Том 18. № 10 🔶 2016

Издается с 1999 г.

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, в систему Российского индекса научного цитирования и реферируется в базах данных INSPEC, CAS и базе данных RSCI на платформе Web of Science

СОДЕРЖАНИЕ

Главный редактор

Мальцев П. П., д.т.н., проф.

Зам. гл. редактора

Лучинин В. В., д.т.н., проф. Шур М., д.ф.-м.н., проф. (США)

Редакционный совет:

Аристов В. В., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН Асеев А. Л., д.ф.-м.н., проф., акад. РАН Гапонов С. В., д.ф.-м.н., проф., акад. РАН Каляев И. А., д.т.н., проф., чл.-кор. РАН Квардаков В. В., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН Климов Д. М., д.т.н., проф., акад. РАН Ковальчук М. В., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН Нарайкин О. С., д.т.н., проф., чл.-кор. РАН Никитов С. А., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН Рыжий В. И., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН (Япония) Сауров А. Н., д.т.н., проф., чл.-кор. РАН Сигов А. С., д.ф.-м.н., проф., акад. РАН Чаплыгин Ю. А., д.т.н., проф., чл.-кор. РАН Шевченко В. Я., д.х.н., проф., акад. РАН Релакционная коллегия: Абрамов И. И., д.ф.-м.н., проф. (Беларусь) Агеев О. А., д.т.н., проф. Андреев А., к.ф.-м.н., (Великобритания) Андриевский Р. А., д.х.н., проф. Антонов Б. И. Астахов М. В., д.х.н., проф. Быков В. А., д.т.н., проф. Горнев Е. С., д.т.н., проф. Градецкий В. Г., д.т.н., проф. Кальнов В. А., к.т.н. Карякин А. А., д.х.н., проф. Колобов Ю. Р., д.т.н., проф. Кузин А. Ю., д.т.н., проф. Панич А. Е., д.т.н., проф. Петросянц К. О., д.т.н., проф. Петрунин В. Ф., д.ф.-м.н., проф. Пожела К., д.ф.-м.н. (Литва) Путилов А. В., д.т.н., проф. Телец В. А., д.т.н., проф. Тимошенков С. П., д.т.н., проф. Тодуа П. А., д.т.н., проф. Шубарев В. А., д.т.н., проф. Отв. секретарь Лысенко А. В. Релакция: Григорин-Рябова Е. В. Чугунова А. В. Учредитель: Издательство "Новые технологии"

элементы мнст

645

650

Аннотации на русском и английском языках с 1999 г. по настоящее время находятся в свободном доступе на сайте журнала (http://microsystems.ru; http://novtex.ru/nmst/) и научной электронной библиотеки (http://elibrary.ru). Электронные версии полнотекстовых статей расположены на сайте журнала: с 1999 по 2014 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: 107076 Москва, Стромынский пер., д. 4 e-mail: nmst@novtex.ru

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Леонтьев	В.	Л.,	Бул	іяр	ски	йС	•	в.,	П	ав	лоі	B	A.	А.	Pe	230F	ан	ICH	ы	e,	дe	тен	CT (opi	ыИ	
антенны	на	осно	ве	угл	epo	днь	IX	на	но	тру	бс	эκ,	yı	тру	то	зан	cpe	пл	ен	Ш	ых	Н	a	об	оих	
концах .									•				•		·		·	•								595

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Голиков А. В., Панкратов В. М., Панкратова Е. В. Тепловые процессы в бухте	
волоконно-оптического гироскопа на основе микроструктурированного опто-	
волокна с углеродными нанотрубками	604
Нидеккер Л. Г. Маршрут разработки библиотеки стандартных элементов	613

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Чуб Д. С., Фарберович О. В., Солдатов А. В. Динамика спинового кроссовера в молекулярных магнитах октаэтилпорфирина кобальта в терагерцевом 620

Сауров А. Н., Булярский С. В., Кондратьев П. К., Скворцов А. А., Павлов А. А., Милованов Р. А., Кицюк Е. П. Конструкция и технология изготовления тестовых кристаллов с композитными проводниками на основе углеродных 628

Павлов В. Ю., Павлов А. Ю. Технологии формирования сплавных и несплавных омических контактов к гетероструктурам на основе GaN. Обзор 635

Мальцев П. П., Федоров Ю. В., Гнатюк Д. Л., Матвеенко О. С., Путинцев Б. Г., Зуев А. В. Монолитная интегральная схема ГУН V-диапазона

Тимошенков В. П., Родионов Д. В., Хлыбов А. И., Мусаткин А. С., Вертянов Д. В. Исследования 3D CBЧ сборок на полиимидном шлейфе для систем в корпусе

© Издательство "Новые технологии", "Нано- и микросистемная техника", 2016

INTERDISCIPLINARY, SCIENTIFIC, TECHNIQUE AND PRODUCTION JOURNAL

Journal of NANOand MICROSYSTEM TECHNIQUE NANO- I MIKROSISTEMNAYA TEHNIKA

ISSN 1813-8586

Maltsev P. P., Dr. Sci. (Tech.), Prof. — CHIEF EDITOR Luchinin V. V., Dr. Sci. (Tech.), Prof. DEPUTY CHIEF EDITOR Shur M. S., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof. (USA) — DEPUTY CHIEF EDITOR

Editorial council:

Aristov V. V., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Aseev A. L., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Acad. RAS Chaplygin Ju. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof., Cor.-Mem. RAS Gaponov S. V., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Kaljaev I. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof., Cor.-Mem. RAS Klimov D. M., Dr. Sci. (Tech.), Prof., Acad. RAS Kovalchuk M. V., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Kvardakov V. V., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Narajkin O. S., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Nikitov S. A., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Ryzhii V. I. (Japan), Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Saurov A. N., Dr. Sci. (Tech.), Prof., Cor.-Mem. RAS Shevchenko V. Ya., Dr. Sci. (Chem.), Prof., Acad. RAS Sigov A. S., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Acad. RAS **Editorial board:** Abramov I. I. (Belorussia), Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof. Ageev O. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Andreev A. (UK), Cand. Sci. (Phys.-Math.), Prof. Andrievskii R. A., Dr. Sci. (Chem.), Prof. Antonov B. I. Astahov M. V., Dr. Sci. (Chem.), Prof. Bykov V. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Gornev E. S., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Gradetskiy V. G., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Kalnov V. A., Cand. Sci. (Tech.) Karjakin A. A., Dr. Sci. (Chem.), Prof. Kolobov Ju. R., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Kuzin A. U., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Panich A. E., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Petrosjants C. O., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Petrunin V. F., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof. Pozhela K.(Lithuania), Dr. Sci. (Phys.-Math.) Putilov A. V., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Shubarev V. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Telets V. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Timoshenkov S. P., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Todua P. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof.

Executive secretary:

Lysenko A. V.

Editorial staff:

Chugunova A. V. Grigorin-Ryabova E. V.

Our:

Web: www.microsistems.ru/eng; e-mail: nmst@novtex.ru

To subscribe, please contact with:

JSC "MK-Periodica": Tel: +7 (495) 672-7012 Fax: +7 (495) 306-3757 E-mail: import@periodicals.ru The Journal is included in the list of the Higher Attestation Commission of the Russian Federation, in the Russian system of science citation index, INSPEC data base, CAS data base and RSCI data base

Published since November 1999

CONTENTS

Vol. 18

No. 10

2016

NANOTECHNOLOGY AND SCANNING PROBE MICROSCOPY

Leontiev V. L., Bulyarsky S. V., Pavlov A. A. Resonant Detectors and Antennas Based on the Carbon Nanotubes, Resiliently Fixed at Both Ends

MODELLING AND DESIGNING OF MNST

SCIENCE OF MATERIALS AND TECHNOLOGICAL BASICS OF MNST

MICRO- AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

Maltsev P. P., Fedorov Yu. V., Gnatyuk D. L., Matveyenko O. S., Putintsev B. G., Zuyev A. V. Monolithic Integrated Circuit for VCO of V-band

Чанотехнологии и зондовая микроскопия Папотесноооду AND Scanning Probe Microscopy

УДК 537.874

В. Л. Леонтьев, д-р физ.-мат. наук, проф.,

Ульяновский государственный университет, г. Ульяновск, leontievvl@ulsu.ru, С. В. Булярский, д-р физ.-мат. наук, проф., нач. лаб., А. А. Павлов, канд. техн. наук, нач. отд., Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, bulyar2954@mail.ru

РЕЗОНАНСНЫЕ ДЕТЕКТОРЫ И АНТЕННЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, УПРУГО ЗАКРЕПЛЕННЫХ НА ОБОИХ КОНЦАХ

Поступила в редакцию 18.03.2016

Проведен анализ частот свободных колебаний системы двух углеродных нанотрубок, упруго закрепленных своими концами. Анализ учитывает поступательные и вращательные движения нанотрубок. Выявлены условия, при которых возникающий в системе резонанс плазмонных колебаний накладывается на резонанс поступательных и вращательных механических колебаний нанотрубок, что приводит к повышению чувствительности резонансного детектора и к увеличению чувствительности либо мощности излучения антенны. Предложены способы технической реализации упругих закреплений концов углеродных нанотрубок и связанные с этим новые модели резонансных детекторов и антенн.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, свободные колебания, антенны, резонанс

Введение

Развитие нанотехнологий в электронике постепенно охватило все аспекты создания систем на кристалле, в том числе и антенные системы. Научные работы последних лет показывают, что на основе нанотрубок могут создаваться антенны, интегрированные с детектором излучения. Такие антенны называют ректеннами. В работе [1] был предложен наноразмерный детектор, содержащий углеродную нанотрубку (УНТ). Подобные исследования на уровне электромеханических систем с небольшим конечным числом степеней свободы имеют большое значение для проектирования эффективных и рациональных наноразмерных конструкций, поскольку выявляют и учитывают их основные динамические характеристики. Результат работы [1] опирался только на механические свойства УНТ. Этот недостаток был выявлен и частично исправлен авторами работы [2]. Была рассмотрена модель резонансного наноразмерного терагерцового детектора, в котором используются не только свойства механического резонанса в двух параллельных УНТ, но и плазмонные резонансы, которые, как отмечалось в работах [3-5], возникают в этих УНТ. Была предложена конструкция

наноразмерного детектора, чувствительность которого существенно превышает чувствительность ранее известных детекторов. Однако в математической модели [2] механических колебаний отдельной УНТ, входящей в состав детектора, учитывается лишь одна степень свободы УНТ, отражающая только поступательное движение каждой из двух УНТ детектора. Такой подход не позволяет раскрыть всех свойств анализируемой системы. В работах [6-8] рассмотрены модели наноразмерных антенн, содержащих УНТ, и установлено, что увеличение амплитуды механических колебаний УНТ антенн оказывает значительное положительное влияние на улучшение качественных и количественных характеристик нанорадио. Чувствительность принимающей антенны зависит от амплитуды резонансных колебаний УНТ системы, вызванных модулированным внешним излучением, и возрастает в случае совместного резонанса поступательных и вращательных механических колебаний обеих УНТ антенны. Мощность излучающей антенны также увеличивается в случае совместного резонанса поступательных и вращательных колебаний УНТ антенны.

В настоящей работе исследуется конструкция детектора или антенны, содержащая две УНТ, в ис-

ходном состоянии параллельных друг другу. В отличие от работы [2], в которой каждая УНТ на одном конце жестко закреплена, а на другом конце свободна, во-первых, предлагается упругое закрепление УНТ на обоих концах, во-вторых, изучаются не только поступательные, но и вращательные движения нанотрубок. В этом случае возможно выполнение условий возникновения совместного резонанса не только плазмонных колебаний и вынужденных резонансных поступательных колебаний УНТ, но и вынужденных резонансных вращательных колебаний этих УНТ. На основе этой модели строится конструкция наноразмерного высокочувствительного детектора.

Модель передающей линии, образованной двумя параллельными УНТ

В работе рассматривается детектор на основе двух параллельных УНТ, которые в одном варианте детектора являются полностью однослойными, а в других вариантах детекторов — однослойными в большей своей части. Поэтому вслед за работой [2], а также на основании результатов теоретических исследований [14] и экспериментальных исследований [15], для описания плазмонных колебаний в каналах, образованных однослойными УНТ, используется теория жидкости Томонаги-Латтинжера (ЖТЛ), в рамках которой плазмонные колебания описываются математической моделью согласованных перемещений массивов электронов. Система дифференциальных уравнений такой математической модели плазмонных колебаний в передающей линии, предложенной в работе [16] и использованной в работе [2], имеет вид:

$$-\frac{\partial v}{\partial z} = L_{eff} \frac{\partial i}{\partial t} + R_{eff} i,$$
$$-\frac{\partial i}{\partial z} = C_E \frac{\partial v}{\partial t}, \qquad (1)$$

где v = v(z, t), i = i(z, t) — напряжение и сила тока в передающей линии;

$$L_{eff} = \frac{L_M + 2L_K}{1 + 2C_E/C_Q}; \quad R_{eff} = \frac{h}{4e^2 l_{m.f.p}(1 + 2C_E/C_Q)};$$

электростатическая емкость

$$C_E = \frac{\pi \varepsilon_0 \varepsilon}{\ln(W/2r_c)};$$

погонная магнитная индуктивность

$$L_M = \frac{\mu_0 \mu}{\pi} \ln(W/2r_c);$$

погонная кинетическая индуктивность

$$L_K = \frac{h}{8e^2v_F};$$

квантовая емкость

$$C_Q = \frac{8e^2}{hv_F};$$

 ε_0 и μ_0 — соответственно диэлектрическая и магнитная постоянные; ε и μ — соответственно диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, в которой находятся УНТ; W — расстояние между двумя УНТ; $l_{m,f,p}$ — длина свободного пробега; v_F — скорость Ферми; r_c — радиус УНТ.

В рамках предположений о гармонической зависимости от времени внешнего излучения и о малости деформаций УНТ с помощью этой модели на основе (1) в работе [2] получено выражение для амплитуды стоячей волны, возникающей в передающей линии, образованной двумя нанотрубками, в окрестности резонансной частоты Ω вынужденных плазмонных колебаний

$$V_0 - V_1 H(\omega),$$

где V_1 и ω — соответственно амплитуда и частота внешнего сигнала;

$$H(\omega) = Q/\sqrt{Q^2(1-\omega^2/\Omega^2)^2+\omega^2/\Omega^2}$$

— амплитудно-частотная характеристика (АЧХ); *Q* — добротность плазмонного осциллятора.

Модель свободных механических колебаний конструкции

Рассматривается детектор или антенна (рис. 1), состоящие из двух одинаковых однослойных УНТ, упруго закрепленных на своих концах и в недеформированном состоянии системы параллельных друг другу. Жесткости пружин попарно равны C_1 и C_2 , масса каждой УНТ равна *M*. К двум УНТ де-



Рис. 1. Электромеханическая схема детектора Fig. 1. Electromechanical circuit of detector



Рис. 2. Модель абсолютно жесткого стержня, который упруго закреплен на концах

Fig. 2. Model of a rigid rod which is elastically mounted at the ends

тектора приложено постоянное напряжение V_0 , а также гармонически изменяющееся напряжение с амплитудой V₁ и частотой ω, порождаемое внешним излучением. Механическая часть системы состоит из двух абсолютно жестких стержней, каждый из которых имеет массу М, сосредоточенную в точке, лежащей на оси стержня и находящейся на расстоянии l_1 от пружины с жесткостью C_1 и на расстоянии $l_2 = l - l_1$ от пружины с жесткостью C_2 . Момент инерции стержня J равен $M\rho^2$, где ρ радиус инерции. Каждый из стержней может совершать как поступательное движение вместе с центром масс, так и вращательное движение относительно него. Кинетическая и потенциальная энергии абсолютно жесткого стержня (рис. 2), имеющего две степени свободы и движущегося в плоскости, записываются соответственно в виде:

$$T = \frac{1}{2} M \left(\frac{dx(t)}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2} J \left(\frac{d\varphi(t)}{dt}\right)^2;$$
(2)

$$\Pi = \frac{1}{2} C_1 (x + l_1 \phi)^2 + \frac{1}{2} C_2 (x - l_2 \phi)^2, \qquad (3)$$

где x(t) — перемещение точки стержня, в которой сосредоточена его масса, в направлении, перпендикулярном исходному расположению оси стержня; $\varphi(t)$ — угол поворота стержня.

Система уравнений Лагранжа второго рода

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \Pi}{\partial x} = 0,$$
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{y}} \right) - \frac{\partial T}{\partial y} - \frac{\partial \Pi}{\partial y} = 0,$$

характеризующих свободные колебания стержня, записывается с учетом (2), (3) в виде

$$M\ddot{x} + C_1(x + l_1\phi) + C_2(x - l_2\phi) =$$

= $M\ddot{x} + (C_1 + C_2)x + (C_1l_1 - C_2l_2)\phi = 0,$ (4)

$$M\rho^{2}\ddot{\varphi} + C_{1}(x + l_{1}\varphi)l_{1} - C_{2}(x - l_{2}\varphi)l_{2} =$$

= $M\rho^{2}\ddot{\varphi} + (C_{1}l_{1} - C_{2}l_{2})x + (C_{1}l_{1}^{2} + C_{2}l_{2}^{2})\varphi = 0.(5)$

Эти уравнения в общем случае являются связанными друг с другом, и одна УНТ детектора характеризуется двумя частотами свободных колебаний. Однако в случае, когда

$$C_1 l_1 = C_2 l_2, (6)$$

из первого уравнения системы уходит слагаемое, содержащее $\varphi(t)$, а из второго уравнения — слагаемое, элементом которого является x(t). Уравнения становятся несвязанными. Однако спектр частот свободных колебаний отдельной УНТ детектора при этом будет содержать в общем случае две различные частоты свободных колебаний:

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{C_1 + C_2}{M}}, \quad \lambda_2 = \sqrt{\frac{C_1 l_1^2 + C_2 l_2^2}{M \rho^2}}.$$
 (7)

Если параметры УНТ детектора выбрать таким образом, чтобы выполнялось условие

$$l_1 l_2 = \rho^2, \tag{8}$$

то частота λ_1 свободных поступательных колебаний x(t) совпадет с частотой λ_2 свободных вращательных колебаний $\varphi(t)$, т.е.

$$\lambda_2 = \sqrt{\frac{(C_1 + C_2)l_1l_2}{M\rho^2}} = \sqrt{\frac{C_1 + C_2}{M}} = \lambda_1, \qquad (9)$$

что приведет к одновременной реализации вынужденных резонансных поступательных и вращательных колебаний. Чувствительность такого детектора возрастет.

Возможны различные способы выполнения условия (9) при конструировании детектора или антенны. В одном из них в состав детектора включены две параллельные в состоянии покоя однослойные УНТ, к каждой из которых присоединены по два компактных материальных элемента, имеющих массы M_1 и расположенных симметрично на расстояниях *а* относительно середины однослойной УНТ, для которой $l_1 = l_2$ (рис. 3).

Суммарная масса УНТ и двух дополнительных компактных тел равна $(M + 2M_1)$, их момент инерции относительно оси, проходящей через середи-



Рис. 3. Модель стержня с отягощениями, который упруго закреплен на концах Fig. 3. Model of a rod with weights, which is elastically fixed at the ends

НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 18, № 10, 2016



Рис. 4. Модель стержня с дополнительными грузами на концах *Fig. 4. Model of a rod with additional weights on the ends*

ну УНТ, равен ($Ml^2/12 + 2M_1a^2$). Уравнения Лагранжа, описывающие свободные колебания УНТ, совмещенной с двумя компактными телами, имеют вид

$$(M + 2M_1)\ddot{x} + (C_1 + C_2)x + + (C_1l_1 - C_2l_2)\varphi = 0;$$
(10)

$$(Ml^2/12 + 2M_1a^2)\rho^2\ddot{\varphi} + (C_1l_1 - C_2l_2)x + + (C_1l_1^2 + C_2l_2^2)\varphi = 0$$
(11)

и дают условия

$$C_1 l_1 = C_2 l_2, \quad \frac{C_1 + C_2}{M + 2M_1} = \frac{(C_1 + C_2)l_1 l_2}{M l^2 / 12 + 2M_1 a^2},$$
 (12)

при выполнении которых частоты свободных поступательных и вращательных колебаний будут совпадать. Второе условие (12), принимающее в случае $l_1 = l_2 = l/2$ вид

$$\frac{M_1}{M} = \frac{l^2/6}{2a^2 - l^2/2},$$
(13)

накладывает на параметр *a* ограничение a > l/2. Пусть a = l/2 + l/100 = 51l/100, т.е. компактные тела присоединяются к УНТ на ее концах (рис. 4). В этом случае

$$\frac{M_1}{M} = \frac{2500}{303}$$

Модель вынужденных электромеханических колебаний конструкции

Погонная пондеромоторная сила, возникающая в каждой из двух УНТ детектора или антенны под влиянием внешнего излучения, характеризуется выражением [2]

$$f(z, t) = -\frac{dC_E}{dW} \frac{V^2(z)}{4} \left(1 + 2\alpha_m \cos\omega_m t + \frac{\alpha_m}{2}\right), \quad (14)$$

где ω — несущая частота внешнего сигнала $V(z, t) = V(z)\cos\omega t(1 + \alpha_m \cos\omega_m t); \omega_m, \alpha_m$ — соответственно частота и глубина его модуляции.

Уравнения вынужденных колебаний УНТ конструкции, вызванных внешним излучением (14), с учетом диссипации имеют следующий вид:

$$\ddot{x} + 2\gamma_{x}\dot{x} + \lambda_{1}^{2}x = \frac{\alpha_{m}V_{0}^{2}l}{4(M+2M_{1})}\frac{dC_{E}}{dW}\cos\omega_{m}t; \quad (15)$$

$$\ddot{\varphi} + 2\gamma_{\varphi}\dot{\varphi} + \lambda_2^2 \varphi = \frac{\mu[f(z,t)]}{(Ml^2/12 + 2M_1a^2)\rho^2}, \quad (16)$$

где γ_x , γ_{ϕ} — коэффициенты затухания механических поступательных и вращательных колебаний; $\mu[f(z, t)]$ — момент пондеромоторных сил относительно оси, проходящей через точку расположения сосредоточенной массы M, который вычисляется с учетом зависимости W от координаты, отсчитываемой вдоль продольной оси УНТ.

В случае $\omega_m = \lambda_1 = \lambda_2$ возникнут резонансные механические поступательные и вращательные колебания обеих УНТ. Если при этом несущая частота ω внешнего сигнала совпадает с Ω , то эти механические колебания совмещаются с резонансными плазмонными колебаниями, и в результате чувствительность детектора, зависящая от амплитуды механических колебаний двух УНТ, возрастает. Это является следствием следующих обстоятельств. Чувствительность детектора определяется формулой [2]

$$R = \frac{\Delta J}{P_{\omega}},\tag{17}$$

в которой P_{ω} — мощность излучения, принимаемого детектором; ΔJ — амплитуда тока в цепи детектора, зависящая от амплитуды Δx механических колебаний УНТ [2].

Амплитуда суммарных механических колебаний пропорциональна квадрату амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) $H(\omega)$ плазмонного резонатора, а также пропорциональна АЧХ $H_x(\omega_m)$ механических поступательных колебаний УНТ и АЧХ $H_{\varphi}(\omega_m)$ механических вращательных колебаний УНТ. Следовательно, амплитуда суммарных механических колебаний системы двух УНТ на их совместном электромеханическом резонансе пропорциональна Q^2 — квадрату добротности плазмонного резонатора, а также Q_x — добротности механического поступательного резонатора и Q_{φ} — добротности механического вращательного резонатора, т.е.

$$\Delta x \propto H^2(\omega) H_x(\omega_m) H_{\varphi}(\omega_m) \propto Q^2 Q_x Q_{\varphi}.$$
 (18)

Таким образом, увеличение амплитуды механических колебаний (18) при совпадении низших частот несвязанных поступательных и вращательных свободных колебаний ведет к значительному возрастанию чувствительности (17) детектора. Действительно, пусть расстояние между двумя параллельными в исходном положении УНТ равно 10 нм, длина каждой УНТ равна 500 нм, радиус УНТ равен 1 нм и амплитуда поступательного движения каждой УНТ составляет порядка 2 нм. Тогда вращательные колебания УНТ при малом угле их поворота порядка 0,5° дадут дополнительные линейные перемещения концов каждой УНТ порядка 2,2 нм, что вместе с поступательным перемещением УНТ выводит систему почти на предельно допустимые суммарные перемещения двух УНТ, не приводящие к их контакту.

Технические реализации упругих закреплений концов УНТ

Предлагаемое в работе упругое закрепление (защемление) первого типа является развитием применяемого в существующих технических устройствах жесткого закрепления концов УНТ. Ни одна техническая реализация так называемого жесткого закрепления в действительности не дает идеальной жесткой фиксации концов УНТ как по их линейным перемещениям, так и по их поворотам относительно координатных осей. Твердая деформируемая связь, которая является внешней по отношению к УНТ и называется жестким закреплением, всегда обладает некоторой упругостью как за счет упругости стенки, в которой закрепляется конец УНТ, так и за счет деформационной упругости закрепленного конца самой УНТ. Таким образом, любое жесткое закрепление в некоторой степени обладает свойствами упругого закрепления и, следовательно, практические реализации упругого закрепления существуют. Увеличение степени упругости связи приближает реальное жесткое закрепление по его свойствам к идеальному упругому закреплению, при этом обеспечивается прочность связи за счет сохранения некоторых свойств "жесткого закрепления". Для ослабления свойства жесткости внешней связи и для усиления свойства ее упругости предлагается в цилиндрической полости стенки вырастить двухстенную нанотрубку и удалить ее внешнюю стенку.

Заключение

В данной работе показано возможное направление дальнейшего совершенствования наноразмерных детекторов и антенн, основанное на использовании упругих закреплений концов УНТ и на анализе спектра частот свободных механических колебаний наноразмерных конструкций. Предложен способ технической реализации упругого закрепления конца УНТ. За счет конструктивных изменений детектора или антенны, путем введения дополнительных масс можно реализовать условия (6)—(9) одновременного резонанса поступательных и вращательных колебаний (4), (5), (10), (11), (15), (16). Такая модернизация конструкции приводит к изменению спектра колебаний и повышению добротности электромеханических осцилляторов. Приведенный пример конструкции показывает возрастание чувствительности детектора или принимающей антенны в случае внешнего излучения, а также возрастание мощности в случае излучающей антенны.

Выполнение условий (6)—(9), (12), (13) может быть достигнуто не только включением в конструкцию компактных тел, но и использованием многослойных УНТ, слои которых расположены неравномерно вдоль оси каждой нанотрубки. Многослойность должна проявляться ближе к обоим концам УНТ, причем число слоев должно возрастать по мере приближения к концу трубки. Увеличение неравномерной погонной массы такой УНТ сделает значение момента инерции УНТ настолько большим, что выполнение второго условия (12) будет обеспечено.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственной поддержки научных исследований.

Список литературы

1. Leiman V. G., Ryzhii M., Satou A., Ryabova N., Rygii V., Otsuji T., Shur M. S. Analysis of resonant detection of terahertz radiation in high-electron mobility transistor with a nanos-tring/carbon nanotube as the mechanically floating gate // J. Appl. Phys. 2008. Vol. 104. P. 024514.

2. Стебунов Ю. В., Лейман В. Г., Арсенин А. В., Гладун А. Д., Рыжий В. И. Резонансный детектор модулированного излучения терагерцового диапазона на основе углеродных нанотрубок // Журнал технической физики. 2012. Том 82, вып. 1. С. 67—72.

3. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A., Lakhtakia A., Yevtushenko O., Gusakov A. V. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136.

4. Burke P. J., Li S., Yu Z. Quantitative theory of nanowire and nanotube antenna performance // IEEE. Trans. On Nanotech. 2006. Vol. 5. P. 314–334.

5. **Maffucci A., Miano G., Villone F.** A transmission line model for metallic carbon nanotube interconnects // Int. J. Circ. Theor. Appl. 2008. Vol. 36. P. 17136.

6. **Pugno N.** Tunneling Current—Voltage Controls, Oscillations, and Instability of Nanotube- and Nanowire-Based Nanoelectromechanical Systems // Glass Physics and Chemistry. 2005. Vol. 31. N. 4. P. 535.

7. Jensen K., Weldon J., Garcia H., Zettl A. Nanotube Radio // Nano Letters. 2007. Vol. 7, N. 11. P. 3508–3511.

8. Wang Y., Wu Q., Shi W., He X., Sun X., Gui T. Radiation Properties of Carbon Nanotubes Antenna at Terahertz/Infrared Range // Int. J. Infrared Milli Waves. 2008. Vol. 29. P. 35–42.

9. Firouz-Abadi R. D., Fotouhi M. M., Permoon M. R., Haddadpour H. Natural frequencies and buckling of pressurized nanotubes using shear deformable nonlocal shell model // J. Mechanical Science and Technology. 2012. Vol. 26 (2). P. 563–573.

10. Михайлов И. С., Леонтьев В. Л. Математическое моделирование нанообъектов, связанное с теорией анизотропных оболочек // Труды Х Международной конф. "Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы", 25—28 августа 2008 г., Ульяновск: УлГУ, С. 11.

11. Ghorbanpour Arani A., Rahnama Mobaraken M., Shams Sh., Mohammadimehr M. The effect of CNT volume fraction on the magneto-thermo-electro-mechanical behavior of smart nanocomposite cylinder // J. Mechanical Science and Technology. 2012. Vol. 26 (8). P. 2565–2572.

12. Georgantzinos S. K., Giannopoulos G. I., Anifantis N. K. An efficient numerical model for vibration analysis of singlewalled carbon nanotubes // Comput. Mech. 2009. Vol. 43. P. 731–741.

13. **Михайлов И. С., Леонтьев В. Л.** О построении потенциала взаимодействия атомов, основанном на ортогональных финитных функциях // Нано- и микросистемная техника. 2011. № 9. С. 48—50.

14. **Bockrath M. W.** Carbon nanotubes: electrons in one dimension Berkeley, Ph. D. Dissertation, 1990. 131 p.

15. Ishii H., Kataura H., Shiozawa H., Yoshioka H., Otsubo H., Takayama Y., Miyahara T., Suzuki S., Achiba Y., Nakatake M., Narimura T., Higaahiguchi M., Shimada K., Namatame H., Taniguchi M. Direct observation of Tomonaga— Luttinger-liquid state in carbon nanotubes at low temperatures // Nature. 2003. Vol. 426. P. 540—544.

16. **Burke P. J.** Luttinger liquid theory as a model of the gigahertz electrical properties of carbon nanotubes // IEEE. Trans. On Nanotech. 2002. Vol. 1. P. 129–144.

17. **Geblinger N., Ismach A., Joselevich E.** Self-organized nanotube serpentines // Nature Nanotechnology. 2008. Vol. 3. P. 195–200.

18. Wang F., Deng K.-J., Zhou L., Zhao J.-B., Ke X.-H., Wen L.-L. Improving the Degree of Functionalization and Solubility of Single-Walled Carbon Nanotubes via Covalent Multiple Functionalization // J. Inorg. Organomet. Polym. and Materials. 2012. Vol. 22. P. 1182–1188.

19. Beheshtian J., Peyghan A. A., Bagheri Z. Carbon nanotube functionalization with carboxylic derivatives: a DFT study // J. Mol. Model. 2013. Vol. 19. P. 391–396.

V. L. Leontiev, D. Sc., Professor, leontievvl@ulsu.ru Ulyanovsk State University, Ulyanovsk,

S. V. Bulyarsky, D. Sc., Professor, Head of Laboratory, **A. A. Pavlov**, PhD., Head of Department, Institute of Nanotechnologies for Microelectronics, RAS, bulyar2954@mail.ru

Resonant Detectors and Antennas Based on the Carbon Nanotubes, Resiliently Fixed at Both Ends

The authors analyzed the system of two carbon nanotubes, resiliently fixed by their ends with account of the fact that the carbon nanotubes can perform the onward and rotational movements. The conditions were revealed, in which the resonance of the plasmon oscillations, arising in the system, coincided with the onward and rotational mechanical vibrations of the nanotubes, resulting in a higher sensitivity of the resonance detector or an increase of the radiation power of the antenna. The authors propose methods for technical realization of a resilient fixation of the ends of the carbon nanotubes and related new models of the resonant detectors and antennas.

Keywords: carbon nanotubes, free oscillations, antenna resonance

Introduction

Development of nanotechnology in electronics gradually spread to all aspects of systems-on-chip, including the antenna systems. The works show that the antenna integrated with a radiation detector can be created on the basis of nanotubes. Such antennas are called rectennas. A nanoscale detector with carbon nanotube (CNT) is offered in [1]. Similar studies on the level of electromechanical systems with small finite number of degrees of freedom are of great importance for the design of effective and efficient nanoscale structures, as they identify and address their basic dynamic performance. The result of work [1] relied only with special mechanical properties of CNTs. This deficiency was partially identified and corrected in [2]. A model of the nano-sized terahertz resonant detector, in which the properties of the mechanical resonance in two parallel CNTs and plasmon resonances are used, which, as noted in [3-5], occur in the CNT. The design of a nano-sized detector whose sensitivity is significantly over the sensitive in prior art detectors is offered. However, in the mathematical model [2] of the mechanical vibrations of a separate CNT embedded in the detector, a degree of freedom of the CNT, which reflects only the forward movement of each of the two CNT detector is taken into account. This approach

did not reveal all the properties of the system being analyzed. In [6-8], the models of nanoscale antennas containing CNTs are reviewed and it found that an increase in the amplitude of the mechanical vibrations of the nanotube antenna has a significant positive impact on the improvement of qualitative and quantitative characteristics of nano-radio. The sensitivity of the receiving antenna depends on the amplitude of the resonance vibrations of CNT system caused by the modulation by external radiation, and increases in the case of co-translational and rotational resonance of mechanical oscillations of both CNTs of the antenna. Power of the irradiating antenna also increases in the case of co-translational and rotational resonance vibrations of CNT of the antenna.

