отсутствия нормальных механических напряжений:  $\sigma = 0$ . Затем проводилось

вычисление упругой энергии ячейки при указанных деформациях.

Для кремния все задавалось аналогично. Предлагаемая модель структуры пор приводит в случае кремния к изменению симметрии материала по

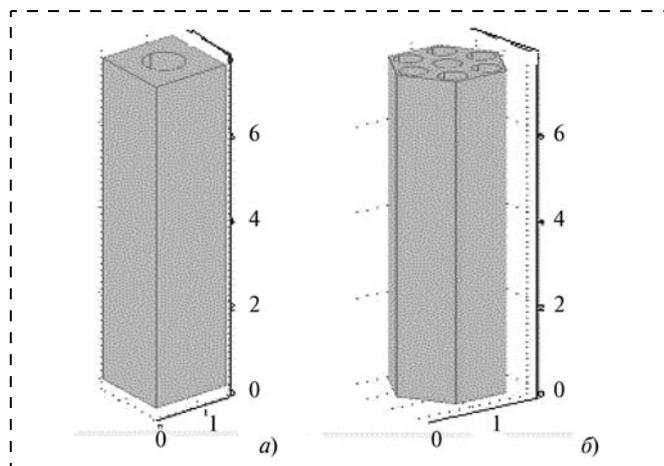


Рис. 2. Геометрическая модель, используемая для расчета модулей упругости и продольной теплопроводности (размеры в нм): а — кремния; б —  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

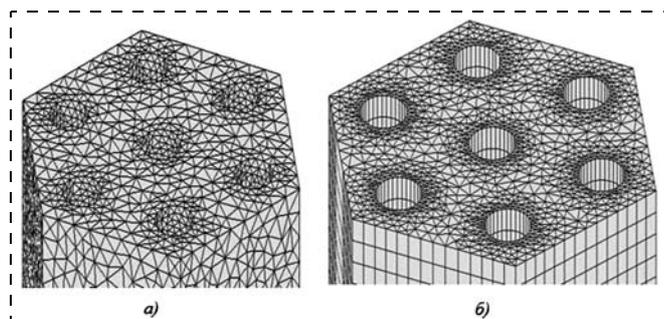


Рис. 3. Конечно-элементная сетка: а — неструктурированная сетка из тетраэдров; б — структурированная сетка из треугольных призм

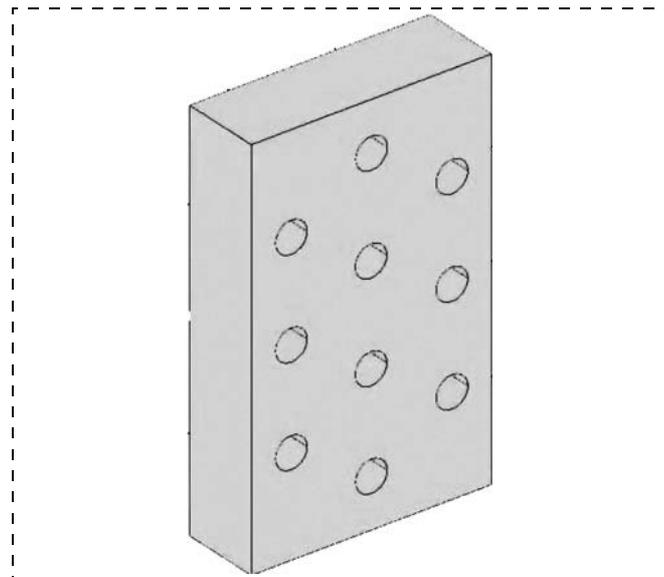


Рис. 4. Геометрическая модель для определения коэффициента поперечной теплопроводности (высота 750 нм, ширина 450 нм, толщина 100 нм)

Таблица 1

Физические параметры  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  и кремния

Параметры	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	Si
Модуль упругости, ГПа	$C_{11} = 495; C_{12} = 160;$ $C_{13} = 115; C_{14} = 230;$ $C_{33} = 497; C_{66} = 146$	$C_{11} = 165;$ $C_{12} = 64;$ $C_{33} = 73$
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	3985	2330
Продольная теплопроводность, Вт/м·К	25,2	151
Поперечная теплопроводность, Вт/м·К	23,1	148,4

сравнению с симметрией беспористого материала. Число независимых компонент тензора упругости в этом случае увеличивается до шести, что соответствует гексагональной структуре.

Вычисления проводились на структурированной и неструктурированной сетках, число конечных элементов составляло 35 000. На рис. 3 показаны геометрические модели ячеек с различными видами сеток.

Геометрические модели для определения коэффициента продольной и поперечной теплопроводности представлены на рис. 2 и 4 при условии, что тепловой поток распространяется в материале соответственно вдоль и перпендикулярно оси поры. Объемное содержание пор варьировалось от 0 до 90 % за счет изменения их радиуса.

Основные параметры приведены в табл. 1.

### Анализ полученных результатов

Полученные зависимости независимых компонент тензора модулей упругости для оксида алюминия и кремния от пористости представлены на рис. 5 и 6 соответственно.

Ввиду монотонности зависимостей компонент тензора модуля упругости от пористости было решено ограничиться ее значениями не более 70 %.

Будем использовать следующие зависимости от пористости для поперечного и продольного коэффициентов теплопроводности:

$$\chi'_1 = \left(1 - \frac{4}{3}n\right)\chi_1; \chi'_3 = (1 - n)\chi_3, \quad (4)$$

где  $\chi_1, \chi'_1$  — коэффициенты поперечной теплопроводности при нулевой и ненулевой пористости  $n$  (в относительных единицах);  $\chi_3, \chi'_3$  — коэффициенты продольной теплопроводности

при нулевой и ненулевой пористости соответственно. Для поперечной компоненты указанное в формуле (4) соотношение получено в работе [9] на основе статистических соображений. Для продольной компоненты указанный результат следует из геометрических соображений, поскольку основной эффект пор сводится к уменьшению поперечного сечения теплопроводящего материала с ростом диаметра пор (полые поры по предположению теплоту не проводят, поскольку теплопроводность воздуха в них на несколько порядков ниже), а при фиксированной длине пор пористость материала пропорциональна их площади.

На рис. 7 и 8 представлены полученные в данной работе зависимости коэффициента продольной теплопроводности от пористости для оксида алюминия

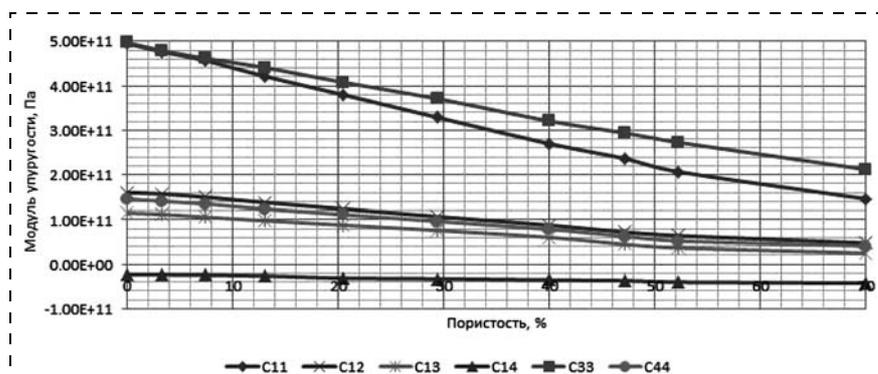


Рис. 5. Зависимости независимых компонент модулей упругости оксида алюминия от пористости

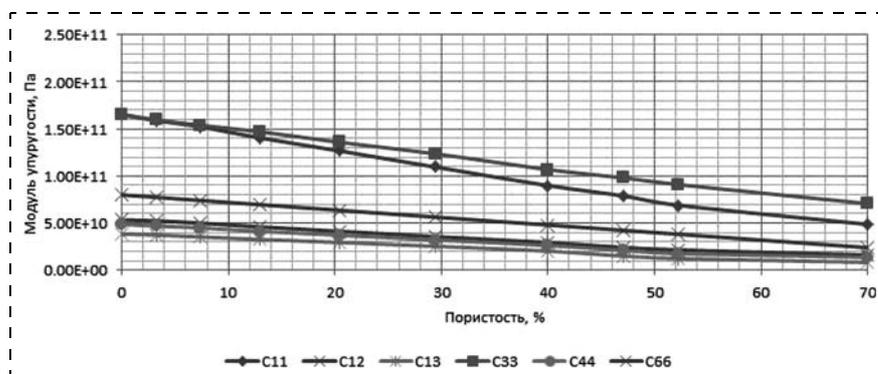


Рис. 6. Зависимости независимых компонент модулей упругости пористого кремния от пористости

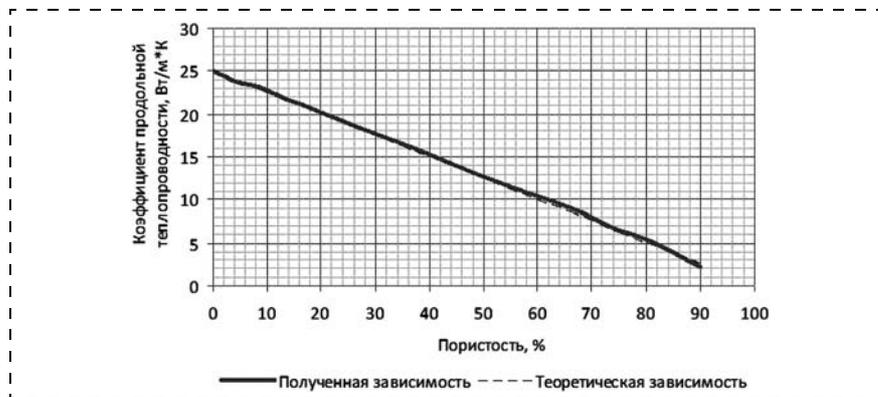


Рис. 7. Зависимость коэффициента продольной теплопроводности от пористости для оксида алюминия

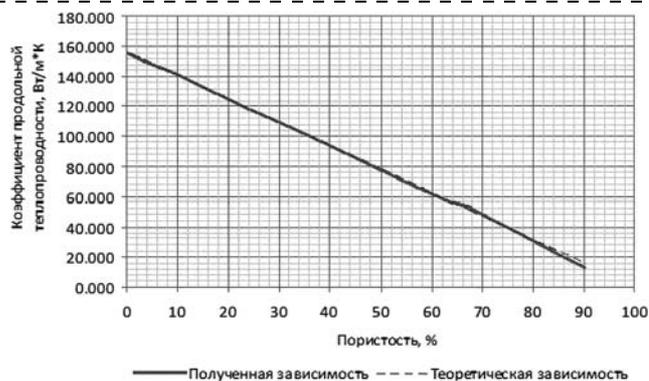


Рис. 8. Зависимость коэффициента продольной теплопроводности от пористости для кремния

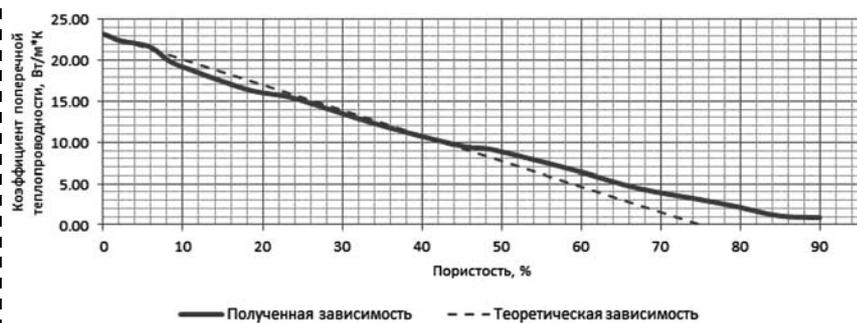


Рис. 9. График зависимости коэффициента поперечной теплопроводности от пористости для оксида алюминия

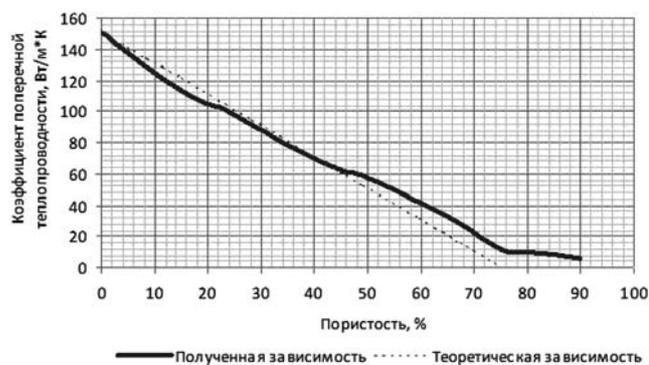


Рис. 10. График зависимости коэффициента поперечной теплопроводности от пористости для кремния

и пористого кремния соответственно вместе с теоретическими прямыми, следующими из уравнений (4), а на рис. 9 и 10 — соответствующие зависимости для поперечной теплопроводности. Как следует из представленных данных, результаты теоретического расчета и имитационного моделирования соответствуют друг другу в достаточно широком интервале пористостей.

Полученные в работе данные о зависимости коэффициентов теплопроводности от пористости материала были использованы для определения оптимальной по потребляемой мощности перспективной конструкции химического сенсора на основе анодированного оксида алюминия. Исследуемая конструкция представлена на рис. 11. Она включает подложку из монокристаллического пористого  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ , на которой расположен платиновый нагреватель типа меандра, покрытый газочувствительным слоем на основе ИТО (Indium Tin Oxide). Данный материал — твердый раствор оксидов индия и олова (90 % по массе  $\text{In}_2\text{O}_3$ , 10 %  $\text{SnO}_2$ ) — является одним из распространенных полупроводниковых материалов, чувствительных к газам, в частности, к оксидам азота и тетрахлорметану [9]. Во всех случаях использовалась квадратная подложка со стороной 1 мм и толщиной 80 мкм с платиновой металлизацией толщиной 0,2 мкм. Площадь меандра составляет приблизительно  $150 \times 150$  мкм при ширине проводника 20 мкм и расстоянии между коленами меандра 10 мкм. Толщина газочувствительного слоя выбиралась равной 20 мкм, его площадь — размерам меандра. Параметры мате-

Таблица 2

Физические параметры элементов химического сенсора

Материал/свойства	ИТО	Оксид алюминия	Платина
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	7120	3965	2145
Электропроводность, См	0	0	$9,5 \cdot 10^6$
Теплоемкость при постоянном давлении, Дж/кг·К	230	730	150
Теплопроводность, Вт/м·К	12	$\chi_1 = 23,1$ $\chi_3 = 25,2$	71,6
Кoeffициент теплового расширения, $10^{-6} \text{ K}^{-1}$	2,3	$\alpha_1 = 5,0$ $\alpha_3 = 6,66$	8,8
Кoeffициент теплообмена с внешней средой, Вт/м <sup>2</sup> ·К	5	5	5

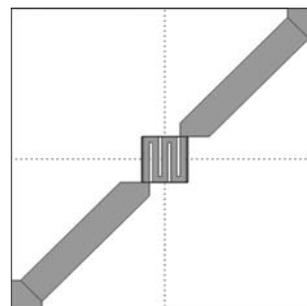


Рис. 11. Общий вид химического сенсора

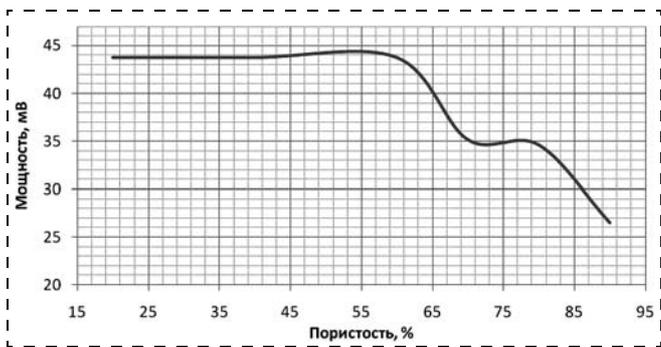


Рис. 13. Зависимость потребляемой мощности от пористости подложки

риалов, использованные при моделировании, представлены в табл. 2.

Оптимальными температурами для обеспечения высокой чувствительности сенсора в широком диапазоне концентраций газов является диапазон температур от 573 до 823 К [10, 11]. Для учета фактора потерь теплоты через подводящие провода на контактных площадках металлизации задавалась фиксированная температура 383 К. На рис. 12 (см. четвертую сторону обложки) показаны распределения температуры по подложке из  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  с пористостью 60 и 90 %.

Анализ распределения температуры в сенсоре, представленный на рис. 12, указывает на локализацию температурного поля в области платиновых электродов при высоком значении пористости алюмооксидной подложки, что следует учитывать при разработке сенсоров на пористых подложках.

Учитывая влияние пористости подложки на распределение температурного поля в сенсоре далее представлялось интересным исследовать влияние пористости на потребляемую мощность сенсора, т. е. мощности электрического тока, которая тратится для поддержания газочувствительного слоя ИТО при температуре 773...823 К. Полученная зависимость потребляемой мощности сенсора от пористости алюмооксидной подложки приведена на рис. 13.

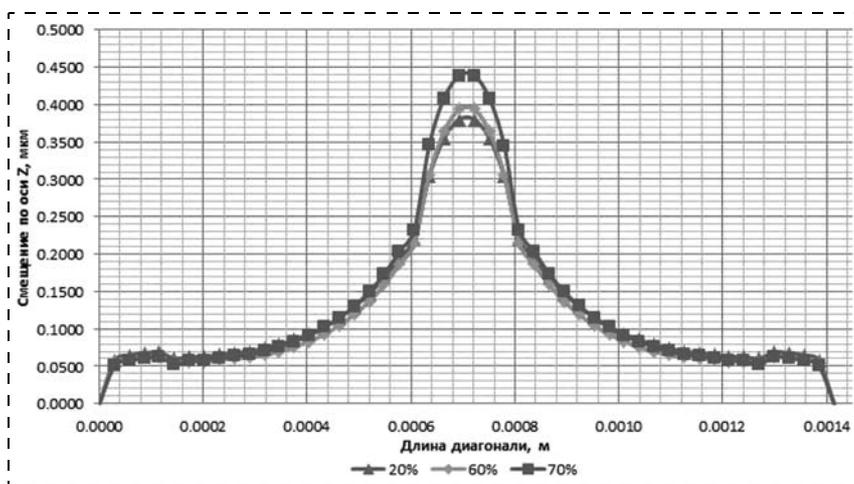


Рис. 14. Зависимость прогиба подложки от пористости

На рис. 13 видно, что только при превышении пористости в алюмооксидной подложке выше 60 % наблюдается уменьшение потребляемой мощности сенсора. Это в полной мере соответствует уравнениям (4) и расчетным значениям, представленным на рис. 7 и 9, так как при пористости подложки порядка 75 % поперечный коэффициент теплопроводности алюмооксидной подложки равен нулю.

На рис. 12 видно, что максимальные температуры нагрева сосредоточены в области чувствительного слоя химического сенсора. Поэтому представляло интерес исследовать изменение геометрических размеров данной области вследствие теплового расширения. На рис. 14 представлены зависимости профиля прогиба подложки вдоль диагонали ИТО от значения пористости при рабочей температуре сенсора порядка 823 К. Видно, что при таком нагреве происходит "вспучивание" данной области с ее смещением приблизительно на 0,4 мкм по оси z, если пористость подложки равна порядка 70 %.

Таким образом, при изготовлении химических сенсоров на подложках из нанопористого оксида алюминия следует принимать во внимание, что при увеличении пористости подложки наряду с положительным эффектом, связанным с уменьшением потребляемой мощности сенсора, можно ожидать разрушение области чувствительного слоя за счет термических воздействий. Для уменьшения данного нежелательного результата требуется более тщательный подбор пары платиновый нагреватель — материал чувствительного слоя.

## Выводы и заключение

Показана принципиальная возможность моделирования термомеханических свойств нанопористых материалов методом конечных элементов. Определены зависимости всех независимых компонентов тензора модулей упругости и коэффициентов теплопроводности от пористости для анодированного оксида алюминия и пористого кремния. Установлены зависимости потребляемой мощности и прогиба подложки химического сенсора от пористости алюмооксидной подложки при рабочих температурах сенсора порядка 773...823 К.

*Работа частично финансировалась в рамках задания 1.2.2 научно-технической программы Союзного государства "Нанотехнология СТ".*

## Список литературы

1. Khatko V., Gorokh G., Mozalev A., Solovoi D., Llobet E., Vilanova X. Corrigé X. Tungsten Trioxide Sensing Layers on Highly Ordered Nanoporous Alumina Templates // Sensors and Actuators B: Chemical. 2006. Vol. 118. N 1. P. 255—262.
2. Lang W., Steiner P., Richter A., Marusczyk K., Weimann G., and Sandmaier H. Application porous silicon as a sacrificial layer // Sensors and Actuators A. 1994. Vol. 43. P. 239—242.

3. Xia Z., Riester L., Sheldon B. W., Curtin W. A., Liang J. Mechanical properties of highly ordered nanoporous anodic alumina membranes // Rev. Adv. Mat. Sci. 2004. Vol. 6. P. 131–139.

4. Баркалин В. В., Медведев С. В., Нелаев В. В., Слущак П. А., Юркевич С. Н. Иерархическая система моделирования физических процессов и свойств материалов на базе суперкомпьютерной конфигурации СКИФ К-1000 // Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач: Тр. Всероссийской науч. конф. (22–27 сентября 2008 г., г. Новороссийск). М.: Изд-во МГУ, 2008. С. 101–105.

5. Barkaline V. V., Chashynski A. S. and Chizhik S. A. Molecular dynamics simulation of mechanical properties of carbon nanotubes and their contact interaction with substrate // Proc. SPIE 7377, 737702. 2008.

6. Odegard G. M., Gates T. S., Nicholson L. M., Wise K. E. Equivalent-Continuum Modeling with Application to Carbon Nanotubes // NASA/TM-2002-211454. 2002.

7. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. N. Y.: Academic Press, 2002. 658 p.

8. Acoustic Crystals Handbook / Ed. M. P. Shaskolskaya. Nauka, Moscow, 1982. 382 p.

9. Ташкинов А. А., Шавшуков В. Е. Прогнозирование эффективных теплофизических характеристик пироуглеродных матриц // Математическое моделирование систем и процессов. 2002. № 10.

10. Sako T., Ohmi A., Yumoto H., Nishiyama K. ITO-film gas sensor for measuring photodecomposition of NO<sub>2</sub> gas // Surface and Coatings Technology. 2001. Vol. 781. P. 142–144.

11. Jiao Z., Wu M., Qin Z., Lu M., Gu J. The NO<sub>2</sub> sensing ITO thin films prepared by ultrasonic spray pyrolysis // Sensors. 2003. № 3. P. 285–289.

УДК 621.3.088.23

**Е. А. Печерская**, д-р техн. наук., доц.,  
e-mail: peal@list.ru,  
**А. М. Метальников**, канд. техн. наук, доц.,  
зам. зав. каф., e-mail: micro@pnzgu.ru,  
**Ю. А. Вареник**, канд. техн. наук, доц.,  
e-mail: micro@pnzgu.ru,  
**А. В. Бобошко**, аспирант,  
e-mail: lestagros@gmail.com,  
ГОУ ВПО "Пензенский государственный  
университет"

## МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ ТОКА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Поступила в редакцию 26.07.2011

*Проанализирован метод косвенного измерения диэлектрических параметров сегнетоэлектриков, основанный на измерении временной зависимости тока переключения с помощью схемы Сойера—Тауэра. Приведены формулы для расчета времени переключения, активного сопротивления, обуславливающего потери энергии при спонтанной поляризации, емкости, поляризованности.*

**Ключевые слова:** сегнетоэлектрик, спонтанная поляризация, ток переключения, метод измерений, схема Сойера—Тауэра

### Введение

Нелинейные зависимости диэлектрических параметров сегнетоэлектриков от напряженности электрического поля содержат информацию о механизмах их переполяризации, вследствие чего представляется актуальной задача измерения и моделирования указанных зависимостей при воздействующем сигнале различной формы (гармонической, ступенчатой квазисинусоидальной, в виде прямоугольных импульсов). В работе [1] представ-

лены результаты экспериментального исследования поляризации в тонких сегнетоэлектрических пленках при воздействии электрического импульса и объяснено явление затухания поляризации с помощью феноменологической теории Гинзбурга.