The design of the detector or the antenna comprising of two nanotubes in the initial state parallel to each other is studied in this paper. In contrast to [2], in which each nanotube at one end is rigidly fixed and at the other end is free, the elastic fastening of CNTs at both ends is offered. Not only translational movement but also rotational nanotubes are studied there. You may see joint resonance not only plasmon oscillations and forced resonant translational vibrations of CNTs, but also forced resonant rotational vibrations of CNTs. The design of the nano-sized high-sensitivity detector is based on the model.

Model of the transmission line formed by two parallel CNTs

The detector on the basis of two parallel CNTs that are in one version are entirely single layer, and in other versions of the detectors are single layered in most of the versions, is studied in this paper. Therefore, following [2], as well as on the basis of theoretical [14] and experimental studies [15], the liquid theory of Tomonaga-Luttinger (LTL) is used for description of the plasmon oscillations in the channels formed by single-walled CNTs, in which the plasmon oscillations are described by the model of agreed movements of electrons' sets. The system of differential equations of such mathematical model of the plasmon oscillations in the transmission line, proposed in [16] and used in [2], is as follows:

$$-\frac{\partial v}{\partial z} = L_{eff} \frac{\partial i}{\partial t} + R_{eff} i, \quad -\frac{\partial i}{\partial z} = C_E \frac{\partial v}{\partial t}, \quad (1)$$

where v = v(z, t), i = i(z, t) — voltage and current in the transmission line;

$$L_{eff} = \frac{L_M + 2L_K}{1 + 2C_E/C_Q}; \quad R_{eff} = \frac{h}{4e^2 l_{m.f.p}(1 + 2C_E/C_Q)};$$

electrostatic capacitance

$$C_E = \frac{\pi \varepsilon_0 \varepsilon}{\ln(W/2r_c)};$$

magnetic inductance per unit length

$$L_M = \frac{\mu_0 \mu}{\pi} \ln(W/2r_c)$$

kinetic inductance per unit length

$$L_K = \frac{h}{8e^2 v_F};$$

quantum capacitance

$$C_Q = \frac{8e^2}{hv_F};$$

 ε_0 and μ_0 — dielectric and magnetic constants; ε and μ — dielectric and magnetic permeability of the medium in which the CNTs are placed; W — the distance between two CNTs; $l_{m,f,p}$ — free path; v_F — Fermi's velocity; r_c — radius of the CNT.

The expression for the standing wave amplitude that occurs in the transmission line formed by two nanotubes, in the vicinity of the resonance frequency Ω of forced plasmon oscillations was obtained by means of this model on the basis of (1) in work [2] as a part of the assumptions about the harmonic function of the time of external radiation and the smallness of the nanotube deformations:

$$V_0 - V_1 H(\omega),$$

where V_1 and ω — the amplitude and frequency of the external signal, respectively;

$$H(\omega) = Q/\sqrt{Q^2(1-\omega^2/\Omega^2)^2+\omega^2/\Omega^2}$$

— amplitude-frequency response; Q — plasmon oscillator quality factor.

Model of free mechanical oscillations of construction design

The detector or antenna (fig. 1) of two identical singlewalled CNTs are considered, resiliently mounted on their ends and parallel to each other in the undeformed state of the system. The spring constant are mutually equal C_1 and C_2 , the mass of each CNT is equal to M. The DC voltage V_0 and harmonic varying voltage with an amplitude V_1 and frequency ω generated by external radiation are applied on two CNTs of the detector. The mechanical part of the system consists of two absolutely rigid rods, each of them has a mass M centered at a point lying on the axis of the rod and situated at a distance l_1 from the spring with stiffness C_1 and at a distance $l_2 = l - l_1$ from the spring with stiffness C_2 . The moment of inertia of the rod J is equal to $M\rho^2$, where ρ — the radius of gyration. Each rod can perform a translational motion jointly with the center of mass and rotational movement relative thereto. The kinetic and potential energy of a rigid rod (fig. 2) having two degrees of freedom and moving in the plane, can be written as:

$$T = \frac{1}{2} M \left(\frac{dx(t)}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2} J \left(\frac{d\varphi(t)}{dt}\right)^2;$$
(2)

$$\Pi = \frac{1}{2} C_1 (x + l_1 \phi)^2 + \frac{1}{2} C_2 (x - l_2 \phi)^2, \qquad (3)$$

where x(t) — movement of the point of the rod, which focuses its mass, in the direction perpendicular to the axis of the rod to the original location; $\varphi(t)$ — angle of rotation of the rod.

Lagrange equations system of the second kind

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \Pi}{\partial x} = 0;$$
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial T}{\partial \varphi} - \frac{\partial \Pi}{\partial \varphi} = 0,$$

characterizing the free oscillations of the rod, can be written taking into account (2), (3) in the form

$$M\ddot{x} + C_1(x + l_1\phi) + C_2(x - l_2\phi) =$$

= $M\ddot{x} + (C_1 + C_2)x + (C_1l_1 - C_2l_2)\phi = 0,$ (4)

$$M\rho^{2}\phi + C_{1}(x + l_{1}\phi)l_{1} - C_{2}(x - l_{2}\phi)l_{2} =$$

= $M\rho^{2}\ddot{\phi} + (C_{1}l_{1} - C_{2}l_{2})x + (C_{1}l_{1}^{2} + C_{2}l_{2}^{2})\phi = 0.$ (5)

The equations in the general case are related to each other, and one detector's CNT is characterized by two frequencies of free oscillations. However, when

$$C_1 l_1 = C_2 l_2, (6)$$

from the first equation of the system leaves the term containing $\varphi(t)$, and from the second equation — the term, which element is x(t). The equations become unrelated. However, the spectrum of frequencies of free oscillations of a single detector's of CNT will in general contain two different frequencies of free oscillations

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{C_1 + C_2}{M}}, \quad \lambda_2 = \sqrt{\frac{C_1 l_1^2 + C_2 l_2^2}{M\rho^2}}.$$
 (7)

601

If the parameters of detector's CNT satisfy the condition should be

$$l_1 l_2 = \rho^2, \tag{8}$$

the frequency of free translational vibrations x(t) coincide with the frequency λ_2 of the free rotational oscillations $\varphi(t)$, i.e.,

$$\lambda_2 = \sqrt{\frac{(C_1 + C_2)l_1l_2}{M\rho^2}} = \sqrt{\frac{C_1 + C_2}{M}} = \lambda_1, \tag{9}$$

which will lead to the simultaneous implementation of forced resonant and translational rotational vibrations. The sensitivity of the detector increases.

Various methods for satisfaction of the condition (9) in the design of the detector or antenna are available. In one, the detector includes two parallel quiescent single-walled CNTs, each of which have two attached compact material elements having a mass M_1 and arranged symmetrically at distances *a* relative to the middle of a single-walled CNT, for which $l_1 = l_2$ (fig. 3).

The total mass of the CNT and two additional compact bodies is $(M + 2M_1)$, their moment of inertia about the axis passing through the middle of the CNT is equal to $(Ml^2/12 + 2M_1a^2)$. Lagrange equations describing free oscillations of the nanotube, combined with two compact bodies, have the form

$$(M+2M_1)\ddot{x} + (C_1 + C_2)x + (C_1l_1 - C_2l_2)\phi = 0; \quad (10)$$

$$(Ml^2/12 + 2M_1a^2)\rho^2\ddot{\varphi} + (C_1l_1 - C_2l_2)x + + (C_1l_1^2 + C_2l_2^2)\varphi = 0$$
(11)

and give conditions

$$C_1 l_1 = C_2 l_2, \quad \frac{C_1 + C_2}{M + 2M_1} = \frac{(C_1 + C_2)l_1 l_2}{M l^2 / 12 + 2M_1 a^2},$$
 (12)

under which the frequencies of the translational and rotational vibrations are the same. The second condition (12), in the case of $l_1 = l_2 = l/2$ having the form

$$\frac{M_1}{M} = \frac{l^2/6}{2a^2 - l^2/2},$$
(13)

imposes restriction a > l/2 on a. Suppose a = l/2 + l/100 = 51l/100, that the compact bodies are attached to CNT at its ends (fig. 4). In this case

$$\frac{M_1}{M} = \frac{2500}{303}$$

Model of forced electromechanical oscillations of construction design

Ponderomotive per unit length force in each of the two detector's or antenna's CNTs under the influence of external radiation is characterized by the expression [2]

$$f(z, t) = -\frac{dC_E}{dW} \frac{V^2(z)}{4} \left(1 + 2\alpha_m \cos \omega_m t + \frac{\alpha_m}{2}\right), \qquad (14)$$

where ω – carrier frequency of an external signal

 $V(z, t) = V(z)\cos\omega t(1 + \alpha_m \cos\omega_m t);$

 ω_m , α_m – frequency and depth of its modulation.

The equations of forced oscillations of nanotube's structure caused by external radiation (14), taking into account the dissipations are as follows:

$$\ddot{x} + 2\gamma_{X}\dot{x} + \lambda_{1}^{2}x = \frac{\alpha_{m}V_{0}^{2}l}{4(M+2M_{1})}\frac{dC_{E}}{dW}\cos\omega_{m}t;$$
 (15)

$$\ddot{\varphi} + 2\gamma_{\varphi}\dot{\varphi} + \lambda_2^2 \varphi = \frac{\mu[f(z,t)]}{(Ml^2/12 + 2M_1a^2)\rho^2},$$
 (16)

where γ_x , γ_{ϕ} — the attenuation coefficients of the mechanical translational and rotational vibrations; $\mu[f(z, t)]$ — moment of ponderomotive forces with respect to the axis passing through the location of the point of the concentrated mass M, which is calculated taking into account dependency W on the coordinate measured along the longitudinal axis of the nanotube.

In the case of $\omega_m = \lambda_1 = \lambda_2$, the mechanical resonance and translational rotational vibrations of both CNTs occur. If the carrier frequency ω of an external signal coincides with Ω , the mechanical vibrations combine with resonant plasmon oscillations, and the sensitivity of the detector, which depends on the amplitude of the mechanical vibrations of two CNTs, increases. This is due to the following circumstances. The sensitivity of the detector is determined by the formula [2]:

$$R = \frac{\Delta J}{P_{\omega}},\tag{17}$$

where P_{ω} — power of radiation received by the detector, ΔJ — amplitude of the current in the detector circuit, which depends on the amplitude Δx of CNT's mechanical oscillations [2].

The amplitude of the total mechanical oscillations is proportional to the square of the amplitude-frequency characteristic (AFC) $H(\omega)$ of the plasmon resonator and also is proportional to AFC $H_x(\omega_m)$ of the translational mechanical oscillations of the nanotube and to AFC $H_{\varphi}(\omega_m)$ of the rotational mechanical oscillations of the nanotube. Consequently, the total amplitude of mechanical oscillations of a system of two CNT at their joint electromechanical resonance is proportional to Q^2 — the square of the quality factor of plasmonic resonator, as well as to Q_x — quality factor of mechanical progressive resonator and Q_{φ} — quality factor of mechanical rotary resonator, i.e.

$$\Delta x \propto H^2(\omega) H_x(\omega_m) H_{\varphi}(\omega_m) \propto Q^2 Q_x Q_{\varphi}.$$
 (18)

Thus, increase in the amplitude of mechanical oscillations (18) at the coincidence of the lower frequencies of unbound translational and rotational free oscillations leads to higher sensitivity (17) of the detector. Let the distance between two CNTs parallel in the rest position is 10 nm, the length of each CNT is equal to 500 nm, the radius is 1 nm and the amplitude of the translational motion of each CNT is about 2 nm. Then the rotational oscillations of CNT with a small angle of rotation of the order of $0,5^{\circ}$ give additional linear displacement of the ends of each CNT for about 2,2 nm, which jointly with the translational movement of the CNT puts the system almost on the maximum allowable total movements of two CNTs that do not lead to their contact.

602 —

Technical implementation of the elastic fixings of CNT's ends

The proposed elastic fixing (jamming) of the first type is the development of the rigid fixing of the ends of a nanotube used in technical devices. Neither the implementation of the rigid fixing reality does not provide an ideal rigid fixation of the ends of a CNT in their linear movement and rotation about their axes. Solid deformable bond, which is external to the CNT and called rigid fixation, always has a certain elasticity due to the elasticity of a wall, the end of the CNT is fixed, and the elastic deformation of CNT's fixed end. Thus, any rigid fixing in some extent has the properties of an elastic fixing and the practical implementation of the elastic fixing also exists. Increasing the degree of elasticity of the bond brings properties of the real hard fixing to the ideal elastic fixing, while ensuring bonding strength due to the conservation of certain properties of "hard fixing". To loosen the stiffness properties of the external bond and to enhance its elasticity, it is offered to grow double-walled nanotube and remove its outer wall in the cylindrical cavity of the wall.

Conclusion

The paper shows a possible further improvement of nanoscale sensors and antennas, based on the use of elastic fixings of CNTs ends on an analysis of the frequency spectrum of free mechanical oscillations of the nanoscale structures. A method for implementing of elastic fixing of the ends of a nanotube is offered. The conditions (6)-(9) of the simultaneous resonance of translational and rotational oscillations (4), (5), (10), (11), (15), (16) can realized due to the structural changes of detector or antenna and introduction of the additional mass. This upgrade results in a change of the oscillation spectrum and increase of the quality factor of the electromechanical oscillators. The example of the structure design shows a sensitivity increase of the detector or receiving antenna in the case of external radiation, and also an increase in power in the case of the radiating antenna.

The fulfilment of conditions (6)—(9), (12), (13) can be achieved not only by including of the compact bodies in the structure design, but also by the use of multi-walled nanotubes, which walls are arranged irregularly along the axis of each nanotube. It should appear closer to both ends of a nanotube, where the number of layers should increase as we approach the end of the tube. The increase in non-uniform mass per unit length of such CNT makes the torque of inertia of CNT so high, that the fulfillment of the second condition (12) will be ensured.

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of the State support of scientific research.

References

1. Leiman V. G., Ryzhii M., Satou A., Ryabova N., Rygii V., Otsuji T., Shur M. S. Analysis of resonant detection of terahertz radiation in high-electron mobility transistor with a nanos-tring/carbon nanotube as the mechanically floating gate, *J. Appl. Phys*, 2008, vol. 104, pp. 024514.

2. Stebunov Yu. V., Leyman V. G., Arsenyn A. D., Gladun A. D., Riygyiy V. I. Rezonansnyi detector modulirovannogo izlucheniaya Tetragerchovogo diapazona na osnove uglerodnysh nanotrubok, *Zhurnal technicheckoy Phyzici*, 2012, vol. 82, is. 1, pp. 67–72.

3. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A., Lakhtakia A., Yevtushenko O., Gusakov A. V. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation, *Phys. Rev. B.*, 1999, vol. 60, pp. 17136.

4. Burke P. J., Li S., Yu Z. Quantitative theory of nanowire and nanotube antenna performance, *IEEE. Trans. On Nanotech*, 2006, vol. 5, pp. 314–334.

5. Maffucci A., Miano G., Villone F. A transmission line model for metallic carbon nanotube interconnects, *Int. J. Circ. Theor. Appl.*, 2008, vol. 36, pp. 17136.

6. **Pugno N.** Tunneling Current–Voltage Controls, Oscillations, and Instability of Nanotube- and Nanowire-Based Nanoelectromechanical Systems, *Glass Physics and Chemistry*, 2005, vol. 31, no. 4, p. 535.

7. Jensen K., Weldon J., Garcia H., Zettl A. Nanotube Radio, *Nano Letters*, 2007, vol. 7, no. 11, pp. 3508–3511.

8. Wang Y., Wu Q., Shi W., He X., Sun X., Gui T. Radiation Properties of Carbon Nanotubes Antenna at Terahertz/Infrared Range, *Int. J. Infrared Milli Waves*, 2008, vol. 29, pp. 35–42.

9. Firouz-Abadi R. D., Fotouhi M. M., Permoon M. R., Haddadpour H. Natural frequencies and buckling of pressurized nanotubes using shear deformable nonlocal shell model, *J. Mechanical Science and Technology*, 2012, vol. 26 (2), pp. 563–573.

10. Michaylov I. S., Leontev V. L. Matematicheskoe modelyrovanie nanoobectov svayazanysh s teoriey anyzatropnysh obolochec, *Trudy X Megdunarodnoy conf. "Opto-, nanoelectronica, nanotechnologyi i microsystemy", 25–28 avgusta 2008 e., Ulyanovsk: UlGU*, p. 11.

11. Ghorbanpour Arani A., Rahnama Mobaraken M., Shams Sh., Mohammadimehr M. The effect of CNT volume fraction on the magneto-thermo-electro-mechanical behavior of smart nanocomposite cylinder, *J. Mechanical Science and Technology*. 2012, vol. 26 (8), pp. 2565–2572.

12. Georgantzinos S. K., Giannopoulos G. I., Anifantis N. K. An efficient numerical model for vibration analysis of single-walled carbon nanotubes, *Comput. Mech.*, 2009, vol. 43, pp. 731–741.

13. **Michaylov I. S., Leontev V. L.** O postroenii potenchiala vzaimodeystviya atomov, osnovanaya na finitnyh ortogonalnyh funkchiyah, *Nano- i microsystemnaya technica*, 2011, no. 9, pp. 48–50.

14. Bockrath M. W. Carbon nanotubes: electrons in one dimension Berkeley, Ph. D. Dissertation, 1990. 131 p.

15. Ishii H., Kataura H., Shiozawa H., Yoshioka H., Otsubo H., Takayama Y., Miyahara T., Suzuki S., Achiba Y., Nakatake M., Narimura T., Higaahiguchi M., Shimada K., Namatame H., Taniguchi M. Direct observation of Tomonaga— Luttinger-liquid state in carbon nanotubes at low temperatures, *Nature*, 2003, vol. 426, pp. 540–544.

16. **Burke P. J.** Luttinger liquid theory as a model of the gigahertz electrical properties of carbon nanotubes, *IEEE. Trans. On Nanotech*, 2002, vol. 1, pp. 129–144.

17. Geblinger N., Ismach A., Joselevich E. Self-organized nanotube serpentines // *Nature Nanotechnology*. 2008. Vol. 3. P. 195–200.

18. Wang F., Deng K.-J., Zhou L., Zhao J.-B., Ke X.-H., Wen L.-L. Improving the Degree of Functionalization and Solubility of Single-Walled Carbon Nanotubes via Covalent Multiple Functionalization, *J. Inorg. Organomet. Polym. and Materials*, 2012, vol. 22, pp. 1182–1188.

19. Beheshtian J., Peyghan A. A., Bagheri Z. Carbon nanotube functionalization with carboxylic derivatives: a DFT study, *J. Mol. Model.*, 2013, vol. 19, pp. 391–396.

Моделирование и конструирование MHCT Modelling and designing of MNST

УДК 531.383-11:681.7

А. В. Голиков, канд. техн. наук, вед. науч. сотр., e-mail: algolikov@yandex.ru,

В. М. Панкратов, д-р техн. наук, проф., зав. лаб., e-mail: iptmuran@san.ru,

Е. В. Панкратова, канд. физ.-мат. наук, науч. сотр., e-mail: iptmuran@san.ru,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки институт проблем точной механики и управления Российской академии наук, Саратов

ТЕПЛОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В БУХТЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОГО ГИРОСКОПА НА ОСНОВЕ МИКРОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОПТОВОЛОКНА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Поступила в редакцию 18.03.2016

Проводится сравнительное исследование нестационарного неоднородного температурного поля в волоконно-оптическом гироскопе с волоконным контуром на основе традиционного оптоволокна и микроструктурированного оптического волокна.

Ключевые слова: моделирование, тепловые процессы, волоконно-оптический гироскоп, микроструктурированное оптоволокно, нанотрубки, метод элементарных балансов

Введение

Исследованию тепловых процессов в волоконно-оптических гироскопах (ВОГ) и повышению его точности посвящено достаточное число работ как в России, так и за рубежом [1—7]. Так как на точность ВОГ существенно влияют нестационарные и неоднородные тепловые воздействия [1—5], то для уменьшения температурной составляющей погрешностей ВОГ разрабатываются различные способы пассивного и активного характера.

Традиционно в ВОГ применяется одномодовое оптоволокно, состоящее из сердцевины и оболочки, однако в настоящее время проводятся исследования по применению в ВОГ микроструктурированных (MC) оптических волокон [6, 7].

В настоящее время активно развиваются технологии изготовления MC оптических волокон [8—12]. По структуре, механизмам формирования и свойствам волноводных мод световоды этого класса существенно отличаются от обычных оптических волокон. Для передачи излучения в MC световодах служит сплошная или полая сердцевина, окруженная микроструктурированной оболочкой, содержащей систему ориентированных вдоль оси волокна цилиндрических воздушных отверстий (рис. 1). Структура МС световодов очень разнообразна и различна по оптическим характеристикам.

Ведутся работы по исследованию свойств MC волокон при заполнении полых отверстий световодов специальными материалами, например, жидкими кристаллами, наночастицами алмаза [11].

Основными недостатками МС волокон является сложность их изготовления и значительный показатель потерь — порядка 50 дБ/км [10]. Однако теоретически возможно сокращение потерь до 0,0005 дБ/км. В настоящее время усилия ученых направлены на улучшение свойств МС волокон [12].

Данная работа продолжает и развивает исследования [3, 4], направленные на существенное повышение точности и эффективности функционирования волоконно-оптических гироскопов и БИНС на их основе [4].

Цель работы — исследование тепловых процессов в волоконной бухте ВОГ с использованием МС оптоволокна, содержащего наночастицы углеродных нанотрубок (УНТ).

В статье рассмотрены следующие задачи:

- расчет тепловых параметров МС оптоволокна;
- моделирование тепловых процессов в ВОГ с оптическим контуром на основе МС оптоволокна.



Рис. 1. Схематическое (a) и электронно-микроскопическое (b) изображения поперечного среза МС волокна Fig. 1. Cross-section images of MS fiber: schematic image (a) and electron-microscope image (b)

Исследования возможности применения МС оптоволокна в ВОГ ведутся как зарубежными, так и отечественными учеными. Основными препятствиями для использования такого типа волокон в ВОГ навигационного класса точности являются повышенное обратное релеевское рассеяние и высокий коэффициент потерь [1]. Однако ряд преимуществ МС оптических волокон перед традиционными (существенно более низкие погрешности, обусловленные эффектами Керра, Шьюпа, Фарадея, термической нестабильности поляризации) на фоне интенсивных исследований по улучшению их характеристик дает основание полагать реально возможным разработки ВОГ на базе МС оптоволокна [6, 7].

В настоящей работе проведена теоретическая оценка тепловых характеристик МС волокна в случае применения его в ВОГ с капиллярами, заполненными как воздухом, так и с теплопроводящими наночастицами УНТ.

Расчет тепловых параметров МС оптоволокна

Для расчета коэффициентов термопроводимостей в волоконной бухте с обычным оптоволокном воспользуемся соотношениями, полученными в работе [3]:

$$q_{\parallel} = nm \left[\lambda_p \frac{b^2 - c^2}{a} + \lambda_k \frac{c^2}{a} \right] + \lambda_f \frac{bf}{a} [(n-1)m + (m-1)n];$$
(1)

$$q_{\perp} = \frac{ma(b-c)}{n\frac{b}{\lambda_p} + (n-1)\frac{f}{\lambda_f}} + \frac{mac}{n\left(\frac{b-c}{\lambda_p} + \frac{c}{\lambda_k}\right) + (n-1)\frac{f}{\lambda_f}} + \frac{m-1}{n}\frac{af\lambda_f}{b}, \qquad (2)$$

где q_{\parallel} , q_{\perp} — коэффициенты теплопроводимости в продольном и поперечном направлении волокна; *n*, *m* — число световодных проводов в объеме соответственно вдоль и поперек распространения теплового потока; λ_p , λ_k , λ_f — коэффициенты теплопроводности оболочки, сердечника волокна и межвитковой среды; *a*, *b*, *c*, *f* — геометрические параметры — соответственно длина части волокна, наружный диаметр световода, диаметр сердечника, ширина межвиткового пространства.

Для расчета коэффициентов термопроводимостей [13] в бухте с МС оптоволокном представим МС световод в виде многослойной упорядоченной структуры (рис. 2).

В качестве конструктивных параметров МС световода опытного образца воспользуемся данными, приведенными в статье [9]. Диаметр воздушных каналов световода $d \approx 5,01$ мкм, диаметр сердцевины $d_c = 6$ мкм, шаг структуры $\Delta \approx 6,68$ мкм, диаметр световода $d_v \approx 100$ мкм.



Рис. 2. Схематичное изображение поперечного сечения МС световода: d — диаметр воздушных каналов; d_c — диаметр сердцевины; Δ — шаг структуры; δ — расстояние между отверстиями; d_v — диаметр световода; m_v — число воздушных каналов в поперечнике гексагональной структуры по диаметральной линии световода

Fig. 2. Scheme of the cross-section of MS light guide: d - diameter of the air channels; $d_c - diameter$ of the core; $\Delta - structure$ step; $\delta - distance$ between the apertures; $d_v - diameter$ of a light guide; $m_v - number$ of the air channels in the cross-section of the hexagonal structure by the diametrical line of a light guide



Рис. 3. К расчету коэффициентов термопроводимостей в бухте МС волокна

Fig. 3. To calculation of the coefficients of thermal conductivity in the bay of MS fiber

Кроме того, для упрощения расчета и учета многообразия структур МС световодов положим диаметр сердцевины кратным диаметру d с коэф-фициентом n_c :

$$d_c = n_c d.$$

Тогда на основе законов теплопередачи [13] приближенные формулы для расчета коэффициентов термопроводимостей в отдельном MC световоде (схематично представленном на рис. 2), согласно [3] получим соотношения вида:

• в продольном направлении световода

$$q_{\parallel}^{\upsilon} = \frac{1}{a} (S_h \lambda_h + S_c \lambda_c + S_k \lambda_k), \qquad (3)$$

где

$$S_{h} = \frac{\pi d^{2}}{4} \left[m_{v} + (m_{v} - 1) \left(\frac{3m_{v} - 1}{4} \right) - n_{c}^{2} \right]$$
$$S_{c} = \frac{\pi d_{c}^{2}}{4},$$
$$S_{k} = \frac{\pi d_{v}^{2}}{4} - S_{h} - S_{c};$$

• в поперечном направлении световода:

$$q_{\perp}^{\upsilon} = ad \left[2 \sum_{j=\frac{n_{c}+1}{2}}^{\frac{m_{v}-1}{2}} \frac{1}{(m_{v}-j)\frac{d}{\lambda_{h}} + (m_{v}-j-1)\frac{\delta}{\lambda_{k}}} + \frac{n_{c}}{(m_{v}-n_{c})\frac{d}{\lambda_{h}} + (m_{v}-n_{c}-2)\frac{\delta}{\lambda_{k}} + n_{c}\frac{d}{\lambda_{c}}} \right].$$
(4)

Здесь q_{\parallel}^{v} , q_{\perp}^{v} — коэффициенты теплопроводимости одного световода в продольном и поперечном направлении; S_h , S_c , S_k — соответственно площадь полых каналов, заполненных воздухом, площадь сердечника и остальная площадь; λ_h , λ_k , λ_c — коэффициенты теплопроводности воздуха и кварца, материала сердцевины световода (кварц или воздух в случае полой сердцевины); d — диаметр воздушных каналов; d_c — диаметр сердцевины; δ — расстояние между отверстиями; d_v — диаметр световода; $m_v = d_v/\Delta$ — число воздушных каналов в поперечнике гексагональной структуры по диаметральной линии световода (рис. 2).

Световолоконную бухту ВОГ представим как многослойную упорядоченную структуру, состоящую из слоев волокна и межвитковой среды [3] (рис. 3).

С учетом (3) и (4) по аналогии с (1), (2) формулы для расчета коэффициентов термопроводимостей в продольном и в поперечном направлениях в бухте MC оптоволокна в части волокна длиной *а* будут иметь следующий вид:

$$q_{\parallel} = q_{\parallel}^{v} mn + \frac{d_{v} f \lambda_{f}}{a} [(n-1)m + (m-1)n], \quad (5)$$

$$q_{\perp} = \frac{m}{\frac{n}{q_{\perp}^{v}} + \frac{f}{d_{v}a\lambda_{f}}(n-1)} + \frac{m-1}{n}\frac{af\lambda_{f}}{d_{v}}.$$
 (6)

Компьютерное моделирование

За основу для компьютерных экспериментов при расчете температурных полей воспользуемся тепловой моделью БВОГ-120, приведенной в статье [4].

Рассматриваемый образец ВОГ имеет следующие геометрические параметры катушки для намотки волокна: радиус r = 4,75 см, высота 1,4 см, ширина слоя волокна 0,7 см (рис. 4). Важной особенностью конструкции данного ВОГ в данном случае является *отсутствие* в нем внутренних источников теплоты за счет вынесения излучателя и блока электроники за его объем.



Рис. 4. Катушка БВОГ-120 с оптическим волокном в поперечном сечении *Fig. 4. BVOG-120 coil with an optical fiber in the cross-section*

606 -

Таблица 1 *Table 1*

	Коэффициенты теплопроводимости (Вт/см °С) Coefficients of thermal conductivity (W/cm °C)									
Тип оптоволокна <i>Type</i> of optical fiber	Ка- тушка- волокно <i>Coil-fiber</i>	Волокно в радиаль- ном на- правлении <i>Fiber in the</i> <i>radial</i> <i>direction</i>	Волокно в вертикаль- ном на- правлении <i>Fiber in the</i> <i>vertical</i> <i>direction</i>	Волокно в продоль- ном на- правлении Fiber in the longitudinal direction						
Обычное оптоволокно	0,0047	0,0199	0,0047	0,0002						
Regular optical fiber MC волокно (капилляры заполнены воздухом) MS fiber	0,003	0,0128	0,0031	0,0004						
(the capillaries filled with air) MC волокно (капилляры заполнены УНТ) MS fiber (the capillaries filled with CNT)	0,0831	0,3378	0,0827	0,0035						

Применительно к данному ВОГ коэффициенты теплопроводимости в волоконной бухте для обычного волокна, для МС волокна и для МС волокна с капиллярами, заполненными наночастицами УНТ, рассчитанные по полученным приближенным формулам (5), (6) представлены в табл. 1.

Как видно из таблицы, эквивалентная теплопроводимость внутри волоконной бухты с МС оптоволокном, капилляры которого заполнены УНТ, на порядок выше тех же показателей для обычного оптоволокна.

При исследовании тепловых процессов в волоконной бухте ВОГ использовалось разработанное на основе модифицированного метода элементарных балансов [3] специализированное программное обеспечение (ПО) "VOG-C++", реализующее математическую модель тепловых процессов в ВОГ с учетом конструктивных особенностей прибора. Для этого данная тепловая модель катушки с оптическим волокном представлена в виде 30 "элементарных объемов". Из них 24 в волокне и 6 в катушке, в каждом из которых рассчитываются температуры в текущий момент времени (рис. 5).

При моделировании оценивались максимальные температурные перепады между "элементарными объемами" (расчетные точки) в бухте с оптоволокном в радиальном направлении между катушкой и волокном ΔT_1 , внутри волокна ΔT_2 и между элементарными объемами вдоль волокна ΔT_3 (рис. 5). Компьютерное моделирование тепловых процессов проводилось при следующих исходных данных. Окружающая среда однородная — воздух при нормальном атмосферном давлении. Температура окружающей среды (возмущающее воздействие) может изменяться по заданному *гармоническому*, *ступенчатому* и *экспоненциальному* закону с течением времени в диапазоне (-50...+50) T °C при начальной температуре 20 °C.

На графиках рис. 6—8, полученных с использованием разработанного ПО, представлены температуры внешнего температурного возмущающего воздействия T_s , температуры в "элементарных объемах" катушки и волокна и температурные перепады в бухте с волокном при различных типах воздействия со следующими параметрами:

- гармоническое изменение возмущающего воздействия в диапазоне -50...+50 °С с периодом 90 мин и начальной температурой в ВОГ 20 °С;
- ступенчатое изменение возмущающего воздействия по заданной циклограмме в диапазоне -40...55 °С и начальной температурой в ВОГ 20 °С;
- экспоненциальное изменение возмущающего воздействия в диапазоне 30...-30 °С и начальной температурой в ВОГ 20 °С.

На графиках рис. 6, a, b - 8, a, b приведены температура окружающей среды и температуры в расчетных точках в катушке и в оптоволокне. Из-за незначительной разницы температур в расчетных точках графики сливаются в один. Тем не менее на графиках 6, a - 8, a заметна разница между температурами в катушке и в волокне.