Наиболее известный метод измерения петель гистерезиса основан на так называемой схеме Сойера—Тауэра, принцип измерений изложен в работе [2]. Метрологический анализ модификаций данной схемы, позволивший выявить и проанализировать методические погрешности измерения полевых зависимостей поляризованности, относительной диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь сегнетоэлектриков, приведен в [3].

В работе [4] изложен оригинальный метод измерения емкости диэлектриков, основанный на отражении импульсного сигнала генератора от выхода коаксиального кабеля с нагрузкой — конденсатором, между обкладками которого помещен исследуемый диэлектрик. В статье [5] данный метод распространен на процессы измерения диэлектрических параметров сегнетоэлектриков с использованием ступенчатого воздействия.

Ниже рассмотрен метод измерения, основанный на косвенном определении диэлектрических параметров сегнетоэлектриков по временным зависимостям тока переключения.

### Метод измерения временной зависимости тока переключения

В основу метода измерений положена схема Сойера—Тауэра. Она представляет собой емкостной делитель, одно из плеч которого — конденсатор с исследуемым сегнетоэлектриком емкостью  $C_x$  (рис. 1, а).

Если конденсатор  $C_0$  заменить последовательно включенным сопротивлением  $r$  (схема представлена на рис. 1, б), то падение напряжения на нем  $U_y$  пропорционально току переполяризации  $i_s$ . Функция  $i_s(t)$  зависит от напряженности поля  $E$ , а сле-

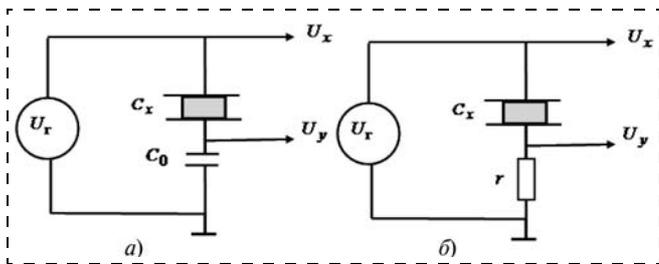


Рис. 1. Схемы Сойера—Тауэра для измерения петли гистерезиса зависимости поляризованности от напряженности  $P(E)$  (а); тока  $i_s$  и времени переключения  $t_s$  (б)

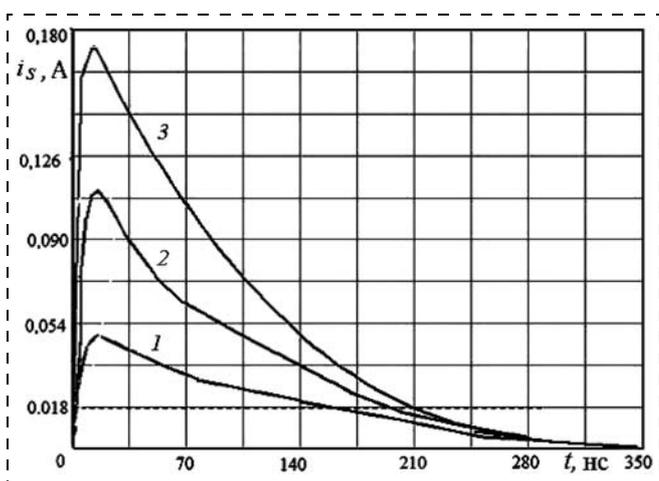


Рис. 2. Временная зависимость тока переключения  $i_s$  при разных значениях напряженности электрического поля  $E$ : 1 — при  $E = 100$  кВ/м; 2 — при  $E = 200$  кВ/м; 3 — при  $E = 350$  кВ/м

довательно, и от формы сигнала генератора  $U_r(t)$ , которая, в свою очередь, приводит к погрешностям методического характера в результатах измерения диэлектрических параметров сегнетоэлектриков. Например, в работе [6] получены выражения для погрешностей измерения емкости сегнетоэлектрика при синусоидальном воздействии и комбинированном в виде гармоника и постоянного смещения. Таким образом, ток, протекающий в цепи при синусоидальном напряжении генератора, является недостаточно информативным, и для измерений параметров материала целесообразно использовать воздействующее напряжение в виде прямоугольных импульсов.

На рис. 2 показан отклик в виде тока переполяризации  $i_s(t)$  на положительный прямоугольный импульс от генератора при разных значениях напряженности электрического поля.

Результаты эксперимента, проведенного на автоматизированном лабораторном стенде [7], подтвердили, что максимальный ток переключения  $i_{\max}$  возрастает, а время переключения  $t_s$  уменьшается с увеличением напряженности электрического поля. Согласно работам [2, 8, 9] время переключения определяется как время, в течение которого ток  $i_s$  уменьшается до значения  $0,1i_{\max}$  при данной напряженности поля.

## Метод измерения резистивной составляющей сопротивления сегнетоэлектрика

Для исследования переходных процессов, имеющих место в цепи с сегнетоэлектриком (рис. 1, б) при подаче прямоугольного входного воздействия с генератора, необходимо учитывать наличие активной составляющей сопротивления сегнетоэлектрика согласно параллельной или последовательной схемам замещения. В общем случае эта активная составляющая состоит из сопротивления  $r_{\text{сп}}$ , обуславливающего потери энергии при спонтанной поляризации, и сопротивления сегнетоэлектрика току сквозной электропроводности  $R_c$  [5]. При пренебрежении  $R_c$  по сравнению с  $r_{\text{сп}}$  известное сопротивление  $r$  в схеме Сойера—Тауэра включено последовательно с  $r_{\text{сп}}$ . Для оценивания  $r_{\text{сп}}$  в данной работе предлагается использовать совместные измерения.

Суть измерений заключается в следующем:

- поочередно в качестве  $r$  подключаются два разных сопротивления известных номиналов  $r_1$  и  $r_2$ ;
- рассчитывают соответствующие постоянные времени цепи  $\tau_1$  и  $\tau_2$  по результатам измерений зависимости  $U_y(t)$  и на основании того, что длительность переходного процесса соответствует времени  $3\tau$ ;
- составляют систему уравнений:

$$\begin{cases} \tau_1 = C_x R_{\text{эКВ1}}, \\ \tau_2 = C_x R_{\text{эКВ2}}, \end{cases} \quad (1)$$

где  $R_{\text{эКВ1}} = r_1 + r_{\text{сп}}$ ;  $R_{\text{эКВ2}} = r_2 + r_{\text{сп}}$ .

В результате совместных измерений возможно определение  $r_{\text{сп}}$  по следующей формуле:

$$r_{\text{сп}} = \frac{\tau_1 r_1 - \tau_2 r_2}{\tau_2 - \tau_1}. \quad (2)$$

Предельная погрешность косвенного измерения  $r_{\text{сп}}$  в относительном виде определяется выражением

$$\begin{aligned} \delta r_{\text{сп}} = & \delta \tau_1 \left( \frac{\tau_1 r_1}{\tau_1 r_1 + \tau_2 r_2} + \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \right) + \\ & + \delta \tau_2 \left( \frac{\tau_2 r_2}{\tau_1 r_1 + \tau_2 r_2} + \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \right) + \\ & + \delta r_1 \left( \frac{\tau_1 r_1}{\tau_1 r_1 + \tau_2 r_2} \right) + \delta r_2 \left( \frac{\tau_2 r_2}{\tau_1 r_1 + \tau_2 r_2} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\delta \tau_1$ ,  $\delta \tau_2$  — соответственно предельные относительные погрешности измерения постоянных времени  $\tau_1$  и  $\tau_2$ ;  $\delta r_1$ ,  $\delta r_2$  — предельные относительные отклонения сопротивлений  $r_1$  и  $r_2$ .

## Определение времени переключения и диэлектрических параметров сегнетоэлектриков

На основе взаимосвязи между временем переключения и постоянной времени получена формула для времени переключения  $t_s$ :

$$t_s = -\tau \ln \left( \frac{0,1 i_{\max} R_{\text{ЭКВ}}}{U_{\Gamma \max}} \right), \quad (4)$$

где  $U_{\Gamma \max}$  — максимальное значение напряжения генератора.

В выражениях (2) и (4) предполагается, что время установления переднего фронта прямоугольного импульса генератора значительно меньше времени переходного процесса, обусловленного активным и реактивным сопротивлениями сегнетоэлектрического конденсатора и сопротивлением резистора  $r$ , включенного последовательно с ним.

Далее рассчитывают временную зависимость емкости сегнетоэлектрика  $C_x(t)$ :

$$C_x(t) = \frac{\tau}{R_{\text{ЭКВ}}} = - \frac{t}{R_{\text{ЭКВ}} \ln \left( i_s(t) \frac{R_{\text{ЭКВ}}}{U_{\max}} \right)}. \quad (5)$$

Зависимость поляризованности  $P$  сегнетоэлектриков наиболее информативна от напряженности электрического поля  $E$ , она имеет следующий формализованный вид:

$$P(E) = \frac{C_x E h}{S} = - \frac{t E h}{R_{\text{ЭКВ}} S \ln \left( i_s(t) \frac{R_{\text{ЭКВ}}}{U_{\Gamma \max}} \right)}, \quad (6)$$

где  $h$  — толщина сегнетоэлектрика;  $S$  — площадь пластины плоского сегнетоэлектрического конденсатора;  $E$  является функцией времени  $E(t) = \frac{U_{\Gamma}(t)}{h}$

при условии  $r \ll r_{\text{СП}}$ , так как при этом практически все напряжение генератора падает на сегнетоэлектрическом конденсаторе, т. е.  $U_C(t) \approx U_{\Gamma}(t)$ .

Аналогично по известным соотношениям взаимосвязи между диэлектрическими параметрами могут быть рассчитаны относительная диэлектрическая проницаемость, диэлектрическая восприимчивость и другие величины.

## Заключение

Рассмотрено применение модификации схемы Сойера—Тауэра для измерения временной зависимости тока переключения  $i_s$  сегнетоэлектрических образцов. Последовательность приложенных к кон-

денсатору с сегнетоэлектрическим образцом биполярных прямоугольных импульсов вызывает последовательность импульсов тока переключения, при этом каждый импульс тока соответствует одной и той же напряженности электрического поля  $E$ . Результаты измерений  $i_s(t)$  позволяют рассчитать время переключения  $t_s$ , сопротивление  $r_{\text{СП}}$ , обуславливающее потери энергии при спонтанной поляризации, емкость  $C_x$ , поляризованность  $P$  и другие диэлектрические параметры.

Результаты работы целесообразно применять при исследовании переходных процессов, имеющих место в цепи с сегнетоэлектриком, при моделировании зависимостей поляризованности сегнетоэлектрика от напряженности электрического поля.

*Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых, грант № МД-2654.2011.8.*

## Список литературы

1. Мишина Е. Д., Мухортов В. М., Сигов А. С., Казанцева Е. В. Возбуждение колебаний поляризации при прохождении электрического импульса в тонкой сегнетоэлектрической пленке // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 7. С. 13—15.
2. Барфут Дж. Введение в физику сегнетоэлектрических явлений: Пер. с англ. М.: Мир, 1970. 352 с.
3. Печерская Е. А. Метрологический анализ метода Сойера—Тауэра для измерения электрических свойств сегнетоэлектриков // Взаимодействие излучений с твердым телом: реферируемый сборник материалов 7-й Международной конференции (г. Минск, 26—28 сентября 2007 г.). Минск: Издат. центр БГУ, 2007. С. 386—388.
4. Dolocan V. A new method for dielectric and ferroelectric characteristics measurements // Measur. Sci. Technol. 1993. V. 4. P. 120—123.
5. Печерская Е. А. Метрологические аспекты исследования активных диэлектриков для микро- и наноиндустрии // Нано-и микросистемная техника. 2007. № 7. С. 41—45.
6. Печерская Е. А., Ляшко Ф. Е. Анализ погрешностей измерения вольт-фарадных характеристик сегнетоэлектрика в зависимости от вида измерительного сигнала // Изв. Самарского научного центра РАН. Вып. "Четверть века изысканий и экспериментов по созданию уникальных технологий и материалов для авиастроения УНТЦ-ФГУП-ВИ-АМ". 2008. Т. 2. С. 217—221.
7. Аверин И. А., Карпанин О. В., Метальников А. М., Печерская Р. М. Автоматизированный комплекс для дистанционного обучения в области индустрии микро-, наносистем // Автоматизированный комплекс для дистанционного обучения в области индустрии микро-, наносистем: Сб. тезисов Междунар. конф. "Образование для сферы нанотехнологий". Москва, 2010. 104 с.
8. Сидоркин А. С., Нестеренко Л. П. Исследование токов переключения в пленках титаната свинца и цирконата — титаната свинца в процессе усталости // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения: Сб. статей VII Международной научно-технической конференции (г. Москва, 23—27 ноября 2010 г.). М.: МИРЭА, 2010. Ч. 2. С. 40—42.
9. CHENG Jin-quan, WANG Biao, DU Shan-yi. A micro-mechanics method to study the effect of domain switching on fracture behavior of polycrystal-line ferroelectric ceramics // Applied Mathematics and Mechanics 2002. V. 23. N 11. P. 1250—1261.

**Т. Н. Бахвалова**, аспирант,  
**М. Е. Белкин**, д-р техн. наук, зав. науч. лаб.,  
 Московский государственный технический  
 университет радиотехники, электроники и  
 автоматики, e-mail: Bakhvalova@imirea.ru

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЕКТРАЛЬНОГО ДЕМУЛЬТИПЛЕКСОРА

Поступила в редакцию 01.11.2011

*Разработана модель спектрального демультиплексора на основе фотонного кристалла в интегральном исполнении. Был использован двумерный фотонный кристалл с квадратной решеткой, образованный диэлектрическими наностержнями в воздухе. Разработка демультиплексора основывалась на изменении поперечных размеров волноводных каналов и внесении дополнительных дефектных наностержней различного радиуса внутрь каналов. Подбор геометрических параметров модели проводился исходя из анализа карт фотонных запрещенных зон. Для моделирования распространения излучения в среде была использована программа OptiFDTD 8 фирмы Optiwave Software<sup>1</sup>.*

**Ключевые слова:** двумерный фотонный кристалл, оптический волновод, демультиплексор, фотонная запрещенная зона

### Введение

Полностью оптическая обработка сигналов благодаря прозрачности канала передачи данных, высокой скорости их обработки и нечувствительности к электромагнитным помехам имеет чрезвычайно высокий потенциал для широкого применения в будущих сверхскоростных телекоммуникационных сетях [1]. Однако несмотря на ряд прорывных подходов, предложенных различными исследовательскими группами, уровень ее применения пока значительно уступает электронной обработке сигналов. Основными причинами сложившейся ситуации считаются отсутствие эффективных устройств полностью оптической памяти и относительно большие размеры пассивных микрооптических компонентов — разветвителей, фильтров, мультиплексоров и т. д. Для уменьшения габаритных размеров требуется эффективное управление оптическим сигналом в масштабе нескольких длин волн, что представляет собой весьма сложную задачу с точки зрения технической реализации. Одно из решений подобной задачи — использование вместо сплошных сред, обычно применяемых в интегральной оптике, периодических структур, об-

ладающих уникальными оптическими свойствами. Такие структуры с периодической модуляцией диэлектрической проницаемости получили название фотонных кристаллов (ФК) [2]. В ФК появляется теоретическая возможность направления света по волноводам развитой топологии, изгибы которых могут быть выполнены с радиусом кривизны порядка длины волны. Подобный результат недостижим с помощью обычных диэлектрических волноводов, радиус кривизны изгибов которых не может быть менее 1 мм ввиду резкого роста доли высших излучающих мод в волноводном спектре [3].

Как известно, в настоящее время наиболее распространённый подход к увеличению пропускной способности телекоммуникационных волоконно-оптических систем передачи (ВОСП) состоит в использовании спектрального разделения каналов (СРК) [4]. Из двух известных вариантов реализации СРК наиболее экономически эффективным при современном развитии техники ВОСП является так называемое "разреженное" СРК (CWDM), когда расстояние между длинами волн оптических несущих достигает десятков и даже сотен нанометров. Самый простой пример CWDM представляет собой передачу на двух оптических несущих во втором и третьем окнах прозрачности кварцевого световода (на волнах 1310 и 1550 нм). Данная технология применяется, например, в пассивных оптических сетях [5] для передачи по одному волокну сигналов прямого (к абоненту) и обратного (к сетевому узлу) направлений. Кроме того, для передачи в прямом направлении данных и телевизионного вещания дополнительно используется волна 1490 нм. Еще одним примером технологии CWDM является телекоммуникационный стандарт IEEE 802.3 40GBASE-LR4, согласно которому сигналы передаются во втором окне прозрачности на четырех длинах волн с разном 20 нм: 1270, 1290, 1310 и 1330 нм.

Для разделения каналов на приемном конце системы с СРК, как и в радиосвязи, используются устройства, называемые демультиплексорами. Традиционные демультиплексоры, используемые в современных ВОСП с СРК, содержат достаточно габаритные элементы, например, спектральные фильтры на базе брэгговских решеток, интерферометров Маха—Цандера, волоконные массивы, и т. д. Спектральные фильтры могут быть также созданы на основе ФК путем варьирования фотонной запрещенной зоны (ФЗЗ) волноводной структуры [4] в одно-, двух- и трехмерных ФК. Для создания волноводов в основном используют двумерные ФК-структуры, которые являются более простой в изготовлении альтернативой трехмерным ФК. В таких волноводах явление полного внутреннего отражения ограничивает световые волны в перпендикулярном плоскости пленки направлении, а двумерная ФК-структура локализует и направляет световые волны в плоскости пленки вдоль линейного дефекта структуры.

<sup>1</sup> <http://www.optimave.com>

Наиболее целесообразно использование ФК-структур для реализации спектрального демультиплексора, схематически представляющего собой комбинацию разветвителей и спектральных фильтров [6].

В настоящее время известен ряд публикаций, посвященных моделированию фотонно-кристаллических спектральных фильтров и демультиплексоров. В частности, в работе [7] представлены результаты моделирования демультиплексора для ВОСП с CWDM, разделяющего волны 1310 и 1550 нм. Структура фотонного кристалла выполнена на кварцевой подложке и представляет собой набор кремниевых наностержней. Для формирования широкополосных фильтров использовали наностержни отличающегося радиуса (дефекты).

Впоследствии данный подход был развит в работах [6, 8]. Кроме того, в работе [9] представлена модель, так называемого триплексора с отражателем для рабочих длин волн 1310, 1490 и 1550 нм, также выполненного на базе двумерного ФК. Общий размер такого устройства составил всего  $16 \times 20$  мкм. В качестве основного материала наностержней использовался InGaAsP. Эффект спектрального разделения каналов осуществлялся за счет добавления дефектных стержней различного радиуса и с различным показателем преломления, для чего использовался материал  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Хотя в данной работе получены хорошие результаты по разделению каналов, использование нескольких материалов значительно усложняет технологический процесс изготовления демультиплексора.

Также представляет значительный интерес изучение возможности использования ФК-фильтров в системах с СРК при меньшем разnose между оптическими несущими, например в ВОСП по стандарту IEEE 802.3.

В свете изложенного выше в данной статье предлагается и исследуется фотонно-кристаллический демультиплексор для разделения оптических каналов, в котором путем внесения дефектов в строго периодическую структуру, а также путем изменения параметров элементов создаются условия для селективного распространения излучения. Данное устройство состоит из кремниевых наностержней в воздушном окружении и может функционировать при разнице между рабочими длинами волн менее 100 нм. Общий размер такого устройства не превышает  $10 \times 10$  мкм. Для моделирования распространения излучения в среде была использована программная среда OptiFDTD 8 фирмы Optiwave Software, Канада, в которой для анализа уравнений Максвелла используется разностная схема, называемая методом конечных разностей во временной области, FDTD.

## Модельные расчеты и результаты

Топология исследуемого демультиплексора представляет собой T-образный разветвитель из трех волноводных каналов — двух выходных и одного входного (рис. 1). В выходные каналы демультиплексора введены спектральные фильтры, реализованные посредством внесения дефектов и изменения ширины волноводного канала. Каждый из фильтров имеет запрещенную зону, соответствующую строго рассчитанному спектральному диапазону. Периодическая структура фотонного кристалла характеризуется фотонной запрещенной зоной, зависящей от соотношения показателей преломления элементов и материала подложки, а также от геометрических параметров структуры. Создавая устройство путем изменения структуры, мы нарушаем строгую периодичность, что образует области с измененной фотонной запрещенной зоной [6].

На первом этапе проектирования демультиплексора на основе ФК необходимо определить геометрические параметры и материал используемого двумерного ФК. В нашем случае все элементы структуры выполнены из одного и того же материала (Si) на подложке из  $\text{SiO}_2$ , которые являются наиболее распространенными материалами современных интегральных схем. В качестве периодических элементов ФК использованы наностержни (см. рис. 1), с помощью которых обеспечивается более высокая эффективность фильтрации по сравнению с нанотверстиями [7].

Для выбора оптимальных геометрических параметров структуры необходимо определиться с диапазоном рабочих длин волн. Как уже упоминалось, свет локализуется в ФК посредством ФЗЗ, поэтому главным требованием является нахождение рабочей длины волны внутри этой зоны (причем, чем ближе к середине ФЗЗ она будет находиться, тем

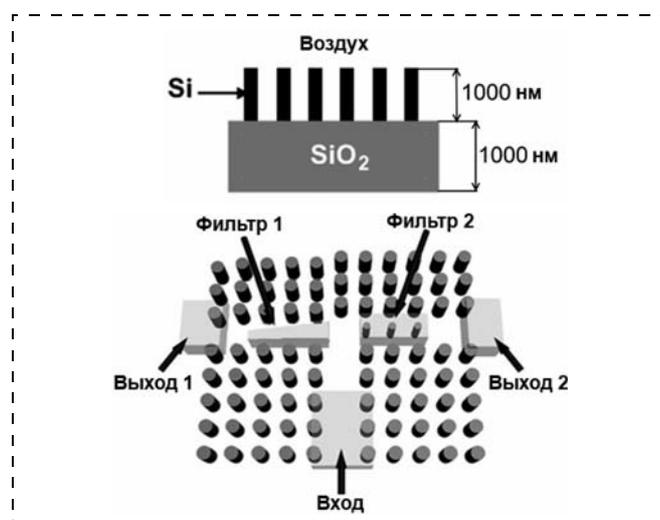


Рис. 1. Топология исследуемого оптического демультиплексора на основе ФК

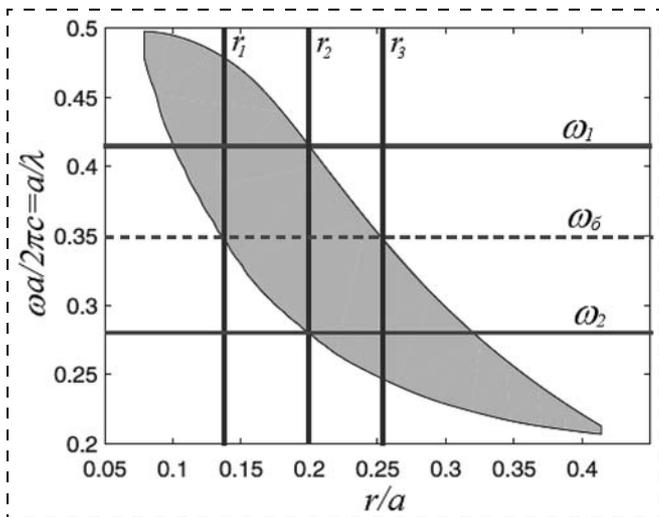


Рис. 2. Схема для выбора геометрических параметров ФК-демультиплексора посредством анализа атласа ФЗЗ [6]

сильнее будет локализация). Исходя из этого требования выбирается период решетки.