Совершенно очевидно, что повышенная тепловая проводимость МС волокна с УНТ дает значительное снижение температурных перепадов по объему катушки по сравнению с традиционным волокном (рис. 6, d, 7, d, 8, d), что должно благо-



Рис. 5. Схематическое изображение бухты оптоволокна и катушки в поперечном сечении с разбиением на "элементарные объемы" Fig. 5. Schematic image of the bay of the optical fiber and the coil in the cross-section with splitting into the "elementary volumes"



Рис. 6. Гармоническое изменение возмущающего воздействия: $a - T_s$, *T* в обычном волокне и в катушке; $b - T_s$, *T* в бухте с MC оптоволокном и в катушке; c — температурные перепады в бухте с обычным оптоволокном; d — температурные перепады в бухте с MC оптоволокном

Fig. 6. Harmonious change of the perturbation action: $a - T_s$, T in the fiber and in the coil; $b - T_s$, T in the fiber and in the coil; c - temperature differences in the bay with a regular optical fiber; d - temperature differences in the bay with MS optical fiber



Рис. 7. Ступенчатое изменение возмущающего воздействия: $a - T_s$, *T* в обычном волокне и в катушке; $b - T_s$, *T* в бухте с MC оптоволокном и в катушке; c — температурные перепады в бухте с обычным оптоволокном; d — температурные перепады в бухте с MC оптоволокном

Fig. 7. Step-by-step change of the perturbation action: $a - T_s$, T in the fiber and in the coil; $b - T_s$, T in the fiber and in the coil; c – temperature differences in the bay with a regular optical fiber; d – temperature differences in the bay with MS optical fiber



Рис. 8. Экспоненциальное изменение возмущающего воздействия: $a - T_s$, T в обычном волокне и в катушке; $b - T_s$, T в бухте с MC оптоволокном и в катушке; c – температурные перепады в бухте с обычным оптоволокном; d – температурные перепады в бухте с MC оптоволокном

Fig. 8. Exponential change of the perturbation action: $a - T_s$, T in the fiber and in the coil; $b - T_s$, T in the fiber and in the coil; c - temperature differences in the bay with a regular optical fiber; d - temperature differences in the bay with MS optical fiber

приятно сказаться на тепловой ситуации в ВОГ в целом.

Результаты вычислительных экспериментов с тепловой моделью ВОГ представлены в табл. 2.

Из представленных в таблице результатов следует, что температурные перепады в бухте с волокном в случае МС оптоволокна с УНТ меньше этих показателей для обычного оптоволокна в 10 и более раз. Среди рассмотренных температурных перепадов в зоне волоконной бухты гироскопа наибольшего значения достигает перепад между катушкой и волокном. Это также видно на графиках 6, a - 8, a.

При этом следует отметить, что абсолютные значения температур в расчетных точках волокна в отличие от *перепадов* температур не зависят от коэффициента тепловой проводимости в зоне волоконной бухты. Для снижения колебаний температур в ВОГ, обусловленных внешними воздействиями, необходимо применение дополнительных мер пассивного и активного характера, например изоляция корпуса ВОГ от внешних тепловых воздейст-

Габлица	2
Table	2

Y	Перепады температур (пиковые значения), °C Differences of temperatures (peak values), °C										
Характер динамики внешнего температурного возмущающего воздействия Character of the dynamics of the external	Между катушкой Between the coil	й и волокном ΔT_1 and the fiber ΔT_1	По радиусу в Along the radius	в волокне ΔT_2 in the fiber ΔT_2	Вдоль волокна ΔT_3 Along the fiber ΔT_3						
temperature perturbation action	Обычное волокно <i>Regular fiber</i>	MC волокно <i>MS fiber</i>	Обычное волокно <i>Regular fiber</i>	MC волокно <i>MS fiber</i>	Обычное волокно <i>Regular fiber</i>	MC волокно <i>MS fiber</i>					
Гармоническое изменение температуры Harmonious change of temperature	3,2	0,3	0,1	0	0,15	0,05					
Ступенчатое воздействие Step-by-step action	4	0,3	0,1	0,005	0,45	0,08					
Экспоненциальное воздействие Exponential action	1,6	0,2	0,03	0,002	0,16	0,02					

НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 18, № 10, 2016 -

вий, алгоритмическая компенсация теплового дрейфа, применение систем терморегулирования.

Заключение

Проведено сравнительное исследование тепловых процессов в волоконной бухте ВОГ с обычным и микроструктурированным оптическим волокном.

Показано, что применение микроструктурированного оптоволокна с воздушными каналами, заполненными теплопроводящими наночастицами, например углеродными нанотрубками [14], позволит существенно снизить температурные перепады в бухте с оптическим волокном по сравнению с ВОГ на основе традиционного оптического волокна. Для рассматриваемого в качестве примера ВОГ на базе МС волокна с УНТ такое снижение перепадов температуры на порядок лучше, чем в ВОГ с традиционным оптическим волокном.

Список литературы

1. **Курбатов А. М., Курбатов Р. А.** Пути повышения точности волоконно-оптических гироскопов // Гироскопия и навигация, изд. ГНЦ РФ "ЦНИИ "Электроприбор". 2012. № 1 (76). С. 102—121.

2. Мешковский И. К., Стригалев В. Е., Дейнека Г. Б., Пешехонов В. Г. и др. Трехосный волоконно-оптический гироскоп. Результаты разработки // XVIII Санкт-Петербургская Международная конференция по интегрированным навигационным системам. С.-Петербург, ГНЦ РФ ОАО "Концерн "ЦНИИ "Электроприбор". 2011. С. 8–14.

3. Джашитов В. Э., Панкратов В. М. Датчики, приборы и системы авиакосмического и морского приборостроения в условиях тепловых воздействий / Под общей редакцией академика РАН В. Г. Пешехонова. Санкт-Петербург: ГНЦ РФ ЦНИИ "Электроприбор", 2005. 404 с.

4. Джашитов В. Э., Панкратов В. М., Голиков А. В. и др. Иерархические тепловые модели бесплатформенной инерциальной навигационной системы с волоконно-оптическими гироскопами и акселерометрами // Гироскопия и навигация, С.-Петербург. 2013. № 1 (80). С. 49—63.

5. **Zhihong Li, Zhuo Meng, Tiegen Liu, X. Steve Yao**. A novel method for determining and improving the quality of a quadrupolar fiber gyro coil under temperature variations // OPTICS EXPRESS. 2013. Vol. 21, N. 2.

6. Blin S., Kim H. K., Digonnet M. J. F., Kino G. S. Reduced thermal sensitivity of a fiber-optic gyroscope using an aircore photonic-bandgap fiber // Journal of Lightwave Technology, 2007. Vol. 25, N. 3. P. 861–865.

7. **Terrel M. A., Digonnet M. J. F., and Fan S.** Resonant fiber optic gyroscope using an air-core fiber // Journal of light-wave technology. 2012, April 1, Vol. 30, N. 7. P. 931–937.

8. **Желтиков А. М.** Микроструктурированные световоды в оптических технологиях / А. М. Желтиков. М.: Физматлит, 2009. 192 с.

9. Бжеумихов К. А., Маргушев З. Ч. Особенности нелинейно-оптических преобразований фемтосекундных лазерных импульсов в микроструктурированных волокнах из стекла ar-glass / Компьютерная оптика, 2010, том 34, № 4, с. 494—500.

10. Шумкова Д. Б., Левченко А. Е.. Специальные волоконные световоды: учеб. пособие / Шумкова Д. Б., Левченко А. Е.; МОиН РФ, ФГБОУ ВПО "Перм. нац. исслед. политехн. ун-т", Ин-т фотоники и оптоэлектрон. приборостроения, Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2011, 178 с.

11. Желтиков А. М., Иванов А. А., Алфимов М. В. Фотоннокристаллические световоды / Центр фотохимии РАН. Фундаментальные и прикладные исследования. Итоги и перспективы 1996—2013 гг. Часть 2. с. 298—322, Москва: ООО ИПЦ "Маска", 2013, 566 с.

12. Дукельский К. В., Коробейников А. Г., Тер-Нерсесянц Е. В. Методы уменьшения оптических потерь в фотонно-кристаллическом оптическом волокне / Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики, 2010, № 3 (67).

13. Дульнев Г. Н., Парфенов В. Г., Сигалов А. В. Методы расчета теплового режима приборов. М.: Радио и связь, 1990. 312 с.

14. Голиков А. В., Джашитов В. Э., Панкратов В. М. Математическое моделирование тепловых процессов в углеродных нанотрубках и фуллеренах // Нано- и микросистемная техника 2014 г. № 11 с. 3—9.

A. V. Golikov, Ph. D., Leading Researcher, algolikov@yandex.ru,

V. M. Pankratov, D. Sc., Professor, Head of Laboratory, iptmuran@san.ru,

E. V. Pankratova, Ph. D., Researcher, iptmuran@san.ru

Institute of Precision Mechanics and Control, RAS, Saratov

Thermal Processes in the Bay of the Fiber Optic Gyroscope Based on the Micro-Structured Optical Fibers with Carbon Nanotubes

The paper presents a comparative study of the non-stationary inhomogeneous temperature field in a fiber-optical gyroscope (FOG) with a fiber head loop based on the traditional and photonic-bandgap fiber. The aim of the work is a study of the thermal processes in a fiber bay of FOG with the use of photonic-bandgap fiber containing nanoparticles of the carbon nanotubes.

The main problems addressed in the article are calculation of the thermal parameters of the photonic-bandgap fiber, modeling of the thermal processes in FOG with an optical head loop based on the photonic-bandgap fiber, equations for calculation of the thermal parameters of the FOG coil with the photonic-bandgap fiber with a hexagonal structure of the holes, computer modeling of the thermal processes in a fiber coil of FOG at different types of the external disturbances.

The conducted research demonstrated that the use of the photonic-bandgap fiber with the air holes filled with the heat-conducting nanoparticles can reduce significantly the temperature differences in the fiber coil compared with FOG based on a conventional optical fiber.

Keywords: modeling, thermal processes, fiber-optic gyroscope, photonic-bandgap fiber, nanotubes, temperature fields, method of elementary balances

Introduction

Research of the thermal processes in the fiber-optical gyroscopes (FOG) and improvement of their accuracy are the topics of a rather big number of works in Russia and abroad [1-7]. Since the accuracy of FOG depends on the non-stationary and non-uniform thermal influences [1-5], various ways of passive and active character are being developed for reduction of the temperature component in the errors.

Traditionally, one-mode optical fiber, consisting of a core and a cover, is applied in FOG, however, the research is going on for application of the microstructured (MS) optical fibers [6, 7].

The manufacturing techniques of MS optical fibers [8-12] are being actively developed. By their structure, the mechanisms of formation and the properties of the waveguide modes, the light conductors of this class differ essentially from the regular optical fibers. In MS light conductors the radiation is transferred through a continuous or hollow core surrounded by MS cover, containing a system of cylindrical air apertures arranged along the axis of the fiber (fig. 1). The structure of MS light conductors is varied and different by the optical characteristics.

The work is going on for research of the properties of MS fibers for filling of the hollow apertures of the light conductors with special liquid crystals, nanoparticles of diamonds [11].

The main drawbacks of the MS fibers are complexity of their manufacture and considerable losses — about 50 dB/km [10]. However, theoretically it is possible to reduce the losses down to 0,0005 dB/km. Scientists seek for ways to improve the properties of the MS fibers [12].

The given work is continuation of R & D [3, 4], aimed to increase essentially the accuracy and efficiency of functioning of the fiber-optical gyroscopes and SINS on their basis [4]. Its purpose is research of the thermal processes in the fiber bay of FOG with the use of the MS optical fiber containing nanoparticles of the carbon nanotubes (CNT).

The article deals with the following problems:

- calculation of the thermal parameters of the MS optical fiber;

- modeling of the thermal processes in FOG with an optical contour on the basis of MS optical fibers.

Research works concerning feasibility of application of MS optical fiber in FOG are conducted by foreign and domestic scientists. The basic obstacles for the use of such fibers in FOG navigation accuracy are raised Rayleigh backscattering and high coefficient of losses [1]. However, there are a number of advantages of the MS optical fibers in comparison with the traditional ones (lower errors due to effects of Kerr, Shupe and Faraday, thermal instability of polarization), which on the background of the intensive research for improvement of their characteristics give grounds to believe that FOG developments on the basis of the MS optical fibers are really possible [6, 7].

The work presents a theoretical estimation of the thermal characteristics of the MS fiber in case of its application in FOG with the capillaries filled with the air and heat-conducting CNT nanoparticles.

Calculation of the thermal parameters of the MS optical fiber

For calculation of the coefficients of the thermal conductivity in a fiber bay with a usual optical fiber we will use the following correlations [3]:

$$q_{\parallel} = nm \left[\lambda_p \frac{b^2 - c^2}{a} + \lambda_k \frac{c^2}{a} \right] + \lambda_f \frac{bf}{a} [(n-1)m + (m-1)n]; \qquad (1)$$

$$q_{\perp} = \frac{ma(b-c)}{n\frac{b}{\lambda_p} + (n-1)\frac{f}{\lambda_f}} + \frac{mac}{n\left(\frac{b-c}{\lambda_p} + \frac{c}{\lambda_k}\right) + (n-1)\frac{f}{\lambda_f}} + \frac{m-1}{n}\frac{af\lambda_f}{b},$$
(2)

where q_{\parallel}, q_{\perp} — are coefficients of thermal conductivity in the longitudinal and cross-section directions of the fiber; n, m — number of the light conductor wires in the volume, accordingly, of the up and down diffusion of the thermal flow; λ_p , λ_k, λ_f — coefficients of thermal conductivity of the cover, the core of the fiber and the interturn environment; a, b, c, f — geometrical parameters — accordingly, length of a part of the fiber, external diameter of the light conductor, diameter of the core, width of the interturn environment.

For calculation of the coefficients of thermal conductivity [13] in the bay with the MS optical fiber we present a MS light conductor in the form of a multilayered ordered structure (fig. 2).

As the design parameters of a pre-production model we will use the data presented in [9]. Diameter of the air channels of a light conductor is $d \approx 5,01 \,\mu\text{m}$, diameter of the core $d_c = 6 \,\mu\text{m}$, a structure step $\Delta \approx 6,68 \,\mu\text{m}$, diameter of a light conductor $d_v \approx 100 \,\mu\text{m}$.

Besides, for simplification of the calculations and account of the variety of the structures of MS light conductors we will assume the diameter of the core as multiple to the diameter dwith coefficient n_c .

$$d_c = n_c d.$$

Then, on the basis of the heat transfer laws [13], the approximated formulas for calculation of the coefficients of thermal conductivity in a separate MS light conductor (diagram in fig. 2), according to [3] we will get the following correlations:

in the longitudinal direction of the light conductor

$$q_{\parallel}^{\nu} = \frac{1}{a} \left(S_h \lambda_h + S_c \lambda_c + S_k \lambda_k \right), \tag{3}$$

where

$$S_{h} = \frac{\pi d^{2}}{4} \left[m_{v} + (m_{v} - 1) \left(\frac{3m_{v} - 1}{4} \right) - n_{c}^{2} \right]$$
$$S_{c} = \frac{\pi d_{c}^{2}}{4};$$
$$S_{k} = \frac{\pi d_{v}^{2}}{4} - S_{h} - S_{c};$$

611

and in the cross-section direction of the light conductor:

$$q_{\perp}^{v} = ad \left[2 \sum_{j=\frac{n_{c}+1}{2}}^{\frac{m_{v}-1}{2}} \frac{1}{(m_{v}-j)\frac{d}{\lambda_{h}} + (m_{v}-j-1)\frac{\delta}{\lambda_{k}}} + \frac{n_{c}}{(m_{v}-n_{c})\frac{d}{\lambda_{h}} + (m_{v}-n_{c}-2)\frac{\delta}{\lambda_{k}} + n_{c}\frac{d}{\lambda_{c}}} \right].$$
(4)

Here q_{\parallel}^v , q_{\perp}^v — are coefficients of thermal conductivity of one light conductor in the longitudinal direction and in the cross-section direction; S_h , S_c , S_k — the area of the hollow channels filled with air, the area of the core and the rest of the area; λ_h , λ_k , λ_c — coefficients of thermal conductivity of air and quartz, the material of the core of the light conductor (quartz or air in case of a hollow core); d — diameter of the air channels, d_c — diameter of the core, δ — distance between the apertures, d_v — diameter of the light conductor, $m_v = d_v/\Delta$ — number of the air channels across the hexagonal structure on the diametrical line of the light conductor (fig. 2).

We will present FOG light-fiber bay as a multilayered ordered structure consisting from layers of fiber and interturn environment [3] (fig. 3).

Taking into account (3) and (4) by analogy with (1), (2) the formulas for calculation of the coefficients of thermal conductivity in the longitudinal and cross-section directions in the bay with MS optical fiber regarding the fiber with length a will look like:

$$q_{\parallel} = q_{\parallel}^{v} mn + \frac{d_{v} f \lambda_{f}}{a} [(n-1)m + (m-1)n];$$
 (5)

$$q_{\perp} = \frac{m}{\frac{n}{q_{\perp}^v} + \frac{f}{d_v a \lambda_f} (n-1)} + \frac{m-1}{n} \frac{a f \lambda_f}{d_v}.$$
 (6)

Computer modeling

As a basis for computer experiments during calculation of the temperature fields we will take the thermal model BVOG-120 [4].

The considered FOG sample has geometrical parameters of the coil for fiber winding: radius r = 4,75 cm, height — 1,4 cm, width of the fiber layer — 0,7 cm (fig. 4). An important feature of the design of the given FOG is *absence* in it of the internal heat sources due to placement of a radiator and electronics unit outside its volume.

With reference to the given FOG the coefficients of thermal conductivity in the fiber bay for a regular fiber, for MS fiber and for MS fiber with the capillaries filled with CNT nanoparticles, calculated in accordance with the received approximated formulas (5), (6), are presented in table 1.

As one can see, the equivalent thermal conductivity inside the fiber bay with MS optical fiber, the capillaries of which are filled with CNT, is by an order higher than the indicators for a regular optical fiber.

During the research of the thermal processes in the FOG fiber bay the VOG-C++ special software was used, developed on the basis of the modified method of the elementary balances [3] and realizing the mathematical model of the thermal

processes in FOG with account of the design features of the device. For this purpose the given thermal model of the coil with an optical fiber is presented in the form of 30 "elementary volumes", 24 out of them are in the fiber and 6 are in the coil, and in each of them the temperatures are calculated in the current moment (fig. 5).

During modeling the maximal temperature differences were estimated between the "elementary volumes" (calculation points) in the bay with the optical fiber in the radial direction, between the coil and the fiber ΔT_1 , inside the fiber ΔT_2 and between the elementary volumes along fiber ΔT_3 (fig. 5).

Computer modeling of the thermal processes was done on the basis of the following initial data: the environment was homogeneous — air at the normal atmospheric pressure, temperature of the environment (perturbation action) could change with the time by the set *harmonious, step* and *exponential* law eventually within the range of -50...+50 T °C at the initial temperature of 20 °C.

The diagrams (fig. 6–8), received with the use of the developed software, present the temperatures of the external temperature perturbation action T_s , temperature in the "elementary volumes" of the coils and fibers, and the temperature differences in the bay with the fiber at various types of action with the following parameters:

- harmonious change of the perturbation action in the range of -50...50 °C with the period of 90 min and initial temperature in FOG of 20 °C;
- step-by-step change of the perturbation action by the set cyclogram in the range of -40...55 °C and initial temperature in FOG of 20 °C;
- exponential change of the perturbation action in the range of 30...-30 °C and initial temperature in FOG of 20 °C.

Fig. 6, a, b - 8, a, b present the ambient temperatures and the temperatures in the calculation points, in the coil, and in the optical fiber. Because of an insignificant difference of temperatures in the calculation points the diagrams merge in one. Nevertheless, in diagrams 6, a - 8, a the difference between the temperatures in the coil and in the fiber is noticeable.

It is obvious that higher thermal conductivity of the MS fiber with CNT decreases the temperature differences by the coil volume in comparison with the traditional fiber (fig. 6, d, 7, d, 8, d), which should affect favorably the thermal situation in FOG as a whole.

The results of the computing experiments with FOG thermal model are presented in table 2.

From the presented results it follows, that the temperature differences in the bay with the fiber, in case of the MS optical fiber with CNT, are 10 and more times less than the indicators for a regular optical fiber. Among the considered temperature differences in the zone of the fiber bay of a gyroscope, the greatest value is reached by the difference between the coil and the fiber. This is also visible in diagrams 6, a - 8, a.

It is necessary to point out, that the absolute values of temperatures in the calculation points of the fiber, unlike the *differences* in temperatures, do not depend on the coefficient of thermal conductivity in the zone of the fiber bay. For a decrease of the fluctuations of temperatures in FOG, caused by the external influences, application of measures of passive and active character is necessary, for example, isolation of the case of FOG from the external thermal influences, algorithmic compensation for a thermal drift, application of the systems of thermoregulation.

Conclusion

Research of the thermal processes was carried out in the fiber bay of FOG with a regular and the MS optical fiber.

It was demonstrated, that application of the MS optical fiber with the air channels filled with heat-conducting nanoparticles, for example, carbon nanotubes [14], will allow us to lower considerably the temperature differences in the bay with the optical fiber in comparison with FOG on the basis of a traditional fiber. For the considered example of FOG on the basis of the MS fiber with CNT such a decrease in temperature differences is by an order better than in FOG with the traditional optical fiber.

References

1. **Kurbatov A. M., Kurbatov R. A.** Puti povyshenija tochnosti volokonno-opticheskih giroskopov, *Giroskopija i navigacija*, izd. GNC RF "CNII "Jelektropribor", 2012, no. 1 (76), pp. 102–121.

2. Meshkovskij I. K., Strigalev V. E., Dejneka G. B., Peshehonov V. G. i dr. Trehosnyj volokonno-opticheskij giroskop. Rezul'taty razrabotki, *XVIII S.-Peterburgskaja Mezhdunarodnaja konferencija po integrirovannym navigacionnym sistemam*. S.-Peterburg, GNC RF OAO "Koncern "CNII "Jelektropribor", 2011, pp. 8–14.

3. Dzhashitov V. E., Pankratov V. M. Datchiki, pribory i sistemy aviakosmicheskogo i morskogo priborostroenija v uslovijah teplovyh vozdejstvij. Pod obshhej redakciej akademika RAN V. G. Peshehonova. S.-Peterburg: GNC RF CNII "Jelektropribor", 2005. 404 p.

4. Dzhashitov V. E., Pankratov V. M., Golikov A. V. i dr. Ierarhicheskie teplovye modeli besplatformennoj inercial'noj navigacionnoj sistemy s volokonno-opticheskimi giroskopami i akselerometrami, *Giroskopija i navigacija*, S.-Peterburg, 2013, no. 1 (80), pp. 49–63.

5. Zhihong Li, Zhuo Meng, Tiegen Liu, X. Steve Yao. A novel method for determining and improving the quality of a quadrupolar fiber gyro coil under temperature variations, *OPTICS EXPRESS*, 2013, vol. 21, no. 2.

6. Blin S., Kim H. K., Digonnet M. J. F., Kino G. S. Reduced thermal sensitivity of a fiber-optic gyroscope using an aircore photonic-bandgap fiber, *Journal of Lightwave Technology*, 2007, vol. 25, no. 3, pp. 861–865.

7. Matthew A. Terrel, Michel J. F. Digonnet, and Shanhui Fan. Resonant fiber optic gyroscope using an air-core fiber, *Journal of lightwave technology*, 2012, April 1, vol. 30, no. 7, pp. 931–937.

8. **Zhjoltikov A. M.** Mikrostrukturirovannye svetovody v opticheskih tehnologijah. Moscow, Fizmatlit, 2009. 192 p.

9. Bzheumihov K. A., Margushev Z. Ch. Osobennosti nelinejno-opticheskih preobrazovanij femtosekundnyh lazernyh impul'sov v mikrostrukturirovannyh voloknah iz stekla ar-glass, *Komp'juternaja optika*, 2010, vol. 34, no. 4, pp. 494–500.

10. Shumkova D. B., Levchenko A. E. Special'nye volokonnye svetovody: ucheb. posobie. Perm': Izd-vo PNIPU, 2011, 178 p.

11. **Zheltikov A. M., Ivanov A. A., Alfimov M. V.** *Fotonnokristallicheskie svetovody.* Centr fotohimii RAN. Fundamental'nye i prikladnye issledovaniya. Itogi i perspektivy 1996— 2013. Part 2. Moskva: OOO IPC "Maska", 2013, 566 p.

12. Dukel'skij K. V., Korobejnikov A. G., Ter-Nersesjanc E. V. Metody umen'shenija opticheskih poter' v fotonno-kristallicheskom opticheskom volokne, *Nauchno-tehnicheskij vestnik* Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo universiteta informacionnyh tehnologij, mehaniki i optiki, 2010, no. 3 (67).

13. Dul'nev G. N., Parfenov V. G., Sigalov A. V. Metody rascheta teplovogo rezhima priborov, Moscow, Radio i svjaz', 1990. 312 p.

14. **Golikov A. V., Dzhashitov V. E., Pankratov V. M.** Matematicheskoe modelirovanie teplovyh processov v uglerodnyh nanotrubkah i fullerenah, *Nano- i mikrosistemnaja tehnika*, 2014, no. 11, pp. 3–9.

УДК 004.31, 621.38

Л. Г. Нидеккер, мл. науч. сотр., lnidekker@mikron.ru АО "НИИ молекулярной электроники", Зеленоград

МАРШРУТ РАЗРАБОТКИ БИБЛИОТЕКИ СТАНДАРТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Поступила в редакцию 09.04.2016

Изложены основные принципы проектирования цифровых СБИС с использованием стандартных элементов. Рассмотрены преимущества и недостатки этого подхода. Также в работе подробно описан маршрут разработки библиотеки стандартных элементов с приведением соответствующих примеров. Представлены основные типы библиотек и их состав. Кратко рассмотрен процесс характеризации логических элементов.

Ключевые слова: проектирование цифровых СБИС, библиотека стандартных элементов, DRC, LVS, логические вентили, характеризация

Введение

Рассматривая современный подход к разработке цифровых СБИС, стоит особо отметить важность метода проектирования с использованием стандартных элементов, основная идея которого заключается в том, что при создании цифровой схемы используется готовый набор логических элементов. Данный метод позволяет разработчику не опускаться до транзисторного и физического уровня при разработке схемы, что значительно упрощает и ускоряет работу. К достоинствам проектирования с использованием стандартных элементов можно отнести следующее:

 сокращение времени разработки схемы (и, как следствие, сокращение параметра TTM — Тіте То Market), так как нет необходимости проведения аналогового моделирования схемы вследствие того, что все временные и мощностные параметры элементов рассчитаны на этапе разработки библиотеки;

- упрощение процесса разработки схемы, так как инженеру нет необходимости вникать в устройство стандартных элементов, а можно использовать их в виде "черных ящиков" (blackbox), выполняющих конкретную логическую функцию;
- универсальность разрабатываемой схемы, т.е. ее независимость от конкретной фабрики и технологии. Как правило, разработка цифровой ИС ведется на уровне регистровых передач (RTL).

Несмотря на повсеместное использование, данный метод имеет некоторые недостатки. Во-первых, так как набор стандартных элементов ограничен, то уменьшается гибкость проектирования, что в свою очередь может привести к уменьшению быстродействия и увеличению площади схемы, по сравнению с ее аналогом, разработанным на транзисторном уровне. Во-вторых, параметры изготовленной микросхемы напрямую зависят от качества библиотеки стандартных элементов.

Для достижения специальных требований, предъявляемых к микросхемам (малая потребляемая мощность, повышенное быстродействие и др.), различают следующие типы библиотек стандартных элементов, рассчитанных на

- малую потребляемую мощность;
- высокую производительность;
- повышенную плотность размещения;
- пониженные токи утечки.

Состав библиотеки стандартных элементов

Так как функционирование любой цифровой схемы сводится к выполнению какой-либо логической (Булевой) функции, то, следовательно, для проектирования достаточно базисного набора элементов, например с использованием элементов NOR и NAND, можно реализовать любую логическую функцию. Однако на практике такой подход не является эффективным. Для уменьшения площади, занимаемой схемой, и для оптимизации временных и мощностных параметров состав библиотеки стандартных элементов значительно расширяется. Как правило, все элементы можно разделить на четыре группы: комбинаторная и последовательная логика, оптимально спроектированные арифметические узлы и специальные элементы. Стоит отметить, что в данном случае не рассматриваются элементы ввода-вывода (IO cells) и IP-ядра (FIFO, PLL, LVDS и др.). К комбинаторной логике относятся базисные логические элементы AND, OR, NAND, NOR, INV, XOR и

некоторые составные элементы, например, АОІ (AND-OR-INV) и OAI (OR-AND-INV). К последовательной логике относятся триггеры (D, JK и др.) и защелки. Наиболее распространенными арифметическими узлами являются мультиплексоры, сумматоры (и полусумматоры), дешифраторы, счетчики, компараторы. Также в библиотеку стандартных элементов включают такие специальные элементы, как буферы, подтяжки к земле и питанию (TIE0 и TIE1), специальные инверторы и буферы для балансировки дерева тактовых сигналов, филлеры, линии задержки и др. Стоит отметить, что часто в состав библиотеки добавляют и другие элементы, например, комбинаторную логику с инвертированными входами, триггеры с мультиплексором на входе (для построения сканирующей тестовой логики — DFT) и clock-gating элементы.

Маршрут разработки библиотеки стандартных элементов

В общем виде маршрут разработки библиотеки стандартных элементов представлен на рис. 1. Это так называемый восходящий маршрут проектирования (*the bottom-up design flow*), который чаще всего применяют при разработке библиотек. Однако следует понимать, что данный процесс является итерационным, т.е. в ходе проектирования возможны возвращения к предыдущим пунктам маршрута для достижения оптимального результата. Далее будет подробно описан каждый пункт представленного маршрута.

Спецификация. Рассматривая маршрут разработки библиотеки стандартных элементов, под спецификацией понимают набор входных данных. Основными параметрами являются: размеры и геометрия транзисторов [1]. Также в спецификации может быть указана различная технологическая информация [2], такая как проектные нормы, число уровней металлизации и др.

Создание электрической схемы. На данном этапе создается электрическая схема элемента, построенная на отдельных КМОП-транзисторах. Алгоритм составления логических функций довольно прост [3]: в силу дуальности КМОП-структур (следствие из теоремы де Моргана) параллельное соединение транзисторов *n*-типа соответствует последовательному соединению транзисторов р-типа и наоборот. В итоге, параллельное соединение р-МОП-транзисторов и последовательное соединение *п*-МОП-транзисторов соответствует логическому элементу NAND, а последовательное соединение *р*-МОП-транзисторов и параллельное соединение *n*-МОП-транзисторов соответствует логическому элементу NOR. Далее, используя правила преобразования логических функций (коммутативный, ассоциативный, дистрибутивный законы и др.), можно спроектировать любой логический элемент с необходимой функцией на транзисторном уровне. В качестве примера на рис. 2 представлена электрическая схема элемента AOI с четырьмя входами, выполняющего логическую функцию $x = ! ((a \cdot b) + (c \cdot d)).$

Создание символа. После разработки электрической схемы элемента необходимо создать его символьное представление, т.е. условное изображение элемента, по возможности отображающее его логическую функцию. На рис. 3, *а* представлены примеры символьных изображений согласно ГОСТ 2.743—91 [4]. Однако на практике используют также другие представления (рис. 3, *b*).

Симуляция идеальной схемы. Для того чтобы получить общее представление о характеристиках



Рис. 1. Восходящий маршрут разработки библиотеки стандартных элементов Fig. 1. Bottom-up standard cell library design flow

разрабатываемого логического элемента, после создания его электрической схемы проводят SPICE симуляцию. В данном случае не учитывают паразитные задержки на межсоединениях, поэтому результаты носят оценочный характер. В процессе симуляции на вход элемента подаются различные комбинации сигналов, и детектируется выходной сигнал. Выход элемента нагружается на емкость. Так, например, в работе [5] при симуляции входным сигналом являлся меандр с периодом 20 нс и скважностью 2, и временем нарастания/спада фронтов 50 пс. Емкость нагрузки составляла 0,3 фФ. Если результаты симуляции неудовлетворительные, то необходимо возвратиться ко второму пункту маршрута и внести изменения в электрическую схему элемента.

Создание топологии. После получения положительного результата симуляции электрической схемы элемента следует создание топологии, т.е. изображение физических структур [6], которые формируют транзисторы и соединения между ними. Данный этап является одним из самых трудоемких во всем маршруте проектирования, так как выполняется вручную и имеет множество особенностей и ограничений. Например, от способа и числа слоев металлизации, использованных для соединения транзисторов в элементе, зависят его конечные временные параметры и разводимость всей схемы в САПР (routing). Также трудности в создании топологии элемента создают ограничения, накладываемые правилами проектирования (Design Rules), особенными для каждого технологического маршрута на фабрике. На рис. 4 (см. третью сторону обложки) представлено изображение топологии элемента АОІ с четырьмя входами.

Проверка соответствия правилам проектирования (DRC). Для каждого технологического маршрута изготовления ИС существуют правила проектирования, которым обязана соответствовать топология схемы или элемента. Данный набор правил включает в себя ограничения на расстояния между различными областями (активной областью, *n*- и *p*-карманами, металлическими шинами и т.д.), минимальные размеры канала транзистора и ширины металлизации, и др. После создания топологии элемента обязательным пунктом маршрута является проверка соответствия правилам проектирования — DRC (Design Rule Checking).

Экстракция паразитных параметров. После того как устранены все ошибки несоответствия правилам проектирования, проводится экстракция паразитных параметров межсоединений. На этом этапе формируется нетлист, содержащий в себе информацию о паразитных емкостях между слоями металлизации, металлизацией и землей. Также в нетлист могут быть внесены значения сопротив-



Рис. 2. Электрическая схема элемента AOI Fig. 2. Electric circuit of AOI element

лений проводников, что влияет на временные характеристики элемента.

Проверка соответствия электрической схемы с топологией (LVS). Последним этапом верификации элемента является проверка соответствия электрической схемы с топологией — LVS (Layout



Рис. 3. Символьные представления логических вентилей INV (верхний) и NAND (нижний): *a* — в соответствии с ГОСТ 2.743—91; *b* — общепринятые символы

Fig. 3. Symbolical presentations of the logical gates of INV (top) and NAND (bottom): a - in accordance with GOST 2.743-91; b - generally accepted symbols

vs Schematic). Основная идея заключается в сравнении идеального нетлиста, соответствующего электрической схеме, и нетлиста, экстрагированного из топологии элемента.

Финальная симуляция схемы. После того как исправлены все ошибки, выявленные на этапе проверок DRC и LVS, и проведена экстракция паразитных параметров, следует выполнить финальную симуляцию элемента. На этом этапе можно получить информацию о временны́х параметрах элемента и потребляемой мощности. На рис. 5 (см. третью сторону обложки) представлены входные (a, b, c) и выходные (x) сигналы в процессе симуляции элемента AOI, электрическая схема которого была изображена ранее (см. рис. 2). Задержка переключения элемента обычно измеряется на уровне 50 % от амплитуды сигналов.

Так как при симуляции учитываются задержки на межсоединениях, то предполагается, что полученные значения с определенной точностью соответствуют параметрам элемента после изготовления. Если результаты финальной симуляции неудовлетворительные, то необходимо возвращаться к предыдущим пунктам маршрута и вносить изменения в топологию и/или электрическую схему элемента.

Характеризация библиотеки стандартных элементов

Процесс описания временных и мощностных параметров разработанного элемента называют характеризацией. Основная идея заключается в SPICE-симуляции электрической схемы логического вентиля с различными значениями нагрузочных емкостей и параметрами входного сигнала и измерении соответствующей задержки переключения. Данная процедура проводится для всех "углов" технологии, т.е. различных крайних значений параметров транзисторов, температуры, напряжения питания и т.д. В итоге, для каждого элемента формируется набор таблиц, содержащих задержки переключения с каждого входного контакта до выходного, которые далее используют для временного анализа в маршруте проектирования цифровых СБИС [7].

Документация на библиотеку стандартных элементов

Заключительным этапом является составление документации, в которой приведена основная информация об элементах библиотеки [2], а именно:

- краткое описание элемента;
- реализуемая логическая функция и таблица истинности;
- символьное обозначение элемента;
- электрическая схема;
- задержки переключения;
- площадь элемента;
- потребляемая мощность.

Заключение

На данный момент проектирование с использованием стандартных элементов стало основным подходом к разработке цифровых ИС. Этот метод позволил максимально автоматизировать процесс проектирования микросхем с использованием специальных САПР, что, в свою очередь, привело к появлению СБИС, содержащих миллионы и миллиарды транзисторов. Также это способствовало появлению нового типа микросхем, а именно, систем на кристалле (СнК), где в качестве стандартных элементов используют не логические вентили, а сложные функциональные блоки (СФ-блоки/IP-ядра).

Список литературы

1. **Hashimoto M., Fujimori K., Onodera H.** Standard Cell Libraries with Various Driving Strength Cells for 0,13, 0,18 and 0,35 um Technologies // ASP – DAC. 2003. P. 589–590.

2. **TSMC** 0,18 um Process 1,8-Volt SAGE-X Standard Cell Library Databook. URL: http://www.utdallas.edu/~mxl095420/ EE6306/Final%20project/tsmc18_component.pdf

3. **Рабаи Жан М., Чандракасан А., Николич Б.** Цифровые интегральные схемы. 2-е изд. М.: И. Д. Вильямс, 2007.

4. ГОСТ 2.743—91. Обозначения условные графические в схемах. М.: Изд-во стандартов, 1993. 44 с.

5. **Poornima H. S., Chethana K. S.** Standard Cell Library Design and Characterization using 45 nm technology. // IOSR Journal of VLSI and Signal Processing. 2014. Vol. 4. Issue. 1. P. 29–33.

6. **Красников Г. Я.** Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. М.: Техносфера, 2011.

7. Нидеккер Л. Г., Эннс В. И. Маршрут разработки цифровой СБИС на основе БМК // "Научное сообщество студентов XXI столетия. Технические науки": Электронный сборник статей по материалам XXVIII студенческой международной научно-практической конференции. Новосибирск: СибАК. 2015. Н. 1 (27). URL: http://www.sibac.info/ archive/Technic/1(27).pdf.

L. G. Nidekker, Junior Researcher, Inidekker@mikron.ru, Research Institute of Molecular Electronics, Zelenograd

Standard Cell Library Design Flow

This paper is dedicated to a detailed description of a standard cell library design flow. It presents the main aspects of the flow, such as design specification, schematic capture, symbol creation, pre-layout simulations, layout, DRC, extraction, LVS and postlayout simulation. This article contains some examples of CMOS circuits, layout and simulation results of the standard cells. It also presents an overview of the characterization process. Besides, a method for development of the digital integrated circuits is considered. The main idea of this approach is the use of the standard cells in IC design flow. The advantages of this method are better design time and time to market, easier process of a digital IC creation and versatility of the developed circuits. The general disadvantage of this method is dependence of the IC quality on the capacity of a standard cell library.

Keywords: designing of digital GSI, standard cell library, design flow, DRC, LVS, logical gates, characterization, CMOS circuits

Introduction

Considering an approach to development of digital GSI, it is necessary to point out the importance of designing with the use of the standard cells, the main idea of which is that a ready set of the logical elements is used for designing of a digital circuit. It allows a developer not to go down to the transistor and physical levels, and that simplifies and accelerates the work considerably. Among the advantages of designing with the use of the standard cells it is possible to mention the following:

- reduction of the time for designing of a circuit (reduction of TTM — Time To Market), since there is no necessity in an analogue modeling of a circuit, because all the time and power parameters are calculated at the stage of a library development;
- simplification of the process of a circuit designing, because a designer does not have to go deep into the device of the standard cells, and can use them as a kind of "blackboxes", performing a concrete logical function;
- universality of the designed circuit (its independence of a concrete factory and technology). As a rule, designing of a digital IC is done at the level of the resistor-transistor logic (RTL).

Notwithstanding its universal use, the method has certain drawbacks. Firstly, since a set of the standard cells is limited, the flexibility of designing is reduced, which can slow down the speed and increase the area of the circuit in comparison with its analogue developed at the transistor level. Secondly, the microcircuit parameters directly depend on the quality of the library of the standard cells.

For satisfaction of the demands to the microcircuits (small power consumption, high speed, etc.), there are the following types of the standard cell libraries designed for:

- small power consumption;
- high efficiency;
- raised density of placement;
- lowered leakage currents.

Composition of a standard cell library

Since functioning of a digital circuit is reduced to performance of the logical (Boolean) function, a basic set of elements is sufficient for designing, for example, with the use of NOR and NAND elements it is possible to perform any logical function. However, such an approach is not effective. In order to reduce the area of a circuit and optimize the time and power parameters, the composition of a standard cell library is extended considerably. As a rule, all the elements can be divided into four groups and these are the combinatory and consecutive logic, optimally designed arithmetic nodes and special elements. It should be pointed out, that in this case the input-output elements (IO cells) and IP nuclei (FIFO, PLL, LVDS, etc.) are not considered. The combinatory logic includes the basic logic elements of AND, OR, NAND, NOR, INV, XOR and certain components, for example, AOI (AND-OR-INV) and OAI (OR-AND-INV). The consecutive logic includes triggers (D, JK, etc.) and latches. The most widespread arithmetic nodes are multiplexers, adders (halfadders), decoders, counters, and comparators. A standard cell library includes such special elements as buffers, TIE0 and TIE1, special inverters and buffers for balancing of the tree of clock signals, fillers, delay lines, etc. Library composition often includes other elements, for example, the combinatory logic with the inverted inputs, triggers with a multiplexer at the input (for construction of the scanning test logic – DFT) and the clock-gating elements.

Standard cell library design flow

In general the standard cell library design flow is presented in fig. 1. This is the bottom-up design flow, which is more frequently applied for a library design. It should be understood, that the process is iterative, that is, during designing a return is possible to the previous points of the flow for achievement of the optimal result. Below each point of the presented flow is described in detail.

Specification. When a standard cell library design flow is considered, the specification is understood as a set of the input data. The basic parameters are the dimensions and the geometry of the transistors [1]. Besides, the specification may contain various technological data [2]: design norms, number of metallization levels, etc.

Designing of an electric circuit. At the given stage an element electric circuit is being developed on separate CMOS transistors. The algorithm of the logical functions is simple enough [3]: owing to duality of the CMOS structures (proceeding from the law of dualization — theorem of de Morgan) the parallel connection of the *n*-type transistors corresponds to the consecutive connection of the *p*-type transistors and vice-versa. As a result, the parallel connection of p-MOStransistors and consecutive connection of *n*-MOS-transistors corresponds to the logical element of NAND, while the consecutive connection of p-MOS-transistors and parallel connection of n-MOS-transistors correspond to the logical element of NOR. Further, using the rules of transformation of the logical functions (the commutative, associative, distributive laws, etc.), it is possible to design any logical element with the necessary function at the transistor level. Fig. 2 presents as an example the electric circuit of AOI element with four inputs, carrying out the logical function $x = ! ((a \cdot b) + (c \cdot d)).$

Designing of a symbol. After development of the electric circuit of an element it is necessary to create its symbolical presentation, i.e. a conditional image of the element displaying its logical function. Fig. 3, a presents examples of the symbolical images in accordance with GOST 2.743–91 standard [4]. However, in practice other presentations are also used (fig. 3, b).

Simulation of an ideal circuit. In order to get an idea about the characteristics of the developed logical element, after creation of its electric circuit, SPICE simulation is done. In this case the parasitic delays on interconnections are not considered, therefore, the results have a character of estimation. In the course of the simulation various combinations of signals are sent to the element input, and the output signal is detected. The element output is loaded on the capacity. Thus, for example, in [5] during the simulation the input signal was a meander with a period of 20 ns, porosity of 2 and the fronts' rise/fall time of 50 ns. The load capacity was equal to 0,3 fF.

If the results of the simulation are unsatisfactory, it is necessary to return to the second point of the flow and introduce changes in the electric circuit of the element.

Designing of the topology. When a positive result of the simulation of the electric circuit of an element is obtained, the next step is designing of the topology, i.e. images of the physical structures [6], which form the transistors and connections between them. This stage is one of the most labor-consuming in all the design flow, because it is carried out manually and has a number of restrictions. For example, the final time parameters and routing of all the circuit in CAD depend on the method and number of layers of metallization for connection of the transistors in an element. Besides, certain difficulties in development of the topology of an element are created by the restrictions imposed by the Design Rules, special for each technological flow at the factory. Fig. 4 presents the topology of AOI element with four inputs.

Checking of the conformity to the design rules. For each technological flow of manufacturing of IC there are the design rules, to which the topology of the circuit or element must correspond. The set of the rules includes restrictions on the distances between various areas (active area, n- and p-pock-ets, metal buses, etc.), the minimum dimensions of the transistor channel and the width of metallization, etc. After creation of an element topology an obligatory flow point is checking of the conformity to the design rules — Design Rule Checking (DRC).

Extraction of the parasitic parameters. When the errors, contradicting with the design rules, are eliminated, the extraction of the parasitic parameters of the interconnections is done. At this stage a netlist is formed, containing information about the parasitic capacities between the metallization layers, metallization and the earth. It may also include the values of the conductors' resistance, which influence the time characteristics of the element.

Checking of the conformity of the electric circuit to the topology. The last stage of verification of an element is checking of the conformity of the electric circuit to the topology — LVS (Layout vs Schematic). The basic idea consists in comparison of the ideal netlist, corresponding to the electric circuit, and the netlist, extracted from the element topology.

Final simulation of the circuit. When the errors, revealed at the stage of checking of DRC and LVS, are corrected and the extraction of the parasitic parameters is done, it is necessary to implement the final simulation of the element. At this stage it is possible to get information about the element's time parameters and power consumption. Fig. 5 presents the input (a, b, c) and output (x) signals in the course of simulation of AOI element, the electric circuit of which was presented earlier (see fig. 2). The delay of switching of the element is usually measured at the level of 50 % of the amplitude of the signals.

Since during the simulation the delays on interconnections are taken into account, it is assumed, that the received values with certain accuracy correspond to the parameters of the element after manufacturing. If the results of the final simulation are unsatisfactory, it is necessary to return to the previous flow points and to introduce changes to the topology and/or the electric circuit of the element.

Characterization of the standard cell library

The process of description of the time and power parameters of the developed element are called characterization. The idea is in SPICE simulation of the electric circuit of the logical gate with various loading capacities and parameters of the input signal, and measurement of the corresponding delay of switching. The given procedure is done for all "the angles" of the technology, i.e. various extreme parameters of the transistors, temperature, supply voltage, etc. As a result, for each element a set of tables is formed containing delays of switching from each input contact up to the output one, which further are used for the time analysis in the flow design of digital GSI [7].

Documentation for a standard cell library

The final stage is formation of the documentation, containing the basic information about the library elements [2]:

- a brief description of an element;
- the realized logical function and the validity table;
- symbolical designation of an element;
- electric circuit;
- switching delays;
- the element area;
- power consumption.

Conclusion

Designing with the use of the standard cells became the basic approach to development of digital IC. The method allowed us to automate as much as possible designing of microcircuits with the use of special CAD, which led to appearance of GSI, containing millions and billions of transistors. It also promoted appearance of a new type of microcircuits, namely, system-on-a-chip (SoC), which uses as standard cells not the logical gates, but complex functional units (CF units/IP-nuclei).

References

1. Hashimoto M., Fujimori K., Onodera H. Standard Cell Libraries with Various Driving Strength Cells for 0,13, 0,18 and 0,35 um Technologies, ASP - DAC. 2003. P. 589–590.

2. **TSMC** 0.18 um Process 1.8-Volt SAGE-X Standard Cell Library Databook. URL: http://www.utdallas.edu/~mxl095420/ EE6306/Final%20project/tsmc18_component.pdf

3. Rabaey Jan M., Chandrakasan A., Nicolic B. Digital integrated circuits. Second edition, Moscow, I. D. Viljams, 2007.

4. GOST 2.743–91. Oboznachenija uslovnye graficheskie v shemah, Moscow, Izd-vo standartov, 1993. 44 p.

5. Poornima H. S., Chethana K. S. Standard Cell Library Design and Characterization using 45nm technology, *IOSR Journal of VLSI and Signal Processing*, 2014, vol. 4, is. 1, pp. 29–33.

6. Krasnikov G. Konstruktivno-tehnologicheskie osobennosti submikronnyh MOP tranzistorov, Moscow, Tehnosfera, 2011.

7. Nidekker L. G., Enns V. I. Marshrut razrabotki cifrovoi SBIS na osnove BMK, Nauchnoe soobshestvo studentov XXI stoletiya. Tehnicheskiye nauki: *Elektronniy sbornik statey po materialam XXVIII studencheskoi mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferencii. Novosibirsk:* Izd. "SibAK". 2015. N. 1 (27). URL: http://www.sibac.info/archive/Technic/1(27).pdf.

Материаловедческие И TEXHONOLI SCIENCE OF MATERIALS И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ AND TECHNOLOGICAL BASICS OF MNST

УДК 537.636, 538.915

Д. С. Чуб¹, аспирант, e-mail: dmchub@yandex.ru, **О. В. Фарберович**^{1,2,3}, д-р физ.-мат. наук, проф.,

А. В. Солдатов¹, д-р, физ.-мат. наук, проф., директор

¹ Международный исследовательский центр "Интеллектуальные материалы",

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону,

² Школа физики и астрономии, Факультет точных наук имени Рэймонда и Беверли Саклер,

Тель-авивский университет,

³ Воронежский государственный университет, Воронеж

ДИНАМИКА СПИНОВОГО КРОССОВЕРА В МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТАХ ОКТАЭТИЛПОРФИРИНА КОБАЛЬТА В ТЕРАГЕРШЕВОМ ИМПУЛЬСНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Поступила в редакцию 18.04.2016

Представлены результаты теоретического исследования динамики спинового кроссовера в молекуле октаэтилпорфирина кобальта под воздействием внешнего импульсного магнитного поля с магнинтой индукцией импульса 36,8 Тл. Показано, что в случае высокоспинового состояния при воздействии импульсного магнитного поля в системе происходит спиновое переключение, и система характеризуется большим временем релаксации. В случае низкоспинового состояния система быстро релаксирует в основное состояние. На графике зависимости магнитной восприимчивости χT от температуры отмечена особенность в районе температуры 40 К, связанная с переходом между спиновыми состояниями.

Ключевые слова: спиновый кроссовер, спиновая динамика, уравнение Ландау—Лившица

Введение

Технологии на основе кремния приближаются к своему физическому пределу миниатюризации, когда дальнейшее уменьшение размеров становится невозможным. Поэтому ведется непрерывный поиск новых материалов, позволяющих уменьшить размер используемых устройств, приборов и их компонентов. В поле зрения исследователей попали молекулярные магнетики благодаря свойствам, привлекательным для потенциального применения. В таких материалах каждая молекула может представлять собой элемент памяти. Плотность записи на таком носителе должна быть очень высокой. Также рассматривается возможность использования молекулярных магнетиков в качестве кубитов — элементов квантового компьютера [1].

Одним из условий записи информации на молекулярных магнетиках и раскрытия петли гистерезиса является медленная релаксация системы. В этом качестве интересны координационные со-

единения, где варьируя координирующие ионы металлов и лиганды, можно регулировать конечные физические свойства. В частности, в этой области крайне популярны соединения со спиновым кроссовером. Спиновый кроссовер представляет собой переключение между двумя спиновыми состояниями молекулы — так называемыми высокоспиновым (HS) и низкоспиновым (LS) состояниями.

Изменение спиновых состояний в системах со спиновым кроссовером может быть вызвано разнообразными внешними воздействиями, такими как изменение температуры, воздействие света, давления, магнитного поля и т.д. [2]. На данный момент теоретически изучены и понятны эффекты влияния температуры, давления и света на характер спиновой динамики для соединений со спиновым кроссовером.

В нашей работе приводится теоретическое исследование динамики спинового перехода, индуцированного импульсным магнитным полем, и

описание этой динамики в рамках уравнения Ландау-Лившица с учетом вкладов энергий анизотропного взаимодействия, обменного взаимодействия и зеемановского расщепления [3]. В качестве объекта исследования выбран октаэтилпорфирин (ОЭП) кобальта благодаря тому, что в этой молекуле [4] длина химической связи между кобальтом и легандом меньше, чем в соединениях на основе железа (II), что приводит к более медленной релаксации спинового состояния. Электронная конфигурация для расчетов была взята из литературы для молекулы Co(II)([Ar]3d74s2), которая может находиться либо в низкоспиновом состоянии ($\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow S = 1/2$), либо в высокоспиновом состоянии ($\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow S = 3/2$), причем оба состояния являются парамагнитными. Изменение в конфигурации электронов на *d*-орбиталях сопровождается значительным изменением длины связи и молекулярного объема.

Теоретические детали расчетов

Гамильтониан \hat{H}_{spin} спиновой системы можно представить в следующем виде:

$$\hat{H}_{spin} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{an} + \hat{H}_{ZEE} + \hat{H}_{pulse}(t), \quad (1)$$

где \hat{H}_{ex} — обменный гамильтониан Гейзенберга— Дирака—Ван Флека (ГДВФ), выражающий изотропное обменное взаимодействие; \hat{H}_{an} — гамильтониан аксиальной анизотропии изолированного иона; \hat{H}_{ZEE} — гамильтониан, описывающий зеемановское взаимодействие системы с внешним стационарным магнитным полем; $\hat{H}_{pulse}(t)$ — гамильтониан, описывающий взаимодействие системы с внешним переменным магнитным полем.

Матрицы операторов приводились к диагональному виду с использованием метода неприводимых тензорных операторов [5]. При расчетах магнитных свойств системы использовалась модель, в которой для исключения спин-спинового взаимодействия спиновая структура молекулы рассматривается как единый спин, взаимодействующий с внешним магнитным полем. Макроскопическое поведение системы со спиновым кроссовером описывается в рамках приближения среднего поля [6]. В приближении среднего поля гамильтониан может иметь вид

$$\hat{H}_{spin} = -\gamma \mathbf{H}_{eff} \hat{\mathbf{S}} \,. \tag{2}$$

Здесь γ — гиромагнитное отношение; \hat{S} — оператор, описывающий взаимодействие спина системы с внешним магнитным полем, которое выра-

жается через эффективное поле $\mathbf{H}_{e\!f\!f}$, определяемое формулой

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{\partial H_{spin}}{\partial \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle}, \qquad (3)$$

где $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ — среднее значение спина системы.

Здесь эффективное магнитное поле \mathbf{H}_{eff} включает в себя внешнее магнитное поле \mathbf{H}_z , анизотропное взаимодействие $\hat{\mathbf{H}}_{an}$, обменное взаимодействие $\hat{\mathbf{H}}_{an}$, обменное взаимодействие $\hat{\mathbf{H}}_{an}$, обменное магнитное поле $\hat{\mathbf{H}}_{pulse}(t)$. В приближении среднего поля полагается $\mathbf{H}_{eff} \rightarrow \mathbf{H}_{eff}^{mean}$, где \mathbf{H}_{eff}^{mean} получается путем замены мгновенных значений спинов на их средние значения $\hat{\mathbf{S}} \rightarrow \mathbf{M}_s = -\gamma \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$. В приближении среднего поля учитывается воздействие спина с внешним усредненным полем, но не учитывается взаимодействие спинов между собой. Данный подход удобен благодаря наличию единого спина в молекуле. Используя уравнение (2), мы получаем [7] модификацию уравнения Ландау—Лившица с учетом диссипации:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{S} \rangle}{\partial t} = \frac{1}{1+\lambda^2} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle \cdot \mathbf{H}_{eff}^{mean} - \frac{\lambda}{1+\lambda^2} \cdot \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle \cdot (\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle \cdot \mathbf{H}_{eff}^{mean}), \qquad (4)$$

где λ — параметр диссипации.

Эффективное магнитное поле \mathbf{H}_{eff}^{mean} в приближении среднего поля определяется как вариационная производная свободной энергии по магнитному моменту:

$$\mathbf{H}_{eff}^{mean}\left(\mathbf{M}_{s}, t\right) = -\frac{\delta F}{\delta \mathbf{M}_{s}},$$

где $F = -Nk_BT \ln Z(\mathbf{H}_z)$ — свободная энергия Гельмгольца; N — число частиц в системе; k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура системы; $Z(\mathbf{H}_z)$ — статистическая сумма

$$Z(\mathbf{H}_{z}) = \sum_{\mathbf{M}_{s}, \mu} \exp[-\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_{s})/(kT)] \times \sum_{\mathbf{M}_{s}} \exp[-g_{e}\mathbf{M}_{s}\mathbf{H}_{z}/(kT)],$$
(5)

где *g*_e — фактор Ланде.

Энергетический спектр спиновых уровней $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_s)$ в магнитном поле находится путем диагонализации спинового гамильтониана H_{spin} . Получив энергетический спектр спиновых уровней, мы можем оценить термодинамические свойства, такие как намагниченность, магнитная восприимчивость и магнитная удельная теплоемкость.

Поскольку спиновый гамильтониан H_{spin} содержит только изотропные вклады, то собственные значения спинового гамильтониана не зависят от направления вектора индукции приложенного магнитного поля. Следовательно, мы можем рассматривать внешнее магнитное поле \mathbf{H}_{z} , направленное вдоль условной оси *z* системы координат молекулы, как ось квантования спина. Энергии спиновых уровней равны $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_{s}) + g_{e}\mathbf{M}_{s}\mathbf{H}_{z}$, где $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_{s}) -$ собственные значения гамильтониана (индекс μ нумерует энергетические уровни с заданным значением \mathbf{M}_{s}). В рамках статистической термодинамики намагниченность \mathbf{M}_{s} определяется следующим выражением:

$$\mathbf{M}_{s} = \frac{\partial F(\mathbf{M}_{s}, \mathbf{H}_{z})}{\partial \mathbf{H}} = Nk_{B}T \frac{\partial \ln(\mathbf{H}_{z})}{\partial \mathbf{H}}.$$
 (6)

Тогда эффективное поле $\mathbf{H}_{e\!f\!f}^{mean}$ может быть представлено как вариационная производная функции свободной энергии:

$$\mathbf{H}_{eff}^{mean} = \frac{\delta(F(\mathbf{M}_{s}, \mathbf{H}_{z}) + F(t))}{\delta \mathbf{M}_{s}} =$$
$$= \frac{\delta(F(\mathbf{M}_{s}, \mathbf{H}_{z}))}{\delta \mathbf{M}_{s}} + \mathbf{H}_{pulse}^{x}(t), \qquad (7)$$

где $\mathbf{H}_{pulse}^{x}(t)$ — внешнее импульсное магнитное поле, приложенное вдоль оси *x*. Таким образом, мы получили обобщенную форму уравнения спиновой динамики для системы со спиновой прецессией в эффективном магнитном поле.

Расчетная часть

Для геометрической оптимизации молекулы и определения параметров спинового гамильтониана, таких как расщепление нулевого поля, g-тензор, обменный интеграл J_{ii} , анизотропия изолированного иона, мы провели расчеты в рамках теории функционала электронной плотности (Density Functional Theory — DFT) с учетом эффектов спин-орбитального взаимодействия в программном комплексе ADF [8, 9]. Расчеты выполнены с обменно-корреляционным функционалом Пердю-Бёрке-Эрнзерхоф (РВЕ) с помощью регулярного приближения нулевого порядка (Zero Order Relativistic Approximation — ZORA) [10], с использованием многоэлектронного валентного трехэкспонентного базисного набора с одной функцией поляризации. Было определено значение расщепления в нулевом поле молекулы ОЭП кобальта, равное 1,32 мэВ. Расчет расщепления в нулевом поле проводился в обобщенном градиентном приближении обменно-корреляционным функционалом Пердю—Бёрке—Эрнзерхоф (GGA PBE). Гамильтониан расщепления в нулевом поле имеет вид

$$\hat{H}_{ZFS} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{D} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \qquad (8)$$

где \hat{S} — векторный оператор эффективного спина атома кобальта; D — декартовый тензор анизотропии. После диагонализации матрицы гамильтониана в базисе магнитных осей получаем:

$$\hat{H}_{ZFS} = D\hat{S}_z^2 + E(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2), \qquad (9)$$

где D — аксиальный параметр расщепления в нулевом поле; E — ромбический параметр расщепления в нулевом поле. Условием бистабильности молекулярных магнетиков является отрицательное значение параметра D. Матрицы гамильтониана зеемановского взаимодействия (g-тензор) также имеют диагональный вид:

$$\hat{H}_{ZEE} = \mu_B \mathbf{H} \cdot \mathbf{g} \cdot \hat{\mathbf{S}} =$$

$$= \mu_B [H_x H_y H_z] \begin{bmatrix} g_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & g_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & g_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где µ_{*B*} — магнетон Бора.

Расчет g-тензора проведен с помощью регулярного приближения нулевого порядка с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Результаты и обсуждение

Системы со спиновым кроссовером являются привлекательным объектом для дальнейших междисциплинарных исследований благодаря таким свойствам, как возможность управлять состоянием молекулы с помощью внешнего воздействия (температуры, давления, света, электрического и магнитного полей), малый размер, фемтосекундное время отклика и возможность комбинировать спиновый кроссовер с другими свойствами. На рис. 1, а представлена спиновая структура молекулы ОЭП кобальта. Бистабильность LS/HS-соединения ОЭП кобальта объясняется малой разностью энергий между спиновыми состояниями. На рис. 1, *b* представлены электронные конфигурации двух возможных основных состояний иона кобальта (II) в октаэдрическом поле лигандов. Переход из одного электронного состояния в другое можно рассматривать как внутриионный перенос электронов, происходящий с изменением ориентации их спинов. Поскольку орбитали е_g являются разрыхляющими, их заполнение сопровождается увеличением расстояния между металлом и лигандом.

Напротив, заполнение орбиталей t_g приводит к усилению дативного взаимодействия, а следовательно, к упрочнению связи металл—лиганд. В результате расстояние металл—лиганд в высокоспиновом состоянии всегда больше, чем в низкоспиновом состоянии. Отметим, что энергия расщепления зависит как от природы лигандов, так и от природы переходного металла и заряда его иона. В то же время для заданного комплекса энергия расщепления зависит от расстояния металл—лиганд. Структура молекулы ОЭП кобальта представлена на рис. 1, *с*.



Рис. 1. Спиновая структура молекулы ОЭП кобальта, в которой наблюдается спиновый кроссовер между HS- и LS-состояниями (a); HS- и LS-состояния в $3d^7$ конфигурации Co^{II} в поле тетрагонального окружения (b) и структура молекулы ОЭП кобальта (c) Fig. 1. Spin structure of OEP molecule of cobalt, in which spin crossover is observed between the HS and LS states (a); HS and LS states in $3d^7$ configuration of Co^{II} in the field of tetragonal environment (b) and structure of OEP molecule of cobalt (c)



Рис. 2. График зависимости χT от температуры Fig. 2. Diagram of dependence of χT on temperature

Большое число исследований направлено на изучение фотоиндуцированного спинового перехода, приводящего к изменению геометрической и магнитной структуры молекулярных магнетиков. Однако на данный момент мы не нашли работ, посвященных спиновой динамике систем со спиновым кроссовером. Одним из недостатков фотоиндуцированного спинового кроссовера является малое время жизни спинового состояния, именно поэтому мы решили исследовать спиновые кроссоверы, индуцированные сильным импульсным магнитным полем. В данной работе мы сфокусировались на исследовании спиновой динамики системы со спиновым кроссовером, индуцированным сильным импульсным магнитным полем, а также условий, при которых система может нахолиться в одном из бистабильных состояний в течение долгого времени. Известно, что в комплексе $Co(H_2(fsa)_2en)(py)_2[H_2(fsa)_2en = N,N'-этилен-бис-$ (3-карбоксисалицилалдимин), ру = пиридин] при воздействии импульсного магнитного поля величиной импульса 32 Тл происходит спиновый переход из HS- в LS-состояние. Причем система остается в этом состоянии долгое время.

График зависимости магнитной восприимчивости χT от температуры представлен на рис. 2. В молекуле ОЭП кобальта отмечена особенность в зависимости χT от температуры в районе температуры 40 К. В окрестности T = 40 К происходит переход между спиновыми состояниями.

В данной работе апробирован наш подход на органической магнитной молекуле ОЭП кобальта путем численного решения нестационарного уравнения Ландау—Лившица с обобщенным спиновым гамильтонианом с использованием метода неприводимых тензорных операторов. При численном решении уравнения Ландау—Лившица мы использовали следующие параметры: продолжительность магнитного импульса $T_{pulse} = 0,17$ пс, период между магнитными импульсами — 37,4 пс, магнитная индукция импульса — 36,8 Тл. Мы нашли решения уравнения Ландау—Лившица для двух спиновых состояний: низкоспинового (S = 1/2, $t_{2g}^6 e_g^1$) и высокоспинового (S = 3/2, $t_{2g}^5 e_g^2$).

При воздействии постоянного магнитного поля с магнитной индукцией 0,1 Тл формируется спиновая структура через определенный интервал времени, который определяется с помощью расщепления в нулевом поле. После насыщения системы мы воздействуем на нее импульсом магнитного поля.



Рис. 3. Спиновая динамика для молекулы ОЭП кобальта без воздействия магнитного импульса (S = 1/2)

Fig. 3. Spin dynamics for OEP molecule of cobalt without the influence of a magnetic pulse (S = 1/2)



Рис. 4. Спиновая динамика для молекулы ОЭП кобальта при воздействии магнитного импульса (S = 1/2)

Fig. 4. Spin dynamics for OEP molecule of cobalt under the influence of a magnetic pulse (S = 1/2)



Рис. 5. Спиновая динамика для молекулы ОЭП кобальта при воздействии магнитного импульса (S = 3/2)

Fig. 5. Spin dynamics for OEP molecule of cobalt under the influence of a magnetic pulse (S = 3/2)

При отсутствии магнитного импульса система в низкоспиновом состоянии проявляет классическое поведение (рис. 3). При воздействии магнитного импульса с индукцией 36,8 Тл и длительностью 100 фс происходит спиновое переключение, после чего система возвращается в основное состояние (рис. 4). Напротив, в случае высокоспинового состояния, при воздействии импульса магнитного поля с индукцией 36,8 Тл и длительностью 100 фс в системе также происходит спиновое переключение, однако система остается в этом состоянии долгое время. При увеличении индукции магнитного поля более 36,8 Тл происходит еще одно спиновое переключение и меняется знак гамильтониана в приближении эффективного поля (рис. 5).

В нашем случае гамильтониан в приближении эффективного поля представляет собой производную спинового гамильтониана по среднему значению спина (\hat{S}). Поскольку в молекуле ОЭП кобальта всего один атом переходного металла, то обменным взаимодействием можно пренебречь. Следовательно, меняется только слагаемое анизотропного взаимодействия. Поэтому качественно поведение эффективного поля H_{eff} можно считать таким же, как поведение (\hat{S}), что видно на рис. 5.

Список литературы

1. de Silva A. P., Uchiyama S. Molecular logic and computing // Nature Nanotechnology, 2007. Vol. 2. P. 399–410.

2. Halcrow M. Spin-Crossover Materials, Wiley, West Sussex, 2013. 564 p.

3. **Guo B., Ding S.** Landau-Lifshitz equations, Singapore, World Scientific, 2008. 400 p.

4. Bernien M. X-ray absorption spectroscopy of Fe complexes on surfaces // PhD Thesis, Freie Universitt Berlin, 2010.

5. Borras-Almenar J. J., Clemente-Juan J. M., Coronado E., Tsukerblat B. S. High-Nuclearity Magnetic Clusters: Generalized Spin Hamiltonian and Its Use for the Calculation of the Energy Levels, Bulk Magnetic Properties, and Inelastic Neutron Scattering Spectra, Inorganic Chemistry, 1999. N. 38. P. 6081–6088.

6. **Garanin D. A.** Fokker-Planck and Landau-Lifshitz-Bloch equations for classical ferromagnets, Physical Review B. 1997. N. 55. P. 3050–3057.

7. **Wieser R.** Comparison of quantum and classical relaxation in spin dynamics, arXiv:1302.1985v1[cond-mat.mes-hall].

8. te Velde G., Bickelhaupt F. M., van Gisbergen S. J. A. Chemistry with ADF // Journal of Computational Chemistry, 2001. N. 22. P. 931–967.