Основывающаяся на анализе атласа запрещенных зон графическая процедура выбора параметров состоит из следующих пяти шагов [6].

1. Определение значения  $r/a$  (радиус стержней/постоянная решетки) для базовой структуры ФК, в которой формируются волновод и демультиплексор. Для этого выбирается наиболее широкая область ФЗЗ, в которой устанавливается первая горизонтальная линия  $\omega_6$  (рис. 2).

2. Определение периода решетки ФК  $a$ . Исходя из выбранного значения относительной частоты находим период решетки ФК  $a$  по формуле

$$\omega_r = \frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda}. \quad (1)$$

3. Выбор оптимальной эффективной толщины ФК-структуры. Увеличение ширины канала приводит к смещению дисперсионных кривых в низкочастотную область. Как следствие, в запрещенной зоне появляются волноводные моды более высокого порядка. Оптимальными значениями эффективной толщины ФК-структуры являются высота  $2a$  для диэлектрических стержней и глубина  $0,6a$  для воздушных отверстий (структура мембраны) [10].

4. Определение относительных частот  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , соответствующих рабочим длинам волн демультиплексора-

ра. Для этого с помощью формулы (1) находим значения относительных частот, от которых проводятся горизонтальные линии. Выбирать частоты необходимо так, чтобы при некотором значении радиуса элементов  $r_2$  обе частоты находились внутри запрещенной зоны (базовая относительная частота), что соответствует ФК волноводного канала, а при двух других значениях радиуса  $r_1$  и  $r_3$  в запрещенную зону попадала только одна из частот, что соответствует ФК полосового фильтра.

5. Определение значений  $r/a$  для полосовых фильтров. На рис. 2 горизонтальными линиями обозначены нормированные частоты каналов, а вертикальными — радиусы стержней соответственно первого фильтра, волноводного канала и второго фильтра.

Приведенная схема дает точные значения параметров и полностью определяет структуру демультиплексора для рабочих длин волн 1,31 и 1,55 мкм [6, 8]. Фильтры, выполненные внесением дополнительных дефектов в структуру, являются широкополосными (~50—100 нм по уровню — 3 дБ) и не могут быть использованы в случае относительно небольшой разницы в рабочих длинах волн. Поэтому для удовлетворительной фильтрации рабочих длин волн с шагом менее 100 нм необходим дополнительный механизм ограничения.

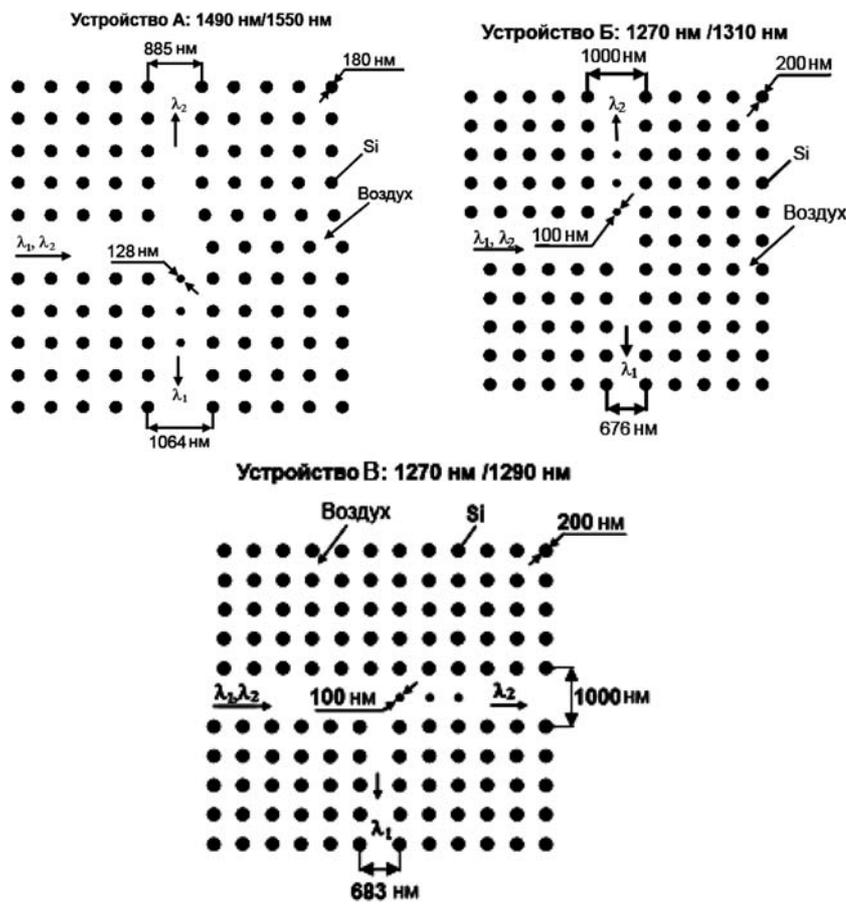


Рис. 3. ФК-демультиплексоры для различных спектральных полос

### Развязка по выходам

Выход	Устройство А		Устройство Б		Устройство В	
	1490 нм	1550 нм	1270 нм	1310 нм	1270 нм	1290 нм
1	-12 дБ	—	—	-8 дБ	—	-8 дБ
2	—	-12 дБ	-12 дБ	—	-6 дБ	—

При уменьшении поперечного размера ФК-волновода происходит смещение рабочих длин волн в коротковолновую область. Таким образом, по более узкому волноводу будет распространяться меньшая по значению длина волны. Использование дополнительной фильтрации позволяет снизить потери и значительно улучшить результаты для одной из рабочих длин волн. Данный механизм может быть реализован только в одном из фильтров, второй фильтр выбирается исходя из приведенной методики анализа ФЗЗ.

На рис. 3 представлены три разработанных спектральных демультиплексора/мультиплексора: устройство А для рабочих длин волн  $\lambda_1 = 1550$  нм и  $\lambda_2 = 1490$  нм (предназначено пассивной оптической сети PON); устройство Б —  $\lambda_1 = 1270$  нм и  $\lambda_2 = 1310$  нм (предназначено для ВОСП по стандарту IEEE 802.3); устройство В —  $\lambda_1 = 1270$  нм и  $\lambda_2 = 1290$  нм (предназначено для ВОСП по стандарту IEEE 802.3). Разработанные демультиплексоры представлены двумерным ФК, образованным набором из цилиндрических кремниевых наностержней с радиусом  $0,2a$ , окруженных воздухом. Демультиплексирование по длине волны в устройствах А, Б и В осуществляется за счет использования разветвителей и различных фильтров в них. В частности, первый фильтр выполнен на базе более узкого волновода, второй фильтр содержит три дополнительных дефектных наностержня внутри волновода нормальной ширины.

Полученные результаты компьютерного моделирования распределения электромагнитного поля в волноводах графически представлены на рис. 4 (см. третью сторону обложки). Кроме того, выше в таблице приведены численные значения развязки по выходам всех трех рассматриваемых устройств. Как следует из таблицы, чем меньше шаг между рабочими длинами волн, тем сложнее осуществить их спектральное разделение. В первую очередь это связано с широкополосностью одного из фильтров.

### Заключение

Предложена новая топология спектрального демультиплексора на основе двумерного ФК в интегральном исполнении, при формировании которой одно из плеч Т-разветвителя реализовано с помощью более узкого волноводного канала, что позволило работать с интервалом рабочих длин волн 60, 40 и 20 нм. Вся структура была выполнена из Si на подложке из SiO<sub>2</sub>, что обеспечивает сравнительную простоту технологического изготовления и возможность использования данных устройств в составе стандартной оптоэлектронной интегральной схемы. Полученные меньшие значения развязки между плечами по сравнению с известными результатами [6, 8, 9] объясняются использованием однородного материала (в отличие от применяемых [9]) и более узкого спектрального интервала (в отличие от [6, 8]).

Наша дальнейшая работа направлена на увеличение изоляции и сокращение потерь в рассмотренных устройствах за счет последующей модификации топологии структуры.

*Настоящая работа выполнена в рамках проекта по аналитической ведомственной целевой программе. Минобрнауки "Развитие научного потенциала высшей школы (2009—2011 годы).*

### Список литературы

1. **Hu X., Zhang L., Cao P., Su Y.** Reconfigurable and Scalable All-Optical VPN in WDM PON // IEEE Photonics Technol. Lett. 2011. Vol. 23, N 14. P. 941—943.
2. **Yablonovitch E.** Photonic band gap structures // JOSA B. 1993. Vol. 10, № 2. P. 283—295.
3. **Лавриненко А. В., Лавриненко Ю. В.** Диэлектрические волноводы на основе фотонных кристаллов // Вісник Одеського державного екологічного університету. 2010. Вип. 9. С. 205—212.
4. **D’Orazio A., De Sario M., Petruzzelli V., Prudenzano F.** PBG filter for wavelength division multiplexer // Optics express. 2003. Vol. 11, № 3. P. 230—239.
5. **Lam C.** Passive Optical Networks: Principles and Practice. Academic Press. 2007. 368 p.
6. **Sukhoivanov I., Guryev I.** Photonic Crystals: Physics and Practical Modeling. Springer Verlag. 2009. P. 152—242.
7. **Гурьев И. В., Сухоиванов И. А., Шулика А. В., Кублик А. В.** Демультиплексирование при помощи широкополосных фильтров на основе двумерных фотонных кристаллов // Радиотехника. 2005. Вып. 143. С. 125—131.
8. **Frontiers in Guided Wave Optics and Optoelectronics.** Edited by: Pal. Bishnu // InTech. 2010. P. 621—645.
9. **Shin Tien-Tsong, Wu Yaw-Dong, Lee Jian-Jang.** Proposal for compact optical triplexer filter using 2-D photonic crystals // IEEE Photonics Technology Letters. 2009. Vol. 21, N 1. P. 18—20.
10. **Joannopoulos J. D.** Photonic crystals: molding the flow of light. Princeton University Press, 2008. 286 p.

УДК 539.2

**М. И. Самойлович**, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
зав. лаб.,  
Центральный научно-исследовательский  
технологический институт "Техномаш", Москва,  
e-mail: samoylovich@technomash.ru,  
**А. Л. Талис**, канд. физ.-мат. наук, вед. научн. сотр.,  
Институт элементоорганических соединений  
РАН, Москва

## КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ МУЛЬТИФЕРРОИКИ И СИММЕТРИЙНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ИХ МАГНИТНЫХ ПОДСИСТЕМ

*Поступила в редакцию 26.08.2011*

*Показано, что классическая кристаллография не способна адекватно отобразить симметрию мультиферроиков, структуры которых определяются закономерностями локального подхода. Рассмотрены примеры проявлений этих закономерностей и их физические следствия.*

**Ключевые слова:** мультиферроики, локальный подход, электронная подсистема

### Введение

Мультиферроики — многофункциональные материалы, в которых реализуются два или более фундаментальных свойства: сегнетоэлектричество (или в принятом обозначении — ферроэлектричество) и магнетизм (в форме ферромагнетизма или антиферромагнетизма). Сосуществование в одной фазе мультиферроика нескольких параметров порядка — новое физическое явление, которое открывает дополнительные возможности по созданию новых функциональных устройств. В настоящее время мультиферроики — одно из перспективных направлений в современной физике конденсированных сред и материаловедении.

Для однородных мультиферроиков, в которых наблюдаются магнитные и ферроэлектрические эффекты, как правило, рассматриваются три механизма проявления указанных свойств:

- ферроэлектрические свойства, сопровождаемые наличием спиралевидных систем упорядочения

спинов или наличием антиферромагнитной  $\xi$ -фазы (например, типа орторомбических манганитов) при нарушении инверсионности в пространственной симметрии;

- ферроэлектрические свойства, связанные с наличием зарядово-упорядоченных состояний;
- спиновое упорядочение тороидального типа в ферротороидальных системах.

Одними из востребованных мультиферроиков являются магнитоупорядоченные структуры тороидального типа (FTO-системы), материалы и метаматериалы, на основе которых разрабатываются перспективные устройства, использующие магнитно- и электрооптические эффекты. Результаты работ [1—6] позволяют сделать вывод о том, что интегрируемость ферроэлектрических и ферромагнитных свойств в зарядово-упорядоченных мультиферроиках является следствием таких структурных особенностей, которые не могут быть объяснены в рамках классической кристаллографии. Настоящая статья призвана показать, что один из вариантов решения данной задачи может быть получен (с использованием аппарата [7]) в рамках развиваемого авторами локального подхода [8—11], который способен адекватно отображать симметричные особенности интегрированных 3-мерных упорядоченных (не только кристаллических) структур.

### Особенности локально-фазовых превращений в периодических физических системах

В нерелятивистском приближении электрическое взаимодействие частиц не зависит от их спинов и гамильтониан системы (в отсутствии магнитного поля) не содержит операторов спина [12—14]. В таком случае уравнению Шредингера удовлетворяет каждая из компонент волновой функции, и она может быть представлена произведением функции, зависящей от координат частиц, на функцию от их спинов. Если частицы идентичны (можно рассматривать физическую одинаковость по определенным свойствам), тогда координатная функция инвариантна относительно операций перестановки таких частиц. При наличии инверсии для каждой пары частиц перестановка соответствует умножению волновой функции на  $(-1)^l$ , где  $l$  — орбитальный момент относительного движения одинаковых частиц [13—14]. Таким образом,

возникает зависимость энергии электронной подсистемы от ее полного спина, а взаимодействие, приводящее к такой зависимости, определяется как обменное. Полный спин системы имеет одинаковую четность с орбитальным моментом. Как известно, однозначное соответствие между значениями спина и уровнями энергии не наблюдается для систем, состоящих из частиц со спином более  $1/2$ . Кроме того, для электронных подсистем, состоящих из трех и более электронов, симметричная координатная функция не реализуется, поэтому решения уравнения Шредингера, соотносящиеся с минимумом энергии, оказываются физически не имеющими места. В этом случае нормальному состоянию такой системы может не отвечать минимум оператора энергии, а волновая функция является заузленной.

С формальной точки зрения, перестановочное вырождение обусловлено тем, что коммутирующие с гамильтонианом операторы перестановок не обязательно коммутируют друг с другом. Отметим, что наличие такого вырождения не обязано быть связанным с какими-либо иными физическими причинами. В результате состояние системы может не соответствовать минимуму энергии, рассчитанному по вариационным методикам, а волновая функция системы может содержать особые точки (например, узловые). Таким образом, при рассмотрении конечных подсистем (подрешеток) системы с большим числом частиц определяющим становится задание такого вида используемых преобразований, который позволяет описывать данную систему как алгебраическую. Соответственно, становится возможным выделение инвариантных относительно таких преобразований алгебраических подмножеств, относящихся к физически реализуемым.

Для реальных физических систем существенно, что к локальным областям, содержащим критическую точку, приурочены особые свойства флуктуаций, например, необычные (по сравнению с регулярными точками) зависимости среднего квадрата флуктуации плотности от объема области [12]. Более того, в периодически упорядоченных системах к высокосимметричным (с большим индексом) точкам приурочены области концентрации (аккумуляции) энергии, например, электромагнитных колебаний [13]. Подобные эффекты могут являться основой для процессов снятия конфигурационного вырождения, задаваемого (реальной или гипотетической) прафазой рассматриваемой системы. Поскольку для гамильтониана волновая функция (как системы в целом, так и отдельных ее частей) является функцией координат отдельных точек, можно перейти к использованию векторно-значимых их аналогов. Действительно, если задано начало и базис координат в евклидовом точечном пространстве, система отнесения каждой точки представлена набором координат, которые можно

рассматривать и как параметры соответствующих векторов в векторном пространстве. Стандартный подход заключается в замене группы линейных преобразований координатных функций (матриц в дискретном варианте) группой линейных преобразований соответствующего векторного пространства с последующей ее заменой обертывающей алгеброй и с использованием различных представлений для алгебраических конструкций. При таком подходе можно рассматривать ограничения на указанные перестановки любой пары частиц, когда координатной перестановочности частиц не всегда отвечает физическая.

При рассмотрении в подобных системах фазовых превращений (ФП) типа ФП-2 следует учитывать, что подобный ФП определяется не только волновым вектором, который соответствует кристаллическому классу рассматриваемой системы, но и балансом между членами разложения первого и второго порядков (по производным, когда координатная компонента полной волновой функцией становится векторно-значимой). В результате на структуру, определяемую параметрами решетки, "накладывается" сверхрешетка, периоды которой не обязательно соизмеримы с параметрами решетки. Соответственно, появляется возможность рассматривать локально-фазовые превращения и локально-периодические (конечные) системы.

### **Кристаллографическая ось мультиферроика как целочисленный представитель семейства нецелочисленных осей геликоидальных подструктур**

Дальнейшее рассмотрение основано на учете топологических свойств объединенной магнитной (спиновой) и "зарядовой" подсистем ( $C$ ). Кристаллографическая группа — это дискретная подгруппа связанной части дискретной группы движений евклидова пространства [7]. Если имеются компактное многообразие — тор  $T^3 = E^3/N$  (где  $E^3$  — трехмерное евклидово пространство,  $N$  — свободная абелева группа ранга 3) и действие некоторой конечной группы  $D$  движений (автоморфизмов) многообразия  $M^3 \rightarrow M^3$ , тогда соответствующая функция Морса  $f(C)$ , инвариантная относительно кристаллографической группы, будет инвариантна и на торе. Кроме принципа унитарного ограничения в настоящей работе используется двойственность для компактных и дискретных групп, при этом накрытие можно рассматривать как топологический (геометрический) образ функции Морса, когда каждой конструкции отвечает критическая точка, единственная для каждого критического уровня  $f^{-1}(C)$ .

Как известно, преобразования (движения) переводят касательные (к рассматриваемым многообразиям) векторы в касательные, а нормальные — в нормальные, что и позволяет использовать векторные представления и алгебраические конструкции

Оси некоторых геликоидов Госсета, определяемые инвариантами 8-мерной алгебраической решетки  $E_8$ 

$I_s$	$m_{js}$	$k_{js}$	$L/d$					
			$I_n = 30$	$I_n = 24$	$I_n = 20$	$I_n = 18$	$I_n = 12$	$I_n = 8$
24	1	12	5	<b>4</b>		3	2	
	2	8	<b>15/4</b>	3		9/4	3*	
	3	6	10/3	<b>8/3</b>	5/2	2	4	
	5	4	3	12/5	2	9/4	5	4
	7	3	20/7	16/7		12/5	8	
	11	2	<b>30/11</b>	<b>24/11</b>	20/9	18/7	12	8/3

(например, расслоенные пространства [7–11]). В любом случае множество критических точек индекса  $k$  будут удовлетворять неравенству (равенству для рассмотренных ниже циклических групп) Морса, связывающему их число с числами Бетти [7–8]. Развиваемый аппарат позволяет использовать инварианты 8-мерной решетки  $E_8$  и их разложения на силовские подгруппы и полуинварианты для задания кристаллографических и нецелочисленных осей (рис. 1), характеризующих геликоидальные подсистемы.

В рамках локального подхода [9–11] был выделен особый класс топологически устойчивых геликоидальных подструктур — геликоидов Госсета, которые определяются как некристаллографическими (например, нецелочисленными), так и кристаллографическими осями. При построении таких геликоидальных систем, не только имеющих в качестве прафазы решетку  $E_8$ , но и отвечающих значениям минимумов энергии, применяются конструкции алгебраической геометрии и топологии. В частности, применяются структурные реализации вложения в  $E^3$  клеточных (симплициальных) комплексов с учетом гомологических (когомологических) свойств рассматриваемых многообразий. Используются группы тора, борелевы и унитарные группы, а также их векторные представления. Корректность применения (систем) решеток корней полупростых алгебр обеспечивается выполнением требований их связности и компактности при задании структурной группы (с определенными ограничениями) через однородные пространства — алгебраические политопа. В итоге по-

являются законченный аппарат для описания локально-упорядоченных структур и модель их построения как компактных связных замкнутых многообразий, построенных в соответствии с критическими значениями (точками) функционалов, относящихся к классу функций Морса. При этом используются минимальные поверхности (обладающие нулевой средней кривизной), которые являются критическими точками функционала площади поверхности пространства деформаций, сохраняющей ограничиваемый минимальной поверхностью объем при малых возмущениях.

Винтовые оси геликоидов Госсета задают вращение на угол  $(360^\circ/L)d$  и в наиболее простом случае [8–10] определяются соотношением

$$L/d = \frac{8}{\gamma_1 \gamma_2} \frac{I_n}{I_s} \frac{m_{js} + 1}{m_{js}} = \frac{8 I_n}{\gamma_1 k_{js}} \frac{1}{\gamma_2 m_{js}}, \quad (1)$$

где  $L, d, k_{js}$  — целые числа, характеризующие оси;  $I_n, I_s = k_{js}(m_{js} + 1)$  — инварианты;  $8I_n/\gamma_1 \gamma_2 k$  — целое;  $m_{js}$  — показатели решетки корней  $E_8$  и ее возможных подрешеток (определяющих алгебраические политопа),  $\gamma_1, \gamma_2 = 1$  или  $2$  в зависимости от одно- или двулистности соответствующего отображения. В качестве примера определения осей по формуле (1) приведена табл. 1 [10], которая охватывает порядка  $L/d$  осей геликоидов Госсета при  $\gamma_1 = 2$ . Структурная реализация выделенных жирным шрифтом в табл. 1 осей (рис. 1) рассматривается ниже. Например, ось 30/11 задает вращение на  $132^\circ$  и определяет симплициальный геликоид

Бернала, который строится по алгоритму "4 объединяемых по граням правильных тетраэдра у каждой вершины". С квадратом оси 30/11 соотносится ось 15/4, которая задает вращение на  $-96^\circ$ .