9. **ADF2014**, SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands. URL: available at http://www.scm.com.

10. van Lenthe E., Ehlers A. E., Baerends E. J. Geometry optimizations in the zero order regular approximation for relativistic effects, Journal of Chemical Physics, 1999. N. 110. P. 8943–8953.

D. S. Chub¹, Postgraduate Student, dmchub@yandex.ru, **O. V. Farberovich**^{1,2,3}, **D.** Sc., Professor, **A. V. Soldatov**¹, **D.** Sc., Professor, Director

¹ Smart Materials International Center, Southern Federal University, 344090, Rostov-on-Don, Russia
 ² Beverly and Raymond Sackler Faculty of Exact Sciences, Tel Aviv University, Tel Aviv, 69978, Israel
 ³ Voronezh State University, Voronezh 394000, Russia

Dynamics of the Spin Crossover in the Co-octaethylporphyrin Molecular Magnets with a Terahertz Pulsed Magnetic Field

The article presents the results of a study of the spin dynamics of the Co-octaethylporphyrin molecule induced by applying the magnetic pulse of 36,8T. It demonstrates that the spin switching in case of the HS state of the Co-octaethylporphyrin molecule is characterized by a longer lifetime in the applied magnetic field. In the LS state the system quickly reverts to its basic state. The diagram of the dependence of the magnetic susceptibility of χT on the temperature demonstrates a specific feature at the temperature around 40 K connected with the spin transition between the two spin states.

Keywords: spin crossover, spin dynamics, Landau-Lifshitz equation

Introduction

The silicon technologies approximate their physical limit of miniaturization, when reduction of their dimensions becomes impossible. Therefore, a continuous search for new materials is conducted, allowing us to reduce the size of the devices, instruments and their components. Attention of the researchers is attracted to the molecular magnets because of their properties, very promising for potential applications. In such materials each molecule can be a memory element. Also a possibility is considered of the use of the molecular magnets as q-bits — elements of a quantum computer [1].

One of the conditions for data recording on the molecular magnets and for disclosing of the hysteresis loop is a slow relaxation of the system. In this respect of interest are the coordination compounds, in which by varying the co-ordinating ions of metals and ligands it is possible to control the final physical properties. In this area the compounds with a spin crossover are popular. A spin crossover is a switching between the two spin states of a molecule — the so-called high-spin (HS) and low-spin (LS) states.

A change of the spin states in the systems with a spin crossover can be caused by various external influences, such as changes of temperature, influence of light, pressure, magnetic field, etc. [2]. So far, the effects of temperature, pressure and light on the character of the spin dynamics for the compounds with a spin crossover have been theoretically studied and are clear.

In our work we present a theoretical research of the spin transition induced by a pulse magnetic field and its description within the Landau-Lifshitz equation with account of the energies of anisotropic interaction, exchange interaction and Zeeman splitting. As the object we selected octaethylporphyrin (OEP) of cobalt (Co-octaethylporphyrin), because in this molecule [4] the length of the chemical bond between cobalt and ligand is less, than in the compounds based on iron (II), which results in a slower relaxation of the spin state. The electronic configuration for calculations was taken from literature for the molecule of Co(II)([Ar]3d74s2), which can be either in a low-spin state ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$ S = 1/2), or in a high-spin state ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ S = 3/2), at that, both states are paramagnetic. A change in the configuration of the electrons on *d*-orbitals is accompanied by a considerable change of the length of the bond and molecular volume.

Theoretical details of calculations

Hamiltonian \hat{H}_{spin} of the spin system can be presented in the following way:

$$\hat{H}_{spin} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{an} + \hat{H}_{ZEE} + \hat{H}_{pulse}(t), \qquad (1)$$

where \hat{H}_{ex} — is the exchange Hamiltonian of Heisenberg— Dirac-van Vleck (HDVV), expressing an isotropic exchange interaction, \hat{H}_{an} — Hamiltonian of the axial anisotropy of the isolated ion, \hat{H}_{ZEE} — Hamiltonian Zeeman describing the interaction of the system with the stationary magnetic field, $\hat{H}_{pulse}(t)$ — Hamiltonian describing the interaction of the system with the variable magnetic field.

The operators' matrixes were brought to a diagonal form with the use of irreducible tensor operators [5]. For calculations of the magnetic properties of the system the model was used, in which for exclusion of the spin-spin interaction, the spin structure was considered as a uniform spin, interacting with the external magnetic field. The macroscopic behavior of the system with a spin crossover is described within the framework of approximation of the mean field [6]. In such an approximation Hamiltonian can look like:

$$\hat{H}_{spin} = -\gamma \mathbf{H}_{eff} \hat{\mathbf{S}} \,. \tag{2}$$

Here γ is the gyromagnetic ratio, $\hat{\mathbf{S}}$ — the operator describing interaction of the system's spin with the external magnetic field, which is expressed through the effective field \mathbf{H}_{eff} and determined by the following formula:

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{\partial \hat{H}_{spin}}{\partial \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle}, \qquad (3)$$

where $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ — is the mean value of the spin of the system.

Here the effective magnetic field \mathbf{H}_{eff} includes the external magnetic field \mathbf{H}_z , anisotropic interaction $\hat{\mathbf{H}}_{an}$, exchange interaction $\hat{\mathbf{H}}_{ex}$ and external pulse magnetic field $\hat{\mathbf{H}}_{pulse}(t)$. In the approximation of the mean field we have $\mathbf{H}_{eff} \rightarrow \mathbf{H}_{eff}^{mean}$, where \mathbf{H}_{eff}^{mean} is obtained by means of replacement of the instant values of the spins with their mean values $\hat{\mathbf{S}} \rightarrow \mathbf{M}_s = -\gamma \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$.

In approximation of the mean field the influence of the spin with an external mean field is taken into account, but not the interaction of the spins among themselves. The given approach is convenient because of the presence of a single spin in a molecule. By using the equation (2) we get [7] a modification of the Landau-Lifshitz equation with account of the dissipation:

$$\frac{\partial \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle}{\partial t} = \frac{1}{1 + \lambda^2} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle \cdot \mathbf{H}_{eff}^{mean} - \frac{1}{1 + \lambda^2} \cdot \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle \cdot (\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle \cdot \mathbf{H}_{eff}^{mean}), \qquad (4)$$

where λ — is the parameter of dissipation.

The effective magnetic field \mathbf{H}_{eff}^{mean} in approximation of the mean field is determined as a variational derivative of the free energy on the magnetic moment:

$$\mathbf{H}_{eff}^{mean}\left(\mathbf{M}_{s}, t\right) = -\frac{\delta F}{\delta \mathbf{M}_{s}},$$

where $F = -Nk_BT \ln Z(\mathbf{H}_z)$ is free Helmholtz energy; N – number of particles in the system; k_B – Boltzmann constant; T – absolute temperature of the system; $Z(\mathbf{H}_z)$ – statistical sum

$$Z(\mathbf{H}_{z}) = \sum_{\mathbf{M}_{s},\mu} \exp[-\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_{s})/(kT)] \sum_{\mathbf{M}_{s}} \exp[-g_{e}\mathbf{M}_{s}\mathbf{H}_{z}/(k_{B}T)],(5)$$

where g_e is Landé splitting factor.

The energy spectrum of the spin levels $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_s)$ in a magnetic field is found by the spin Hamiltonian diagonalization \hat{H}_{spin} . Having received the energy spectrum of the spin levels, we can estimate the following thermodynamic properties: magnetization, magnetic susceptibility and magnetic specific thermal capacity.

Since the spin Hamiltonian \hat{H}_{spin} contains only isotropic contributions, its own values do not depend on the direction of the vector of induction of the applied magnetic field. Hence, we can consider the external magnetic field \mathbf{H}_z directed along the conventional axis z of the coordinate system of a molecule as an axis of the spin quantization. The energies of the spin levels are equal to $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_s) + g_e \mathbf{M}_s \mathbf{H}_z$, where $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{M}_s)$ — are the own Hamiltonian values (index μ numbers the energy levels with the preset value \mathbf{M}_s). Within the limits of the statistical thermodynamics the magnetization of \mathbf{M}_s is determined by the expression:

$$\mathbf{M}_{s} = \frac{\partial F(\mathbf{M}_{s}, \mathbf{H}_{z})}{\partial \mathbf{H}} = Nk_{B}T \frac{\partial \ln(\mathbf{H}_{z})}{\partial \mathbf{H}}.$$
 (6)

Then the effective field $\mathbf{H}_{e\!f\!f}^{mean}$ can be presented as a variational derivative of the free energy function:

$$\mathbf{H}_{eff}^{mean} = \frac{\delta(F(\mathbf{M}_{s}, \mathbf{H}_{z}) + F(t))}{\delta \mathbf{M}_{s}} = \frac{\delta(F(\mathbf{M}_{s}, \mathbf{H}_{z}))}{\delta \mathbf{M}_{s}} + \mathbf{H}_{pulse}^{x}(t),$$
(7)

where $\mathbf{H}_{pulse}^{x}(t)$ — is the external pulse magnetic field applied along axis x. Thus, we have received a generalized form of the equation of the spin dynamics for the system with a spin precession in an effective magnetic field.

Calculation part

For the geometrical optimization of a molecule and determination of the spin Hamiltonian parameters, such as splitting of the zero field, g-tensor, exchange integral J_{ii} , anisotropy of the isolated ion, we carried out calculations within the framework of the Density Functional Theory (DFT) taking into account the effects of the spin-orbital interaction in the ADF program complex [8, 9]. The calculations were done with the exchange-correlation functional of Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) by means of the Zero Order Relativistic Approximation (ZORA) [10], with the use of a multielectronic valent three-exponent basic set with one function of polarization. The value of splitting in the zero field of OEP molecule of cobalt equal to 1,32 meV was determined. The splitting calculation in the zero field was done in a generalized gradient approximation of the exchange-correlation functional (GGA) of PBE. Hamiltonian splitting in the zero field looks like:

$$\hat{H}_{ZFS} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{D} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \qquad (8)$$

where $\hat{\mathbf{S}}$ — is the vector operator of the effective spin of the atom of cobalt, and **D** is a Cartesian tensor of anisotropy. After diagonalization of the Hamiltonian matrixes in the basis of the magnetic axes we receive:

$$\hat{H}_{ZFS} = D\hat{S}_z^2 + E(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2),$$
(9)

where parameters D — axial parameter of splitting in the zero field, and parameter E — rhombic parameter of splitting in the zero field. A condition for bistability of the molecular magnets is the negative value of the parameter D. Hamilto-

nian matrixes of Zeeman interaction (g-tensor) also have a diagonal appearance:

$$\hat{H}_{ZEE} = \mu_{B} \mathbf{H} \cdot \mathbf{g} \cdot \hat{\mathbf{S}} =$$

$$= \mu_{B} [H_{x} H_{y} H_{z}] \begin{bmatrix} g_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & g_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & g_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{S}_{x} \\ \hat{S}_{y} \\ \hat{S}_{z} \end{bmatrix}, \qquad (10)$$

where μ_B — is Bohr magneton [D1].

Calculation of the g-tensor was done by means of a regular approximation of the zero order with account of the spin-orbital interaction.

Results and discussion

The systems with a spin crossover are attractive objects for the further interdisciplinary researches due to a possibility of control of the state of a molecule by means of an external influence (temperature, pressure, light, electric and magnetic fields), small dimensions, femtosecond time of response and a possibility to combine a spin crossover with the other properties. Fig. 1, *a* presents a spin structure of OEP molecule of cobalt. Bistability of LS/HS compound of OEP of cobalt is explained by a small difference of the energies between the spin states. Fig. 1, *b* presents the electronic configurations of the two possible basic states of ion of cobalt (II) in the octahedral field of ligands. The transition from one electronic state into another can be considered as an intraionic transfer of the electrons, occurring with a change of orientation of their spins.

Since orbitals e_g are loosening, their filling is accompanied by an increase of the distance between the metal and the ligand. And, on the contrary, filling of orbitals t_g leads to strengthening of the dative interaction, and, hence, to strengthening of the metal-ligand bond. As a result the metal-ligand distance in a high-spin state is always more than in a low-spin state. We should point out, that the energy of splitting depends on the nature of the ligands, the transitive metal and the charge of its ion. At the same time, for a set complex the energy of splitting depends on the metal-ligand distance. The structure of OEP molecule of cobalt is presented in fig. 1, c.

A big number of researches are aimed at studying of the photoinduced spin transition leading to a change of the geometrical and magnetic structure of the molecular magnets. However, so far we have found no works devoted to the spin dynamics of the systems with a spin crossover. One of the drawbacks of the photoinduced spin crossover is a little lifetime of the spin state, therefore we decided to investigate the spin crossovers induced by a strong pulse magnetic field. In our work we focused on the research of the spin dynamics of the system with a spin crossover induced by a strong pulse magnetic field, and also the conditions, in which the system can be in one of the bistable states during a long period of time. As is known, in the complex of $Co(H_2(fsa)_2en)(py)_2[H_2(fsa)_2en = N,N'-eth$ ylen-bis(3-carboxysalicylaldimin), py = pyridine] under the influence of a pulse magnetic field with a pulse of 32 T a spin transition occurs from HS into LS state. At that, the system remains in this state for a long time.

The diagram of dependence of the magnetic susceptibility χT on the temperature is presented in fig. 2. In OEP molecule of cobalt a special feature was observed of dependence of χT on the temperature in the area of 40 K. Around 40 K there is a transition between the spin states, as one can see in the diagram of the dependence of χT on temperature.

In the given work we tested our approach based on organic magnetic molecule OEP of cobalt by a numerical solution of the non-stationary equation of Landau-Lifshitz with a generalized spin Hamiltonian and the use of the method of irreducible tensor operators. Applying the numerical solution of the Landau-Lifshitz equation we used the duration of the magnetic pulse $T_{pulse} = 0,17$ ps, the period between the magnetic impulses -37,4 ps, and the magnetic induction of the pulse -36,8 T. We found solutions to the Landau-Lifshitz equation for the two spin states: low-spin (S = 1/2, $t_{2g}^6 e_g^1$) and high-spin (S = 3/2, $t_{2g}^5 e_g^2$). Under the influence of a constant magnetic field with a

magnetic induction of 0,1 T through a certain interval of time the spin structure is formed, the value of which is determined by means of splitting in the zero field. After saturation of the system we apply a magnetic field pulse to it. In the absence of a magnetic pulse, in the low-spin state the system demonstrates classical behavior (see fig. 3). Under the influence of a magnetic pulse with induction of 36,8 T and duration of 100 fs a spin switching occurs, then the system returns to its basic state (fig. 4). On the contrary, in case of a high-spin state, under the influence of a pulse of the magnetic field with an induction of 36,8 T and duration of 100 fs, a spin switching also occurs in the system, however, the system remains in this state for a long time. With an increase of the induction of the magnetic field over 36,8 T, another spin switching occurs and the Hamiltonian sign changes in approximation of the effective field (fig. 5).

In our case the Hamiltonian in approximation of the effective field is a derivative of a spin Hamiltonian by mean value of the spin $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$. Since in OEP molecule of cobalt there is only one atom of the transitive, the metal exchange interaction can be neglected. Hence, only a summand of the anisotropic interaction is changed. Therefore, the behavior of the effective field H_{eff} can be qualitatively regarded as the same as the behavior of $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$, which is visible from fig. 5.

References

1. de Silva A. P., Uchiyama S. Molecular logic and computing, *Nature Nanotechnology*, 2007, no. 2. pp. 399–410.

2. Halcrow M. Spin-Crossover Materials, Wiley, West Sussex, 2013, 564 p.

3. Guo B. and Ding S. Landau-Lifshitz equations, Singapore, World Scientific, 2008, 400 p.

4. Bernien M. X-ray absorption spectroscopy of Fe complexes on surfaces, PhD Thesis, Freie Universitt Berlin, 2010.

5. Borras-Almenar J. J., Clemente-Juan J. M., Coronado E., Tsukerblat B. S. High-Nuclearity Magnetic Clusters: Generalized Spin Hamiltonian and Its Use for the Calculation of the Energy Levels, Bulk Magnetic Properties, and Inelastic Neutron Scattering Spectra, *Inorganic Chemistry*, 1999, no. 38, pp. 6081–6088.

6. Garanin D. A. Fokker-Planck and Landau-Lifshitz-Bloch equations for classical ferromagnets, *Physical Review B*, 1997, no. 55, pp. 3050–3057.

7. **Wieser R.** Comparison of quantum and classical relaxation in spin dynamics, arXiv:1302.1985v1[cond-mat.mes-hall].

8. te Velde G., Bickelhaupt F. M., van Gisbergen S. J. A. Chemistry with ADF, *Journal of Computational Chemistry*, 2001, no. 22. pp. 931–967.

9. ADF2014, SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, available at http://www.scm.com.

10. van Lenthe E., Ehlers A. E., Baerends E. J. Geometry optimizations in the zero order regular approximation for relativistic effects, *Journal of Chemical Physics*, 1999. no. 110. pp. 8943–8953. **А. Н. Сауров**¹, чл.-корр. РАН, директор, **С. В. Булярский**¹, д-р физ.-мат. наук, проф., нач. лаборатории, **П. К. Кондратьев**¹, мл. науч. сотр., **А. А. Скворцов**², д-р физ.-мат. наук, зав. каф.,

А. А. Павлов¹, канд. техн. наук, нач. отдела, e-mail: inmeozi@gmail.com,

Р. А. Милованов¹, канд. техн. наук, зам. нач. отдела, **Е. П. Кицюк**¹, мл. науч. сотр.

¹ Институт нанотехнологий микроэлектроники (ИНМЭ) РАН, Москва,

² Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ)

КОНСТРУКЦИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ТЕСТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ С КОМПОЗИТНЫМИ ПРОВОДНИКАМИ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И МЕТАЛЛОВ

Поступила в редакцию 14.04.2016

Представлена конструкция и технология изготовления тестовых кристаллов, предназначенных для создания и исследований композитной металлизации СБИС с применением углеродных нанотрубок (УНТ). В качестве металлической основы используется электрохимически осаждаемая медь, а УНТ выступают в роли наполнителя. Технология изготовления совместима с технологией СБИС.

Ключевые слова: металлизация, СБИС, композит, металлическая матрица, углеродные нанотрубки, концентрация, тестовый кристалл, топология, электрохимическое осаждение, медь

Введение

В настоящее время появилось много исследований, связанных с использованием композитных материалов на основе углеродных нанотрубок (УНТ) и металлов. Сообщается, что в результате добавления УНТ снижается масса получаемого материала [1], улучшаются его механические характеристики (увеличивается твердость, модуль Юнга и т.д.) [2-8], термические характеристики (уменьшается КТР, увеличивается теплопроводность) [4, 5, 8], повышается коррозионная стойкость [5, 7], возрастает предельно выдерживаемая плотность тока [10, 11]. В ряде работ отмечается, что введение углеродных нанотрубок приводит к незначительному увеличению сопротивления при комнатной температуре [2-5, 10-12], причем в [11] сказано, что при повышенных температурах сопротивление композита может быть ниже из-за меньшего значения коэффициента температурной зависимости сопротивления. В [1, 13] также сообщается, что получены образцы композитов Cu-УНТ с сопротивлением при комнатной температуре меньшим, чем у чистой меди. Дополнительно ожидается, что композит должен обладать преимуществами с точки зрения противодействия электро-, термо-, стрессмиграции [9, 10]. В целях повышения надежности и улучшения электрических характеристик интегральных схем такой материал может давать неоспоримые преимущества.

Поскольку в реальных условиях эксплуатации деградация токоведущих дорожек интегральных схем (ИС) занимает годы, для исследований этого явления применяют ускоренные испытания. Наиболее распространенными средствами ускорения является повышение температуры и плотности тока [14]. Процедуры испытаний характеризуют-

ся большим числом особенностей, которые часто приводят к широкому разбросу результатов. Поэтому для получения достоверных данных необходимо проводить исследования на стандартизированных структурах. В целом методики определения различных параметров для обычных материалов (Cu, Al) разработаны достаточно подробно [15-17]. Однако при определении каждого конкретного параметра зачастую создаются отдельные образцы определенной формы, причем набор таких конструкций достаточно велик. В данной работе проведен анализ современных методик испытания систем одноуровневой металлизации ИС, и на основе накопленного опыта разработана конструкция тестового образца, который позволяет определять параметры композитных дорожек, а также проводить их испытание на воздействие различных факторов с использованием тестового кристалла с минимальным набором элементов.

При создании тестового образца мы ставили себе следующие цели. Во-первых, он должен производиться по технологии, совместимой с технологией СБИС. Это необходимо, поскольку многие методы создания композитов, перечисленные в [1-13] (такие как порошковая металлургия, расплавление с последующей кристаллизацией, торсионная сварка и др.), хотя и демонстрируют преимущества композитов, при этом не подходят для полупроводникового производства. Поэтому в работе делается акцент на совершенствовании низкотемпературных методов выращивания УНТ нужной морфологии, а также методов одновременного электрохимического осаждения (ЭХО) меди с нанотрубками и осаждения меди в предварительно выращенные массивы УНТ. Дополнительно предусмотрены предварительная функционализация поверхности УНТ и применение атомно-слоевого осаждения для формирования различных подслоев. Во-вторых, в образцах объединены несколько типов тестовых структур, обеспечивающих проведение широкого спектра разносторонних испытаний композитной металлизации, а именно:

- определение электрического сопротивления двух- и четырехзондовыми методами;
- определение влияния массивов УНТ, выращенных с различной плотностью расположения нанотрубок и по различному рисунку (в поперечном, продольном или сетчатом исполнении, с различной площадью катализатора) на скорость и степень электромиграции вдоль проводника, его электрическое сопротивление и коэффициент температурной зависимости сопротивления;
- определение длины инициирования электромиграции (Blech-длины) для указанных композитных структур при разных плотностях тока;
- изучение твердости получаемого композита (методами Кнуппа, Виккерса, склерометрии) и сравнение с чисто медными структурами.

Описание тестовых кристаллов

Тестовые образцы представляют собой кристаллы, выполненные по планарной технологии на круглой полупроводниковой пластине. В качестве рабочих пластин используются пластины кремния с электронным типом проводимости, легированные мышьяком (типа КЭМ-0.001), ориентацией (100) и соответственно с удельным электрическим сопротивлением $\rho = 0,001\Omega \cdot \text{см}$. Такое низкое сопротивление необходимо для реализации подачи электрического потенциала с обратной стороны кристалла через подложку к тестовым структурам при проведении последующего электрохимического осаждения металлов. Диаметр пластин — 100 мм, и толщина — 400 мкм. Размер отдельного модуля, содержащего три кристалла различного функционального назначения, составляет 25,5×8,5 мм. Размер каждого кристалла 8×8 мм, либо 8,5×8,5 мм с учетом дорожек реза. Различаются кристаллы исключительно рисунком катализатора под массивы углеродных нанотрубок.

Все тестовые структуры в кристаллах соединены перемычками с областями, расположенными непосредственно на кремнии. Посредством этих областей осуществляется приложение напряжения с обратной стороны подложки во время электрохимического осаждения металла. После этой операции перемычки отрезаются либо лазером на установке Karl Zuss PM5, либо ионной пушкой на установке Vion (FEI). При использовании Дамасского процесса необходимость в перемычках соответственно отпадает. Ниже приводится описание тестовых структур.

Тестовые структуры 1-го типа

Эксперименты по подтверждению различных теорий массопереноса в результате электромиграции могут проводиться различными способами, но сравнение процессов, материалов и методов выполняется, как правило, на прямых проводниках методом Кельвина, в результате чего осуществляется сбор статистики и определяются критерии отказов. Самым простым типом таких структур является структура "собачья кость" или NIST (National Institute of Standards and Technology, США), представленная в работах [15, 16]. Похожая структура, но в другом масштабе, описана в работе [17]. Немного усовершенствованный вариант с выделением двух токовых и двух потенциальных контактных площадок представлен в стандарте 1259М-96 (2003) ASTM International [18]. Указанные тестовые структуры позволяют определять сопротивление проводника, но при изучении эффекта электромиграции предусматривают фиксацию лишь интегральной характеристики со всей дорожки. Регистрировать на подобных структурах начальные этапы развития деградационных процессов и распространение оплавленных зон (скорость и направление) практически невозможно — такие нарушения носят, как правило, локальный характер. Более выгодной с этой точки зрения является структура, представленная в работе [19]. На ней сформированы дополнительные потенциальные контактные площадки, которые позволяют снимать осциллограммы с отдельных участков дорожки металлизации (длиной ~300 мкм) и фиксировать локальные неоднородности, возникающие в процессе прохождения токовых импульсов, например, области зарождения расплавленных зон и контактного плавления.

В результате за основу принята базовая структура в виде проводника Ti/TiN длиной 800 мкм (рис. 1). Это значение согласуется со стандартизированной тестовой структурой типа NIST [15, 16] и стандартом [17]. По возможности вместо комбинации Ti/TiN предпочтительнее использовать



Fig. 1. Test structure of the 1-st type

Ta/TaN, которые обеспечивают лучшую адгезию медного композита. Для исследований более современных систем металлизации допускается также использование структур меньшей длины. Ширина проводника Ti/TiN w = 28,5 мкм при толщине h = 0,33 мкм. Для медных и композитных структур длина остается такой же; толщина может варьироваться и зависит от продолжительности и других характеристик электроосаждения. Ширина медного проводника составляет w = 25,5 мкм, что на 1,5 мкм с каждой стороны уже базового титанового подслоя. Дополнительно, с учетом сведений, приведенных в работе [19], к двум токовым площадкам (обозначены как I1, I2), в тестовой структуре добавлены пять потенциальных контактных площадок (обозначены как V1, ..., V5), делящие структуру на четыре сегмента по 200 мкм и позволяющие отдельно снимать сигналы с каждого из них.

Размер контактных площадок подбирался с точки зрения удобства контактирования зондами на станции, оснащенной оптическим микроскопом (например, Karl Zuss PM5), и с учетом требований ручной или автоматической разварки выводов при установке кристалла в корпус или на макетную печатную плату (размер контактной площадки не менее 1,5...2 диаметров проволоки). Дополнительно был принят во внимание стандарт № EIA/JEP128 (JEDEC Publication), согласно которому размер контактных площадок должен быть не менее 80 мкм (по каждой стороне) и расстояние между центрами соседних — не меньше 160 мкм. Форма потенциальных контактных площадок V1, ..., V5 выбрана квадратной; размер 125×125 мкм. Токовые площадки I1, I2 задействованы в передаче электрического тока высоких плотностей и испытывают серьезные тепловые нагрузки. Поэтому они больше (лучше теплоотвод и площадь сцепления с основой) и имеют скос под 45° в сторону тестовых структур. Ширина дорожек к V1, ..., V5 составляет 6 мкм против 25,5 мкм ширины основной структуры. Это обеспечивает более равномерные значения плотности тока по всей длине тестируемой области и не оказывает существенного влияния на теплоотвод.

В качестве маски при формировании композитных структур на титановом подслое используется Si_3N_4 . Альтернативно допускается применение маски специализированных фоторезистов, предназначенных для проведения ЭХО различной толщины (например, "ma-P 1200...1240").

Представленная на рис. 1 структура позволяет проводить тестирование электрофизических характеристик получаемых композитных проводников и дополнительно исследовать их деградацию в результате электромиграции посредством измерения сопротивления, которое зависит от структурных и геометрических изменений, происходящих при передвижении атомов. При этом эксперименты по электромиграции могут заключаться как в изучении деградационных процессов при длительных воздействиях "докритических" плотностей тока, так и в экспериментах, связанных с образованием расплавленных зон, в том числе при высоких тепловых нагрузках или тепловых ударах, вызываемых прямоугольными импульсами тока амплитудой до $8 \cdot 10^{10}$ A/m² и длительностью 100...1000 мкс [19].

Тестовые структуры 2-го типа

В качестве основы была рассмотрена тестовая структура, представляющая собой металлическую полосу, размещенную поверх более высокоомного проводника, в результате чего электрический ток практически полностью проходит через верхнюю структуру, вызывая массовый транспорт в направлении движения носителей заряда. Этот метод позволяет проводить прямое измерение скорости перемещения ионов металла под воздействием электронного ветра и был введен исследователями Blech и Kinsbron [20] в качестве эффективного метода оценки кинетических параметров электромиграции. Для осуществления подобных экспериментов необходимо, чтобы нижний проводник лишь в незначительной степени участвовал в токопереносе. Этому условию удовлетворяет, например, подслой из титана. На рис. 2 представлена зависимость отношения сопротивления слоя меди к сопротивлению слоя титана толщиной 300 нм в зависимости от толщины слоя меди.

Как видно, при толщинах меди от нескольких сотен нанометров и до нескольких микрометров сопротивление подслоя Ті значительно больше. Это позволяет считать, что весь электрический ток пойдет через композит, даже если его сопротивление будет несколько выше, чем сопротивление чистой меди. В наших образцах применяется Ті —



Рис. 2. Зависимость R(Cu)/R(Ti) от толщины меди Fig. 2. Dependence of R(Cu)/R(Ti) on the thickness of copper

более высокоомный материал по сравнению с Мо, используемым в работе [10, 11]. В тестовой структуре, описанной данной группой исследователей, отношение сопротивления верхнего проводника к сопротивлению Мо-подслоя составляет всего 17,5 % для чистой меди при толщинах Сu 350 нм и Мо 200 нм.

Тестовая структура второго типа (рис. 3, см. четвертую сторону обложки) представляет собой серию проводников шириной 25,5 мкм с длинами 2,5-5-10-25-50-75-100-125-150-175 мкм, находящихся на базовом проводнике Ti/TiN и предназначена в том числе для определения влияния продольных массивов УНТ на электромиграцию, а также нахождения Blech-длины (длины инициирования электромиграции) при заданных температурах и плотностях тока. Данная структура *на примере композитной металлизации медь/УНТ* призвана показать следующее:

- чем длиннее полосы, тем большему истощению подвергаются катодные стороны при электромиграции;
- при определенной плотности тока не наблюдается истощения ниже некоторой "критической длины";
- для отрезков определенной длины электромиграция не проявляет себя, пока плотность тока не достигает некоторого значения.

По данным из литературных источников Blechдлина для проводников из разных материалов и при разной плотности тока составляет от 10...75 мкм. При увеличении длины степень проявления электромиграции соответственно возрастает. По этой причине представленная нами тестовая структура содержит набор дорожек от 2,5...175 мкм.

Тестовые структуры 3-го типа

Тестовая структура 3-го типа (рис. 4, см. четвертую сторону обложки) представляет собой серию проводников длиной 100 мкм (такая длина гарантирует проявление эффекта электромиграции (ЭМ) с ширинами 2,2-3-6-12-24-48 мкм и предназначена для определения влияния ширины проводника и поперечных массивов УНТ на процессы электромиграции. Обозначенные на рис. 4 балластные проводники обеспечивают равномерность суммарного сечения для дорожек разной ширины.

Увеличение ширины оказывает влияние на значение стресс-градиента напряжений [14] поперек проводника, в результате чего вакансии диффундируют к краю линии более быстрыми темпами, чем в узком аналоге. По возможности желательно использовать минимальные ширины линий 1 мкм и меньше, поскольку в более широких проводниках эффект проявляется слабее. Указанный в работе размер 2,2 мкм обусловлен доступной топологической нормой. Соответственно, минимальная ширина топологических элементов слоя катализатора также составляет 2,2 мкм. В дальнейшем с использованием средств электронной литографии или литографии EUVL (Extreme Ultra Violet Lithography) планируется доведение этой величины до нескольких десятков нанометров, что сопоставимо с диаметрами УНТ.

Тестовые структуры 4-го типа

Тестовая структура 4-го типа (рис. 5, см. четвертую сторону обложки) представляет собой серию проводников размерами 100×25,5 мкм с различным рисунком катализатора. Длина 100 мкм, как и в предыдущем случае, гарантирует проявление ЭМ.

Тестовая структура предназначена для сравнения влияния массивов УНТ разной плотности и расположения на процессы электромиграции в композитных структурах. Исследуются массивы с различными шириной и интервалами друг от друга в параллельном, перпендикулярном и сетчатом исполнении.

Как и в предыдущих структурах, регулирование концентрации УНТ осуществляется несколькими способами: во-первых, регулированием параметров синтеза для выращивания разреженных массивов УНТ; во-вторых, использованием наряду со сплошным фрагментированного рисунка катализатора. Фрагментация осуществляется литографическими методами, где минимальный размер конечного элемента определяется допустимой топологической нормой. Применяются структуры с площадью катализатора 0, 6, 12,5, 25, 50, 75, 100 %. Это позволяет проводить количественную оценку и сравнивать концентрации УНТ в разных образцах.

Заключение

В статье на основе анализа существующих методик исследования одноуровневой металлизации ИС представлена топология и технология изготовления тестовых кристаллов, предназначенных для исследования композитных проводящих дорожек на основе УНТ и металлов. Технология получения композита, включающая в себя низкотемпературный синтез УНТ и электрохимическое осаждение меди в массивы нанотрубок (в том числе их одновременное осаждение) совместима с технологией СБИС. Разработанные тестовые структуры позволяют определять электрофизические и механические свойства композитов, а также влияние массивов УНТ различной концентрации и различного расположения на степень проявления электромиграции.

Список литературы

1. Lee Dominic F., Burwell Malcolm, Stillman H. Priority Research Areas to Accelerate the Development of Practical Ultraconductive Copper Conductors // Electrical and Electronics Systems Research Division, Oak Ridge National Laboratory, USA. 2015. P. 26. 2. Weißgärber Thomas. Metal/Carbon nanotube Composites // Fraunhofer Institute for manufacturing Technology and Advanced Materials IFAM, Dresden, 2012. P. 2.
 3. Weißgärber Thomas, Hutsch Thomas, Kieback Bernd.

3. Weißgärber Thomas, Hutsch Thomas, Kieback Bernd. Metall-Carbon-Verbunde für funktionelle Anwendungen // Maschinen Markt. 2012. N. 4. P. 46–48.

4. Aryasomayajula Lavanya, Wolter Klaus-Juergen. Carbon Nanotube Composites for Electronic Packaging Applications: A Review // Hindawi Publishing Corporation: Journal of Nanotechnology. 2013, Article ID 296517. P. 7.

5. Bakshi S. R., Lahiri D., Agarwal A. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites — a rewiew // International Materials Reviews. 2010. Vol. 55, N. 1. P. 41—64.

6. **Quang Pham, Jeong Young Gi, Yoon Seung Chae** et al. Carbon Nanotube Reinforced Metal Matrix Nanocomposites Via Equal Channel Angular Pressing // Switzerland. Trans Tech Publications. Materials Science Forum. Vols. 534—536. 2007. P. 245—248.

7. **Conductors and Yarns**. Nanocomp Technologies Inc. 2014. URL: http://www.nanocomptech.com/environmentally-tough.

8. **Praveennath G. Koppad, Vikas Kumar Singh, Ramesh C. S.** et al. Metal Matrix Nanocomposites Reinforced with Carbon Nanotubes // Advanced Carbon Materials and Technology. Scrivener Publishing LLC. 2014. P. 331–376.

9. Subramaniam Chandramouli, Yamada Takeo, Kobashi Kazufumi et al. One hundred fold increase in current carrying capacity in a carbon nanotube—copper composite. // Nature communications. Macmillan Publishers Limited. 2013. DOI: 10.1038/ncomms3202. P. 7.

10. Chai Yang, Chan Philip C. H. High Electromigration-Resistant Copper/Carbon Nanotube Composite for Interconnect Application // IEEE International. Electron Devices Meeting IEDM. 2008. P. 4.

11. Chai Yang, Chan Philip C. H., Fu Yunyi et al. Electromigration Studies of Cu-CNT Composite Interconnects Using Blech Structure // IEEE Electron Device Letters. 2008. Vol. 29. P. 1001–1003.

12. Arai Susumu, Saito Takashi, Endo Morinobu. Cu-MWC-NT Composite Films Fabricated by Electrodeposition // Journal of The Electrochemical Society. 2010. N. 157 (3). P. 147–153.

13. **Dumitrescu Irina.** The European commission awards 3,3 million for the development of ultraconductive copper. Brussels, 2013. URL: http://www.copperalliance.eu/news-and-media/press-releases.

14. **Failure** Mechanism of Semiconductor Devices // Semicon Panasonic Japan. 2009. Vol. T04007BE-3. P. 60.

15. **Harry A. Schafft.** Thermal Analysis of electromigration test structures // IEEE Transactions on Electron Devices. 1987. Vol. ED-34. N. 3. P. 664–672.

16. **Tan Cher Ming.** Electromigration in ULSI Interconnections // World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. International Series on Advances in Solid State Electronics and Technology. 2010. P. 291.

17. Nguyen T. A., Joubert P.-Y., Lefebvre S. et al. Study for the non-contact characterization of metallization ageing of power electronic semiconductor devices using the eddy current technique // Microelectronics Reliability. 2011. N. 51. P. 1127–1135.

18. **Standard Guide** for Design of Flat, Straight-Line Test Structures for Detecting Metallization Open-Circuit or Resistance-Increase Failure Due to Electromigration // ASTM International Designation. West Conshohocken. United States. 2003. Designation: F 1259M - 96 (Reapproved 2003). P. 2.

19. Скворцов А. А., Каленков С. Г., Корячко М. В. Фазовые превращения в системах металлизации при нестационарном тепловом воздействии // Письма в ЖТФ. 2014. Т. 40. Вып. 18. С. 24—32.

20. **Blech I. A., Kinsbron E.** Electromigration in thin gold films on molybdenum surfaces // Thin Solid Films. 1975. N. 25. P. 327–334.

A. N. Saurov¹, Corresponding Member of RAS, Director, **S. V. Buliarsky**¹, D. Sc., Professor, Head of Laboratory, **P. K. Kondratiev**¹, Junior Researcher, inmeozi@gmail.com,

A. A. Skvortsov², D. Sc., Head of Department, A. A. Pavlov¹, Ph. D., Head of Department,

R. A. Milovanov¹, Ph. D., Deputy Head of Department, **E. P. Kitsyuk**¹, Junior Researcher

¹ Institute of Nanotechnologies of Microelectronics (INME) of RAS, 32A, Leninsky Prospekt, Moscow, 119991, Russia

² Moscow State University of Mechanical Engineering (MAMI), 38, Bolshaya Semenovskaya St., Moscow, 107023, Russia

Design and Fabrication Technology of Integrated Circuit with Test Structures Based on Metal Matrix — Carbon Nanotubes Composite Conductors

The paper presents design and fabrication technology of the test crystals intended for development and research of Integrated Circuit metallization based on Metal Matrix — Carbon Nanotubes (CNTs) composite conductors. The metal base is made of electrochemically deposited copper, while CNTs play the role of a fillers. Composite conductors are made in the form of test structures designed to study the addition of carbon nanotubes on the electrical properties of the base material, as well as experiments on electromigration. Presented technology is compatible with CMOS.

Keywords: metallization, integrated circuit, composite, metal matrix, carbon nanotubes, concentration, test crystal, topology, electrochemical deposition, copper

Introduction

A lot of research works appeared concerning the use of the composite materials on the basis of carbon nanotubes (CNT) and metals. Addition of CNT reduces the weight of a material [1], improves its mechanical characteristics (strength, Young modulus, etc.) [2–8], thermal characteristics (coefficient of thermal expansion is reduced, the thermal conductivity is increased) [4, 5, 8], the corrosion resistance is improved [5, 7],

the maximal current density grows [10, 11]. The authors point out that insertion of CNT leads to an increase of resistance at a room temperature [2-5, 10-12]. According to [11], at higher temperatures the resistance of a composite can be lower because of a smaller temperature coefficient of resistance. According to [1, 13] at a room temperature samples of Cu-CNT composites have smaller resistance, than those of pure copper. It is expected that a composite would have advantages from the point of view of counteraction to electro-, thermo-, and stresses-migrations [9, 10]. The material can also ensure such advantageous as increased reliability and improved electric characteristics of the integrated circuits.

Since in real conditions of operation the degradation of the current carrying paths of the integrated circuits (IC) takes years, for research of the phenomenon the accelerated tests are applied. The most widespread means are higher temperature and current density [14]. The test procedures are characterized by a big number of features, which often lead to a spread of the results. Therefore, for authenticity of the data it is necessary to carry out research on the standardized structures. In general, the determination techniques for usual materials (Cu, Al) have been developed in sufficient detail [15-17]. During determination of a concrete parameter separate samples of certain forms are frequently created, at that, a set of such designs is great enough. In the work an analysis was done of the techniques for testing of the systems of single-level metallization of IC, and on the basis of the accumulated experience the design of the test sample was developed, which made it possible to determine the parameters of the composite paths, to conduct their test for influence of various factors using a test crystal with a minimal set of elements.

During development of the test sample we pursued the following aims. First, it had to be done by the technology compatible with IC (Integrated Circuit) technology. This is necessary, because, although the methods for development of composites [1-13] (powder metallurgy, melting and solidification, torsion welding, etc.) demonstrate advantages of the composites, they do not suitable for the Semiconductor Manufacturing. Therefore, in the work the emphasis is placed on improvement of the low-temperature growing of CNTs of the needful morphology, and also a simultaneous electrochemical deposition (ECD) of copper with nanotubes, copper deposition in the preliminary grown CNT forests. Additionally the following factors were envisaged: a preliminary functionalization of the CNT surfaces, atomic layer deposition (ALD) for formation of various intermediate layers. Secondly, the samples contains several types of the test structures, which ensured carrying out of a wide spectrum of tests of the composite metallization, namely:

- measurement of the electric resistance by the two- and four-probe methods;
- determination of the influence of CNT arrays with various density (-) of nanotubes and various drawings of the catalyst (in the transverse, longitudinal or mesh versions, with various areas of the catalyst) on the electromigration drift velocity along a conductor, its electric resistance and temperature coefficient of resistance;
- determination of the length of initiation of electromigration (Blech-length) for the specified composite structures at different current densities;
- investigation of the hardness of a received composite (by sclerometry or Knupp and Vickers test methods) and comparison of the results with the pure copper structures.

Description of the test crystals

The test samples are the crystals made by planar technology on a round semi-conductor wafer. As working, the silicon wafers with electronic type of conductivity, doped by arsenic (KEM-0.001), orientation (100) and with specific electric resistance of $\rho = 0,001 \ \Omega \cdot cm$ are used. Such a low resistance is necessary for supply of the electric potential from the backside (-) through a substrate to the test structures during the subsequent electrochemical deposition of metals. Diameter of the plates - 100 mm, and thickness - 400 μ m. The dimensions of the module containing three different-purpose crystals are $25,5 \times 8,5$ mm. The dimensions of each crystal are 8×8 mm, or $8,5 \times 8,5$ including the cutting area. The crystals differ exclusively by the drawings of the catalyst for CNT arrays.

All the test structures in the crystals are connected by jumpers with the areas located directly on the silicon. By means of them the voltage is applied from the backside of the substrate during the electrochemical deposition of a metal. After this operation the jumpers are cut off by Karl Zuss PM5 laser or by Vion (FEI) focused ion beam. If the Damask process is used, there is no necessity in the jumpers. Below a description of the test structures is presented.

Test structures of the 1st type

Experiments for confirmation of the theories of masstransfer as a result of electromigration can be carried out by various ways, but comparison of the processes, materials and methods is done on straight conductors by the method of Kelvin. As a result, the statistical data are acquired and the criteria of failures are determined. The most simple one is the "dog bone" structure or NIST (National Institute of Standards and Technology, USA) [15, 16]. A similar structure, but of a different scale is described in [17]. Its slightly improved version, which singles out two current and two potential contact platforms, is presented in the standard of 1259M - 96 (2003) ASTM International [18]. The test structures allow us to determine the resistance of a conductor, but during studying of the electromigration effect they envisage fixation of only the integral characteristic of the whole of the path. It is practically impossible to record on the structures the initial stages of the degradation processes and distribution of the molten zones (velocity and direction) — such problems have a local character. The structure [19] is more suitable. Additional potential contact platforms are formed on it, which allow us to record oscillograms from separate sections of a path of metallization (length $\sim 300 \ \mu m$) and to fix the local heterogeneities, which appear during passage of the current pulses: for example, areas of origin of the molten zones and contact fusion.

As a result, as a basis we accepted the basic structure in the form of Ti/TiN conductor with the length of 800 μ m (fig. 1). It agrees well with the standardized test structure of NIST [15, 16] and the standard [17]. Instead of Ti/TiN combination more preferable is Ta/TaN, which ensures the best adhesion of a copper composite. For research of the modern metallization systems it is acceptable to use structures of a smaller length. The width of Ti/TiN conductor is $w = 28,5 \mu m$ at the thickness $h = 0.33 \,\mu\text{m}$. For the copper and composite structures the length remains the same; the thickness can vary and depends on the duration and other characteristics of electrodeposition. The width of a copper conductor is $w = 25,5 \mu m$, from each side 1,5 micrometers less than the basic titanic intermediate layer. In addition, with the account of the data [19], in the test structure, to the two current platforms (I1, I2) five potential contact platforms are added (V1, ..., V5), dividing the structure into four segments, 200 µm each, and allowing to record separately the signals from each of them.

The size of the contact platforms was selected from the point of view of the contact convenience of the probes at the station equipped with an optical microscope (Karl Zuss PM5), and with the account of the requirements of manual or automatic wire bonding during installation of a crystal into the package or on a (-) printed-circuit board (the size of a contact platform is not less than 1,5...2 diameters of a wire). In addition the standard N^o EIA/JEP128 (JEDEC Publication) was taken into consideration, according to which the

size of the contact platforms is not less than 80 μ m (on each side) and the distance between the centers of the neighboring ones is not less than 160 μ m. The form of the potential contact platforms of V1, ..., V5 was chosen as the square one; with the size of $125 \times 125 \mu$ m. The current platforms I1, I2 are involved in transfer of the electric current of high density and are subjected to considerable thermal loads. Therefore, they are bigger (the heat-conducting path and the area of coupling with the basis are better) and have a slant of 45° towards the test structures. The width of the paths to V1, ..., V5 equals to 6 micrometers compared with 25,5 μ m of the width of the basic structure. This ensures a uniform density of the current along all the length of the tested area and does not render an essential influence on the heat sink.

 Si_3N_4 is used as a mask during formation of the composite structures on the titanic sublayer. Application of a mask of special photoresists for carrying out of ECD of various thicknesses (for example, "ma-P 1200...1240") is admissible.

The structure in fig. 1 allows us to test the electrophysical characteristics of the composite conductors and in addition to investigate their degradation as a result of electromigration by means of measurement of the resistance, which depends on the structural and geometrical changes during the movement of atoms. At that, the electromigration experiments can consist in studying of the degradation processes during the long influences of the "subcritical" current densities and in the experiments connected with formation of the molten zones, including at high thermal loads or the thermal shocks caused by rectangular current pulses of amplitude up to $8 \cdot 10^{10}$ A/m² and duration of 100...1000 µm [19].

Test structures of the 2nd type

As a basic, a test structure was considered presenting a metal strip, placed atop of a more high-resistance conductor, as a result of which the electric current passed completely through the top structure, causing mass transport in the direction of movement of the charge carriers. The method allows a direct measurement of the speed of movement of the ions of a metal under the action of an electronic wind, and it was introduced [20] as an effective method for estimation of the kinetic parameters of electromigration. Such experiments demand that the bottom conductor participates only insignificantly in the current transfer. This condition is met, for example, by a sublayer from titanium. Fig. 2 presents the dependence of the relation of the resistance of the copper layer to the resistance of the copper layer.

If the thickness of copper varies from several hundreds of nanometers up to several micrometers, the resistance of the Ti sublayer is much higher. This allows us to believe, that all the electric current will go through the composite, even if its resistance is slightly higher, than the resistance of a pure copper. In our samples Ti was applied — more high-resistant material in comparison with Mo [10, 11]. In the test structure described by the given group, the relation of the resistance of the top conductor to the resistance of the Mo sublayer was only 17,5 % for the pure copper with thickness of Cu — 350 nm and of Mo — 200 nm.

The test structure of the second type (fig. 3, see the 4-th side of cover) is a number of conductors with the width of 25,5 μ m and lengths of 2.5-5-10-25-50-75-100-125-150-175 μ m situated in the base Ti/TiN conductor and intended for determination of the influence of the longitudinal CNT arrays on the electromigration, detection of the Blech-length (length of initiation of electromigration) at the set tempera-

tures and current densities. Using *an example of a composite copper/CNT metallization* the given structure is intended to demonstrate the following:

- the longer are the strips, the more the cathodic sides are exhausted during the electromigration;
- at a certain current density no exhaustion is observed below a certain "critical length";
- for the sections of a certain length the electromigration does not reveal itself, till the current density reaches a certain value.

According to literature, the Blech-length for the conductors from different materials and at different current densities? varies from 10 up to 75 μ m. With an increase of the length the degree of the revealed electromigration increases. For this reason the test structure presented by us contains a set of paths from 2,5 up to 175 μ m.

Test structures of the 3rd type

The test structure of the 3rd type (fig. 4, see the 4-th side of cover) is a series of conductors with the length of 100 μ m (the length guarantees appearance of the effect of electromigration (EM) and the width of 2.2-3-6-12-24-48 μ m), and it is intended for determination of the influence of the width of a conductor and cross-section CNT arrays on the electromigration. The ballast conductors (fig. 4) ensure uniformity of the total section for the wires of different widths.

An increase of the width influences the stress-gradient of the stresses [14] across the conductor. As a result, the vacancies diffuse to the line edge more quickly, than in narrow analogue. Whenever possible, it is desirable to use the minimal width of the lines, 1 micrometer and less, because in the wider conductors the effect is less pronounced. The specified size of 2,2 μ m is determined by the accessible technology node. Accordingly, the minimal width of the topological elements of the catalyst layer is 2,2 μ m. Subsequently, with the use of electronic lithography or EUVL lithography (Extreme Ultra Violet Lithography) it is planned to reach the size to several tens of nanometers, which is comparable with the CNT diameters.

Test structures of the 4th type

The test structure of the 4th type (fig. 5, see the 4-th side of cover) is a series of conductors with the sizes of $100 \times 25,5 \,\mu\text{m}$ and various drawings of the catalyst. The length of $100 \,\mu\text{m}$, just like in the previous case, guarantees a reveal of EM. It is intended for comparison of the influence of the CNT forests of different density and arrangement on the electromigration in the composite structures. Arrays with various widths and intervals in parallel, perpendicular and mesh versions are investigated.

Just like in the previous structures, the control of the CNT concentration is carried out in several ways. Firstly, this is done by regulation of the synthesis parameters for cultivation of the rarefied CNT arrays; secondly, by the use of a fragmented catalyst drawing alongside with a continuous one. The fragmentation is carried out by the lithographic methods, where the minimal size of the final element is determined by an admissible technology node. The structures with the catalyst area of 0, 6, 12,5, 25, 50, 75, 100 % are applied. This allows us to undertake a quantitative estimation and compare CNT concentrations in different samples.

Conclusion

On the basis of the analysis of the research techniques of a single-level metallization the article presents the topology and fabrication techniques of the test crystals for the composite paths based on CNT and metals. The technology for obtaining of the composite, including a low-temperature synthesis of CNT and electrochemical deposition of copper in the arrays of the nanotubes (including their simultaneous deposition) is compatible with IC technology. The developed test structures allow us to determine the electrophysical and mechanical properties of the composites, and also the influence of the CNT forests of various concentrations and arrangements on the degree of electromigration.

References

1. Lee Dominic F., Burwell Malcolm, Stillman H. Priority Research Areas to Accelerate the Development of Practical Ultraconductive Copper Conductors // *Electrical and Electronics Systems Research Division*, Oak Ridge National Laboratory, USA, 2015, pp. 26.

2. Weißgärber Thomas. Metal/Carbon nanotube Composites // Fraunhofer Institute for manufacturing Technology and Advanced Materials IFAM, Dresden, 2012, pp. 2.

3. Weißgärber Thomas, Hutsch Thomas, Kieback Bernd. Metall-Carbon-Verbunde für funktionelle Anwendungen, *Maschinen Markt*, 2012, no. 4, pp. 46–48.

4. Aryasomayajula Lavanya, Wolter Klaus-Juergen. Carbon Nanotube Composites for Electronic Packaging Applications: A Review. Hindawi Publishing Corporation, Journal of Nanotechnology. 2013, Article ID 296517, pp. 7.

 Bakshi S. R., Lahiri D., Agarwal A. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites – a rewiew, *International Materials Reviews*, 2010, vol. 55, no. 1, pp. 41–64.
 Quang Pham, Jeong Young Gi, Yoon Seung Chae et al. Carbar Nucleur Difference (1996).

6. Quang Pham, Jeong Young Gi, Yoon Seung Chae et al. Carbon Nanotube Reinforced Metal Matrix Nanocomposites Via Equal Channel Angular Pressing. *Switzerland. Trans Tech Publications. Materials Science Forum.* Vol. 534–536. 2007, pp. 245–248.

7. Conductors and Yarns. *Nanocomp Technologies Inc.* 2014. URL: http://www.nanocomptech.com/environmentally-tough.

8. **Praveennath G. Koppad, Vikas Kumar Singh, Ramesh C. S.** et al. Metal Matrix Nanocomposites Reinforced with Carbon Nanotubes, *Advanced Carbon Materials and Technology*, Scrivener Publishing LLC, 2014, pp. 331–376.

9. Subramaniam Chandramouli, Yamada Takeo, Kobashi Kazufumi et al. One hundred fold increase in current carrying

capacity in a carbon nanotube—copper composite, *Nature communications. Macmillan Publishers Limited.* 2013. DOI: 10.1038/ncomms3202, pp. 7.

10. Chai Yang, Chan Philip C. H. High Electromigration-Resistant Copper/Carbon Nanotube Composite for Interconnect Application, *IEEE International. Electron Devices Meeting IEDM*, 2008, pp. 4.

11. Chai Yang, Chan Philip C. H., Fu Yunyi et al. Electromigration Studies of Cu-CNT Composite Interconnects Using Blech Structure, *IEEE Electron Device Letters*, 2008, vol. 29, pp. 1001–1003.

12. Arai Susumu, Saito Takashi, Endo Morinobu. Cu-MWCNT Composite Films Fabricated by Electrodeposition, *Journal of The Electrochemical Society*, 2010, no. 157 (3), pp. 147–153.

13. **Dumitrescu Irina.** The European commission awards 3,3 million for the development of ultraconductive copper. Brussels, 2013. URL: http:// www.copperalliance.eu/news-and-me-dia/press-releases.

14. Failure Mechanism of Semiconductor Devices. Semicon Panasonic Japan, 2009, vol. T04007BE-3, pp. 60.

15. Harry A. Schafft. Thermal Analysis of electromigration test structures, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1987, vol. ED-34, no. 3, pp. 664–672.

16. **Tan Cher Ming.** Electromigration in ULSI Interconnections, *World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. International Series on Advances in Solid State Electronics and Technology*, 2010, pp. 291.

17. Nguyen T. A., Joubert P.-Y., Lefebvre S. et al. Study for the non-contact characterization of metallization ageing of power electronic semiconductor devices using the eddy current technique, *Microelectronics Reliability*, 2011, no. 51, pp. 1127–1135.

18. **Standard Guide** for Design of Flat, Straight-Line Test Structures for Detecting Metallization Open-Circuit or Resistance-Increase Failure Due to Electromigration, *ASTM International Designation*. *West Conshohocken*. *United States*, 2003, Designation: F 1259M — 96 (Reapproved 2003), pp. 2.

19. Skvortsov A. A., Lalenkov S. G., Koryachko M. V. Fazovoye prevrashhenija v sistemah metallizacii pri nestacionarnom teplovom vozdejstvii, *Pis'ma v ZhTF*, 2014, vol. 40, no. 18, pp. 24–32.

20. Blech I. A., Kinsbron E. Electromigration in thin gold films on molybdenum surfaces, *Thin Solid Films*, 1975, no. 25, pp. 327–334.

УДК 621.382.323

В. Ю. Павлов, мл. науч. сотр., e-mail: vl-pavlov@mail.ru,

А. Ю. Павлов, канд. техн. наук, зав. лаб., e-mail: p.alex.ur@yandex.ru

Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук (ИСВЧПЭ РАН), г. Москва

ТЕХНОЛОГИИ ФОРМИРОВАНИЯ СПЛАВНЫХ И НЕСПЛАВНЫХ ОМИЧЕСКИХ КОНТАКТОВ К ГЕТЕРОСТРУКТУРАМ НА ОСНОВЕ Gan. Обзор

Поступила в редакцию 16.05.2016

Проведено описание различных методов формирования омических контактов к гетероструктурам на основе GaN. Выделено две группы методов: сплавная и несплавная технологии формирования омических контактов. В сплавной технологии популярны композиции, содержащие кремний. Несплавную технологию связывают с эпитаксиальным доращиванием сильнолегированного нитрида галлия. Сплавная технология проста в реализации, но зависит от нескольких параметров. При несплавной технологии необходимо использование дорогостоящего прецизионного оборудования, несплавные омические контакты менее термостабильны, чем сплавные.

Ключевые слова: гетероструктура, сплавной и несплавной омические контакты, нитрид галлия, полевой транзистор, быстрый термический отжиг, эпитаксия Интерес к приборам на нитриде галлия (GaN) связан с его свойствами. Гетероструктуры на основе GaN являются широкозонными и имеют большую концентрацию основных носителей заряда. Применение GaN-транзисторов существенно улучшает параметры усилителей, модуляторов и других ключевых устройств современных радиоэлектронных систем [1]. Транзисторы на нитриде галлия, о создании которых впервые сообщили в начале 1993 г. разработчики компании APA Optics во главе с М. Ханом [2], существенно расширили возможности приборов CBЧ диапазона.

Частотные характеристики полевых транзисторов определяются не только свойствами используемых полупроводниковых материалов, но и конструкцией приборов, в частности, параметрами выпрямляющего и невыпрямляющего контактов металл—полупроводник. Невыпрямляющий (омический) контакт характеризуется линейной вольтамперной характеристикой (ВАХ) и должен иметь низкое контактное сопротивление.

По мере развития технологий роста наноразмерных гетероструктур на основе GaN, позволяющих улучшить параметры материала (подвижность, концентрация основных носителей заряда), шло развитие технологических аспектов формирования приборов, в частности СВЧ полевого транзистора, на GaN. Одним из важных этапов формирования СВЧ полевого транзистора является создание омического контакта, который влияет на частотные характеристики (граничные частоты усиления по току и по мощности) и на технологичность последующих этапов изготовления транзистора. К омическим контактам предъявляют ряд требований, ужесточающихся с каждым годом развития мощной СВЧ силовой электроники на нитридах.

В работе рассмотрены основные технологические приемы формирования омических контактов к GaN и получаемые с их использованием характеристики контактов, приведены достоинства и недостатки сплавных и несплав-

контакта к полупроводникам *n*-типа на основе GaN чаще всего используют многокомпонентные контакты на основе Ті, образующие в процессе термообработки соединения с низкой работой выхода [3, 4]. Наибольшее распространение получили системы Ti-Al-Ni-Au, Ti-Al-Ti-Au, Ti-Al-Mo-Au, Ті—Аl—Та—Аu. Качественно итоговое удельное сопротивление омического контакта определяется отношением слоев Ti-Al, вышележащие слои определяют большей частью морфологию контакта. Низкое сопротивление омического контакта металл — GaN (до 10^{-6} ... 10^{-7} Ом · см² при высоких концентрациях носителей в полупроводнике) [5, 6] обычно связывают с образованием вакансий азота за счет взаимодействия GaN с материалом контакта, например Ті. Такие вакансии азота образуют нарушенный слой под контактом, играющий роль сильно легированного слоя.

2. Подбор термической обработки (температуры, времени отжига, а также кривой нагрева). Отжиг проводят в инертной среде.

Работы по созданию сплавных омических контактов к гетероструктурам AlGaN/GaN заключаются в основном в выборе композиции и экспериментальном исследовании влияния разных наборов композиции (по толщине слоев), либо влияния одного слоя композиции после стандартных термических обработок на конечное удельное сопротивление контакта и морфологию поверхности (измерение шероховатости).

В работе [7] показан выбор оптимальной металлизации Ti—Al—Ti—Au для омического контакта к *n*-GaN и зависимость морфологии контакта от температуры отжига экспериментальным путем. Было взято несколько наборов композиций, каждый набор подвергался высокотемпературному отжигу при разных температурах, после чего оценивали удельное сопротивление и шероховатость (рис. 1). Оптимальная композиция обеспечивала наименьшую шероховатость в большом интервале

Сплавные омические контакты

ных омических контактов.

Контакт металл—полупроводник, формируемый с использованием высокотемпературного быстрого термического отжига, получил название сплавного омического контакта и нашел широкое применение в первых работах по полевым СВЧ транзисторам на гетероструктурах AlGaN/GaN.

Можно выделить два основных этапа формирования сплавных контактов к гетероструктуре AlGaN/GaN.

1. Подбор системы металлизации. Для создания омического



Рис. 1. Зависимость сопротивления (а) и шероховатости (b) исследуемых композиций от температуры отжига

Fig. 1. Dependence of the resistance (a) and roughness (b) of the compositions on the temperature of annealing



Рис. 2. Морфология омического контакта Ti—Al—Ni—Au с разной толщиной слоев Ni—Au в композиции: a — толщина Au в 5 раз больше Ni; b — толщина Au сопоставима с Ni Fig. 2. Morphology of Ti—Al—Ni—Au ohmic contact with different

rig. 2. Morphology of 11-Al-M-Au onmic contact with algerent thicknesses of the Ni-Au layers in a composition: a - the thickness ofAu is 5 times more than that of Ni; b - the thickness of Au is comparable with that of Ni

температур отжига с низким удельным сопротивлением контакта.

Наибольшее распространение получила композиция Ti—Al—Ni—Au. В работе [8] показано влияние отношения Ti—Al на сопротивление омического контакта к гетероструктурам с разной мольной долей Al в гетеропаре AlGaN/GaN. Показано, что изменение мольного состава гетероструктуры требует своего подбора композиции для формирования омического контакта. В работе [9] отмечено, что толщина слоев Ni—Au влияет на морфологию омического контакта после отжига (рис. 2). Увеличение толщины золота ведет к росту шероховатости композиции после отжига.

Так как морфология контакта влияет на технологичность последующих операций формирования полевого СВЧ транзистора, то ряд работ посвящен улучшению помимо контактного сопротивления морфологии этих контактов. В работе [9] было уже показано влияние слоев композиции на шероховатость поверхности после отжига, но помимо состава на шероховатость влияют режимы термообработки композиции.

Использование ступенчатого (*multi-step*) нагрева нанесенной традиционной металлизации Ti—Al—

- multi-step heating

Ni—Au на гетероструктуру AlGaN/GaN при формировании омических контактов позволяет значительно уменьшить шероховатость композиции после отжига [10, 11]. На рис. 3 показана морфология при разных режимах нагрева.

Добавление тонкого слоя кремния (2 нм) в композицию омического контакта Ti—Al—Ni—Au [12] в целях увеличения концентрации основных носителей в контактной области металл—полупроводник позволило уменьшить температуру отжига, что сказывается на морфологии, и получить удельное сопротивление ниже 0,35 Ом • мм (рис. 4).

Введение кремния в сплавную композицию омического контакта позволило значительно улучшить характеристики и качество контактов к гетероструктурам на основе GaN, что отмечено в ряде публикаций по исследованию таких конструкций и получить рекордно низкое удельное контактное сопротивление для сплавных контактов — 0,12 Ом · мм [13—17].

Предварительная обработка поверхности полупроводника перед нанесением металлизации композиции омического контакта положительно сказывается на сопротивлении контакта металл—полупроводник, в некоторых случаях перед нанесением сплавной композиции удаляют защитный или барьерный слои в гетероструктуре [18—20].

В работе [21] перед нанесением традиционной сплавной металлизации Ti—Al—Ni—Au проводили реактивное ионное травление (РИТ) полупроводника, это позволило получить удельное контактное сопротивление $8,9 \cdot 10^{-8}$ Ом · см. Аналогичный прием использовали в работах по подбору сплавной композиции Ti—Al—Ta—Au [22]. Перед нанесением контактной металлизации проводили обработку поверхности AlGaN в плазме газа BCl₃ в течение 10, 20 и 30 с.

Авторы работ [23, 24] провели сравнение электрических характеристик и морфологии металлизаций на основе Ti—Al, но с разными барьерными слоями (Ni, Ti, Ta, Mo, Nb, Ir, Pt). Результаты этих исследований дают представление о роли каждого



Puc. 3. Морфология омического контакта одного состава после термообработки: a - T = 750 °C в течение 45 с; b - T = 830 °C в течение 45 с; c - multi-step-нагрев Fig. 3. Morphology of the ohmic contact of one composition after a heat treatment: a - T = 750 °C during 45 s; b - T = 830 °C during 45 s;

– НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 18, № 10, 2016 —



Рис. 4. Зависимость сопротивления омического контакта от температуры отжига для композиции Si—Ti—Al—Ni—Au

Fig. 4. Dependence of the resistance of an ohmic contact on the temperature of annealing for Si-Ti-Al-Ni-Au

компонента при формировании хорошего омического контакта к гетероструктуре на основе GaN.

Помимо исследования композиции на основе Ti/Al проводили исследование композиций на основе Hf/Al, V/Al, Mo/Al и др. [25—28]. В данных вариантах использованы металлы с меньшей работой выхода, чем у Al, материалы тугоплавкие и редкие, в связи с чем могли возникать проблемы технической реализации таких составов. По удельному сопротивлению эти материалы сопоставимы с композициями на основе Ti/Al, но показали худшую термостабильность.

Достоинство сплавных омических контактов простота реализации и хорошая термостабильность. Недостатками являются сложная развитая морфология после отжига, зависимость сопротивления омических контактов от большого числа параметров.

Несплавные омические контакты

Можно выделить как отдельное направление формирование контакта металл—полупроводник для гетероструктур AlGaN/GaN без использования высокотемпературных процессов — несплавные омические контакты. Создание несплавных омических контактов связывают с изменением свойств полупроводника, контактирующего с наносимой композицией металлизации, для изменения работы выхода из него: легирование защитного (контактного) слоя (проблема подзатворного удаления GaN); ионное легирование областей под омические контакты; удаление полупроводника под контактом до уровня двумерного электронного газа (ДЭГ) с последующим ростом сильнолегированного GaN (доращивание n^+ GaN).

В работе [29] омические контакты к гетероструктурам AlGaN/GaN формируют с использованием сильнолегированного контактного GaN. Осуществляется рост гетероструктуры с защитным сильнолегированным слоем n^+ GaN, который необходимо удалить в подзатворной области (рис. 5). Наносимая металлизация на n^+ GaN позволяет сразу получить омический контакт без термического отжига.

О возможности использования ионной имплантации в целях легирования областей под омические контакты для получения несплавных контактов к гетероструктурам AlGaN/GaN изложено в работе [30], где проведено сравнение транзисторов со сплавными и несплавными омическими контактами (см. рис. 7). Ионную имплантацию кремния в окна под омические контакты проводили с последующей активацией перед напылением, доза имплантации — $1 \cdot 10^{16}$ см⁻², имплантированы при энергиях ионов 50 кэВ при комнатной температуре. Имплантацию осуществляли через предварительно сформированную маску. Схема имплантации показана на рис. 6. Перед напылением окна под омические контакты заглубляли реактивным ионным травлением в хлоре (Cl), затем наносили композицию Ti-Au-Ni.