Ось 30/11 определяет, в частности, упаковку тетраэдров в стержневых подструктурах, из которых "собирается" кубический кристалл  $\beta$ -Mn (рис. 2, а). Минимальный трансляционно-повторяющийся фрагмент стержня  $\beta$ -Mn состоит из 8 непра-

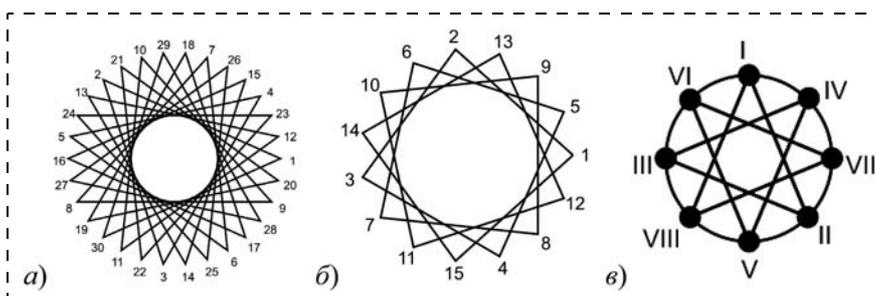


Рис. 1. Нецелочисленные оси: а — 30/11; б — 15/4; в — 8/3

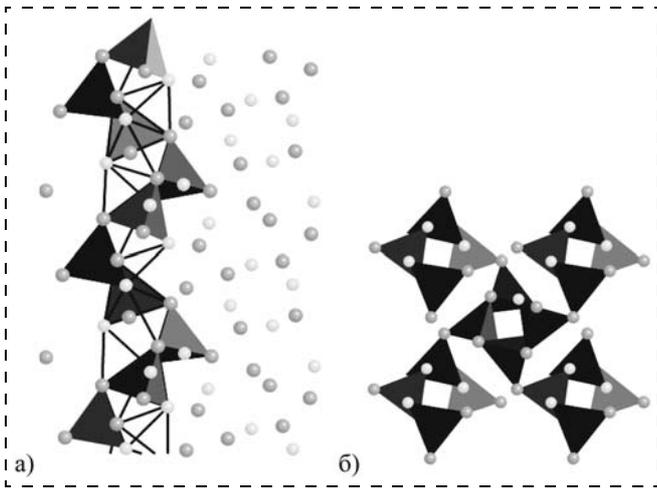


Рис. 2. Проекция кубического кристалла  $\beta$ -Mn на плоскость (100) (а). Атомы Mn1 обозначены темными кружками, Mn2 — светлыми. Геликоид  $4_1$  из тетраэдров "обвивает" идущий вдоль [001] симплициальный геликоид. Четыре темных и четыре светлых атома образуют (слегка искаженный) геликоид с 8-й осью вдоль [100]; б — кубический кристалл  $\beta$ -Mn как тетрагональная упаковка конгруэнтных копий геликоида а) как проекция на плоскость (001)

вильных тетраэдров, которые разделены на два типа. Тетраэдры каждого типа связаны винтовой осью  $4_1$ , а вершины стержня "в среднем" связаны винтовой осью  $8/3$  (поворот на  $135^\circ$ ), квадрат которой совпадает с  $4_1$ . Наличие в стержне "оси"  $8/3$  позволило рассматривать структуру  $\beta$ -Mn и как кристаллический аппроксимант октагонального квазикристалла. Таким образом, незначительной деформации тетраэдров достаточно для того, чтобы кристаллографические геликоиды трансформировались в геликоиды с близкими к ним нецелочисленными осями (рис. 2). Таким образом, особенности строения кристалла  $\beta$ -Mn [15—17] позволяют рассматривать его как структуру, определяемую сборкой геликоидов Госсета.

Направление "легкого намагничивания" в кристалле мультиферроика должно зависеть от соответствующей оси  $n$ -го порядка,  $n = 2, 3, 4, 6$  мультиферроика, но в общем случае упорядочение магнитных (спиновых) подсистем может определяться углом  $2\pi/\eta$ , где  $n - 0,5 \leq \eta \leq n + 0,5$ . В общем случае можно утверждать, что для мультиферроика реализуется не непрерывный спектр значений  $\eta$ , а его опреде-

ленное дискретное подмножество. Дело в том, что дискретные системы оказываются предпочтительнее, чем непрерывные из-за более высокой надежности. В дискретной системе, состоящей из подсистем, каждая элементарная подсистема, как правило, игнорирует малые отклонения от нормы различных физических параметров, восстанавливая "в первоизданном виде" одно из своих допустимых состояний. В непрерывной системе малые возмущения "накапливаются" и, если система слишком сложна, она перестает воспроизводимо реализовываться.

Геликоиды Госсета — топологически устойчивые геликоиды, и число их ограничено [8—10], поэтому упорядочение магнитных (спиновых) подсистем "симметрично-реализуемое" при минимизации интегральной энергии можно ограничить величинами  $\eta$ , которые совпадают с углами вращения геликоидов Госсета. Подмножество нецелочисленных значений осей  $L/d$  геликоидов Госсета, которое находится в интервале от  $n - 0,5$  до  $n + 0,5$  (и включает кристаллографическое значение  $n$ ), назовем семейством  $\Gamma_n$  осей Госсета:

$$\Gamma_n = \{n - 0,5 \leq L/d \leq n + 0,5\}. \quad (2)$$

Каждый геликоид Госсета определяется своей алгебраической (параболической) группой, поэтому соотношение (2) фактически определяет множество параболических подгрупп, в которое вкладывается данная циклическая группа  $n$ -го порядка [8—10]. Соотношение (2) позволяет рассматривать кристаллографическую ось мультиферроика как целочисленного представителя определенного семейства  $\Gamma_n$ . Последнее означает, что развиваемый подход позволяет последовательно рассматривать природу и соотношения двух параметров порядка в системах мультиферроиков.

Семейства  $\Gamma_n$  при  $n = 2, 3, \dots, 9$  представлены в табл. 2, которая позволяет определить симметрично-возможные геликоидальные упорядочения как для атомнопорожденных подрешеток, так и для электронных (спиновых) подсистем в зависимости от наличия оси  $n$  в прямой или обратной решетках. Оси, возможные в алмазоподобных системах [10], выделены в табл. 2 жирным шрифтом (см. также диаграммы Хегора 1 рода [7]).

Таблица 2

Нецелочисленные оси, которые при наличии целочисленной оси  $n$  могут реализоваться для магнитных электронных подсистем в кристаллических мультиферроиках

Целочисленная ось	Нецелочисленные аналоги
2	12/5 (2,4) 7/3 (2,333...) 30/13 (2,308...) 16/7 (2,288...) 9/4 (2,25) 20/9 (2,222...) 24/11 (2,182) 15/7 (2,143...) 9/5 (1,8)
3	16/5 (3,2) <b>28/9</b> (3,111...) 30/11 (2,727...) 20/7 (2,857...) 14/5 (2,8) 8/3 (2,666...)
4	9/2(4,5) <b>40/9</b> (4,444...) 30/7 (4,286...) 15/4 (3,75) 18/5 (3,6)
6	<b>40/7</b> (5,714...) <b>28/5</b> (5,6)
5	24/5 (4,8) 14/3 (4,666...)
7	15/2 (7,5) <b>36/5</b> (7,2) 20/3 (6,666...)
9	<b>28/3</b> (9,333...) <b>26/3</b> (8,666...)

Помимо геликоидов с одной нецелочисленной осью развиваемый аппарат позволяет рассматривать и объединение особых фрагментов геликоидов в один геликоид, который также возможен для спиновой подсистемы. Объединение таких фрагментов возможно и в другие топологические объекты (например, торы), которые принципиально не могут быть рассмотрены в рамках классической кристаллографии. Решетка  $E_8$  (как и решетки  $D_4$ ,  $D_4^+$ ) является самодвойственной, а зоны Бриллюэна топологически являются торами, поэтому рассмотрение векторных представлений прямой и обратной (которая используется для задания волновых функций электронных подсистем) решеток можно вести в рамках единого подхода [8–11]. В этом случае выделяемые в мультиферроиках (топологические) подструктуры могут определять некоторые особенности строения границ доменов при наноструктурировании.

### Локальный подход и тороидальное структурное упорядочение в ферротороидальных системах

Основной структурной особенностью ферротороидальных структур является тороидальное упорядочение спинов [6]. Классическая кристаллография в принципе не способна отображать симметрию таких объектов (рис. 3), которая определяется сборкой симплицальных (клеточных) комплексов посредством топологических структурных элементов. Таким образом, полученные нефедоровские симметрии [8] позволяют отображать закономерности упорядочения электронной подсистемы в мультиферроиках.

Появлению в рассматриваемых алгебраических конструкциях особых операций отражения [11] способствуют свойства корневых решеток, использование вещественных нормальных форм, представленных некомпактными ( $g_0$ ) формами, когда множества неподвижных точек для таких инволюций (преобразований) являются подалгебрами. Задание топологического пространства и внешней метрики для подструктур геликоидального или то-

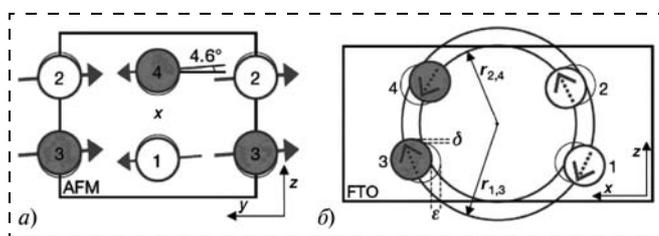


Рис. 3. Упорядочение спинов ионов  $Co^{2+}$  на  $yz$ -плоскости (а) и  $xz$ -плоскости (б) для основного состояния кристаллического мультиферроика состава  $LiCoPO_4$  (AFM и FTO — антиферромагнитный и ферротороидальный типы упорядочения соответственно). Закрашенные и незакрашенные кружки представляют ионы  $Co$  для координат  $x \sim 3/4$  и  $x \sim 1/4$  соответственно. Серыми стрелками показаны спиновые компоненты ионов  $Co$  [6]

роидального типа можно формализовать введением периодичности (гармоничности), а именно, использованием унитарной периодичности, задаваемой инвариантами решетки  $E_8$  — как своеобразной прафазы. В работах [8, 11] были рассмотрены топологически допустимые варианты объединения симплицальных подструктур в конструкции типа геликоида и тора. Далее будут подробно рассмотрены конструкции, которые могут "отвечать", например, за один параметр порядка в мультиферроике, а именно, симплицальные тороидальные комплексы. Локальный подход [8–11] позволяет для объяснения особенностей строения спиновой подсистемы рассматривать объединение особых фрагментов геликоидов в одну тороидальную алгебраическую конструкцию.

Сами по себе автоморфизмы решетки  $E_8$ , используемой в качестве прафазы, суть группы Коксетера [11], порождаемые простыми отражениями, но только выбор группы Бореля определяет набор простых корней, которые не только задают решетки корней (их максимальные торы и его подторы), но и используются для построения векторных представлений. Группа автоморфизмов решетки корней (Вейля), которая порождается отражениями в вещественном пространстве, сохраняющими целочисленные отношения между векторами, перемещает множество баз корней однотранзитивно, так что каждый корень принадлежит, по крайней мере, одной базе (в частности, расслоения).

Одна из проблем рассмотрения тороидальных мультиферроиков связана с необходимостью использования для описания их магнитных подсистем векторных расслоений особого типа. Действительно, дифференциальная 2-форма  $\Omega$  (форма кривизны для расслоений со структурной группой  $G$ ) в соответствии с уравнениями Максвелла физически соотносится с напряженностью электромагнитного поля. Для стационарных задач она отвечает напряженности магнитного поля в некоторой области  $U$  пространства Минковского, поэтому  $U = E^3 / \{x_0 \cup \dots \cup x_k\}$ , где число неподвижных (нулевых) точек  $x_i$  определяется числом независимых циклов в базе расслоения (рассматриваются расслоения с отображением  $n$ -мерных сфер  $S^3 \rightarrow S^2$ ), для которых интеграл по  $S^2$  для  $\Omega$  дает целочисленное значение. В настоящей работе рассматривается случай, когда 2-форма (как и 1-форма  $\omega$ ) принимают значения в алгебре  $g$  группы  $G$ , что приводит к необходимости ограничения алгебры на картанову (максимальную коммутативную подалгебру). Кроме того, для введения симплектических преобразований и однородного пространства используется построение на  $S^3$  политопов, порождаемых решеткой корней  $E_8$  (подробнее в [8–11]), так что обе указанные формы могут рассматриваться как матрично- и векторно-значимые. Дело в том, что единственной ориентируемой замкнутой поверх-

ностью, допускающей задание на ней векторного поля, нигде не обращающегося в ноль, является тор  $T^2$ , что и приводит к рассмотрению алгебраических конструкций, являющихся аналогами динамических систем на торе [7], когда решения соответствующих уравнений являются периодически либо реализуются через особые точки.

Если рассматривать 96-вершинный политоп {96} на  $S^3$  и расслоения типа слоений Роба вида  $(D^2 \times S^1) \cup (S^1 \times D^2)$  как объединение двух полноториев, приводящее к  $S^3$ , то некоторые из возможных решений позволяют построить тороидальные конструкции, аналогичные приведенной на рис. 4 (см. третью сторону обложки). Формально динамические системы описываются диффеоморфизмами вида  $\varphi: S^1 \rightarrow S^1$  при  $n$ -кратном применении. Если систему нормировать на сферу единичного радиуса и параметр времени также на 1, тогда имеем  $\varphi^n(x_0) = x_0$  и для общего случая  $\bar{\varphi}(x) = \varphi(x) \pmod{1} - \bar{\varphi}(x) = x_0 + m$ , где  $m$  и  $n$  определяются числом точек на окружности  $S^1$ , принадлежащей тору  $T^2$ , и числом элементов в комплексе вложения (числом вершин для полиэдра, соответствующего диску  $D^2$  в рассматриваемом дискретном случае). Условием реализации подобной системы является рациональность числа  $m/n$ ; можно показать, что угол поворота  $\alpha_n = (\varphi(x) - x)/n$  имеет предел при возрастании  $n$  (что и позволяет рассматривать некоторое среднее значения для угла вращения) и не зависит от выбора  $x$ . Построенная тороидальная система соотносится с конструкцией замкнутого на себя конечного фрагмента геликоида, а числа  $m$  и  $n$ , характеризующие построение на рис. 4, отвечают нецелочисленной оси вида 24/11, принадлежащей семейству  $\Gamma_2$  (см. табл. 2). Ось 24/11 (см. табл. 1) порождается политопом {96} и инвариантом 24 по формуле (1), а ее принадлежность к  $\Gamma_2$  согласуется с орторомбичностью, например, кристалла  $\text{LiCoPO}_4$  (см. рис. 3), обладающего только винтовыми осями  $2_1$ .

## Заключение

Согласно принципу Кюри, должным образом отображенная симметрия структуры определяет симметрию физических свойств. Симметрией особенностью мультиферроиков является возможность различной упорядоченности для узлов решетки, характеризующих положение атомов в структуре и спиновой подсистеме. В частности, для ферротороидальных кристаллических структур возможно тороидальное упорядочение спинов. Результаты данной работы показывают, что классическая кристаллография, ограниченная федоровскими группами, не способна отобразить интегральную симметрию мультиферроиков с полнотой, необходимой для отображения симметрии их физических свойств, тогда как локальный подход (структурная и топологическая реализация конст-

рукций алгебраической геометрии) позволяет решить данную задачу. В частности, если ферротороидальная структура обладает кристаллографической осью  $n$ , тороидальный тип упорядочения спиновой подсистемы может определяться нецелочисленными осями семейства  $\Gamma_n$ .

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты № 12095-офи-м-2011, № 09-03-00740-офи-а) и программы ОХНМ РАН ОХ-06. Авторы благодарят А. А. Реу и А. В. Лавренюка за помощь в оформлении статьи.*

## Список литературы

1. Смоленский Г. А., Чупис И. Е. Сегнетомагнетики // УФН. 1982. Т. 137. С. 415—435.
2. Залесский А. В., Фролов А. А., Звездин А. К. и др. Влияние пространственной спиновой модуляции на релаксацию и частоты ЯМР ядер Fe в сегнетоантиферромагнетике  $\text{BiFeO}$  // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. С. 116—122.
3. Звездин А. К., Пятаков А. П. Фазовые переходы и гигантский магнитоэлектрический эффект в мультиферроиках // УФН. 2004. Т. 174. № 4. С. 465—470.
4. Kudasov Yu. B., Korshunov A. S., Pavlov V. N., Maslov D. A. Dynamics of magnetization in frustrated spin-chain system  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 132407—132502.
5. Moskvina A. S., Pisarev R. V. Charge-transfer transitions in mixed-valent multiferroic  $\text{TbMn}_2\text{O}_5$  // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 060102.
6. Wang K. F., Liu J.-M., Ren Z. F. Multiferroicity: the coupling between magnetic and polarization orders // Adv. in Phys. 2009. V. 58. N 4. P. 321—448.
7. Дубровин Б. Л., Новиков С. П., Фоменко А. Т. Современная геометрия. Т. 2. М.: Изд-во УРСС. 2001. 268 с.
8. Самойлович М. И., Талис А. Л. Топологические структурные элементы, локальный подход и упорядоченные трехмерные структуры // Материалы XVII междунар. конф. "Высокие технологии в промышленности России". М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. С. 425—438.
9. Samoylovich M. I., Talis A. L. A special class of simple 24-vertex polyhedra and tetrahedrally coordinated structures of gas hydrates // Acta Cryst. A. 2010. V. 66. P. 616—625.
10. Самойлович М. И., Талис А. Л. Геликоиды Госсета. I. 8-мерная кристаллографическая решетка  $E_8$  и определяемые ею кристаллографические, квазикристаллографические и нецелочисленные винтовые оси геликоидов // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 4. С. 599—605.
11. Самойлович М. И., Талис А. Л. Симметричные особенности магнитных подсистем кристаллических мультиферроиков // Материалы XVII междунар. конф. "Высокие технологии в промышленности России". М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. С. 18—30.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1964. 567 с.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 567 с.
14. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1964. 567 с.
15. Nyman H., Carroll C. E., Hyde B. G. Rectilinear rods of face-sharing tetrahedra and the structure of  $\beta\text{-Mn}$  // Zeitschrift für Krist. 1991. V. 196. P. 39—46.
16. Zhaorong Huang, Sven Hovmoumller. An octagonal quasicrystal structure model with 8/3 screw axes // Phil. Mag. Letters. 1991. V. 64. N 2. P. 83—88.
17. Kraposhin V. S., Prokoshin A. F., Zlobin V. V. Anisotropy of atomic oscillations in the amorphous ferromagnetic wire and its geometric interpretation // Proc. "Application of Magnetic Resonance in Novel Materials". Nafplion, Greece. 2000. P. 28—34.
18. Lord E. A. Helical Structures: The Geometry of Protein Helices and Nanotubes // Structural Chemistry. 2002. V. 13. P. 305—314.

**В. А. Акопьян**<sup>1</sup>, канд. техн. наук, вед. науч. сотр.,  
**Ю. Н. Захаров**<sup>1</sup>, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр.,  
**С. Ю. Матвеев**<sup>2</sup>, специалист,

**А. А. Панич**<sup>1</sup>, канд. техн. наук, зав. лаб.,

**Е. В. Рожков**<sup>1</sup>, ст. науч. сотр.

<sup>1</sup> Южный федеральный университет,

<sup>2</sup> ООО "ГЕКО — Северный Кавказ"

E-mail: akop@math.rsu.ru

## АНАЛИЗ СТАБИЛЬНОСТИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЬЕЗОКЕРАМИК РАЗЛИЧНЫХ СОСТАВОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ГЕНЕРАТОРОВ ПОВЫШЕННОЙ МОЩНОСТИ

Поступила в редакцию 12.08.2011

*Представлены результаты экспериментальных исследований влияния амплитуд сжимающих напряжений на значение пьезоэлектрических констант и на генерируемый пьезоэлементами электрический заряд. Показано, что наибольшая стабильность выходного электрического напряжения имеет место у пьезоэлементов из керамики, спеченной по горячепрессованной технологии, в частности у пьезокерамики ПКР-78. Установлено, что среди основных параметров, характеризующих стабильность выходной мощности пьезогенераторов наиболее достоверным является пьезомодуль  $d_{33}$  сегнетокерамического материала.*

**Ключевые слова:** пьезокерамика, пьезоэлектрические константы, одноосное сжатие, выходное электрическое напряжение, пьезоэлектрические генераторы

### Введение

В последние годы проблема энергосбережения становится все более острой. Один из путей решения этой проблемы — создание самовозобновляемых источников энергии, в которых используются пьезоэлектрические элементы (ПЭ) — преобразователи энергии окружающей среды (вибрация, ветер, солнечная энергия, теплота) в электрическую с последующим ее накоплением и передачей приемному устройству. Работа относится к Перечню приоритетных направлений развития техники в РФ 2011 г. (п. 8. Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная технология) и к Перечню новых технологий (п. 15. Технологии новых и возобновляемых источников энергии).

Различные схемы и типы пьезоэлектрических генераторов (ПГ), созданных в последние годы,

подробно описаны в нескольких обзорах [1, 2]. Известные опытные образцы ПГ (пьезонакопителей энергии окружающей среды) могут быть объединены в два класса, различающихся по типу используемых мод колебаний (продольные и поперечные). Схемы и конструктивные особенности ПГ, работающих от воздействия продольных (относительно вектора поляризации) и изгибных мод колебаний, преобразующих механическую энергию в электрическую, приведены в работах [1—3]. Пьезогенераторы, относящиеся к первому классу, нашли применение в устройствах для накопления электрической энергии относительно большой мощности, а ПГ второго класса (как правило, меньшей мощности) были использованы для устройств накопления энергии в малой энергетике, преимущественно для подзарядки аккумуляторов устройств связи [1—3].

Известны также исследования этого класса ПГ для других применений, в частности, недавние исследования пьезопреобразователя гибридного типа, включающего в себя многослойный пьезоактуатор (ПА) и встроенный пьезодатчик, сигнал с которого используется для корректировки характеристик системы управления микродеформацией [4]. В модели такого преобразователя не учтен фактор снижения пьезозаряда с ростом сжимающих напряжений. Для ПА микроперемещений такой подход вполне приемлем, в то время как для многослойных ПГ большой мощности не учитывать упомянутый фактор недопустимо. Как следует из отмеченных выше работ, остаются нерешенными проблемы генерирования и накопления достаточно большой единичной мощности ПГ, применяемыми, например, для устройств преобразования энергии деформирования асфальтового покрытия автодорог и рельсов железных дорог в электрическую. Кроме того, остается неисследованной задача временной стабильности выходной мощности ПГ, связанная с существенным уменьшением пьезочувствительности пьезокерамики при больших механических напряжениях, в области которых только и можно получить максимальную выходную мощность. В связи с этим задача выбора наиболее энергоэффективного материала для чувствительных элементов ПГ повышенной мощности приобретает особую актуальность.

### Цель работы

Выбор пьезокерамического материала (ПКМ), имеющего наибольшую энергоэффективность и стабильность выходных характеристик чувствительных элементов ПГ из такого ПКМ при действии на пьезогенератор больших механических усилий — первая задача работы. Кроме того, необходим анализ значений пьезомодуля  $d_{ik}$  как параметра оценки стабильности выходных характеристик ПГ в широком диапазоне действующей на него механической сжимающей нагрузки.

Для решения поставленной в работе задачи было проведено исследование характеристик, применяемых для пьезогенераторов различных ПКМ системы твердых растворов цирконата — титаната свинца и анализ их физических констант (определяющих значение электрического заряда), изменение которых минимально при действии на ПКМ больших механических напряжений и сохраняющихся при этом высокий исходный уровень пьезочувствительности.

Важнейшей характеристикой ПГ является выходное напряжение (и следовательно, выходная мощность) его чувствительного элемента (ЧЭ), которое напрямую зависит от пьезочувствительности материала (и связанных с ней значений электрофизических констант) во всем диапазоне действующих на ПГ внешних механических нагрузок.

Материал ЧЭ должен отвечать требованиям постоянства максимальной пьезочувствительности во всем диапазоне внешних механических нагрузок.

Исследования были проведены на образцах ПКМ, геометрия которых типична для ЧЭ пьезоэлектрических генераторов, применяемых в условиях больших механических нагрузок.

В качестве основных исследованных характеристик ПКМ были выбраны пьезомодуль  $d_{33}$  в квазистатическом режиме, коэффициент электро-механической связи  $K_{33}$ , а для ЧЭ было рассмотрено выходное электрическое напряжение и мощность.