Использование ионной имплантации под омические контакты приводит к образованию высокой плотности дефектов незащищенных областей при имплантации [31].



гис. 5. Схема несплавных омических контактов: $a - до удаления n^+$ GaN; b - после удаления n^+ GaN

Fig. 5. Scheme of the unalloyed ohmic contacts: $a - before removal of n^+ GaN$; $b - after removal of n^+ GaN$



Рис. 6. Схема гетероструктуры с имплантацией под омические контакты



На сегодняшний день наиболее распространенная технология несплавных омических контактов к гетероструктурам на основе GaN — технология эпитаксиально доращиваемого сильнолегированного GaN в окнах под омические контакты через предварительно сформированную маску [32-35]. Суть метода заключается в формировании диэлектрической маски на гетероструктуре, затем выполняется формирование в диэлектрике окон под омические контакты, осуществляется эпитаксиальный рост n^+ GaN, удаление диэлектрической маски и напыление металлизации контакта на n^+ GaN. В некоторых вариантах перед эпитаксиальным ростом плазмохимически через диэлектрическую маску вытравливают окно в гетероструктуре до уровня ДЭГ. Схематически формирование несплавных омических контактов с доращиваемым n^+ GaN показано на рис. 8 [32].

Использование несплавных методов формирования омических контактов к гетероструктурам на основе GaN требует дополнительных исследований для оценки изменения характеристик контактов от внешних факторов. таких как температура. В процессе изготовления приборов на GaN и их работе контакт металл-полупроводник греется и может менять свои свойства. При сплавной технологии формирования омических контактов их подвергают высокотемпературной обработке, и они имеют большую термостабильность, чем несплавные контакты, склонные к термической деградации, поэтому в качестве металлизации к n^+ GaN используют сплавную композицию с высокотемпературным отжигом [36]. В качестве контактной металлизации без термической обработки в несплавных методах используют композиции Ti/Au и Cr/Au. Для предотвращения миграции Аи при нагреве через контактный слой

Ті(Сr) в гетероструктуру вводят слой Pd, обеспечивающего термостабильность несплавных омических контактов до температур 350...400 °С [37, 38].

Достоинствами несплавных контактов являются: хорошая воспроизводимость (зависимость сопротивления в основном от легированного GaN); хорошая морфология контактов, которая определяется только шероховатостью поверхности под металлизацию и внесенными дефектами самой металлизации; и низкое сопротивление. Недостаток необходимость в использовании высокотехнологичного дорогостоящего оборудования.



Рис. 7. Фотография и ВАХ транзисторов: a - сплавные омические контакты Ti-Al-Ni-Au; <math>b - несплавные омические контакты Ti-Au-Ni Fig. 7. Photo and VAC of transistors: a - alloyed ohmic contacts of Ti-Al-Ni-Au; b - unalloyed ohmic contact of Ti-Au-Ni





Fig. 8. Schematic image of formation of the epitaxy additionally grown high-alloy GaN

Заключение

При формировании сплавных омических контактов проводится подбор толщин слоев наносимой в вакууме композиции с последующим быстрым термическим отжигом в инертной среде в строго подобранном режиме. Таким образом, для получения воспроизводимого результата необходимо выполнение нескольких критериев. Наиболее распространены и исследованы сплавные омические контакты на основе Ti/Al. Наилучший результат по удельному сопротивлению омического контакта (0,12 Ом · мм) показала композиция Ti/Si/Al/Si/Mo/Au [13]. Суть несплавных методов формирования омических контактов к гетероструктурам на основе GaN — создание сильнолегированного нитрида галлия в области омического контакта. Наиболее распространено эпитаксиальное доращивание n^+ GaN через предварительно сформированную диэлектрическую маску с плазмохимическим заглублением в ростовых окнах до уровня ДЭГ. Для реализации несплавных методов необходимо использование ряда высокотехнологических установок, что по времени реализации дольше, чем для сплавных методов, но позволяет снизить зависимость характеристик формируемых омических контактов от параметров быстрого термического отжига и толщины слоев металлизирующей композиции, этот процесс более стабилен и воспроизводим. Отсутствие высокотемпературной обработки несплавной металлизации решает проблему развитой морфологии сплавных композиций, но возникает проблема термостабильности при температурах выше 400 °С. Удельное сопротивление ДЭГ с выращенным n^+ GaN достигает значений 0,05 Ом • мм и меньше [33].

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение о предоставлении субсидии № 14.607.21.0124, уникальный идентификатор проекта RFMEFI60715X0124).

Список литературы

1. Данилин В., Жукова Т., Кузнецов Ю., Тараканов С., Уваров Н. Транзистор на GaN пока самый "крепкий орешек" // Электроника НТБ. 2005. № 4. С. 20-29.

2. Khan M. A., Kuznia J. N., Bhattaral A. R., Olsen D. T. Metal semiconductor field effect transistor based on single crystal GaN // Applied Physics Letters. 1993. Vol. 62, N. 15. P. 1786–1787.

3. Бланк Т. В., Гольдберг Ю. А. Механизмы протекания тока в омических контактах металл—полупроводник. Обзор // ФТП. 2007. Т. 41, № 11. С. 1281—1308.

4. Zhou L., Johnson M. R., Smith D. J., Meyer D. J., Storm D. F., Katzer D. S., Downey B. P. Microstructure of Ti/Al/Ni/Au ohmic contacts for N-polar GaN/AlGaN high electron mobility transistor devices // Journal of Vacuum Science and Technology B. 2014. Vol. 32, N. 1. P. 011201.

5. Morkoc H., Strike S., Gao G. B., Lin M. E., Sverdlov B., Burns M. Large-band-gap SiC, III–V nitride, and II–VI ZnSebased semiconductor device technologies // Journal of Applied Physics. 1994. Vol. 76, N. 3. P. 1363.

6. Prakashs S., Tan L. S., Ng K. M., Raman A., Chua S. J., Woe A. T.C., Lin S. N. Abstract of Int. Conf. on SiC and Rel. Mater. Sheraton. 1999. P. 48.

7. Davydov A. V., Motayed A., Boettinger W. J., Gates R. S., Xue Q. Z., Lee H. C., Yoo Y. K. Optimization of Ti/Al/Ti/Au ohmic contacts to *n*-GaN // Physica Status Solidi. 2005. Vol. 2. N. 7. P. 2551–2554.

8. Crespo A., Fitch R., Gillespie J., Moser N., Via G., Yannuzzi M. Ti/Al/Ni/Au Ohmic Contacts on AlGaN/GaN HEMTs // International Conference on Compound Semiconductor Mfg. 2003.

9. Xin H. P., Poust S., Sutton W., Li D., Lam D., Smorchkova I., Sandhu R., Heying B., Uyeda J., Barsky M., Wojtowicz M., Lai R. Optimization of AlGaN/GaN HEMT Ohmic Contacts for Improved Surface Morphology with Low Contact Resistance // Proceedings of the CSMANTECH Conference, Portland, Oregon, USA, 2010, pp. 149–152. 10. Feng Q., Li L., Hao Y., Ni J., Zhang J. The improvement of ohmic contact of Ti/Al/Ni/Au to AlGaN/GaN HEMT by multi-step annealing method // Solid-State Electronics. 2009. Vol. 53. N. 9. P. 955–958.

11. Wei Y., Renping Z., Yandong D., Weihua H., Fuhua Y. Analysis of the ohmic contacts of Ti/Al/Ni/Au to AlGaN/GaN HEMTs by the multi-step annealing process // Journal of Semiconductors. 2012. Vol. 33. N. 6. P. 064005.

12. Guodong G., Shaobo D., Yuanjie L., Tingting H., Peng X., Jiayun Y., Zhihong F. Low ohmic contact AlN/GaN HEMTs grown by MOCVD // Journal of Semiconductors. 2013. Vol. 34. N. 11. P. 114004.

13. **Mohammed F. M., Wang L., Adesida I.** Ultralow resistance Si-containing Ti/Al/Mo/Au ohmic contacts with large processing window for AlGaN/GaN heterostructures // Applied Physics Letters. 2006. Vol. 88. N. 21. P. 212107.

14. Mohammed F. M., Wang L., Koo H. J., Adesida I. Siinduced enhancement of ohmic performance of Ti/Al/Mo/Au metallisation for AlGaN/GaN HEMTs // Electronics Letters. 2005. Vol. 41. N. 17. P. 984–985.

15. Desmaris V., Shiu J., Lu C., Rorsman N., Zirath H., Chang E. Transmission electron microscopy assessment of the Si enhancement of Ti/Al/Ni/Au ohmic contacts to undoped AlGaN/GaN heterostructures // Journal of Applied Physics. 2006. Vol. 100. N. 3. P. 034904.

16. **Desmaris V., Eriksson J., Rorsman N., Zirath H.** Low-Resistance Si/Ti/Al/Ni/Au multilayer ohmic contact to undoped AlGaN/GaN heterostructures // Electrochemical and Solid-State Letters. 2004. Vol. 7. N. 4. P. 72–74.

17. Li Y., Ng G., Arulkumaran S., Kumar C., Ang K., Anand M., Wang H., Hofstetter R., Ye G. Low-contact-resistance non-gold Ta/Si/Ti/Al/Ni/Ta ohmic contacts on undoped AlGaN/GaN high-electron-mobility transistors grown on silicon // Applied Physics Express. 2013. Vol. 6. N. 11. P. 116501.

18. Cao X. A., Piao H., LeBoeuf S. F., Li J., Lin J. Y., Jiang H. X. Effects of plasma treatment on the ohmic characteristics of Ti/Al/Ti/Au contacts to *n*-AlGaN // Applied Physics Letters. 2006. Vol. 89. N. 8. P. 082109.

19. Chabak K., Crespo A., Tomich D., Langley D., Miller V., Trejo M., Gillespie J. K., Via G. D., Dabiran A. M., Wowchak A. M., Cui B., Chow P. P. Processing methods for low ohmic contact resistance in AlN/GaN MOSHEMTs // Proceedings of the CS MANTECH Conference, Tampa, Florida, USA, May 18–21, 2009.

20. Wang R., Li G., Verma J., Zimmermann T., Hu Z., Laboutin O., Cao Y., Johnson W., Gao X., Guo S., Snider G., Fay P., Jena D., Xing H. Si-containing recessed ohmic contacts and 210GHz quaternary barrier InAlGaN high-electron-mobility transistors // Applied Physics Express. 2011. Vol. 4. N. 9. P. 096502.

21. Fan Z., Mohammad S. N., Kim W., Aktas O., Botchkarev A. E., Morkoc H. Very low resistance multilayer ohmic contact to *n*-GaN // Applied Physics Letters. 1996. Vol. 68. N. 12. P. 1672–1674.

22. **Wang C., Cho S., Kim N.** Optimization of ohmic contact metallization process for AlGaN/GaN high electron mobility transistor // Transactions on Electrical and Electronic Materials. 2013. Vol. 14. N. 1. P. 32–35.

23. **Wang C., Kim N.** Electrical characterization and nanoscale surface morphology of optimized Ti/Al/Ta/Au ohmic contact for AlGaN/GaN HEMT // Nanoscale Research Letters. 2012. Vol. 7. N. 1. P. 107.

24. Mohammed F. M., Wang L., Koo H. J., Adesida I. Anatomy-performance correlation in Ti-based contact metallizations on AlGaN/GaN heterostructures // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 101. N. 3. P. 033708.

25. Luther B. P., Mohney S. E., DeLucca J. M., Karlicek R. F. Study of contact resistivity, Mechanical Integrity, and Thermal Stability of Ti/AI and Ta/AI Ohmic Contacts to *n*-Type GaN // Journal of Electronic Materials. 1998. Vol. 27. N. 4. P. 196–199.

26. Liu Y., Singh S. P., Ngoo Y. J., Kyaw L. M., Bera M. K., Lo Q. Q., Chor E. F. Low thermal budget Hf/Al/Ta ohmic contacts for InAlN/GaN-on-Si HEMT swith enhanced breakdown voltage // Journal of Vacuum Science and Technology. 2014. Vol. 32. N. 3. P. 032201.

27. Liu Y., Singh S. P., Kyaw L. M., Bera M. K., Ngoo Y. J., Tan H. R., Tripathy S., Lo G. Q., Chor E. F. Mechanisms of Ohmic Contact Formation and Carrier Transport of Low Temperature Annealed Hf/Al/Ta on $In_{0,18}Al_{0,82}N/GaN$ -on-Si. // ECS Journal of Solid State Science and Technology. 2015. Vol. 4. N. 2. P. 30–35.

28. Selvanathan D., Mohammed F. M., Tesfayesus A., Adesida I. Comparative study of Ti/Al/Mo/Au, Mo/Al/Mo/Au, and V/Al/Mo/Au ohmic contacts to AlGaN/GaN heterostructures // Journal of Vacuum Science and Technology B. 2004. Vol. 22. N. 5. P. 2409–2416.

29. Wong M. H., Pei Y., Palacios T., Shen L., Chakraborty A., McCarthy L. S., Keller S., DenBaars S. P., Speck J. S., Mishra U. K. Low nonalloyed Ohmic contact resistance to nitride high electron mobility transistors using N-face growth // Applied Physics Letters. 2007. Vol. 91. N. 23. P. 232103.

30. Recht F., McCarthy L., Rajan S., Chakraborty A., Poblenz C., Corrion A., Speck J. S., Mishra U. K. Nonalloyed ohmic contacts in AlGaN/GaN HEMTs by ion implantation with reduced activation annealing temperature // IEEE Electron Device Letters. 2006. Vol. 27. N. 4. P. 205–207.

31. Boratynski B., Macherzynski W., Drozdziel A., Pyszniak K. Ion implanted ohmic contacts to AlGaN/GaN structures // Journal of Electrical Engineering. 2009. Vol. 60. N. 5. P. 273–275.

32. **Pang L., Kim K.** Analysis of AlGaN/GaN high electron mobility transistors with nonalloyed Ohmic contacts achieved by selective area growth using plasma assisted molecular beam epitaxy // IOSR Journal of Engineering (IOSRJEN). 2014. Vol. 4. N. 2. P. 8–13. 33. Guo J., Li G., Faria F., Cao Y., Wang R., Verma J., Gao X., Guo S., Beam E., Ketterson A., Schuette M., Saunier P., Wistey M., Jena D., Xing H. MBE-regrown ohmics in InAlN HEMTs with a regrowth interface resistance of 0,05 $\Omega \infty$ mm // IEEE Electron Device Letters. 2012. Vol. 33. N. 4. P. 525–527.

34. Dasgupta S., Nidhi, Brown D. F., Mates T. E., Keller S., Speck J. S., Mishra U. K. Ultra-low ohmic contacts to N-polar GaN HEMTs by In(Ga)N based source-drain regrowth by Plasma MBE // Proceedings of the CS MANTECH Conference, Portland, Oregon, USA. May 17th—20th, 2010. P. 111.

35. Brown D. F., Shinohara K., Corrion A. L., Chu R., Williams A., Wong J. C., Alvarado-Rodriguez I., Grabar R., Johnson M., Butler C. M., Santos D., Burnham S. D., Robinson J. F., Zehnder D., Kim S. J., Oh T. C., Micovic M. High-speed, enhancement-mode GaN power switch with regrown n^+ GaN ohmic contacts and staircase field plates // IEEE Electron Device Letters. 2013. Vol. 34. N. 9. P. 1118–1120.

36. Nidhi, Brown D. F., Keller S., Mishra U. K. Very Low Ohmic Contact Resistance through an AlGaN Etch-Stop in Nitrogen-Polar GaN-Based High Electron Mobility Transistors // Japanese Journal of Applied Physics. 2010. Vol. 49. N. 2. P. 021005.

37. Zeng C., Zhang S. M., Wang H., Liu J. P., Wang H. B., Li Z. C., Feng M. X., Zhao D. G., Liu Z. S., Jiang D. S., Yang H. Formation of low-resistant and thermally stable nonalloyed ohmic contact to N-Face *n*-GaN // Chinese Physics Letters. 2012. Vol. 2. N. 1. P. 017301.

38. Lee M. L., Sheu J. K., Hu C. C. Nonalloyed Cr/Aubased Ohmic contacts to *n*-GaN // Applied Physics Letters. 2007. Vol. 91. N. 18. P. 182106.

V. Ju. Pavlov, Junior Researcher, vl-pavlov@mail.ru,

A. Ju. Pavlov, Ph. D., Head of Laboratory, p.alex.ur@yandex.ru,

Federal State Budgetary Scientific Establishment Institute of Microwave Semiconductor Electronics, RAS (IMSCE RAS), Moscow

Technologies for Formation of the Alloyed and Unalloyed Ohmic Contacts to the Heterostructures on the Basis of GaN. Review

A description of various methods for formation of the ohmic contacts to the heterostructures on the basis of GaN was presented. Two groups of methods can be singled out: alloyed and unalloyed technologies for formation of the ohmic contacts. In case of the alloyed technology it is necessary to select a composition and a temperature mode for a fast thermal annealing. The alloyed Ohm contacts on the basis of Ti/Al became widespread. Introduction of Ti ensures formation of the nitric vacancies in the contact layer, which plays the role of a high-alloy layer, and of titanium nitride (TiN), which has a smaller work function than Ti. Addition of silicon (Si), as an alloying impurity for GaN, to the contact layer of the alloyed composition based on Ti/Al, allows us to lower the annealing temperature and reduce the contact resistance. Before deposition of the ohmic contact composition, which more often is Ti/Au or Cr/Au, the unalloyed technology for formation of the ohmics contacts requires formation of a high-alloy layer of gallium nitride, which ensures an ohmics contact without a high-temperature fast annealing. High-alloy GaN can be formed in one growth process with a heterostructure, or after the growth of the heterostructure due to additional further growth of GaN, or implantation of an alloying impurity (Si) in GaN through a preliminary formed mask. The alloyed technology is simple in realization, but it depends on several parameters of their formation process. The unalloyed technology demands expensive high-precision equipment. Unalloyed ohmics contacts are less thermally stable, than the alloyed ones, but have a smooth relief due to absence of high-temperature annealing in the contact composition, which is more technologically convenient for the subsequent operations of formation of the devices based on GaN.

Keywords: heterostructure, alloyed and unalloyed ohmics contacts, gallium nitride, field transistor, fast thermal annealing, epitaxy

The interest shown to the devices on gallium nitride (GaN) is due to its properties. The heterostructures on the basis of GaN are wide-band ones and also have a big concentration of the basic charge carriers. Application of GaN-transistors improves the parameters of the amplifiers, modulators and other key devices of the radio-electronic systems [1]. First announced in the beginning of 1993 by the developers from

APA Optics Co led by M. Han [2], they expanded considerably the potential of the microwave devices.

The frequency characteristics of the field transistors are determined not only by the properties of the applied semiconductor materials, but also by the design of the devices, in particular, by the parameters of the rectifying and nonrectifying metal-semiconductor contacts. A nonrectifying (ohmic) contact is characterized by a linear volt-ampere characteristic (VAC) and it should have a contact resistance.

Alongside with the development of the technologies for growing of the nanosized GaN-based heterostructures allowing us to improve the material's parameters (mobility, concentration of the main charge carriers) there is a progress in the technological aspects of formation of the devices, microwave field transistor on GaN, in particular. One of the important stages of its formation is creation of an Ohm contact, which influences the frequency characteristics (the boundary frequencies of strengthening by current and by power) and the adaptability to manufacture of the fabrication stages of the transistor. There are several requirements to the ohmics contacts, which become tougher and tougher with the development of powerful microwave power electronics based on nitrides.

The work presents the basic processing methods for formation of the ohmics contacts to GaN and the characteristics of the contacts received with their use, it also presents the advantages and disadvantages of the alloyed and unalloyed ohmic contacts.

Alloyed ohmic contacts

A metal-semiconductor contact with a high-temperature fast thermal annealing is called an alloyed ohmic contact and it found application in the works concerning the field microwave transistors on AlGaN/GaN heterostructures.

It is possible to single out two basic stages of formation of the alloyed contacts to AlGaN/GaN heterostructure.

1. Selection of a metallization system. For creation of an ohmic contact to the semiconductors of *n*-type based on GaN the multicomponent contacts on the basis of Ti are used, which during a heat treatment form compounds with a low work function [3, 4]. The most widespread ones are Ti-Al-Ni-Au, Ti-Al-Ti-Au, Ti-Al-Mo-Au and Ti-Al-Ta-Au. The quality of the total specific resistance of an Ohm contact is determined by the correlation of the Ti-Al layers, the overlying layers determine mostly the contact morphology. The low resistance of the metal – GaN ohmic contact (up to $10^{-6}...10^{-7} \Omega \cdot cm^2$ at high concentration of the carriers in a semiconductor) [5, 6] is usually explained by formation of nitrogen vacancies due to interaction of GaN with a contact material. Nitrogen vacancies form the affected layer under the contact, playing the role of a highly alloyed layer.

2. Selection of a thermal processing (temperature, time of annealing and a heating curve). An annealing is done in the inert environment.

Creation of the alloyed ohmic contacts to AlGaN/GaN heterostructures consists in selection of a composition and research of the influence of different compositions (by thickness of layers), or influence of one layer after the standard thermal processings on the final specific resistance of the contact and the surface morphology (measurement of roughness).

In [7] the choice of optimal Ti—Al—Ti—Au metallization for an ohmic contact to *n*-GaN and the dependence of the contact morphology on the temperature of annealing are shown. Several compositions were selected and each set was subjected to annealing at different temperatures, after that the specific resistance and roughness were estimated (fig. 1). The optimal composition ensured the lowest roughness in a wide range of temperatures of annealing with a low specific resistance of contact.

The most widespread is Ti-Al-Ni-Au composition. The influence of the Ti-Al relation on the resistance of an ohmic contact to the heterostructures with a different mole share of Al in AlGaN/GaN heteropair is demonstrated in [8]. A change in the mole composition of the heterostructure demands selection of a composition for formation of an ohmic contact. In [9] it is pointed out, that the thickness of Ni—Au layers influences the morphology of this contact after annealing (fig. 2). An increase of the thickness of gold leads to a growth of roughness of a composition after annealing.

Since the contact morphology influences the adaptability to manufacture of the subsequent operations of formation of a field microwave transistor, certain works are devoted, besides the contact resistance, to improvement of the morphology of these contacts. In [9] the influence of the composition's layers on the roughness of the surface after annealing is demonstrated, but, besides the composition, the roughness is influenced by the modes of the thermal processing of the composition.

The use of the multi-step heating of the deposited traditional Ti—Al—Ni—Au metallization on the AlGaN/GaN heterostructure during formation of the ohmics contacts allows us to reduce considerably the roughness of a composition after annealing [10, 11]. The morphology in case of different modes of heating (fig. 3).

Addition of a thin layer of silicon (2 nm) into the composition of Ti—Al—Ni—Au ohmic contact [12] for increasing of the concentration of the basic carriers in the metal-semiconductor area allowed us to lower the temperature of annealing, which affected the morphology, and to get a specific resistance below $0.35 \Omega \cdot \text{mm}$ (fig. 4).

Introduction of silicon into an alloyed composition of the ohmic contact allowed us to improve considerably the characteristics and the quality of the contacts to the heterostructures on the basis of GaN, which was noted in a number of publications on the research of such designs, and to receive a record-breaking low specific contact resistance for the alloyed contacts $-0,12 \Omega \cdot \text{mm} [13-17]$.

A preliminary processing of the surface of a semiconductor before deposition of metallization of a composition of an ohmic contact positively affects the resistance of the metalsemiconductor contact, in some cases before the deposition of an alloyed composition is done, the protective or barrier layers in the heterostructure are deleted [18–20].

In [21] before the deposition of Ti–Al–Ni–Au alloyed metallization a jet ionic etching (JIE) of the semiconductor was done, which allowed us to receive the specific contact resistance of $8,9 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{cm}$. A similar method was used during selection of the alloyed composition of Ti–Al–Ta–Au [22]. Before the deposition of a contact metallization the surface of AlGaN was processed in BCl₃ plasma during 10, 20 and 30 s.

The authors [23, 24] compared the electric characteristics and the morphology of Ti—Al metallizations but with different barrier layers (Ni, Ti, Ta, Mo, Nb, Ir, Pt). The results of the research give an idea about the role of each component during formation of a good ohmic contact to the GaN heterostructure.

Besides the research of the Ti/Al composition, a research was carried out of the compositions on the basis of Hf/Al, V/Al, Mo/Al, etc. [25–28]. In the given versions the metals with smaller work function, than Al, were used. The materials were refractory and rare and this could cause the problems of technical realization of such compositions. By the specific resistance these materials were comparable with the compositions on the basis of Ti/Al, but demonstrated worse thermo — stability.

The advantages of the ohmic contacts are simplicity of realization and good thermostability. Their drawbacks are difficult morphology after annealing, and dependence of the resistance of the ohmics contacts on a big number of parameters.

Unalloyed ohmic contacts

It is possible to single out the formation of the metal-semiconductor contact for AlGaN/GaN heterostructures without the use of high-temperature processes — unalloyed ohmics contacts. Creation of such ohmics contacts is explained by the change of the properties of the semiconductor, contacting with the deposited composition of metallization, for changing of its work function: alloying of the protective (contact) layer (the problem of subgate removal of GaN); ion alloying of the areas for the ohmics contacts; removal of the semiconductor under the contact up to the level of the two-dimensional electron gas (TDEG) with the subsequent growth of high-alloy GaN (additional growth of n^+ GaN).

In [29] the ohmic contacts to AlGaN/GaN heterostructures are formed with the use of high-alloy GaN contact. A heterostructure is grown with a protective high-alloy n^+ GaN layer, which should be removed in the subgate area (fig. 5). Metallization on n^+ GaN allows us to get an Ohm contact without a thermal annealing.

Feasibility of the use of the ion implantation for alloying of the areas for the ohmic contacts for obtaining of the unalloyed contacts to AlGaN/GaN heterostructures is described in [30], where a comparison is made of the transistors with the alloyed and unalloyed ohmic contacts (fig. 7). The ion implantation of silicon to the windows under the ohmics contacts was done with the subsequent activation before the deposition, the dose of implantation was $1 \cdot 10^{16}$ cm⁻², the implantation was done at the ion energies of 50 keV at a room temperature. The implantation was done through a formed mask. The scheme of the implantation is presented in fig. 6. Before the deposition the windows for the ohmics contacts were deepened by the jet ion etching in Cl, and then the Ti— Au—Ni composition was deposited.

The use of the ion implantation under the ohmic contacts leads to formation of high density defects in the unprotected areas [31].

The most widespread technology of the unalloyed ohmic contacts to the heterostructures on the basis of GaN is the technology of the epitaxially additionally grown high-alloy GaN in the windows under the ohmic contacts through a preliminary generated mask [32–35]. Its essence is in the formation of a dielectric mask on a heterostructure, then the windows are formed in the dielectric under the ohmic contacts, the epitaxial growth of n^+ GaN is carried out, the dielectric mask is removed and the deposition of the contact metallization on n^+ GaN is done. In some variants before the epitaxial growth, a window is plasma-chemically etched through a dielectric mask in the heterostructure up to the level of TDEG. Formation of the unalloyed ohmics contacts with the additionally grown n^+ GaN is presented in fig. 8 [32].

The use of the unalloyed formation of the ohmic contacts to the heterostructures on the basis of GaN demands a research for estimation of the change of the characteristics of the contacts due to the external factors, such as temperature. During manufacture of the GaN-based devices and their operation the metal-semiconductor contact is heated and can change its properties. In case of the alloyed technology the ohmic contacts are subjected to a high-temperature processing, and they are more thermally stable, than the unalloyed contacts, inclined to a thermal degradation, therefore, as a metallization to n^+ GaN an alloyed composition with hightemperature annealing is used [36]. As a contact metallization without thermal processing in the unalloyed methods the Ti/Au and Cr/Au compositions are used. For prevention of migration of Au during heating through the Ti(Cr) contact layer a Pd layer is introduced into a heterostructureenter, which ensures thermostability of the unalloyed ohmic contacts up to 350...400 °C [37, 38].

The advantages of the unalloyed contacts are good reproducibility (dependence of the resistance basically on the alloyed GaN); good morphology of the contacts, which is determined only by the surface roughness under metallization and the defects introduced by the metallization itself, and low resistance. Their drawback is the need for hi-tech expensive equipment.

Conclusion

During formation of the alloyed ohmic contacts the thickness of the layers is selected for the composition deposited in vacuum with a fast thermal annealing in the inert environment in the selected mode. Thus, for obtaining of a reproducible result several criteria should be met. The alloyed ohmic contacts on the basis of Ti/Al are the most widespread. By the specific resistance of the ohmic contact (0,12 $\Omega \cdot mm$) the Ti/Si/Al/Si/Mo/Au composition [13] demonstrated the best result. The essence of the unalloyed methods for formation of the ohmic contacts to the heterostructures on the basis of GaN is creation of a high-alloy gallium nitride in the area of the ohmic contact. The most widespread method is epitaxial additional growing of n^+ GaN through the formed dielectric mask with a plasma-chemical deepening in the growth windows up to the level of TDEG. For realization of the unalloyed methods it is necessary to use high-technology installations, which are more expensive, than for the alloyed methods, but allow to lower the dependence of the characteristics of the formed ohmic contacts on the parameters of the fast thermal annealing and thickness of layers of the metalizing composition. This process is more stable and reproducible. Absence of a high-temperature processing for the unalloyed metallization solves the problem of the developed morphology of the alloyed compositions, but the problem of thermostability arises at temperatures above 400 °C. The specific resistance of TDEG with the grown n^+ GaN reaches the level of 0,05 Ω · mm and less [33].

The work was done with the financial support of the Ministry of Education and Science (grant agreement N_{0} 14.607.21.0124, the unique project identifier — RFMEFI60715X0124).

References

1. Danilin V, Zhukova T., Kuznetsov Yu., Tarakanov S., Uvarov N. Tranzistor na GaN poka samyi "krepkii oreshek", *Elektronika NTB*, 2005, vol 4, pp. 20–29 (in Russian).

2. Khan M. A., Kuznia J. N., Bhattaral A. R., Olsen D. T. Metal semiconductor field effect transistor based on single crystal GaN, *Applied Physics Letters*, 1993, vol. 62, no. 15, pp. 1786–1787.

3. Blank T. V., Gol'dberg Yu.A. Mekhanizmy protekaniya toka v omicheskikh kontaktakh metal-poluprovodnik. Obzor, *FTP*, 2007, vol. 41, no. 11, pp. 1281–1308. (in Russian).

4. Zhou L., Johnson M. R., Smith D. J., Meyer D. J., Storm D. F., Katzer D. S., Downey B. P. Microstructure of Ti/Al/Ni/Au ohmic contacts for N-polar GaN/AlGaN high electron mobility transistor devices, *Journal of Vacuum Science* and Technology B, 2014, vol. 32, no. 1, pp. 011201.

5. Morkoc H., Strike S., Gao G. B., Lin M. E., Sverdlov B., Burns M. Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSebased semiconductor device technologies, *Journal of Applied Physics*, 1994, vol. 76, no. 3, pp. 1363.

6. Prakashs S., Tan L. S., Ng K. M., Raman A., Chua S. J., Woe A. T.C., Lin S. N. Abstract of Int. Conf. on SiC and Rel. Mater. Sheraton, 1999, pp. 48. 7. Davydov A. V., Motayed A., Boettinger W. J., Gates R. S., Xue Q. Z., Lee H. C., Yoo Y. K. Optimization of Ti/Al/Ti/Au ohmic contacts to *n*-GaN, *Physica Status Solidi*, 2005, vol. 2, no. 7, pp. 2551–2554.

8. Crespo A., Fitch R., Gillespie J., Moser N., Via G., Yannuzzi M. Ti/Al/Ni/Au Ohmic Contacts on AlGaN/GaN HEMTs, *International Conference on Compound Semiconductor Mfg*, 2003.

Mfg, 2003. 9. Xin H. P., Poust S., Sutton W., Li D., Lam D., Smorchkova I., Sandhu R., Heying B., Uyeda J., Barsky M., Wojtowicz M., Lai R. Optimization of AlGaN/GaN HEMT Ohmic Contacts for Improved Surface Morphology with Low Contact Resistance, Proceedings of the CSMANTECH Conference, Portland, Oregon, USA, 2010, pp. 149–152.

10. Feng Q., Li L., Hao Y., Ni J., Zhang J. The improvement of ohmic contact of Ti/Al/Ni/Au to AlGaN/GaN HEMT by multi-step annealing method, *Solid-State Electronics*, 2009, vol. 53, no. 9, pp. 955–958.

11. Wei Y., Renping Z., Yandong D., Weihua H., Fuhua Y. Analysis of the ohmic contacts of Ti/Al/Ni/Au to AlGaN/GaN HEMTs by the multi-step annealing process, *Journal of Semiconductors*, 2012, vol. 33, no. 6, pp. 064005.

12. Guodong G., Shaobo D., Yuanjie L., Tingting H., Peng X., Jiayun Y., Zhihong F. Low ohmic contact AlN/GaN HEMTs grown by MOCVD, *Journal of Semiconductors*, 2013, vol. 34, no. 11, pp. 114004.

13. Mohammed F. M., Wang L., Adesida I. Ultralow resistance Si-containing Ti/Al/Mo/Au ohmic contacts with large processing window for AlGaN/GaN heterostructures, *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 88, no. 21, pp. 212107. 14. Mohammed F. M., Wang L., Koo H. J., Adesida I. Si-

14. Mohammed F. M., Wang L., Koo H. J., Adesida I. Siinduced enhancement of ohmic performance of Ti/Al/Mo/Au metallisation for AlGaN/GaN HEMTs, *Electronics Letters*, 2005, vol. 41, no. 17, p. 984–985.

15. **Desmaris V., Shiu J., Lu C., Rorsman N., Zirath H., Chang E.** Transmission electron microscopy assessment of the Si enhancement of Ti/Al/Ni/Au ohmic contacts to undoped Al-GaN/GaN heterostructures, *Journal of Applied Physics*, 2006, vol. 100, no. 3, pp. 034904.