### Объект исследования

Были проведены испытания семи составов пьезокерамики (материала чувствительного элемента пьезогенератора): ЦТС-19, ПКР-1, ПКР-66, ПКР-78 и ПКР-7М, спеченных и поляризованных (по толщине) по горячепрессованной и традиционной пьезокерамической технологиям в опытном производстве НИИ физики Южного Федерального Университета. Дисковые образцы пьезоэлементов имели стандартные размеры: диаметр 10 мм, толщина 1 мм (ГОСТ 12370—85). Составы ПКМ, выбранные для исследований, имеют достаточно высокие зна-

чения коэффициента электро-механической связи (КЭС), который, как известно, характеризует эффективность преобразования механической энергии в электрическую. Ниже, в таблице, приведены известные значения констант  $K_{33}$  для выбранных ПКМ [4—6]. Там же даны значения пьезомодулей  $d_{33}$ ,  $g_{33}$ , причем приведены не только их известные из литературы значения, но и полученные авторами настоящей работы. Как видно из приведенных выше данных, ПКМ, спеченные по горячепрессованной технологии (г. п.), имеют более высокие значения КЭС, чем у материалов, полученных по керамической технологии. Однако значение пьезомодуля  $d_{33}$  у них в исходном состоянии (в отсутствие внешних воздействий) различается почти в 2 раза. Поэтому для выбора наиболее энергоэффективного ПКМ для ЧЭ пьезогенераторов зависимости пьезозаряда (электрического напряжения), генерируемого ЧЭ ПГ, были исследованы нами для всех составов ПКМ, приведенных в таблице.

### Методика исследования

Оценка эффективности электро-механического преобразования механической энергии сжатия пьезоэлемента в электрическую была сделана на основе измерения пьезоэлектрического модуля  $d_{33}$  в квазистатическом режиме в диапазоне рабочих температур (с помощью известного измерителя YE2730A  $d_{33}$  meter, APC International Ltd) и электрического напряжения на выходных клеммах нагрузочного сопротивления  $R_H$ :

$$U_{\text{вых}} = \frac{dQ_i}{dt} R_H, \quad (1)$$

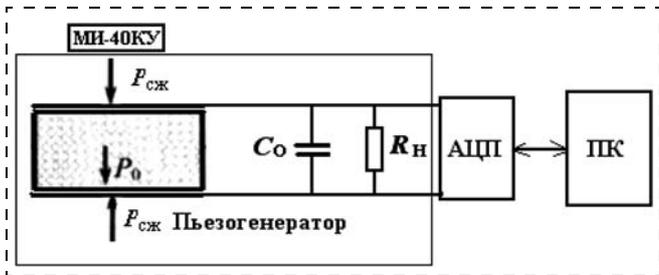
где  $Q_i$  — электрический заряд, генерируемый пьезогенератором под действием одноосного сжатия (рис. 1).

Механическое одноосное нагружение дисковых пьезоэлементов осуществлялось в измерительном модуле испытательной машины МИ-40КУ в комплексе с персональным компьютером через стандартный интерфейс RS232 при нагрузке силой от 0

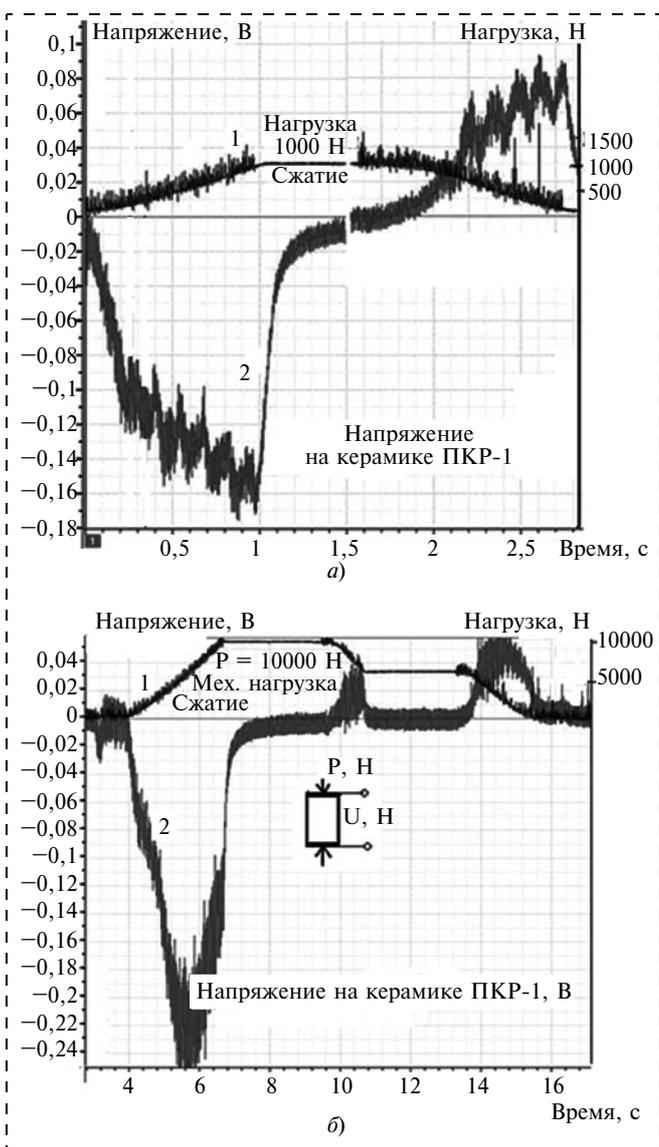
Значения некоторых электрофизических констант ПКМ

Состав ПКМ	Технология	Плотность, г/см <sup>3</sup>	$K_{33}$	$d_{33} \cdot 10^{-12}$ , Кл/Н	$g_{33} \cdot 10^{-3}$ , В · м/Н	Источник
ЦТС-19	Керамическая	7,74	0,64	200	23,1	[4]
ЦТС-19	Горячепрессованная	7,79	0,72	455	—	[4]
ПКР-1		7,91	0,63...0,73	265...279	40,4...42,6	[4—6]
ПКР-66		7,55	—	540...590	19,3...21,1	[4—6]
ПКР-78		7,60	—	320	—	—
ПКР-7М		7,44	0,75	655...718	13,8...15,1	[6]

Примечание: Разброс значений КЭС и пьезомодуля  $d_{33}$  в квазистатическом режиме связан с расхождением известных данных [4—6], вызванных различием режимов спекания образцов ПКМ, на которых эти данные были получены. Измеренные нами значения констант не выходят за пределы указанных интервалов. Значения констант  $g_{33}$  получены расчетным путем по значениям  $d_{33}$  и диэлектрической проницаемости [3—6].



**Рис. 1.** Принципиальная электрическая измерительная схема: МИ-40КУ — механическая испытательная машина;  $P_0$  — вектор поляризации пьезоэлемента;  $P_{сж}$  — сжимающее усилие;  $C_0$  — электрическая емкость пьезоэлемента и соединительных проводов;  $R_H$  — электрическое сопротивление нагрузки; АЦП — аналого-цифровой преобразователь Е-14-140-М; ПК — персональный компьютер



**Рис. 2.** Временные зависимости усилия одноосного сжатия и выходного электрического напряжения при сопротивлении электрической нагрузки  $R = 4$  кОм для образцов пьезокерамики ПКР-1, диаметром 12 мм, высотой 4 мм. Кривая 1 отображает изменение значения механической нагрузки, кривая 2 — электрическое напряжение на керамике:

*a* — максимальное механическое усилие  $P = 1000$  Н; *б* — максимальное механическое усилие  $P = 10\,000$  Н

до 1,0 10,0 и 40,0 кН, на различных этапах эксперимента последовательно, со скоростью нагружения 10 мм/мин. На каждом из этих этапов были проведены измерения пьезомодуля  $d_{33}$  в квазистатическом режиме, сначала до механического нагружения, а затем после разгрузки каждого из образцов.

С помощью стандартной программы PowerGraph 3.3 Professional, встроенной в измерительную схему (рис. 1), были зарегистрированы текущие значения выходного напряжения  $U_{\text{вых}}$  усилия сжатия  $P_{\text{сж}}$ . В результате были получены сопряженные графики временных зависимостей этих параметров  $U_{\text{вых}}(t)$ ,  $P_{\text{сж}}(t)$  для семи различных составов пьезокерамики, где  $t$  — время действия нагрузки. В качестве примера на рис. 2, *a* и 2, *б* приведены сопряженные графики зависимостей  $U_{\text{вых}}(t)$  и  $P_{\text{сж}}(t)$  для образцов ПКР-1, подвергнутых одноосному сжатию до  $P_{\text{max}} = 1000$  Н и 10 000 Н при сопротивлении нагрузки  $R_H = 4$  кОм, соответственно. Выбор этих зависимостей был обусловлен тем, что на них наглядно зарегистрирован процесс деполяризации пьезокерамики при действии сжимающей механической нагрузки. Интерпретация этого явления приведена ниже.

Данные, зарегистрированные на сопряженных зависимостях  $P(t)$ ,  $U_{\text{вых}}(t)$ , были обработаны и на их основе построены графики зависимостей выходного напряжения и пьезоэлектрического модуля  $d_{33}$  от механических сжимающих напряжений (рис. 3, 4).

Анализ зависимостей выходного напряжения от сжимающих усилий  $U_{\text{вых}}(\sigma_{\text{сж}})$  позволил выявить общую тенденцию для различных исследованных составов пьезокерамики, заключающуюся в уменьшении выходного электрического напряжения с ростом сжимающих усилий. При этом степень уменьшения  $U_{\text{вых}}$  для различных составов ПКМ различна.

Как видно из формулы (1) выходное напряжение прямо пропорционально производной электрического заряда по времени. Вместе с тем, из методики определения пьезомодуля  $d_{33}$  в квазистатическом режиме известно простое соотношение [3, 6]

$$U_{\text{вых}} = \frac{d_{33}\sigma_{\text{сж}}S}{C_{\text{обр}}}, \quad (2)$$

где  $\sigma_{\text{сж}}$  — сжимающее напряжение;  $S$  — площадь поперечного сечения образца;  $C_{\text{обр}}$  — емкость образца ПЭ и соединительных проводов. Используя соотношение (2) для исследованных составов, были рассчитаны значения выходного напряжения  $U_{\text{вых}}$ , которые показаны на рис. 3. Сопоставление экспериментальных и расчетных данных показало удовлетворительную достоверность результатов измерений, не выходящую за пределы их погрешностей.

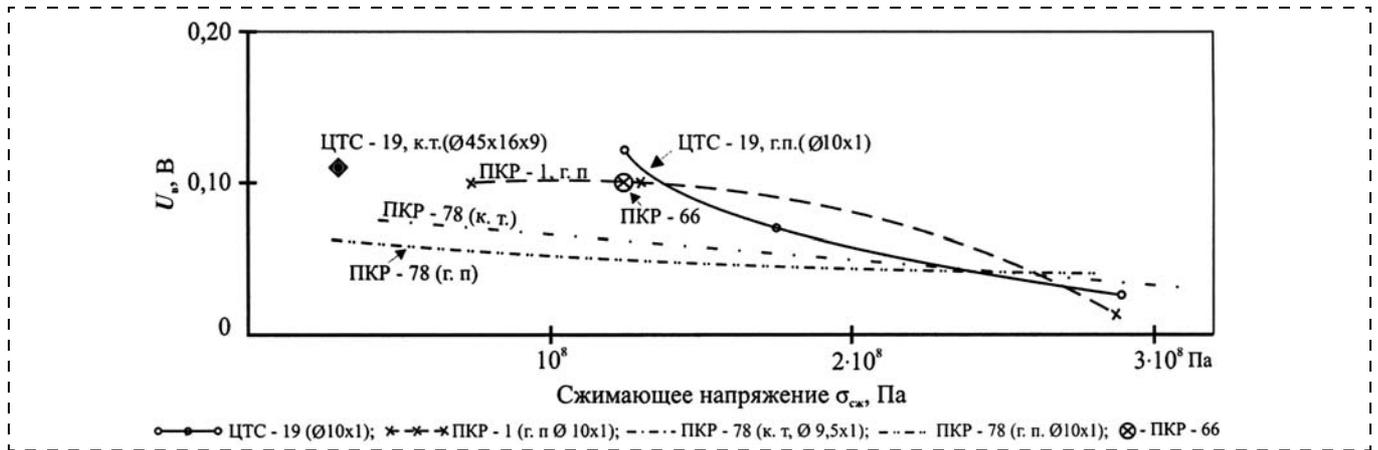


Рис. 3. Зависимость амплитуды выходного электрического сигнала от механических напряжений при одноосном сжатии (г. п. — горячепрессованная технология; к. т. — керамическая технология)

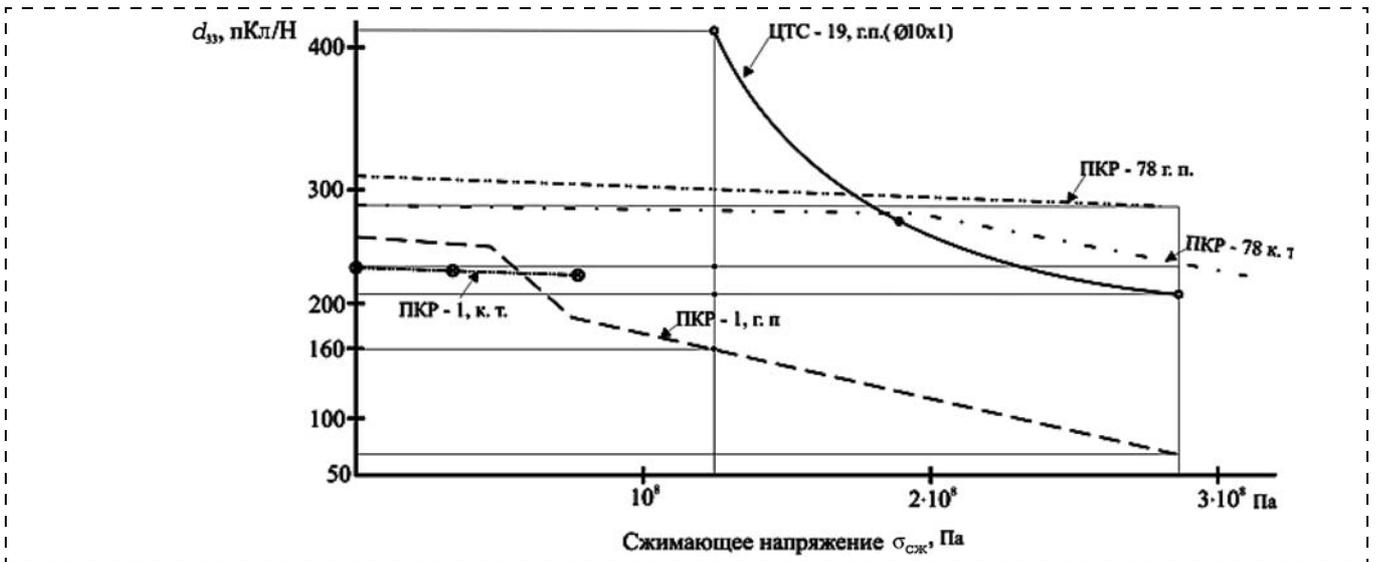


Рис. 4. Зависимость пьезомодуля  $d_{33}^{KB}$  пКл/Н от значения сжимающего напряжения (одноосное квазистатическое сжатие)

### Анализ и обсуждение результатов

Как известно, по мере увеличения механических напряжений одноосного сжатия вдоль направления вектора поляризации значение пьезомодуля  $d_{33}$  уменьшается в значительной степени у "сегнетомягких" пьезокерамик (ПК) и в отличие от них у "сегнетожестких" составов это падение значения  $d_{33}$  мало. Эффект необратимой деполяризации при одноосном сжатии связан с  $90^\circ$ -ной и  $180^\circ$ -ной переориентацией доменов в пьезокерамике [5]. Количественная оценка степени обратимой и необратимой деполяризации может быть сделана с помощью известных коэффициентов, определяемых по зависимостям  $d_{33}(\sigma)$  [8]. В частности, полное изменение пьезомодуля в результате действия одноосного сжатия рассчитывается по формуле

$$\alpha = \frac{d_{33}^H - d_{33}^{\max}}{d_{33}^H} 100 \%, \quad (3)$$

где  $d_{33}^H$  — начальное значение пьезомодуля до действия нагрузки,  $d_{33}^{\max}$  — значение пьезомодуля при максимально заданной нагрузке.

Сравнение экспериментальных данных для ряда образцов пьезокерамики, изготовленных по горячепрессованной и керамической технологиям (см. рис. 4), позволило оценить степень деполяризации пьезокерамики под действием одноосного сжатия в интервале напряжений от  $1,25 \cdot 10^8$  до  $2,8 \cdot 10^8$  Па. Деполяризация была оценена по изменению пьезомодуля  $d_{33}$  (величине  $\alpha$ ), уровень которого приведен ниже.

Состав материала	Изменение пьезомодуля $d_{33}$ (значение $\alpha$ , %)
ПКР-78 (г.п.) . . . . .	6,6
ПКР-78 (к.т.) . . . . .	22,0
ЦТС-19 (г.п.) . . . . .	48,0
ПКР-1 (г.п.) . . . . .	56,0

Из данных, приведенных выше, следует, что степень необратимой деполяризации ПК при сжатии существенно различна для разных составов ПК. Если у

ПК ПКР-78 степень деполяризации при нагрузке  $2,8 \cdot 10^8$  Па составляет всего 6,6 %, то у ЦТС-19 и ПКР-1 она равна 48 и 56 % соответственно. Такое поведение ПКМ при сжатии ранее было объяснено в работах [6—8] различной степенью устойчивости к сжимающим напряжениям ПКМ, состав которых отличается введением в них различных модифицирующих добавок. В зависимости от типа добавок все ПКМ принято разделять условно на материалы "сегнетомягкие", средней сегнетожесткости и "сегнетожесткие". Последние характеризуются очень малым снижением значения пьезомодуля. Наши результаты (см. рис. 3, 4) дают основание утверждать: ПКР-78 является "сегнетожестким", а ЦТС-19 и ПКР-1 — "сегнетомягкими" материалами. Кроме этого, оказалось, что устойчивость доменной структуры ПКМ зависит также от технологии режимов спекания материала, и главным образом от его плотности. Сравнение значений снижения пьезомодуля у ПКМ, горячепрессованных и спеченных по керамической технологии, равных 6,6 и 22,0 % соответственно показало, что горячепрессованная ПК более чем в три раза стабильнее к воздействию сжимающих напряжений, чем спеченная по керамической технологии, т. е. ее "сегнетожесткость" существенно выше. Это, по-видимому, связано с тем, что плотность первой из них значительно выше [6]. При этом следует отметить, что значения пьезомодуля  $d_{33}$  этих составов в исходном состоянии (без действия сжимающей нагрузки) отличаются всего на ~8 %. Другой важный параметр, учитываемый при выборе материалов для ЧЭ ПГ, это значение КЭС таких материалов. Некоторые неполные данные по значениям КЭС, приведенные в таблице, показывают, что у исследованных составов КЭС отличается мало. Поэтому использование этого параметра при выборе материала для ПГ не дает полной информации. Это означает, что энергоэффективность выбранного типа ПКМ для них должна оцениваться в первую очередь параметром стабильности пьезомодуля  $d_{33}$  при больших механических нагрузках.

При расчете параметров ПГ необходимо учитывать еще один параметр, влияющий на корректность определения значения  $d_{33}$ . Этот параметр связан с геометрией образцов пьезоэлементов ЧЭ. В настоящей работе измерения  $d_{33}$  в квазистатическом режиме проводились на стандартных образцах пьезоэлементов, у которых отношение "толщина  $H$ /диаметр  $d$ " ( $\bar{h} \geq H/d$ ) равно (или больше) 0,1. Ранее было установлено, что при измерениях на образцах, у которых  $0,45 < \bar{h} \leq 1,75$ , значение пьезомодулей необходимо корректировать на значение систематической погрешности [5]. Поэтому при разработке конструкций ПГ в расчете его выходных характеристик необходимо учитывать связь выбранной геометрии ЧЭ со значением пьезомодуля.

## Заключение

Описанные выше количественные оценки параметров стабильности электрофизических характеристик пьезокерамик различных составов позволили установить следующее.

1. Основным параметром, который необходимо учитывать при выборе материалов для чувствительных элементов пьезогенераторов, работающих в условиях больших механических нагрузок, является стабильность значения пьезомодуля  $d_{33}$ .

2. Установлено, что у горячепрессованной пьезокерамики ПКР-78 значение пьезомодуля  $d_{33}$  в исходном (без нагрузки) состоянии, хотя меньше, чем у более чувствительного ПКМ ЦТС-19, но при напряжениях сжатия, приближающихся к разрушающим ( $3 \cdot 10^8$  Па), пьезомодуль у ПКР-78 выше более чем в 1,5 раза.

3. Пьезочувствительность у пьезоэлементов из ПКР-78 во всем исследованном интервале сжимающих напряжений меняется мало (6,6 %) в отличие от пьезочувствительности ЧЭ из ЦТС-19, падающей до 48 %. Это означает, что выходная мощность ПГ с ЧЭ из ПКР-78 меняется мало, т. е. важнейший параметр ПГ — ее мощность имеет вполне стабильное значение.

Из всего этого следует, что пьезогенераторы, в которых будут применены исследованные высокостабильные ПКМ, получат существенные преимущества перед более ранними конструкциями, где чаще всего используется пьезокерамика ЦТС-19 или ее аналог PZT-5а.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 10-08-00093а, № 10-08-13300 РТ\_оми).*

## Список литературы

1. **Sadano H.** Power Using Piezoelectric Materials. URL: <http://cap.ee.ic.uk/pdm97/2007>
2. **Galhardi M. A., Henrique T., Lopes Junior V.** A review of power harvesting of Mechanical vibration using piezoelectric material and applications // Proc. 7th Brazilian Conf. of Dynamics, Control and Applications. "Dincon 2008". [www.dem.feis.unes](http://www.dem.feis.unes)
3. **Акопян В. А., Паринов И. А., Истомин И. В.** Пьезогенераторы — новое перспективное направление малой энергетики // Релга.ру (эл. журнал). 2011. № 9 (227). URL: <http://www.relga.ru> 24.05.2011.
4. **Афонин С. М.** Корректирующие устройства систем управления деформацией пьезоактуаторов нано- и микроперемещений // Нано- и микросистемная техника. 2011. № 3. С. 30—38.
5. **Акопян В. А., Soloviev A. N., Parinov I. A., Shevtsov S. N.** Definition on Constants for Piezoceramic Materials. N.-Y.: Nova Science Publishers, 2010. 205 p.
6. **Смажневская Е. Г., Фельдман Н. Б.** Пьезоэлектрическая керамика. М.: Советское радио, 1971. 200 с.
7. **Гориш А. В., Дудкевич В. П., Куприянов М. Ф.** и др. Пьезоэлектрическое приборостроение / Под ред. А. В. Гориша. Т. 1. Физика сегнетоэлектрической керамики. М.: ИПРЖР, 1999. 368 с.
8. **Крамаров О. П., Дорошенко В. А., Бородин В. В.** и др. Влияние внутренних полей на процессы деполяризации сегнетокерамики при продольном сжатии // Пьезоэлектрические материалы и преобразователи. Ростов-на-Дону: Издательство РГУ, 1971. С. 120—127.

УДК 681.586.712-002.532

**Е. М. Белозубов**<sup>1</sup>, д-р техн. наук, нач. группы,  
**Н. Е. Белозубова**<sup>2</sup>, аспирант,  
**В. А. Васильев**<sup>2</sup>, д-р техн. наук, проф.,  
e-mail: opto@bk.ru

<sup>1</sup> ОАО "Научно-исследовательский институт физических измерений"

<sup>2</sup> Пензенский государственный университет

## ПОВЫШЕНИЕ ВИБРОУСТОЙЧИВОСТИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ НАНО- И МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ДАТЧИКОВ ДАВЛЕНИЯ НА ИХ ОСНОВЕ

*Поступила в редакцию 13.07.2011*

*Рассмотрены вопросы повышения виброустойчивости тонкопленочных нано- и микроэлектромеханических систем и датчиков давления на их основе.*

**Ключевые слова:** тонкопленочные нано- и микроэлектромеханические системы, датчик давления, вибрация, температура

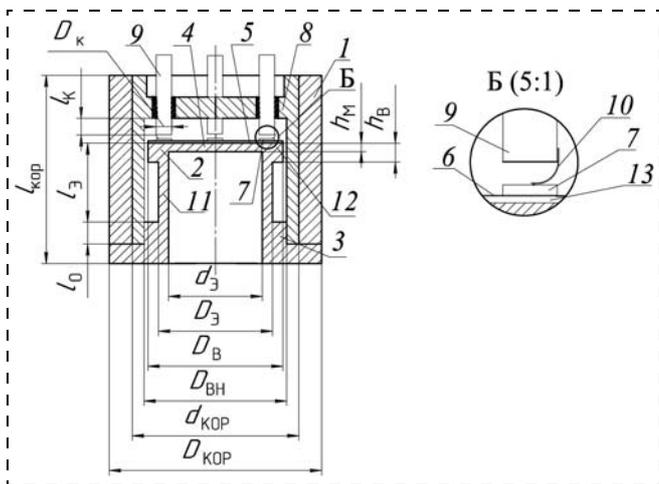
Датчики давления являются важнейшими элементами информационно-измерительных и управляющих систем, а также систем мониторинга, контроля и диагностики технически сложных объектов современной ракетной и авиационной техники. Необходимость измерения давлений непосредственно в местах протекания высокоэнергетических процессов ракетных двигателей предъявляет высокие требования к устойчивости датчиков при влиянии критических воздействующих факторов: высоких уровней виброускорений в широком диапазоне частот и широкого диапазона нестационарных температур. В настоящее время тонкопленочные тензорезисторные датчики давления (ТТДД) обладают оптимальным сочетанием метрологических, конструктивных, технологических характеристик с наивысшей устойчивостью к воздействию выше-названных факторов по сравнению с датчиками аналогичного назначения других принципов преобразования. Поэтому ТТДД обеспечивают измере-

ния большинства параметров давления отечественных жидкостных ракетных двигателей (ЖРД). В то же время совершенствование ЖРД предопределило актуальным дальнейшее повышение устойчивости ТТДД к воздействию критических факторов.

ТТДД представляют собой гетерогенные структуры, использующие в качестве чувствительных элементов тонкопленочные тензорезисторные нано- и микроэлектромеханические системы (НиМЭМС) [1]. Критическими элементами НиМЭМС и датчиков в целом к воздействию повышенных виброускорений являются выводные проводники, соединяющие контактные площадки тензоструктуры НиМЭМС с ее гермовыводами [2–4]. Повышенные виброускорения приводят к разрушению критических элементов и прекращению функционирования датчиков. Кроме того, особенностью работы ТТДД является то, что недостаточная устойчивость критических элементов к воздействию повышенных виброускорений приводит к появлению дополнительной температурной погрешности, вызванной влиянием изменения нестационарной температуры, возникающей в результате внутреннего и наружного трения этих элементов. В связи с этим повышение виброустойчивости НиМЭМС одновременно решает задачу уменьшения влияния нестационарных температур, возникающих при повышенных виброускорениях [3–5].

Известные решения не отвечают предъявляемым требованиям к виброустойчивости, так как при воздействии на тонкопленочные НиМЭМС повышенных (более  $10\,000\text{ мс}^{-2}$ ) виброускорений выводные проводники подвергаются воздействию не только этих виброускорений, но и дополнительных усилий, вызванных различными перемещениями в местах присоединения выводных проводников к контактным площадкам тензочувствительной схемы и контактам колодки. Поэтому наиболее частыми местами разрушения проводников являются места присоединения проводников к контактам колодки или контактным площадкам тензочувствительной схемы [2–4].

Задачей предлагаемого решения является повышение виброустойчивости датчиков давления за счет уменьшения различного перемещения выводных проводников в местах их присоединения к контактным площадкам тензочувствительной схемы и контактам колодки и за счет уменьшения отношения выходного сигнала датчика от воздействия



Расчетная модель НиМЭМС с повышенной виброустойчивостью

виброускорений к выходному сигналу от воздействия номинального измеряемого давления с помощью повышения чувствительности датчика к измеряемому давлению. При этом в силу некоторых очень важных обстоятельств решение задачи необходимо обеспечить без изменения технологии изготовления, оборудования и габаритно-массовых характеристик датчиков.

Разработанная в ОАО "НИИФИ" НиМЭМС (см. рисунок) содержит цилиндрический корпус 1, упругий элемент 2 в виде выполненной как одно целое с цилиндрическим опорным основанием 3 жесткозаземленной мембраны 4, на которой сформирована тензочувствительная схема 5 с тензорезисторами 6 и контактными площадками 7, и соединяющие контактные площадки 7 и контакты колодки 9, выводные проводники 10, частично расположенные по цилиндрическим поверхностям, соединяющим плоскости контактных площадок и плоскости поверхностей контактов колодки. Тензорезисторы 6 с контактными площадками 7 изолированы от упругого элемента диэлектрической пленкой 13 [6].

Тензорезисторы 6 размещены на периферии мембраны между контактными площадками 7. На опорном основании упругого элемента выполнено цилиндрическое утонение 11, образующее на опорном основании выступ 12 в виде цилиндрического кольца. Одно из его оснований находится в плоскости поверхности мембраны, на которой размещена тензочувствительная схема 5. Выполнение тензорезисторов 6 в виде идентичных тензоэлементов и их размещение на периферии мембраны 4 позволяют повысить чувствительность датчика к измеряемому давлению за счет увеличенных (до 2 раз) деформаций от измеряемого давления на периферии мембраны 4 по сравнению с деформациями в других областях мембраны [6].

Повышение чувствительности к измеряемому давлению уменьшает соотношение выходного сиг-

нала датчика от воздействия виброускорений к выходному сигналу от воздействия номинального измеряемого давления, а следовательно, относительная погрешность от воздействия виброускорений будет уменьшена. Кроме того, размещение тензорезисторов 6 на периферии мембраны 4 позволяет разместить контактные площадки 7 непосредственно под контактами 9 колодки 8 без использования дополнительных контактных площадок и выводных проводников, расположенных на поверхности тензочувствительной схемы, что повышает виброустойчивость.

Так как на опорном основании 3 упругого элемента 2 выполнено цилиндрическое утонение 11, то под воздействием виброускорений места присоединения выводных проводников 10 к контактными площадкам 7 тензочувствительной схемы 5 вследствие отсутствия жесткой связи мембраны 4 и корпуса 1 имеют перемещения относительно корпуса 1. Фаза этих перемещений при частотах виброускорений, меньших собственных частот элементов датчика (что является известным условием работоспособности конструкций при воздействии виброускорений), совпадает с фазой перемещений мест присоединения выводных проводников 10 к контактам 9 колодки 8 [7].

В результате этого уменьшаются различия перемещений выводных проводников в местах их присоединения к контактными площадкам 7 тензочувствительной схемы 5 и контактам 9 колодки 8, а следовательно, уменьшаются дополнительные усилия, вызванные рассматриваемыми перемещениями, и повышается виброустойчивость НиМЭМС и датчика в целом.

Выполнение на опорном основании 3 выступа 12 позволяет обеспечивать одинаковое перемещение выводных проводников в местах их присоединения к контактными площадкам 7 тензочувствительной схемы 5 и контактам 9 колодки 8 при больших толщинах цилиндрического утонения 11 (для сохранения необходимой его прочности при воздействии давления) вследствие увеличения виброперемещений за счет массы выступа 12. Выступ 12 выполнен в виде цилиндрического кольца, так как только в этом случае достигается равномерное влияние на виброперемещения по всем направлениям, перпендикулярным продольной оси датчика.

При этом одно из оснований выступа 12 находится в плоскости поверхности мембраны 4, на которой размещена тензочувствительная схема 5, для обеспечения максимального влияния выступа 12 на виброперемещения. Если одно из оснований выступа 12 будет находиться ниже плоскости поверхности мембраны 4, на которой размещена тензочувствительная схема 5, то влияние выступа 12 на виброперемещения будет меньше вследствие уменьшения расстояния от выступа 12 до места закрепления упругого элемента 2 в корпусе 1.

Определение оптимальных соотношений размеров проведем из следующих соображений. Наиболее опасным направлением является воздействие виброускорений в направлении, перпендикулярном длинам контактов колодки и упругого элемента. Рассмотрим контакт колодки при воздействии виброускорений как консоль с равномерно распределенной по длине выступающей части контакта нагрузкой, вызванной воздействием виброускорений. Интенсивность этой нагрузки определим в соответствии со вторым законом Ньютона:

$$q_k = 4^{-1} \pi D_k^2 \gamma_k W_k, \quad (1)$$

где  $D_k$  — диаметр контакта колодки;  $\gamma_k$  — плотность материала контакта колодки;  $W_k$  — виброускорения, воздействующие на контакт.

Тогда в соответствии с [7] прогиб на конце консоли (т. е. в месте присоединения выводного проводника к контакту колодки) будет определяться формулой

$$f_k = q_k l_k^4 (8E_k I_{zk})^{-1}, \quad (2)$$

где  $l_k$  — длина контакта колодки;  $E_k$  — модуль упругости материала контакта колодки;  $I_{zk} = 64^{-1} \pi D_k^4$  — момент инерции.

Подставляя значения интенсивности вибрационной нагрузки и момента инерции в выражение (2), получим

$$\begin{aligned} f_k &= q_k l_k^4 (8E_k I_{zk})^{-1} = \\ &= 4^{-1} \pi D_k^2 \gamma_k W_k l_k^4 (8E_k \pi D_k^4)^{-1} = \\ &= 2\gamma_k l_k^4 W_k (E_k D_k^4)^{-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

При воздействии виброускорений на упругий элемент рассматриваем его находящимся под воздействием суммы равномерно распределенной по длине его утоненной части нагрузки, вызванной воздействием виброускорений и приложенной к незакрепленному краю консоли сосредоточенной нагрузки, вызванной воздействием виброускорений на присоединенную массу мембраны и выступа. Тогда прогиб незакрепленного торца упругого элемента, на котором размещены контактные площадки тензочувствительной схемы, при воздействии виброускорений будет равен

$$\begin{aligned} f_3 &= q_3 l_3^4 (8E_3 I_{z3})^{-1} + \\ &+ (M_M + M_B) l_3^3 W_3 (3E_3 I_{z3})^{-1}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $q_3$  — интенсивность равномерно распределенной нагрузки на упругий элемент, вызванной воздействием виброускорений;  $E_3$  — модуль упруго-

сти материала упругого элемента;  $l_3$  — длина деформируемой под воздействием виброускорений части упругого элемента;  $I_{z3}$  — момент инерции упругого элемента;  $M_M$  — масса мембраны;  $M_B$  — масса выступа.

Интенсивность равномерно распределенной нагрузки на упругий элемент, вызванной воздействием виброускорений, определяется аналогично выражению (1)

$$\begin{aligned} q_3 &= 0,25\pi (D_3^2 - d_3^2) \gamma_3 W_3 = \\ &= 0,25\pi D_3^2 (1 - d_3^2 D_3^{-2}) \gamma_3 W_3, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $D_3$  — наружный диаметр утончения упругого элемента;  $d_3$  — внутренний диаметр опорного основания упругого элемента;  $\gamma_3$  — плотность материала упругого элемента.

Учитывая незначительное расстояние от контактов колодки до поверхности тензочувствительной схемы и высокую жесткость корпуса датчика, необходимость которой будет пояснена далее, принимается, что виброускорения, воздействующие на контакты колодки, равны виброускорениям, воздействующим на упругий элемент, т. е.  $W_k = W_3$ . Для устранения различного перемещения мест присоединения выводных проводников к контактными площадкам тензочувствительной схемы и контактам колодки необходимо равенство прогибов контактов и упругого элемента в местах закрепления выводных проводников при воздействии виброускорений ( $f_k = f_3$ ).

Масса мембраны определяется выражением

$$M_M = 0,25\pi \gamma_3 d_3^2 h_M, \quad (6)$$

где  $h_M$  — толщина мембраны.

Масса выступа определяется выражением

$$M_B = 0,25\pi \gamma_3 (D_B^2 - D_3^2) h_B, \quad (7)$$

где  $D_B$  — диаметр выступа упругого элемента;  $h_B$  — толщина выступа.

Учитывая, что  $I_{z3} = 64^{-1} \pi D_3^4 (1 - d_3^4 D_3^{-4})$ , после преобразований получим

$$\begin{aligned} f_3 &= 2\gamma_3 l_3^4 E_3 (D_3^2 + d_3^2)^{-1} W_3 + \\ &+ 16 \left[ \gamma_3 d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2) \gamma_3 h_B \right] \times \\ &\times l_3^3 \left[ 3E_3 (D_3^4 - d_3^4) \right]^{-1} W_3. \end{aligned} \quad (8)$$

Приравнявая выражения (4) и (7), получим соотношение для элементов конструкции датчика, при котором обеспечивается равенство вибропере-

мешений контактов колодки и контактных площадок тензочувствительной схемы

$$2\gamma_K l_K^4 E_K^{-1} D_K^{-2} = 2\gamma_3 l_3^4 E_3^{-1} (D_3^2 + d_3^2)^{-1} + 16 \left[ \gamma_3 d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2) \gamma_3 h_B \right] \times \times l_3^3 \left[ 3E_3 (D_3^4 - d_3^4) \right]^{-1}. \quad (9)$$

Решая полученное уравнение четвертой степени относительно  $D_3$  и учитывая, что его величина должна быть вещественна и положительна, получим соотношение для элементов конструкции

$$D_3 = \left\{ 3\gamma_3 E_K l_3^4 D_K^2 + \left[ 9\gamma_3^2 E_K^2 l_3^8 D_K^4 + 36\gamma_K^2 E_3^2 l_K^8 d_3^4 + 12\gamma_K \gamma_3 E_K E_3 D_K^2 l_K^4 l_3^3 \times \left( 8d_3^2 h_M + 8D_B^2 h_B - 8d_3^2 h_B - 3d_3^2 l_3 \right) \right]^{0,5} \right\}^{0,5} \times \left( 6\gamma_K E_3 l_K^4 \right)^{-0,5}. \quad (10)$$

Размеры в полученном соотношении целесообразно определять методом последовательного приближения. В случае, если наружный диаметр утонения упругого элемента не соответствует условиям обеспечения прочности при воздействии виброускорений или измеряемого давления, то изменяя диаметр и толщину выступа упругого элемента, добиваются соответствия размеров датчика соотношению с обеспечением необходимой прочности. Для эффективной работы НиМЭМС необходимо, чтобы выступ опорного основания при воздействии даже максимального виброускорения перемещался внутри колодки без ограничений, так как в противном случае соударение выступа и колодки приведет к различным виброперемещениям упругого элемента и контактов колодки.

Это условие будет соблюдено, если внутренний диаметр колодки будет больше диаметра выступа на удвоенную величину виброперемещений выступа даже при воздействии максимальных виброускорений:

$$D_{вн} > D_B + 2f_{3\max}, \quad (11)$$

где  $D_{вн}$  — внутренний диаметр колодки.

Тогда в соответствии с выражением (8) виброперемещения упругого элемента при воздействии максимальных виброускорений будут определяться выражением

$$f_{3\max} = 2\gamma_3 l_3^4 E_3^{-1} (D_3^2 + d_3^2)^{-1} W_{\max} + 16 \left[ \gamma_3 d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2) \gamma_3 h_B \right] \times \times l_3^3 \left[ 3E_3 (D_3^4 - d_3^4) \right]^{-1} W_{\max}, \quad (12)$$

где  $W_{\max}$  — максимальное значение виброускорений.

Проведя необходимые преобразования, получим необходимое соотношение для внутреннего диаметра колодки [6]:

$$D_{вн} > D_B + 4\gamma_3 W_{\max} \times \left\{ 3l_3^4 (D_3^2 - d_3^2) + 8 \left[ d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2) h_B \right] l_3^3 \right\} \times \times \left[ 3E_3 (D_3^4 - d_3^4) \right]^{-1}. \quad (13)$$

Для обеспечения соотношения (10) необходимо минимальное влияние корпуса на виброперемещения контактов колодки. Это условие будет выполняться, если виброперемещения упругого элемента будут существенно больше виброперемещений корпуса в месте закрепления колодки [6]:

$$f_3 \gg f_{кор}. \quad (14)$$

Виброперемещения упругого элемента определяются по выражению (8). Виброперемещения корпуса можно определить по аналогии с первой частью выражения (8):

$$f_{кор} = \gamma_{кор} l_{кор}^4 \left[ E_{кор} (D_{кор}^2 + d_{кор}^2) \right]^{-1} W_{кор}, \quad (15)$$

где  $\gamma_{кор}$  — плотность материала корпуса;  $l_{кор}$  — длина корпуса;  $E_{кор}$  — модуль упругости корпуса;  $D_{кор}$  — наружный диаметр корпуса;  $d_{кор}$  — внутренний диаметр корпуса;  $W_{кор}$  — виброускорения, воздействующие на корпус датчика.

Подставляя выражения (8) и (15) в соотношение (14) и принимая  $W_{кор} = W_3$ , получим необходимое соотношение [6]:

$$2\gamma_3 \left\{ 3l_3^4 (D_3^2 - d_3^2) + 8 \left[ d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2) h_B \right] l_3^3 \right\} \times \times \left[ 3E_3 (D_3^4 - d_3^4) \right]^{-1} \gg \gg \gamma_{кор} l_{кор}^4 \left[ E_{кор} (D_{кор}^2 + d_{кор}^2) \right]^{-1}. \quad (16)$$

Для обеспечения соотношения (10) необходимо минимальное влияние опорного основания на участке без утонения на величину виброперемещений упругого элемента. Это условие выполняется, если виброперемещения упругого элемента, определяемые утонением упругого элемента, будут существенно больше виброперемещений опорного основания на участке без утонения в месте перехода опорного основания в утонение:

$$f_3 \gg f_0, \quad (17)$$

где  $f_0$  — виброперемещения опорного основания на участке без утонения.

Подставляя выражения (8) в соотношение (17) и определяя виброперемещения опорного основания на участке без утонения, по аналогии с выражением

(15) после преобразований получим оптимальное соотношение для размеров элементов НиМЭМС [6]:

$$2\left\{3l_3^4(D_3^2 - d_3^2) + 8\left[d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2)h_B\right]l_3^3\right\} \times \\ \times \left[3(D_3^4 - d_3^4)\right]^{-1} \gg l_0^4 \left[(D_{30}^2 + d_3^2)\right]^{-1}, \quad (18)$$

где  $D_{30}^2$  — наружный диаметр опорного основания упругого элемента на участке без утончения;  $l_0$  — длина опорного основания на участке без утончения.

Полученные соотношения связывают размеры корпуса, упругого элемента и контактной колодки НиМЭМС, при которых в случае воздействия виброускорений обеспечиваются одинаковые перемещения выводных проводников в местах их присоединения к контактным площадкам тензочувствительной схемы и контактам колодки, а следовательно, повышается виброустойчивость НиМЭМС и датчика.

Таким образом, условия минимизации влияния виброускорений на НиМЭМС с выводными проводниками, соединяющими контактные площадки и контакты колодки, размещенные перпендикулярно поверхности упругого элемента, можно сформулировать в следующем виде [6]. Тензорезисторы должны быть размещены на периферии мембраны между контактными площадками, а на опорном основании упругого элемента необходимо выполнить цилиндрическое утончение, образующее на опорном основании выступ в виде цилиндрического кольца, причем одно из оснований находится в плоскости поверхности мембраны, на которой размещена тензочувствительная схема. Размеры упругого элемента, контактной колодки и корпуса нужно выбирать из соотношений

$$D_3 = \left\{3\gamma_3 E_K l_3^4 D_K^2 + \left[9\gamma_3^2 E_K^2 l_3^8 D_K^4 + \right. \right. \\ \left. \left. + 36\gamma_K^2 E_3^2 l_K^8 d_3^4 + 12\gamma_K \gamma_3 E_K E_3 D_K^2 l_K^4 l_3^3 \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left(8 d_3^2 h_M + 8 D_B^2 h_B - 8 d_3^2 h_B - 3 d_3^2 l_3\right)\right]^{0,5}\right\}^{0,5} \times \\ \times \left(6\gamma_K E_3 l_K^4\right)^{-0,5}; \\ D_{BH} > D_B + 4\gamma_3 W_{max} \times \\ \times \left\{3l_3^4(D_3^2 - d_3^2) + 8\left[d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2)h_B\right]l_3^3\right\} \times \\ \times \left[3E_3(D_3^4 - d_3^4)\right]^{-1}; \\ 2\gamma_3 \left\{3l_3^4(D_3^2 - d_3^2) + 8\left[d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2)h_B\right]l_3^3\right\} \times$$

$$\times \left[3E_3(D_3^4 - d_3^4)\right]^{-1} \gg \\ \gg \gamma_{кор} l_{кор}^4 \left[E_{кор}(D_{кор}^2 + d_{кор}^2)\right]^{-1}; \quad (19)$$

$$2\left\{3l_3^4(D_3^2 - d_3^2) + 8\left[d_3^2 h_M + (D_B^2 - D_3^2)h_B\right]l_3^3\right\} \times \\ \times \left[3(D_3^4 - d_3^4)\right]^{-1} \gg l_0^4 \left[(D_{30}^2 + d_3^2)\right]^{-1}.$$

На основании вышеизложенного можно заключить, что метод повышения виброустойчивости тонкопленочных НиМЭМС с выводными проводниками заключается в обеспечении одинаковых по амплитудам и фазам виброперемещений мест закреплений выводных проводников. В результате испытаний серийных образцов ТТДД Вт212А.1, изготавливаемых в ОАО "НИИФИ" с применением НиМЭМС в соответствии с предлагаемым решением, с использованием в качестве плоских выводных проводников полос из золота Зл 999,9, традиционно применяемых для вибро- и термоустойчивых НиМЭМС, установлено, что эти датчики работоспособны при воздействии виброускорений  $25\,000\text{ мс}^{-2}$  и более в широком частотном диапазоне [6]. При этом погрешность датчиков Вт212А.1 от воздействия виброускорений и нестационарных температур в среднем в 5 раз меньше аналогичной погрешности ТТДД Вт212, изготовленных в соответствии с ранее известными решениями и выдерживающих воздействие виброускорений до  $6000\text{ мс}^{-2}$ . Преимуществом предлагаемого решения является также то, что повышение виброустойчивости достигнуто без изменения технологии изготовления, оборудования и габаритно-массовых характеристик датчика.

#### Список литературы

1. Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е. Тонкопленочные тензорезисторные датчики давления — изделия нано- и микросистемной техники // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 12. С. 49—51.
2. Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е. Повышение устойчивости МЭМС-структур тонкопленочных датчиков к воздействию виброускорений и температур // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 2. С. 63—66.
3. Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е. Повышение устойчивости датчиков давления к воздействию виброускорений и нестационарных температур // Датчики и Системы. 2008. № 4. С. 42—45.
4. Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е., Васильев В. А. Микроэлектромеханические системы тонкопленочных датчиков давления для высоких температур и виброускорений // Автоматизация и современные технологии. 2008. № 10. С. 33—37.
5. Белозубов Е. М., Васильев В. А. Нано- и микроэлектромеханические системы тонкопленочных датчиков давления. Принципы построения и перспективы использования // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2009. № 9. С. 26—32.
6. Белозубов Е. М., Блинов А. В., Козин С. А., Белозубова Н. Е. Патент РФ № 2344389. Тонкопленочный датчик давления. Опубл. 20.01.09. Бюл. № 2.
7. Тимошенко С. П. Соппротивление материалов. Т. 1: Пер. с англ. М.: Изд-во Наука, 1965. 363 с.

**Л. П. Ичкитидзе**, канд. физ.-мат. наук, доц., ст. науч. сотр., e-mail: leo852@inbox.ru,  
**А. Н. Миронюк**, инженер, e-mail: anton.mironioug@gmail.ru,  
 Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Национальный исследовательский университет "МИЭТ", Зеленоград, Москва,  
 Институт нанотехнологий микроэлектроники, РАН, Москва

## ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЙ ПЛЕНОЧНЫЙ СВЕРХПРОВОДНИКОВЫЙ ТРАНСФОРМАТОР МАГНИТНОГО ПОТОКА

Поступила в редакцию 27.07.2011

*Рассматривается пленочный сверхпроводниковый трансформатор магнитного потока в форме квадратообразного кольца со суженной активной полосой. Активная полоса трансформатора магнитного потока перекрывает сверху пленочный магниточувствительный элемент с гигантским магнитосопротивлением, отделенный с помощью изолирующей пленки.*

*Показано, что топологическое наноструктурирование активной полосы трансформатора магнитного потока повышает его фактор умножения на порядок и более, т. е. повышается его эффективность, что приводит к значительному росту положительных показателей датчика магнитного поля.*

**Ключевые слова:** сверхпроводящие пленки, датчики, магнитное поле, трансформатор магнитного потока, топологическое наноструктурирование

Сверхчувствительные приборы являются базовыми для решения многих научных и технических задач, в том числе задач, относящихся к исследованию биологических объектов. Магнитное поле  $B$  биологического объекта или его отдельного органа настолько мало (например, мозг человека создает магнитное поле порядка  $\sim(10^{-5} \dots 10^{-4})$  нТл), что оно находится вблизи границы магнитного вакуума и только современные высокочувствительные магнитометры и системы могут измерять его значение [1, 2].

В настоящее время слабые магнитные поля  $B \leq 10$  нТл измеряют различными магнитометрами: СКВИД (*SQUID — superconducting quantum interference device*), оптическими и ЯМР магнитометрами и др. Из них наиболее чувствительными являются СКВИД-приборы, основанные на эффекте туннелирования сверхпроводящих электронов через слабую связь (контакт или переход Джозефсона),

однако они не могут непосредственно измерять абсолютное значение магнитного поля и регистрируют только его приращение. Абсолютное значение магнитного поля можно измерять феррозондовыми датчиками [3] и многочисленными магнитометрами на их основе [3, 4]. Однако феррозондовый датчик имеет большие массогабаритные размеры и неудовлетворительное разрешение по магнитному потоку  $\delta\phi \geq 100\phi_0$ , где  $\phi_0 = 2,07 \cdot 10^{-15}$  Вб — квант магнитного потока, и по магнитному полю —  $\delta B \approx 10^{-2}$  нТл, тогда как для СКВИД достигаются значения  $\delta\phi \approx 10^{-6}\phi_0$  и  $\delta B \sim 10^{-5}$  нТл, соответственно.

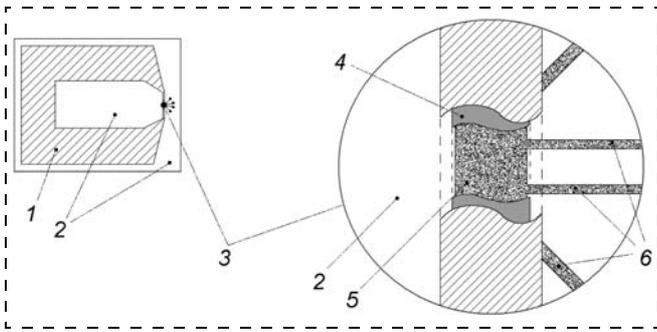
В качестве магниточувствительного элемента (МЧЭ) можно использовать любой материал, имеющий достаточную нелинейность магнитной характеристики. Например, датчики Холла, материалы и структуры с эффектом гигантского магнитного сопротивления (ГМС), гранулярный традиционный низкотемпературный сверхпроводящий (НТСП) или керамический высокотемпературный сверхпроводящий (ВТСП) материал. Однако для улучшения основных параметров датчика магнитного поля (в частности уменьшения  $\delta B$ ) необходимым является использование концентраторов измеряемого (внешнего) магнитного поля, в частности, так называемых трансформаторов магнитного потока (ТМП). Для этой цели часто используется свойство сверхпроводников сохранять магнитный поток в замкнутом контуре без потерь.

Элементы ТМП на основе ВТСП пленочных материалов используются на практике во многих магнитометрах, где в качестве МЧЭ выступают джозефсоновские переходы (для СКВИД) [5], датчики Холла [6, 7], датчики на эффекте ГМС [8, 9], датчики на магниторезистивном эффекте (МРЭ) в керамических ВТСП материалах [10] и др.

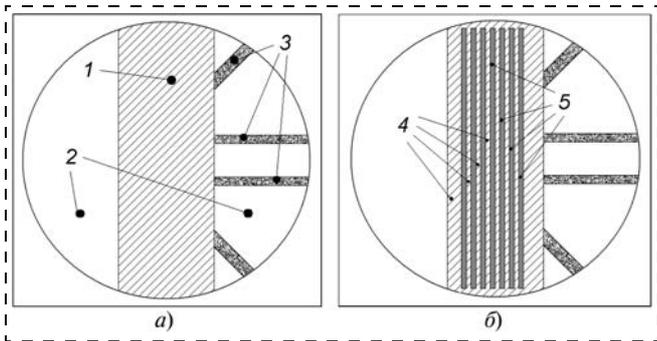
В настоящей работе приведены результаты расчетов концентрации магнитного поля для повышения эффективности трансформаторов магнитного потока на основе пленочных сверхпроводящих материалов.

Объектом исследования является фактор  $F$  умножения (концентрации) магнитного поля ТМП на МЧЭ. Рассматривается конструкция датчика магнитного поля (ДМП), состоящего из квадратообразного сверхпроводникового пленочного ТМП со суженной активной полосой и МЧЭ в виде пленки с ГМС. При этом активная полоса ТМП перекрывает МЧЭ, отделенный с помощью изолирующей пленки, а все элементы ДМП имеют планарное исполнение, что иллюстративно показано на рис. 1 и 2.

Значение фактора умножения  $F$  магнитного поля на МЧЭ оценивалось следующим образом. Во внешнем магнитном поле  $B$  магнитный поток, который экранирует кольцо  $I$  (см. рис. 1), определяется из выражения  $\phi = AB$ , где  $A$  — площадь поверхности кольца. Экранирующий ток  $I_s$  равен



**Рис. 1. Иллюстративная схема ДМП и его элементы:**  
 1 — сверхпроводящее квадратное кольцо ТМП; 2 — диэлектрическая подложка; 3 — активная ТМП-полоса в увеличенном масштабе (пропорции не сохранены); 4 — изолирующая пленка; 5 — МЧЭ; 6 — выводы к контактным площадкам



**Рис. 2. Участок ДМП:**  
 а — неструктурированная активная ТМП-полоса, т. е. без ветвей; б — структурированная активная ТМП-полоса, т. е. с ветвями (1 — сверхпроводящее кольцо ТМП; 2 — изолирующая подложка; 3 — выводы от МЧЭ к контактным площадкам; 4 — ветви; 5 — прорези)

$I_s = \phi / (L + M)$ , где  $L$  — индуктивность кольца;  $M$  — сумма взаимных индуктивностей между частями ТМП и МЧЭ. Известно, что величина  $L$  на порядок и более превышает суммарную взаимную индукцию  $M$ .

Индуктивность кольца ТМП в основном определяется индуктивностью  $L$  активной ТМП-полосы, поскольку отношение  $D/w_s > 10^3$ , где  $D$  — длина стороны квадратного кольца и  $w_s$  — ширина активной полосы ТМП. В случае, когда последняя состоит из нескольких ветвей, каждая с индуктивностью  $L_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ , где  $n \geq 2$  — число ветвей в активной ТМП-полосе), их суммарная индуктивность незначительно увеличивается относительно  $L$ .

Был выполнен расчет максимального значения роста фактора умножения  $F_m$  при варьировании ширины прорезей и ветвей, их числа, топологического расположения и характерных параметров сверхпроводящего материала ТМП. Для оптимального разбиения активной ТМП-полосы, ведущего к максимизации  $F_m$ , рассчитывали магнитные поля на МЧЭ, создаваемые сверхпроводящими токами в

ветвях активной ТМП-полосы. При этом учитывался только компонент магнитного поля, параллельный поверхности подложки, поскольку именно этот компонент сильно влияет на МЧЭ в виде элемента с ГМС.

В расчетах были использованы известные следующие формулы:

$$B = \frac{\mu_0 I_s}{8\pi\lambda h} \left[ \int_{-2h}^0 \int_0^0 \frac{e^{-\frac{x+l}{\lambda}(y_0-y)}}{(y_0-y)^2 + (x_0-x)^2} dx dy + \int_{-2h}^0 \int_0^{+l} \frac{e^{-\frac{l-x}{\lambda}(y_0-y)}}{(y_0-y)^2 + (x_0-x)^2} dx dy \right]; \quad (1)$$

$$F_m = \langle B \rangle / \langle B_0 \rangle (1/K_L); \quad (2)$$

$$K_L = \frac{\sum_{i=1}^n L_i}{L} \approx \frac{w_s}{\sum_{i=1}^n w_i}, \quad (3)$$

где  $l$  и  $h$  — полуширина и полутолщина пленки активной ТМП-полосы соответственно;  $\mu_0$  — постоянная магнитного поля;  $I_s / (4\lambda h) \leq J_c$ ,  $I_s$  — сила экранирующего сверхпроводящего тока в активной ТМП-полосе, протекающего над МЧЭ и действующего на него в точке  $(x_0, y_0)$  (точка отсчета  $(0, 0)$  находится в центре верхней поверхности пленки);  $J_c$  и  $\lambda$  — плотность критического тока и лондоновская глубина проникновения для пленочного материала ТМП соответственно;  $\langle B \rangle$  и  $\langle B_0 \rangle$  — усредненные значения магнитных полей, создаваемых активной ТМП-полосой в случаях с многочисленными ветвями и без ветвей (одна полоса) соответственно;  $K_L$  — фактор роста суммарной индуктивности активной ТМП-полосы;  $L$ ,  $L_i$  — индуктивность активной ТМП-полосы и ее  $i$ -й ветви соответственно;  $n$  — число ветвей в активной ТМП-полосе;  $w_s$ ,  $w_i$  — ширина активной ТМП-полосы и ее  $i$ -й ветви соответственно.

Физический механизм работы данного ДМП основан на концентрации магнитного поля с помощью ТМП на МЧЭ. Высокая концентрация магнитного поля на МЧЭ позволяет увеличить его относительную магниточувствительность  $S_0$  в  $F$  раз и улучшить разрешительные показатели ДМП. Здесь  $S_0 = (R_B - R_0) / (R_0 B)$ , где  $R_B$  — сопротивление МЧЭ во внешнем магнитном поле, т. е.  $B \neq 0$ ,  $R_0$  — сопротивление МЧЭ в отсутствие внешнего магнитного поля, т. е.  $B = 0$ . Действи-



дждофеоновооой среды из этих же систем [11] или систем Bi-2223 [12–15].

Таким образом, топологическое наноструктурирование активного участка сверхпроводниковооо пленочного трансформатора магнитного потока повышает его эффективность, уллучшая характерные параметры датчика магнитного поля.

*Авторы выражают благодарность профессорам Селищеву С. В. и Благову Е. В. за полезные советы и поддержку данной работы.*

#### Список литературы

1. Fischer R., Batzella M. G., Borgna-Pignatti C. et al. Applications of biomagnetic liver susceptometry in hematological disorders // Proc. of 13 th International conference on biomagnetism. August 10–14, Boston, Jena, Germany. BIOMAG2002. P. 1.
2. Zheng Y., Kotani M., Utsukawa Y. et al. Development of a portable pneumomagnetic measurement device // 14 th International conference on biomagnetism. August 8–12, Boston, Massachusetts, USA. BIOMAG2004. P. 267–268.
3. Tumanski S. Induction coil sensors — a review // Measurement Science and Technology. 2007. Vol. 18. P. R31–R46.
4. Deak J., Miklich A. H., Slonczewski J., Koch R. H. Dynamic calculation of the responsivity of monodomain fluxgate magnetometers // Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 69, N 8. P. 1157–1159.
5. Ketchen M. B., Jaycox J. M. Ultra-low-noise tunnel junction dc-SQUID with a tightly coupled input coil // Appl. Phys. Lett. 1982. Vol. 40. P. 736–738.

6. Bär L. R., Daalmans G. M., Uhl D., Bömmel F. A niobium planar SQUID gradiometer operating in an unshielded environment // Supercond. Sci. Technol. 1996. Vol. 9, N 4A. P. 109–112.

7. Linzen S., Schmidt F., Schmidl F. et al. A thin film HTSC-Hall magnetometer-development and application // Physica C. 2002. Vol. 372–376. P. 146–149.

8. Pannetier M., Fermon C., Le Goff G. et al. Femtotesla magnetic field measurement with magnetoresistive sensors // Science. 2004. Vol. 304, N 5677. P. 1648–1650.

9. Pannetier M., Claude F., Juha S. Device for sensing a magnetic field: patent WO 2004/068158. Publication date: 12.08.2004.

10. Ичкидидзе Л. П. Датчик слабого магнитного поля на основе сверхпроводящей пленки: патент № 2258275 RU. Дата публикации 10 августа 2005 г.

11. Itoh M., Ishidoh M., Mori K. et al. // Highly sensitive magnetic sensor made with a superconducting Y–Ba–Cu–O thick film // IEEE Transac. Appl. Superconductivity. 1999. Vol. 2. P. 3085–3089.

12. Ichkitidze L. P. Resistive film sensor of a weak magnetic field based on the HTS (Bi, Pb)<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> ceramics // Physica C. 2006. Vol. 435, Is. 1–2. P. 140–143.

13. Ichkitidze L. P. Weak magnetic field superconductor resistive sensors in comparison with semiconductor and magnetoresistive sensors // Physica C. 2007. Vol. 460–462. Part 2. P. 781–782.

14. Ичкидидзе Л. П. Резистивный датчик слабого магнитного поля на основе толстых пленок ВТСП-материалов // Изв. РАН. Серия Физическая. 2007. Том 71, № 8. С. 1180–1182.

15. Tsukamoto K., Shimojima H., Ishii M., Yamagishi C. Sensitivity to magnetic field for Bi–Sr–Ca–Cu–O superconductive film // Ceramics International. 1992. Vol. 18. Is. 3. P. 147–154.

## 8-й МОСКОВСКИЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ ФОРУМ ТОЧНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ - ОСНОВА КАЧЕСТВА И БЕЗОПАСНОСТИ

23 – 25 мая '2012

Москва Павильон  
ВВЦ №57

СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЕ  
ВЫСТАВКИ

MetrolExpo

PromSafety

ResMetering

MedTest

20 мая - Всемирный день метрологии

4-й СИМПОЗИУМ  
«ТОЧНОСТЬ. КАЧЕСТВО.  
БЕЗОПАСНОСТЬ»

ДИРЕКЦИЯ ФОРУМА

Москва, Технопарк ВВЦ, ул. Олонецкая, 35, стр. 182,  
Тел/Факс: +7 (495) 937-40-23

E-mail: metrol@expoprom.ru, www.metrol.expoprom.ru

#### ОРГАНИЗАТОР

Федеральное агентство по техническому регулированию и метрологии (Росстандарт)

#### СОДЕЙСТВИЕ

Аппарат Правительства Российской Федерации

#### МЕЖДУНАРОДНЫЕ ПАРТНЕРЫ

Центр международного промышленного сотрудничества ЮНИДО в РФ

The International Bureau of Weights and Measures (BIPM)

International Organization of Legal Metrology (OIML)

The European Association of National Metrology Institutes (EURAMET)

The International Committee for Non-Destructive Testing (ICNDT)

#### С УЧАСТИЕМ

Минпромторг России, Минэнерго России, Минздравсоцразвития России, Минобороны России, Минобрнауки России, Ростехнадзор, Роскосмос, «Роснано», «Росатом», «Ростехнологии», ОАО «РЖД», ОАО «ОАК», ОАО «Газпром», ОАО «Роснефть», ОАО «ОСК», Российские металлургические группы, ОАО «КАМАЗ», ОАО «АВТОВАЗ», Российский союз химиков, НП «Росхимреактив», Ассоциация аналитических центров «Аналитика», региональные ЦСМ и метрологические институты

#### ЭКСПЕРТНАЯ КОМИССИЯ

ФГУ «Ростест -Москва», 32 ГНИИ Минобороны России

#### ПРОГРАММА ФОРУМА

8-ая Международная выставка-конкурс средств измерений, испытательного и лабораторного оборудования «METROLEXPO-2012»

Специализированная выставка средств обеспечения безаварийной работы промышленных объектов «PROMSAFETY-2012»

Специализированная выставка коммерческого и технологического учета энергоресурсов «RESMETERING-2012»

2-ая Специализированная выставка СИ для медицинской техники и средств её проверки, контроля и испытаний «MEDTEST-2012»

4-й Московский Международный симпозиум «ТОЧНОСТЬ. КАЧЕСТВО. БЕЗОПАСНОСТЬ»

Всероссийская выставочно-конкурсная программа «ЗА ЕДИНСТВО ИЗМЕРЕНИЙ»

#### УСТРОИТЕЛЬ И ВЫСТАВОЧНЫЙ ОПЕРАТОР

Компания «Вэстстрой Экспо»

# УКАЗАТЕЛЬ СТАТЕЙ, ОПУБЛИКОВАННЫХ В ЖУРНАЛЕ В 2011 Г.

Уверенный взгляд в будущее — 50 лет ОАО  
"НИИФИ" ..... № 3

## ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

- Астахов М. В., Филонов М. Р., Ягодкин Ю. Д., Саркисов П. Д., Юргов Е. В. О реализации проектов подготовки кадров в области функциональных и конструкционных наноматериалов . № 11
- Раткин Л. С. Перспективы развития мировой нанотехнологической промышленности . № 8
- Раткин Л. С. Перспективы развития размерной метрологии в сфере нанотехнологий и микроэлектроники. .... № 5
- Раткин Л. С. Проблемы стандартизации и метрологического обеспечения в нано- и микроэлектронике ..... № 4

## НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

- Антипов А. А., Аракелян С. М., Кутровская С. В., Кучерик А. О., Ногтев Д. С., Прокошев В. Г. Формирование протяженных массивов наноструктур при осаждении металлических наночастиц из коллоидных растворов импульсно-периодическим лазерным излучением . . . № 3
- Аракелян С. М., Кутровская С. В., Кучерик А. О., Троицкий Д. П., Прокошев В. Г., Быков В. А., Леесмент С. И. Использование методов фрактальной геометрии для анализа морфологических свойств и управления качеством получаемого информационного массива по результатам измерений наноразмерных объектов с использованием атомно-силового микроскопа . . № 4
- Басаев А. С., Галперин В. А., Павлов А. А., Цыганов А. В., Шаман Ю. П., Шаманаев А. А. Влияние окисления катализатора на рост углеродных нанотрубок. .... № 12
- Батурин А. С., Чуприк А. А. Измерение емкости квазистатическим методом в атомно-силовом микроскопе ..... № 1
- Гавриленко В. П., Митюхляев В. Б., Раков А. В., Тодуа П. А., Филипов М. Н., Шаронов В. А. Влияние контаминации в РЭМ на профиль рельефных элементов нанометрового диапазона . № 2
- Галиев Г. Б., Васильевский И. С., Климов Е. А., Пушкарев С. С., Рубан О. А. Использование метаморфной технологии для получения НЕМТ-наногетероструктур InAlAs/InGaAs на подложках GaAs и InP с различным содержанием InAs в активной области. .... № 12
- Галперин В. А., Павлов А. А., Поломошнов С. А., Шаман Ю. П., Шаманаев А. А. Исследование электрофизических характеристик структур на основе топологических массивов углеродных нанотрубок. .... № 12
- Глухова О. Е., Колесникова А. С. Полимеризация фуллеренов в углеродной нанотрубке в процессе ее изгиба ..... № 8

- Глухова О. Е., Слепченков М. М. Теоретическое исследование распределенных локальных напряжений графеновой наноленты ..... № 7
- Дудин А. А., Кустов Е. Ф. Теория расчета основных параметров наночастиц для определения их состава ..... № 5
- 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 . . № 8
- Коноплев Б. Г., Агеев О. А., Смирнов В. А., Коломейцев А. С., Ильин О. И. Модификация зондовых датчиков-кантилеверов для атомно-силовой микроскопии методом фокусированных ионных пучков ..... № 4
- Сеничкин А. П., Бугаев А. С., Ячменев А. Э. Вольт-амперные характеристики системы нанонитей из атомов олова, встроенных в кристалл арсенида галлия. .... № 12
- Сидорова С. В., Юрченко П. И. Исследование формирования островковых наноструктур в вакууме. .... № 5

## КОНСТРУИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНСТ

- Абрамов И. И., Баранов А. Л., Щербакова И. Ю. Моделирование одноэлектронных приборных структур на основе молекул. .... № 10
- Абрамов И. И., Коломейцева Н. В. Моделирование резонансно-туннельного диода на основе Si/SiGe ..... № 11
- Аверин И. А., Карпова С. С., Мошников В. А., Никулин А. С., Печерская Р. М., Пронин И. А. Управляемый синтез тонких стекловидных пленок ..... № 1
- Белкин Л. М., Белкин М. Е. Бесструктурная модель поверхностно излучающего лазера с полосою модуляции в СВЧ диапазоне. .... № 10
- Белкин Л. М., Белкин М. Е. Применение оптоэлектронного подхода для преобразования и размножения частот сигналов сверхвысоко частотного диапазона. .... № 11
- Богданов С. А., Захаров А. Г., Лытюк А. А. Моделирование распределения потенциала в барьерах Шоттки с учетом краевых эффектов . № 5
- Боронахин А. М., Иванов П. А., Суков И. Л. Исследование влияния инструментальных погрешностей испытательного средства на результаты калибровки блока микроакселерометров ..... № 3
- Васильев В. А., Чернов П. С. Диффузионная модель роста и морфология поверхностей тонких пленок материалов ..... № 11
- Вернер В. Д., Луканов Н. М., Сауров А. Н. Принципы конструирования биполярных СВЧ структур с предельно узкими эмиттерными областями. .... № 12
- Годовицын И. В. Перспективная конструкция миниатюрного тензорезистивного преобразователя давления. .... № 10
- Гришина Т. А., Мельников А. А., Гришина В. Ю., Трошин Б. В. Взаимодействие электронного пучка с полем кристаллической решетки и представления волновой оптики ..... № 4

- Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Рогозин О. А., Рябченков В. В., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Проблемно-моделирующая среда для расчетов и анализа газокинетических процессов . . . . . № 2
- Захаров А. Г., Богданов С. А., Лыгюк А. А. Моделирование газовой чувствительности кондуктометрических сенсоров газов на основе оксидов металлов . . . . . № 1
- Козлов А. В., Королев М. А., Поломошнов С. А., Тихонов Р. Д., Черемисинов А. А., Шаманаев С. В. Конструктивные и схемотехнические способы повышения чувствительности биполярных магнетранзисторов для прецизионного контроля перемещений микромеханических элементов . . . . . № 12
- Костров А. И. Макромодель ячейки памяти с магнитным туннельным переходом . . . . . № 2
- Михайлов В. П., Степанов Г. В., Базиненков А. М., Зобов И. К., Шаков К. Г. Управление активной виброизоляции и позиционированием магнитореологических устройств . . . . . № 7
- Мухуров Н. И., Ефремов Г. И., Жвавы С. П. Теоретическое моделирование плоскопараллельных двухэлектродных микроактюаторов . . . . . № 1
- Пономарев Д. С., Васильевский И. С., Галиев Г. Б., Климов Е. А., Хабибуллин Р. А., Кульбачинский В. А. Моделирование зонной диаграммы и расчет эффективной массы электронов в составных квантовых ямах InGaAs с нанослоями GaAs/InAs . . . . . № 12
- Смолин В. К., Герасимов В. А. Возможности оценки качества металлизации по стойкости к электромиграции . . . . . № 8
- Тарнавский Г. А., Чесноков С. С. Проектирование дислокаций примесей в выступающем элементе нанорельефа поверхности кремниевой пластины . . . . . № 1
- Хабибуллин Р. А., Васильевский И. С., Пономарев Д. С., Галиев Г. Б., Кульбачинский В. А. Подвижность электронов в комбинированно-легированных транзисторных наногетероструктурах Al/GaAs/GaAs/InGaAs/GaAs/AlGaAs с высокой концентрацией электронов: моделирование и эксперимент . . . . . № 12
- 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 . . . . . № 8
- Шевцов С. Н., Акопьян В. А., Панич А. А., Париннов И. А., Самошенко И. Г. Оптимизация системы пьезоактуаторного гашения вибраций композитной лопасти вертолета . . . . . № 6

#### МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

- Аверин И. А., Печерская Р. М., Пронин И. А. Особенности низкотемпературной самоорганизации зольей на основе двухкомпонентных систем диоксид кремния — диоксид олова . . . . . № 11
- 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 . . . . . № 8
- Войцеховский А. В., Несмелов С. Н., Кульчицкий Н. А., Мельников А. А. Светоизлучающие гетероструктуры AlGaIn/InGaIn/GaN с множественными квантовыми ямами . . . . . № 5
- Гавашели Д. Ш., Рехвишвили С. Ш. Тепловое разрушение фрактальных наноструктур под действием импульсного лазерного излучения . . . . . № 8
- Громов Д. Г., Козьмин А. М., Поломошнов С. А., Шулятьев А. С., Шаманаев С. В. Оптимизация условий формирования тонких пленок ZnO для использования в интегральных МЭМС-устройствах . . . . . № 12
- Дудин А. А., Кустов Е. Ф. Геометрические и физические свойства наночастиц магнитных ферритов . . . . . № 2
- Зарубина А. П., Лукашов Е. П., Деев Л. И., Пархоменко И. М., Образцова Е. А., Новоселова Л. А., Рубин А. Б. Оценка рисков токсичности углеродных наноматериалов . . . . . № 10
- Иванов М. Б., Лазебная М. А., Колобов Ю. Р., Храмов Г. В., Волковняк Н. Н., Колобова Е. Г. Исследование коррозионной стойкости микродуговых кальций-фосфатных покрытий на титане ВТ1-0 в биологических средах . . . . . № 4
- Ильин Н. А., Никонорова Т. В., Шерстюк Н. Э., Мишина Е. Д. Оптические свойства фотоннокристаллических структур на основе монокристаллического GaAs . . . . . № 3
- Ковалевский А. А., Строгова А. С., Плякин Д. В., Цыбульский В. В., Борисевич В. М. Трансформация германосиликатного стекла в нанокластеры германия . . . . . № 2
- Ковалевский А. А., Строгова А. С., Цыбульский В. В., Шевченко А. А. Наноструктурированный твердый раствор TiSi<sub>2</sub> как фотокатализатор разложения воды . . . . . № 1
- Козлов Г. В., Афашагова З. Х., Маламатов А. Х. Эффективность процесса кристаллизации нанокompозитов полиэтилен/карбонат кальция . . . . . № 6
- Кульчицкий Н. А., Мельников А. А. Современное состояние производства CdTe, ZnTe, Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te и приборов на их основе . . . . . № 6
- Лу Пин, Горбатенко Ю. А., Семинистая Т. В., Воробьев Е. В., Королев А. Н. Получение чувствительных элементов сенсоров газов на основе пленок полиакрилонитрила и серебросодержащего полиакрилонитрила и определение их характеристик . . . . . № 9
- Лупарев Н. В., Шешин Е. П., Чадаев Н. Н., Гордеев С. К., Корчагина С. Б. Исследование автоэмиссионных свойств композитов алмаз — углерод . . . . . № 3
- Мальшев А. В. Исследование влияния технологии приготовления литий-титановой ферритовой керамики на ее электрофизические свойства . . . . . № 5
- Мустафаев Аб. Г., Мустафаев Г. А., Мустафаев Ар. Г. Исследование гетероэпитаксии кремния на сапфире при создании транзисторных структур . . . . . № 8
- Печерская Е. А., Метальников А. М., Бобошко А. В. Структура интеллектуальной системы поддерж-

ки исследований параметров сегнетоэлектрических материалов. . . . . № 6

**Прищепов С. К., Власкин К. И.** Интегральные и гибридные технологии производства феррозондовых датчиков. . . . . № 9

**Разумная А. Г., Кабиров Ю. В., Рудская А. Г., Куприянов М. Ф., Назаренко А. В.** Структурные изменения в твердых растворах  $Y_{1-x}Cd_xMnO_3$  и  $Y_{1-x}Cd_xFeO_3$ . . . . . № 1

**Раткин Л. С.** Перспективы разработки и освоения производства наноматериалов. . . . . № 11

**Сигов А. С., Лазарев А. П., Абрамов А. В., Битюцкая Л. А., Богатиков Е. В., Тучин А. В.** Спиновые состояния нанокластеров силицидов переходных металлов. . . . . № 12

**Синев Л. С., Рябов В. Т.** Согласование коэффициентов термического расширения при электростатическом соединении кремния со стеклом. . . . . № 5

**Соколов Л. В., Парфенов Н. М.** Технологические особенности формирования трехмерных МЭМС. . . . . № 11

**Сякина С. Д., Никитина Л. В., Симаков В. В., Синев И. В., Чичварина О. Г.** Стабильность электрических свойств широкозонных газочувствительных наноструктурированных материалов. . . . . № 7

**Тимошенков С. П., Гаев Д. С., Бойко А. Н., Горшкова Н. М.** Исследование и разработка газопоглощающих покрытий для МЭМС. . . . . № 2

**Тополов В. Ю., Филиппов С. Е., Воронцов А. А.** Пьезоэффект и анизотропия электромеханических свойств новых 1-0-3-композигов на основе сегнетопьезокерамики. . . . . № 9

**Троян П. Е., Данилина Т. И., Гребнева Ю. Ю., Кулинич И. А.** Изготовление МДМ-катодов с наноструйным нижним электродом. . . . . № 12

**Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Романов А. В.** Влияние внешних физических воздействий на СВЧ характеристики композитных материалов, содержащих углеродные микро- и нановключения. . . . . № 3

**Хромова Л. П., Коростелев В. Ф.** Формирование квазикристаллических структур в сплавах на основе алюминия. . . . . № 5

**Хромова Л. П., Коростелев В. Ф.** Формирование квазикристаллических структур в условиях наложения давления. . . . . № 6

**Чернега Н. В., Самойлович М. И., Белянин А. Ф., Кудрявцева А. Д., Клещева С. М.** Генерация электромагнитного и акустического излучений в наноструктурированных системах. . . . . № 4

**Чигирев П. М.** Методы получения графена для целей наноэлектроники. . . . . № 1

**Чигирев П. М.** Применение графена в электронной технике. . . . . № 2

**Шомахов З. В., Молоканов О. А., Кармоков А. В.** Электропроводность свинцово-силикатного стекла в процессах нагрева и изотермического отжига. . . . . № 7

**Штенников В. Н.** Влияние некоторых параметров паяльного инструмента на температуру пайки. . . . . № 4

**ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ**

**Адамов Ю. Ф., Братов А. В., Братов В. А., Грюншпан А. А., Горшкова Н. М., Сибатуллин А. Г.** Уни-

версальный приемник дифференциальных сигналов для программируемых микросхем. . . . . № 8

**Амеличев В. В., Годовицын И. В., Сайкин Д. А.** Перспективная технология изготовления высокочастотных кремниевых микромеханических резонаторов. . . . . № 4

**Амеличев В. В., Касаткин С. И., Поломошнов С. А., Решетников И. А., Тихонов Р. Д., Черемисников А. А., Шаманаев С. В.** Микросистема контроля двух компонент вектора магнитной индукции на основе наноразмерных магниторезистивных структур. . . . . № 12

**Аравин В. В., Вернер В. Д., Сауров А. Н., Мальцев П. П.** МЭМС высокого уровня — возможный путь развития МЭМС в России. . . . . № 6

**Афонин С. М.** Корректирующие устройства систем управления деформацией пьезоактюаторов нано- и микроперемещений. . . . . № 3

**Белкин М. Е., Лопарев А. В.** Оптоэлектронный генератор СВЧ сигналов: моделирование, исследование спектральных и шумовых характеристик. . . . . № 9

**Белозубов Е. М., Белозубова Н. Е.** Повышение временной стабильности датчиков давлений на основе тонкопленочных нано- и микроэлектромеханических систем. . . . . № 6

**Белозубов Е. М., Васильев В. А., Громков Н. В.** Совершенствование тонкопленочных нано- и микроэлектромеханических систем с идентичными тензоэлементами и датчиков давления на их основе. . . . . № 10

**Белозубова Н. Е.** Метод минимизации влияния нестационарных температур и виброускорений на датчики давлений на основе тонкопленочных нано- и микроэлектромеханических систем № 3

**Белостоцкая С. О., Кузнецов А. Е., Кузнецов Е. В., Рыбачек Е. Н., Чуйко О. В.** Использование кремниевых нанопроволочных структур в качестве биосенсоров. . . . . № 1

**Васильев В. А., Громков Н. В.** Датчики давления с частотным выходом на основе нано- и микроэлектромеханических систем, устойчивые к воздействию температур. . . . . № 9

**Войцеховский А. В., Несмелов С. Н., Кульчицкий Н. А., Мельников А. А.** МЭМС-детекторы инфракрасного диапазона. . . . . № 7

**Войцеховский А. В., Несмелов С. Н., Кульчицкий Н. А., Мельников А. А.** Неохлаждаемые микроболометры на основе поликристаллического SiGe для инфракрасного диапазона № 2

**Годовицын И. В., Амеличев В. В., Сауров А. Н., Гаврилов Р. О., Генералов С. С.** Миниатюрные тензорезистивные преобразователи давления: итоги двадцатипятилетия. . . . . № 7

**Громов Д. В., Матвеев Ю. А., Федоров Ю. В.** Влияние радиации на характеристики элементов на нитриде галлия. . . . . № 5

**Гусев Д. В., Данилова Н. Л., Панков В. В., Суханов В. С.** Микроэлектронные преобразователи давления для средств регулирования и мониторинга технологических процессов в энергосберегающих системах. . . . . № 3

Джашитов В. Э., Панкратов В. М. Суперминиатюрный микромеханический датчик инерциальной информации в условиях переменных и постоянных механических воздействий . . № 6

Джашитов В. Э., Панкратов В. М. Суперминиатюрный микромеханический датчик инерциальной информации в условиях тепловых воздействий . . . . . № 7

Драгунов В. П., Остертак Д. И. Архитектура и анализ схем МЭМ рекуператоров электрической энергии . . . . . № 4

Дудин А. А. Лазеры на квантовых точках . . . № 1

Казаков В. К., Образцов Р. М. К вопросу о критериях отбраковки пьезоблоков и пьезоактюаторов. № 10

Козин И. А., Постников А. В., Морозов О. В. Исследование динамики микроэлектромеханических устройств с нанесенной металлизацией . . . . . № 12

Королева В. А., Капустян А. В., Жуков А. А., Гоголинский К. В., Усеинов А. С. Оценка изгибной жесткости и деформации микроразмерных исполнительных элементов устройств микросистемной техники . . . . . № 1

Корпухин А. С., Бабаевский П. Г., Жуков А. А., Козлов Д. В., Смирнов И. П. Влияние условий формирования и толщины слоев на термомеханические характеристики полиимид-кремниевых упруго-шарнирных балок тепловых актюаторов. . . . . № 2

Лукьянов Д. П., Шевченко С. Ю., Кукаев А. С., Сафронов Д. В. Анализ концепций построения твердотельных микрогироскопов на поверхностных акустических волнах . . . . . № 7

Малышев К. В., Чернышев С. Л. Вольт-амперные характеристики фигурных AlGaAs свёрхрешеток. . . . . № 2

Мухуров Н. И., Ефремов Г. И., Жвавый С. П. Функциональные возможности электротоковых микрореле . . . . . № 3

Мухуров Н. И., Ефремов Г. И., Жвавый С. П. Эффект предварительного деформирования упругих элементов электростатических микрореле. Часть 1. Деформированный якорь . . . . . № 8

Мухуров Н. И., Ефремов Г. И., Жвавый С. П. Эффект предварительного деформирования упругих элементов электростатических микрореле. Часть 2. Деформированные держатели . . . № 9

Прокофьев И. В., Тихонов Р. Д. Нано- и микросистемы для мониторинга параметров движения транспортных средств . . . . . № 12

Сопильняк А. А., Фетисов Ю. К., Лебедев С. В., Сегала А. Г. Пьезоэлектрический резонансный датчик магнитного поля на основе планарной биморфной структуры с возбуждающей электромагнитной катушкой. . . . . № 11

Суханов В. С., Панков В. В., Годовицын И. В., Михайлов Ю. А., Данилова Н. Л., Земляников Н. С. Тензорезистивный кремниевый МЭМС-преобразователь давления мембранного типа. . . . . № 12

Тимошенков С. П., Плеханов В. Е., Анчутин С. А., Зарянкин Н. М., Рубчиц В. Г., Дернов И. С., Шилов В. Ф., Кочурина Е. С. Балансировка ре-

зонатора кольцевого микромеханического гироскопа. . . . . № 11

Уваров И. В., Морозов О. В., Козин И. А., Постников А. В., Амиров И. И., Кальнов В. А. Динамические характеристики чувствительного элемента микроакселерометра с повышенным фактором демпфирования. . . . . № 12

Уваров И. В., Наумов В. В., Аминов М. К., Курприянов А. Н., Амиров И. И. Исследование резонансных характеристик металлических микро- и нанобалок . . . . . № 12

Фетисов Ю. К., Чашин Д. В., Лебедев С. В., Сегала А. Г., Итальянцев А. Г., Горнев Е. С. Пьезоэлектрический датчик магнитного поля на основе планарной биморфной структуры с током. . № 4

Чуйко О. В., Кузнецов А. Е. Исследование кремниевых наноструктур в качестве рН-чувствительных элементов . . . . . № 12

## ПРИМЕНЕНИЕ МНСТ

Анчутин С. А., Максимов В. Н., Морозова Е. С., Головань А. С., Шилов В. Ф. Блок инерциальных датчиков . . . . . № 1

Раткин Л. С. Нано- и микросистемная техника для лазерной индустрии . . . . . № 10

Тимошенков С. П., Анчутин С. А., Морозова Е. С., Головань А. С., Шилов В. Ф. Разработка системы начальной выставки углового положения объекта на базе микромеханических акселерометров . . . . . № 9

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И БИОЭЛЕКТРОНИКА

Амеличев В. В., Гаврилов Р. О., Касаткин С. И., Резнев А. А., Решетников И. А., Сауров А. Н. Профилированный магниторезистивный микрочип биосенсорного устройства регистрации магнитных меток . . . . . № 12

Журавлева Л. М., Плеханов В. Г. Изотопэлектроника и квантовая информация . . . . . № 3

Леонтьев В. Л., Михайлов И. С. О построении потенциала взаимодействия атомов, основанном на ортогональных финитных функциях. . № 9

## СИСТЕМЫ НА КРИСТАЛЛЕ

Адамов Ю. Ф., Горшкова Н. М., Сибгатуллин А. Г., Сомов О. А. Адаптивная коррекция параметров функциональных блоков в системах на кристалле . . . . . № 6

Мальцев П. П., Матвеев О. С., Гнатюк Д. Л., Лисицкий А. П., Федоров Ю. В. Обзор реализации планарных встроенных антенн диапазона 5 ГГц с минимальным объемом . . . . . № 10

Мальцев П. П., Матвеев О. С., Гнатюк Д. Л., Лисицкий А. П., Федоров Ю. В. Направления развития антенн диапазона 5 ГГц с минимальным объемом . . . . . № 11

Мальцев П. П., Матвеев О. С., Гнатюк Д. Л., Лисицкий А. П., Федоров Ю. В. Обзор реализации встроенных антенн диапазона 5 ГГц с излучателем-монополюсом . . . . . № 9

Матвеев О. С., Гнатюк Д. Л., Галиев Р. Р. Интегрированные антенны на наногетероструктурах арсенида галлия . . . . . № 12

**Rathkeen L. S.** *Problems and Prospective of Russian Nanotechnological Development* . . . . . 2

The forth International nanotechnological forum was organized in Moscow 26—28, October 2011. On meetings were discussed the questions of nanotechnological development and producing of nanomaterials in Russia, investment in innovation nanotechnological projects and investigations for small and medium nanoindustrial enterprises.

**Keywords:** Russian academy of sciences, RAS, nanotechnologies, nanomaterials, innovations, investment, electronics, building, health care, pharmaceuticals, medicine, nanophotonics, energetic, machine building

**Glukhova O. E., Zhnichkov R. Y., Slepchenkov M. M.** *Program Complex for Nanoelectronics* . . . . . 5

The program-calculated complex is developed. The quantum-chemical method of tight-binding is the theoretical basis of this complex. The electronic spectrum of the compressed graphene nanoribbons are calculated by this complex. It is established that the compressed nanoribbons have improved emissive properties. One can investigate the atomic structure and properties of the polyatomic structures by the developed complex.

**Keywords:** nanoribbons, tight-binding method, electronic spectrum, parallel calculations, electronic density

**Ephimov V. V., Kalinin V. A., Likhosherst V. V., Matveev V. V., Raspopov V. Ya.** *Information and Analytical Support of Micromechanical Gyroscopes and Accelerometers Initial Design Stage* . . . . . 11

Examined information and analytical support of micromechanical gyroscopes and accelerometers design including classifications, basic structures and basic mathematical models.

**Keywords:** micromechanics, gyroscope, accelerometer, design, classification, basic construction diagrams, basic mathematical models

**Belahurau Y. A., Shukevich Ya. I., Barkaline V. V., Khatko V. V., Taratyn I. A.** *Finite Element Modelling Thermomechanical Properties of Nanoporosity Materials* . . . . . 18

Technique has been developed for definition of tensors of modules elasticity and heat conduction of nanoporosity materials on the basis simulation modeling standards experimental techniques by finite elements method. Dependences on the porosity have been calculated for indicated tensors for  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  and silicon. Influence of porosity on distribution of temperature into the structure of chemical sensor on basic  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  has been calculated.

**Keywords:** finite elements method, tensor of module elasticity, tensor of heat transfer, nanoporosity materials

**Pecherskaya Ye. A., Metalnikov A. M., Varenik Yu. A., Boboshko A. V.** *Method for Measuring the Current Switching and Dielectric Parameters of Ferroelectrics* . . . . . 24

The method of measurement of the dielectric parameters of ferroelectric materials, based on measuring the time dependence of the switching current through the scheme Sawyer — Tower is presented. The formulas for calculating the switching time, the resistance which characterizes the loss effect of energy loss in the spontaneous polarization, capacitance, polarization are considered.

**Keywords:** ferroelectric, spontaneous polarization, switching current, measurement method, the circuit Sawyer—Tower

**Bakhvalova T. N., Belkin M. E.** *Modeling of Photonic Cristal Demultiplexer* . . . . . 27

A model of spectral demultiplexer based on photonic crystal in integrated design is investigated. We used two-dimensional photonic crystal with square lattice formed by dielectric rods in air. Design of the demultiplexer based on the change in transverse dimensions of the waveguide channels and the introduction of additional defective rods of various radii inside the channels. Selection of geometric parameters of the model is based on the analysis of full photonic bandgap maps. The computations were carried out using the OptiFDTD 8 program of Optiwave Software.

**Keywords:** two-dimensional photonic crystal optical waveguide, demultiplexer, photonic bandgap

**Samoylovich M. I., Talis A. L.** *Crystalline Multiferroics and Symmetry Characteristics of the Magnetic Subsystems* . . . . . 31

Shown that the classical crystallography is not able to adequately display the symmetry of the multiferroics, whose structure is determined by the laws of the local approach. The examples of the manifestations of these laws and their physical implications are considered.

**Keywords:** MULTIFERROICS, a local approach, the electronic subsystem

**Akopyan V. A., Zakharov Yu. N., Matveev S. Yu., Panich A. A., Rozhkov E. V.** *Analysis of the Electro-Physical Characteristics Piezoceramics Different Composition Used for High Power Piezoelectric Generators* . . . . . 37

The results of experimental investigations of influence compression stress amplitudes on quantity of the piezoelectric constants and generated piezoelement charge have been presented. Most stability of the voltage output there is with piezoelement from piezoceramic processed compression technology, particularly with piezoceramic PKR-78. Amongst main parameters which characterized a stability of the output power piezo-generator have been reliable a piezoelectric constant  $d_{33}$  of the ferroelectric material.

**Keyword:** piezoceramic, piezoelectric constants, axial compression, output voltage, piezoelectric generators

**Belozubov E. M., Belozubova N. E., Vasil'ev V. A.** *The Vibration Proof Lead-to-Pad Bonds of Thin-Film Nano- and Microelectromechanical Systems (NaMEMS) and Pressure Sensors on the Base* . . . . . 42

The vibration proof lead-to-pad bonds of thin-film nano- and microelectromechanical systems (NaMEMS) and pressure sensors on the base is considered.

**Keywords:** thin-film nano- and microelectromechanical systems (NaMEMS), pressure sensor, vibration, temperature

**Ichkitidze L. P., Mironuk A. N.** *Topological Nanostructured Filmy Superconducting Transformer of Flux* . . . . 47

The object of study is a superconducting film flux transformer in the form of a square shaped loop with the tapering operative strip. The magnetosensitive film element based on the giant magnetoresistance effect is overlapped with the tapering operative strip of the flux transformer and is separated from the latter by an insulator film.

It is shown that the topological nanostructuring of the operative strip of the flux transformer increases its gain factor by one or more orders of magnitude, i.e. increases its efficiency, which leads to a significant growth of important parameters of a magnetic field sensor.

**Keywords:** superconducting thin film, sensor, magnetic field, magnetic flux transformer, topological nanostructuring

**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, Стромьинский пер., 4. Телефон редакции журнала (499) 269-5510. E-mail: nmst@novtex.ru  
Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства  
в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.  
Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.

Дизайнер Т. Н. Погорелова. Технический редактор Е. М. Патрушева. Корректор М. Г. Джавадян

Сдано в набор 20.11.2011. Подписано в печать 22.12.2011. Формат 60×88 1/8.

Усл. печ. л. 6,86. Заказ МС112. Цена договорная

Оригинал-макет ООО «Авансед солишнз».

Отпечатано в ООО «Авансед солишнз». 105120, г. Москва, ул. Нижняя Сыромятническая, д. 5/7, стр. 2, офис 2.