16. Desmaris V., Eriksson J., Rorsman N., Zirath H. Low-Resistance Si/Ti/Al/Ni/Au multilayer ohmic contact to undoped AlGaN/GaN heterostructures, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 2004, vol. 7, no. 4, pp. 72–74. 17. Li Y., Ng G., Arulkumaran S., Kumar C., Ang K.,

17. Li Y., Ng G., Arulkumaran S., Kumar C., Ang K., Anand M., Wang H., Hofstetter R., Ye G. Low-contact-resistance non-gold Ta/Si/Ti/Al/Ni/Ta ohmic contacts on undoped AlGaN/GaN high-electron-mobility transistors grown on silicon, *Applied Physics Express*, 2013, vol. 6, no. 11, pp. 116501.

18. Cao X. A., Piao H., LeBoeuf S. F., Li J., Lin J. Y., Jiang H. X. Effects of plasma treatment on the ohmic characteristics of Ti/Al/Ti/Au contacts to *n*-AlGaN, *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 89, no. 8, pp. 082109.

19. Chabak K., Crespo A., Tomich D., Langley D., Miller V., Trejo M., Gillespie J. K., Via G. D., Dabiran A. M., Wowchak A. M., Cui B., Chow P. P. Processing methods for low ohmic contact resistance in AlN/GaN MOSHEMTs, *Proceedings of the CS MANTECH Conference, Tampa, Florida, USA*, May 18–21, 2009.

20. Wang R., Li G., Verma J., Zimmermann T., Hu Z., Laboutin O., Cao Y., Johnson W., Gao X., Guo S., Snider G., Fay P., Jena D., Xing H. Si-containing recessed ohmic contacts and 210GHz quaternary barrier InAlGaN high-electron-mobility transistors, *Applied Physics Express*, 2011, vol. 4, no. 9, pp. 096502.

21. Fan Z., Mohammad S. N., Kim W., Aktas O., Botchkarev A. E., Morkoc H. Very low resistance multilayer ohmic contact to *n*-GaN, *Applied Physics Letters*, 1996, vol. 68, no. 12, pp. 1672–1674.

22. Wang C., Cho S., Kim N. Optimization of ohmic contact metallization process for AlGaN/GaN high electron mobility transistor, *Transactions on Electrical and Electronic Materials*, 2013, vol. 14, no. 1, P. 32–35.

23. Wang C., Kim N. Electrical characterization and nanoscale surface morphology of optimized Ti/Al/Ta/Au ohmic contact for AlGaN/GaN HEMT, *Nanoscale Research Letters*, 2012, vol. 7, no. 1, pp. 107.

24. Mohammed F. M., Wang L., Koo H. J., Adesida I. Anatomy-performance correlation in Ti-based contact metallizations on AlGaN/GaN heterostructures, *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 3, pp. 033708.

25. Luther B. P., Mohney S. E., DeLucca J. M., Karlicek R. F. Study of contact resistivity, Mechanical Integrity, and Thermal Stability of Ti/AI and Ta/AI Ohmic Contacts to *n*-Type GaN, *Journal of Electronic Materials*, 1998, vol. 27, no. 4, pp. 196–199.

26. Liu Y., Singh S. P., Ngoo Y. J., Kyaw L. M., Bera M. K., Lo Q. Q., Chor E. F. Low thermal budget Hf/Al/Ta ohmic contacts for InAlN/GaN-on-Si HEMT swith enhanced breakdown voltage, *Journal of Vacuum Science and Technology*, 2014, vol. 32, no. 3, pp. 032201.

27. Liu Y., Singh S. P., Kyaw L. M., Bera M. K., Ngoo Y. J., Tan H. R., Tripathy S., Lo G. Q., Chor E. F. Mechanisms of Ohmic Contact Formation and Carrier Transport of Low Temperature Annealed Hf/Al/Ta on In_{0,18}Al_{0,82}N/GaN-on-Si, *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 2015, vol. 4, no. 2, pp. 30–35.

28. Selvanathan D., Mohammed F. M., Tesfayesus A., Adesida I. Comparative study of Ti/Al/Mo/Au, Mo/Al/Mo/Au, and V/Al/Mo/Au ohmic contacts to AlGaN/GaN heterostructures, *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 2004, vol. 22, no. 5, pp. 2409–2416.

29. Wong M. H., Pei Y., Palacios T., Shen L., Chakraborty A., McCarthy L. S., Keller S., DenBaars S. P., Speck J. S., Mishra U. K. Low nonalloyed Ohmic contact resistance to nitride high electron mobility transistors using N-face growth. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, no. 23, pp. 232103.

30. Recht F., McCarthy L., Rajan S., Chakraborty A., Poblenz C., Corrion A., Speck J. S., Mishra U. K. Nonalloyed ohmic contacts in AlGaN/GaN HEMTs by ion implantation with reduced activation annealing temperature, *IEEE Electron Device Letters*, 2006, vol. 27, no. 4, pp. 205–207.

31. Boratynski B., Macherzynski W., Drozdziel A., Pyszniak K. Ion implanted ohmic contacts to AlGaN/GaN structures, *Journal of Electrical Engineering*, 2009, vol. 60, no. 5, pp. 273–275.

32. **Pang L., Kim K.** Analysis of AlGaN/GaN high electron mobility transistors with nonalloyed Ohmic contacts achieved by selective area growth using plasma assisted molecular beam epitaxy, *IOSR Journal of Engineering (IOSRJEN)*, 2014, vol. 4, no. 2, pp. 8–13.

33. Guo J., Li G., Faria F., Cao Y., Wang R., Verma J., Gao X., Guo S., Beam E., Ketterson A., Schuette M., Saunier P., Wistey M., Jena D., Xing H. MBE-regrown ohmics in InAlN HEMTs with a regrowth interface resistance of $0,05 \ \Omega \cdot mm$, *IEEE Electron Device Letters*, 2012, vol. 33, no. 4, pp. 525–527.

34. Dasgupta S., Nidhi, Brown D. F., Mates T. E., Keller S., Speck J. S., Mishra U. K. Ultra-low ohmic contacts to N-polar GaN HEMTs by In(Ga)N based source-drain regrowth by Plasma MBE, *Proceedings of the CS MANTECH Conference, Portland, Oregon, USA*, May 17th–20th, 2010, pp. 111.

35. Brown D. F., Shinohara K., Corrion A. L., Chu R., Williams A., Wong J. C., Alvarado-Rodriguez I., Grabar R., Johnson M., Butler C. M., Santos D., Burnham S. D., Robinson J. F., Zehnder D., Kim S. J., Oh T. C., Micovic M. High-speed, enhancement-mode GaN power switch with regrown n^+ GaN ohmic contacts and staircase field plates, *IEEE Electron Device Letters*, 2013, vol. 34, no. 9, pp. 1118–1120.

36. Nidhi, Brown D. F., Keller S., Mishra U. K. Very Low Ohmic Contact Resistance through an AlGaN Etch-Stop in Nitrogen-Polar GaN-Based High Electron Mobility Transistors, *Japanese Journal of Applied Physics*, 2010, vol. 49, no. 2, pp. 021005.

37. Zeng C., Zhang S. M., Wang H., Liu J. P., Wang H. B., Li Z. C., Feng M. X., Zhao D. G., Liu Z. S., Jiang D. S., Yang H. Formation of low-resistant and thermally stable nonalloyed ohmic contact to N-Face *n*-GaN, *Chinese Physics Letters*, 2012, vol. 2, no. 1, pp. 017301.

38. Lee M. L., Sheu J. K., Hu C. C. Nonalloyed Cr/Aubased Ohmic contacts to *n*-GaN, *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, no. 18, pp. 182106.

Элементы MHCT *M*icro-AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

УДК 621.38

П. П. Мальцев, д-р техн. наук, проф., науч. руководитель,

Ю. В. Федоров, гл. конструктор — зам. директора по НИОКР, Д. Л. Гнатюк, канд. техн. наук, зав. лаб., **О. С. Матвеенко,** канд. техн. наук, ст. науч. сотр., **Б. Г. Путинцев,** аспирант, инженер-исследователь, **А. В. Зуев,** науч. сотр.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук (ИСВЧПЭ РАН) E-mail: iuhfseras2010@yandex.ru

МОНОЛИТНАЯ ИНТЕГРАЛЬНАЯ СХЕМА ГУН V-ДИАПАЗОНА

Поступила в редакцию 25.07.2016

Представлена монолитная интегральная схема (МИС) генератора, управляемого напряжением (ГУН) V-диапазона с буферным усилителем, изготовленная по HEMT-технологии на основе гетероструктур AlGaN/GaN на сапфировых подложках в ИСВЧПЭ РАН. Выходная мощность ГУН с буферным усилителем варьируется в пределах 25...50 мВт, крутизна управления ГУН ~900 МГц/В, потребляемый ток МИС при напряжении питания 10 В — 90 мА. Дрейф частоты от температуры составил 30 МГц/°С.

Ключевые слова: V-диапазон, нитрид галлия, генератор, управляемый напряжением, НЕМТ

Введение

Диапазон частот 57...64 ГГц (V-диапазон) активно осваивается разработчиками и производителями радиоэлектронных систем. С одной стороны, ширина доступной полосы делает данный диапазон привлекательным для высокоскоростной сверхширокополосной передачи данных в сетях 5G, скорость передачи данных в которых составляет до 5 Гбит/с. С другой стороны, сильное ослабление электромагнитных волн на атмосферном кислороде (порядка 10 дБ/км) устраняет проблему интерференции между различными источниками сигнала, принадлежащими разным сетям, при организации персональных сетей [1]. Развитие технологий 5G в настоящий момент переходит от стадии исследований к стадии стандартизации; переход к коммерциализации ожидается в 2020 г. Помимо локальных и персональных сверхширокополосных сетей беспроводной передачи данных, устройства данного диапазона могут найти применение в радиационно-стойкой аппаратуре для систем межспутниковой связи, защищенных от влияния помех со стороны Земли [2].

Разработка и изготовление МИС ГУН V-диапазона

В ИСВЧПЭ РАН ведутся работы по освоению технологии проектирования и производства моно-

литных интегральных схем (МИС) на основе гетероструктур нитрида галлия для приемопередающих систем V-диапазона [3—8]. В данной работе представлены результаты исследования образцов МИС ГУН, разработанных и изготовленных в ИСВЧПЭ РАН. МИС ГУН были реализованы на гетероструктурах AlGaN/GaN на подложках сапфира толщиной 350 мкм производства ЗАО "Элма-Малахит". Изготовленные на данных гетероструктурах тестовые транзисторы с шириной затвора 2×50 мкм и длиной затвора 140 нм имеют измеренные значения параметров F_t и F_{max} без деембеддинга контактных площадок 57 и 130 ГГц соответственно.

За рубежом микросхемы на основе гетероструктур AlGaN/GaN, как правило, изготавливают по микрополосковой технологии, подразумевающей травление заземляющих отверстий сквозь подложку, однако это связано с серьезными технологическими трудностями. Частично решение данной проблемы может быть облегчено при переходе к гетероструктурам на кремниевых подложках, но в настоящее время такие гетероструктуры нам недоступны. Поэтому в ИСВЧПЭ РАН было найдено технологическое решение, заключающееся в создании заземляющей плоскости над лицевой поверхностью пластины с уже изготовленными активными и пассивными СВЧ элементами поверх слоя полимерного диэлектрика — фотолака разра-



Рис. 1. Схематическое изображение сечения МИС с заземляющей плоскостью над лицевой поверхностью пластины

Fig. 1. Schematic image of MIC section with a grounding plane over the front-face surface of the plate

ботки Института высокомолекулярных соединений (ИВС РАН). Заземление соответствующих элементов осуществляется через отверстия в слое фотолака (рис. 1), одновременно выполняющего роль защитной пассивации.

Для реализации ГУН V-диапазона была выбрана схема, приведенная на рис. 2.

Микрополосковые линии Ts и Tg, подключенные к истоку и затвору транзистора, вместе с варактором образуют резонансный контур. На стоке образуется отрицательное дифференциальное выходное сопротивление. Частота генерации определяется в основном длиной линий Ts и Tg и емкостями транзистора [10]. Управление частотой генерации осуществляется варактором, в качестве которого использован транзистор в диодном включении — управляющее напряжение меняет емкость затвор-сток. На выход ГУН добавлен однокаскадный буферный усилитель для устранения влияния вариации цепи нагрузки генератора на частоту и уровень формируемого в ГУН сигнала. Номинал разделительных конденсаторов в цепях питания и смещения выбран достаточно большим, чтобы не оказывать влияния на резонансную частоту. При расчетах схемы была использована нелинейная модель транзисторов с шириной затвора 100 мкм, построенная на основе результатов измерений тестовых транзисторов.

По разработанным принципиальным схемам был создан топологический проект ГУН и проведен электромагнитный расчет методом моментов с использованием тех же моделей транзисторов. Данный этап проектирования позволил учесть влияние паразитных связей между линиями передачи и прочих особенностей топологии. По результатам моделирования при необходимости проводят коррекцию топологического проекта и повторный электромагнитный расчет до достижения удовлетворительного результата. На основе полученного топологического проекта разработан комплект рабочих фотошаблонов для изготовления МИС.

Разработанные МИС ГУН были изготовлены на технологическом оборудовании ИСВЧПЭ РАН. Фотографии кристаллов МИС ГУН до и после нанесения слоев фотолака и верхней металлизации представлены на рис. 3. Размер кристалла составляет 1,5×1,24 мм.

Исследования характеристик МИС ГУН

Измерения параметров МИС ГУН проводили в ИСВЧПЭ РАН с помощью зондовой станции как на неразрезанной пластине, так и на отдельных кристаллах после резки пластины. В качестве измерительного оборудования был использован анализатор цепей Keysight N5247A с опцией анализатора спектра N5247A-090. На рис. 4 показана зависимость частоты генерации (F_{gen}) трех образцов МИС ГУН от управляющего напряжения (V_{ctrl}) на разрезанных кристаллах без теплоотвода.







Рис. 3. Фотографии МИС ГУН до (а) и после (b) нанесения слоя фотолака и верхней металлизации

Fig. 3. Photos of MIC VCO before (a) and after (b) deposition of the layer of photovarnish and top metallization



Рис. 4. Зависимость частоты генерации от управляющего напряжения трех образцов МИС ГУН

Fig. 4. Dependence of the oscillation frequency on the control voltage of three MIC VCO samples

При управляющих напряжениях от 2 до 6 В характеристика перестройки близка к линейной. Крутизна перестройки в линейной области составляет ~900 МГц/В.

Выходная мощность (*Pout*) исследованных образцов МИС ГУН при номинальном рабочем напряжении 10 В варьируется в пределах 25...50 мВт (рис. 5). Ток потребления составляет не более 70 мА.

На рис. 6 показана типовая зависимость частоты генерации от напряжения питания при постоянном напряжении управления и смещения на затворах. Чувствительность частоты генерации ГУН (F_{gen}) к изменению напряжения питания (V_{d1}) составляет ~260 МГц/В при рабочем напряжении питания 10 В.

Дополнительно было выполнено исследование зависимости характеристик МИС ГУН от температуры окружающей среды. Измерения проводили зондовым способом на отдельных кристаллах без теплоотвода на зондовой станции с термостоликом. На рис. 7 представлена зависимость частоты генерации МИС ГУН от температуры при нагреве до 85 °C.

Кривая 1 соответствует измерениям в постоянной рабочей точке. При увеличении температуры частота генерации уменьшается. Дрейф частоты от температуры составляет примерно 30 МГц/°С. Выходная мощность при 85 °С уменьшается на 1,8 дБм.

Установлено, что посредством запирания транзисторов можно обеспечить постоянное значение частоты генерации (кривая 2). Кривая 3 отражает зависимость напряжения смещения (V_g) , необходимого для поддержания частоты генерации МИС ГУН на постоянном уровне.



Рис. 5. Выходная мощность трех образцов МИС ГУН при напряжении питания 10 В

Fig. 5. Output power of three MIC VCO samples at the supply voltage of 10 V



Рис. 6. Типовая зависимость частоты генерации МИС ГУН от напряжения питания

Fig. 6. Typical dependence of the oscillation frequency of MIC VCO on the supply voltage

НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 18, № 10, 2016 -



Рис. 7. Зависимость частоты генерации МИС ГУН от температуры

Fig. 7. Dependence of the oscillation frequency of MIC VCO, of the temperature

Аппаратные возможности использованного измерительного оборудования не позволили провести измерения фазового шума.

Заключение

Впервые в России в ИСВЧПЭ РАН были разработаны, изготовлены и исследованы МИС ГУН V-диапазона на гетероструктурах нитрида галлия на подложках сапфира. Выходная мощность образцов составляет 25...50 мВт, диапазон перестройки частоты генерации достигает 4 ГГц. Дрейф частоты от температуры составляет 30 МГц/°С.

Авторы выражают благодарность московскому представительству Keysight Technologies за предоставленную демонстрационную лицензию на опцию 090 к анализатору цепей. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение о предоставлении субсидии № 14.607.21.0087, уникальный идентификатор проекта RFMEFI60714X0087).

Список литературы

1. Вишневский В., Фролов С., Шахнович И. Миллиметровый диапазон как промышленная реальность. Стандарт IEEE 802.15.3с и спецификация WirelessHD // ЭЛЕКТРО-НИКА: Наука, Технология, Бизнес. 2010. № 3. С. 70–78.

2. Мальцев П. П., Федоров Ю. В., Галиев Р. Р. и др. Нитридные приборы миллиметрового диапазона // Нано-индустрия. 2014. № 3. С. 40-51.

3. Мальцев П. П., Матвеенко О. С., Федоров Ю. В. и др. Интегральный антенный элемент со встроенным усилителем 5 мм диапазона длин волн на основе гетероструктур AlGaN/GaN // Известия ВУЗов. Электроника. 2014. № 4 (189).

4. Мальцев П. П., Матвеенко О. С., Федоров Ю. В. и др. Монолитная интегральная схема усилителя со встроенной антенной для пятимиллиметрового диапазона длин волн // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 9. С. 12–15.

5. Мальцев П. П., Федоров Ю. В., Гнатюк Д. Л., Матвеенко О. С., Зуев А. В. Топология ИМС "Интегральный антенный элемент со встроенным малошумящим усилителем для диапазона 57—64 ГГц". Свидетельство о государственной регистрации № 2013630159 от 06 ноября 2013 г.

6. Мальцев П. П., Федоров Ю. В., Гнатюк Д. Л., Матвеенко О. С., Зуев А. В. Топология ИМС "Преобразователь сигнала для диапазона 57—64 ГГц", свидетельство о государственной регистрации № 2013630171 от 06 ноября 2013 г.

7. Мальцев П. П., Федоров Ю. В., Гнатюк Д. Л., Матвеенко О. С. Топология ИМС "Смеситель на балунах Маршанда для диапазона 57—64 ГГц", свидетельство о государственной регистрации № 20146300511 от 19 февраля 2014 г.

8. Федоров Ю., Мальцев П., Матвеенко О. и др. МИС усилителей со встроенными антеннами СВЧ диапазона на наногетероструктурах // Наноидустрия. 2015. № 3 (57). С. 44—51.

9. Muller J.-E., Grave T., Siweris H. J. A GAAS HEMT MMIC Chip Set for Automotive Radar Systems Fabricated by Optical Stepper Lithography // IEEE Journal of solid-state circuits. September 1997. Vol. 32, N. 9.

P. P. Maltsev, D. Sc., Professor, Research Supervisor,
Yu. V. Fedorov, Chief Designer, Deputy Director for Research and Development,
D. L. Gnatyuk, PhD., Head of Laboratory, O. S. Matveyenko, PhD., Senior Researcher,
B. G. Putintsev, Postgraduate Student, Engineer-researcher, A. V. Zuyev, Researcher,

Institute of Ultra High Frequency Semiconductor Electronics, RAS, Moscow iuhfseras2010@yandex.ru,

Monolithic Integrated Circuit for VCO of V-band

Institute of Microwave Frequency Semiconductor Electronics of RAS (IMSCE RAS) presented a monolithic integrated circuit (MIC) for V-band voltage controlled oscillator (VCO) on sapphire substrates designed and manufactured on the basis of AlGaN/GaN heterostructures. The output power of VCO with a buffer amplifier varied within 25-50 mW, the tuning sensitivity equaled to ~900 MHz/V, the power consumed by MIC was 90 mA at 10V of the supply voltage, and the frequency drift due to the temperature change was 30 MHz/°C.

Keywords: V-band, GaN, voltage controlled oscillator, HEMT

Introduction

Developers and manufacturers of the radio-electronic systems master actively the range of frequencies of 57...64 GHz (V-range). On one hand, the width of the accessible band makes it promising for a high-speed superbroadband data transmission in 5G networks, the transfer speed in which will be up to 5 Gbit/s. On the other hand, sharp weakening of the electromagnetic waves in the atmospheric oxygen (about 10 dB/km) eliminates the problem of interference between p signal sources belonging to different networks, during organization of the personal networks [1]. Development of 5G technologies transfers from the stage of research to the stage of standardization, and commercialization of the technology is expected in 2020. Besides the local and personal superbroadband networks of wireless data transmission, the devices of the given band can find their applications in the radiationresistant equipment for the systems of intersatellite communication protected from the influence and hindrances of the Earth [2].

Development and manufacture of MIC VCO of V-band

IMSCE RAS continues development of the technology for designing and manufacture of the monolithic integrated circuits (MIC) on the basis of the heterostructures of gallium nitride for the transmitter-receiver systems of V-band [3–8]. The work presents the results of research of the samples of the developed and manufactured MIC VCO. The MIC VCO samples were realized on AlGaN/GaN heterostructures on sapphire substrates with thickness of 350 µm manufactured by Elma-Malachite Company. The test transistors made on the given heterostructures with the gate width of 2×50 µm and gate length of 140 nm have the measured values of F_t and F_{max} parameters without de embedding of the contact platforms of 57 and 130 GHz, accordingly.

Abroad, as a rule, the microcircuits on the basis of AlGaN/GaN heterostructures are made by the microstrip technology, envisaging etching of the earthing apertures through a substrate, however, this is connected with technological difficulties. The problem can be partially solved due to transition to the heterostructures on the silicon substrates, however, such heterostructures are not available to us. Therefore IMSCE RAS found a solution consisting in creation of the earthing plane over the front-face of the plate with already manufactured active and passive microwave elements over the polymeric dielectric layer —photovarnish developed by the Institute of High-molecular Compounds (IHC RAS). Grounding of the corresponding elements is carried out through the apertures in the photovarnish layer (fig. 1), which simultaneously plays the role of a protective passivation.

The circuit selected for realization of VCO of V-band is presented in fig. 2. Ts and Tg microstrip lines connected to the transistor source and gate, together with the varactor, form a resonant contour. Negative differential output resistance is formed on the drain. The oscillation frequency is determined basically by the length of Ts and Tg lines and the transistor's capacities [10]. The oscillation frequency is controlled by the varactor, the role of which is played by the transistor in a diode switch — the control voltage changes the gate-drain capacity. The VCO output was supplemented by one-cascade buffer amplifier for elimination of the influence of the variation of the oscillator load circuit on the frequency and level of the signal formed in VCO. Rating of the blocking capacitors in the circuits of power supply and displacement was chosen as big enough in order not to render influence on the resonant frequency. In the circuit calculations a nonlinear model of transistors was used with the gate width of 100 µm, constructed on the basis of the results of measurements of the test transistors.

In accordance with the developed basic circuits the VCO topological project was created and electromagnetic calculation was done by the method of the moments with the use of the same models of transistors. The given design stage allowed to consider the influence of the spurious couplings between the transfer lines and other specific features of the topology. If necessary, by the results of modeling a correction of the topological project can be done as well as a repeated electromagnetic calculation up to achievement of a satisfactory result. On the basis of the received topological project a complete set of the working photomasks was developed for manufacture of MIC.

The developed MIC VCO were made on the technological equipment of IMSCE RAS. Photos of MIC VCO crystals before and after deposition of the layers of photovarnish and the top metallization are presented in fig. 3. The size of the crystal is $1,5 \times 1,24$ mm.

Research of MIC VCO characteristics

Measurements of MIC VCO parameters were done with the help a probe station on an uncut plate and on separate crystals after the plate was cut. The measuring equipment was Keysight N5247A circuit analyzer with an option of N5247A-090 spectrum analyzer. Fig. 4 presents the dependence of the oscillation frequency (F_{gen}) of three MIC VCO samples on the control voltage (V_{ctrl}) on the cut crystals without a heat-conducting path. At the control voltages from 2 up to 6 V the readjustment characteristic is close to the linear one. The readjustment steepness in the linear area is ~900 MHz/V.

The output power (*Pout*) of MIC VCO samples at the nominal operating voltage of 10 V varies within 25...50 mW (fig. 5). The current consumption is not more than 70 mA.

Fig. 6 presents a typical dependence of the oscillation frequency on the supply voltage at a constant voltage of control and displacement on the gates. Sensitivity of the oscillation frequency of VCO (F_{gen}) to the change of supply voltage (V_{d1}) is ~260 MHz/V at the working supply voltage of 10 V.

In addition the research of the dependence of MIC VCO characteristics on the ambient temperature was done. Measurements were done by the probe method on separate crystals without a heat-conducting path on a probe station with a thermal table. Fig. 7 presents the dependence of the oscillation frequency of MIC VCO on temperature at heating up to 85 °C.

Curve 1 corresponds to the measurements in a constant working point. If the temperature is increased, the oscillation frequency decreases. The frequency drift due to temperature is about 30 MHz/°C. The output power at 85 °C decreases by 1.8 dBm.

It was established, that by means of locking of the transistors it is possible to ensure a constant value of the oscillation frequency (curve 2). Curve 3 reflects the dependence of the bias voltage (V_g) , necessary for keeping of the oscillation frequency of MIC VCO at a constant level.

The hardware potential of the used measuring equipment did not allow us to measure the phase noise.

Conclusion

For the first time in Russia IMSCE RAS developed, manufactured and investigated MIC VCO of V-band on the heterostructures of gallium nitride on sapphire substrates. The output power of the samples was 25...50 mW, the band of rearrangement of the oscillation frequency reached 4 GHz. Frequency drift due to temperature was 30 MHz/°C. The authors express their gratitude to the Moscow Office of Keysight Technologies for the provided demonstration license for 090 option to the circuit analyzer.

The work was done with financial support of the Ministry of Education and Science (grant agreement N_{o} 14.607.21.0087, unique identifier of the project -*RFMEFI60714X0087*).

References

1. **Vishnevskij V., Frolov S., Shahnovich I.** Millimetrovyj diapazon kak promyshlennaja real'nost'. Standart IEEE 802.15.3s i specifikacija WirelessHD, *ELEKTRONIKA: Nauka, Tehnologija, Biznes*, 2010, no. 3, pp. 70–78.

2. **Mal'cev P. P., Fedorov Ju. V., Galiev R. R.** i dr. / Nitridnye pribory millimetrovogo diapazona, *Nanoindustrija*, 2014, no. 3, pp. 40–51.

3. **Mal'cev P. P., Matveenko O. S., Fedorov Ju. V.** Integral'nyj antennyj element so vstroennym usilitelem 5mm diapazona dlin voln na osnove geterostruktur AlGaN/GaN, *Izvestija VUZov. Elektronika*, 2014, no. 4 (189).

4. Mal'cev P. P., Matveenko O. S., Fedorov Ju. V. i dr., Monolitnaja integral'naja shema usilitelja so vstroennoj antennoj dlja pjatimillimetrovogo diapazona dlin voln, Nano- i mikrosistemnaja tehnika, 2014, № 9, pp. 12–15.

5. Mal'cev P. P., Fedorov Ju. V., Gnatjuk D. L., Matveenko O. S., Zuev A. V. Topologija IMS "Integral'nyj antennyj jelement so vstroennym maloshumjashhim usilitelem dlja diapazona 57-64 GHz", svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii № 2013630159 ot 06 nojabrja 2013 g.

6. Mal'cev P. P., Fedorov Ju. V., Gnatjuk D. L., Matveenko O. S., Zuev A. V. Topologija IMS "*Preobrazovatel' signala dlja diapazona 57–64 GGc*", svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii № 2013630171 ot 06 nojabrja 2013 g.

7. Mal'cev P. P., Fedorov Ju. V., Gnatjuk D. L., Matveenko O. S. Topologija IMS "*Smesitel' na balunah Marshanda dlja diapazona 57–64 GGc*", svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii \mathbb{N} 20146300511 ot 19 fevralja 2014 g.

8. Fedorov Ju., Mal'cev P., Matveenko O. i dr. MIS usilitelej so vstroennymi antennami SVCh-diapazona na nanogeterostrukturah, *Nanoidustrija*, 2015, no. 3 (57), pp. 44–51.

9 Jan-Erik Muller, Thomas Grave, Heinz J. Siweris, A GaAs HEMT MMIC Chip Set for Automotive Radar Systems Fabricated by Optical Stepper Lithography, *IEEE Journal of sol-id-state circuits*, 1997, vol. 32, no. 9.

УДК 621.372.8.049.75.002 (031)

В. П. Тимошенков, д-р техн. наук, проф., e-mail: valeri04@hotmail.com,

Д. В. Родионов, вед. инженер, denis.rodionov@gmail.com,

А. И. Хлыбов, канд. техн. наук, науч. сотр., alex1818@yandex.ru,

A. C. Мусаткин, инженер, musatkin.a@hotmail.com,

Д. В. Вертянов, вед. инженер, vdv.vertyanov@gmail.com

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования Национальный исследовательский университет МИЭТ

ИССЛЕДОВАНИЯ 3D СВЧ СБОРОК НА ПОЛИИМИДНОМ ШЛЕЙФЕ ДЛЯ СИСТЕМ В КОРПУСЕ

Поступила в редакцию 11.04.2016

Исследовались особенности 3D сборки CBЧ трактов высокочастотных интегральных микросхем и устройств на полиимидном носителе. Рассмотрены расчеты волнового сопротивления микрополоскового и копланарного трактов. Проведены экспериментальные исследования CBЧ параметров и сравнение с теоретическим расчетом.

Ключевые слова: 3D СВЧ сборка, интегральная микросхема, S-параметры, полиимид, полиимидный гибкий шлейф

Введение

Основные тенденции в микроэлектронике связаны со снижением массогабаритных параметров, повышением быстродействия и снижением потребляемой мощности. Технология трехмерной (3D) интеграции играет существенную роль в улучшении параметров изделий электронной техники. Ключевыми приемами 3D-интеграции является использование ультратонких (20...35 мкм) кристаллов, собранных в пакет (стек) с применением коммутационных подкристальных плат-интерпозеров (*interposer*), со сквозными металлизированными переходными отверстиями [1]. Данная технология хорошо работает для относительно низкочастотных сигналов. В случае сигналов СВЧ диапазона существуют ограничения, связанные с изготовлением трактов передачи на проводящем кремниевом основании (чип кристалла, интерпозер). Эту проблему можно успешно разрешить, используя гибкий полиимидный шлейф, включающий СВЧ тракты, а также низкочастотные сигнальные линии, шины питания и земли. Причем применение полиимидного шлейфа возможно как для соединения печатных плат, так и для интегральных схем, собираемых в 3D-пакет (рис. 1).

В связи с этим актуальной задачей является разработка СВЧ трактов на полиимидном носителе, а также измерение и исследование их параметров в широком частотном диапазоне.



Рис. 1. Использование полиимидного шлейфа в 3D CBЧ тракты: a, b - для печатных плат; c - для интегральных микросхем *Fig. 1. Polyimide transmission line in 3D microwave frequency:* a, b - printed-circuit boards; c - integrated microcircuits

Разработка конструкции СВЧ трактов на полиимидном носителе

На полиимидной пленке возможно формирование как 50-омных, так и 75-омных микрополосковых и копланарных трактов (рис. 2), применяемых в СВЧ технике. При расчете волнового сопротивления таких конструкций используется экспрессный (инженерный) или более точный теоретический (научный с применением вычислительной техники) подходы.

Для инженерных расчетов микрополосковых линий (МПЛ), обеспечивающих точность 15...20 %, целесообразно использовать соотношение [2]

$$Z_{0,\text{MIII}} = \frac{87}{\left(\varepsilon_r + 1.41\right)^{1/2}} \ln\left[\frac{5.98h}{0.8w+t}\right].$$
 (1)

Параметры ε_r , *h*, *w*, *l* представлены на рис. 2.

Достоинством микрополоска является его простота расчета и реализации. К недостаткам следует отнести дополнительную индуктивность в цепи нулевой шины. Эта "паразитная" индуктивность появляется в результате соединения соответствующих площадок на интегральной схеме и нулевой шины на обратной стороне микрополосковой конструкции. Копланарная конструкция лишена этих недостатков, так как нулевая и сигнальные шины расположены в одной плоскости. Инженерный расчет волнового сопротивления копланарной линии (КПЛ) осуществляется по соотношениям [3]

$$Z_{0,\text{K}\Pi\Pi} = \frac{60\pi}{\sqrt{\epsilon_{eff}}} \frac{1}{\frac{K(k)}{K(k')} + \frac{K(k_1)}{K(k_1')}},$$
 (2)

где
$$k = \frac{w}{w+2s}, \ k' = \sqrt{1-k^2}, \ k_1 = \frac{\tanh(\frac{\pi w}{4h})}{\tanh(\frac{\pi (w+2s)}{4h})},$$

$$k_{1}' = \sqrt{1 - k_{1}^{2}}, \ \varepsilon_{eff} = \frac{1 + \varepsilon_{r} \frac{K(k')}{K(k)} \frac{K(k_{1})}{K(k_{1}')}}{1 + \frac{K(k')}{K(k)} \frac{K(k_{1})}{K(k_{1}')}}$$

 $K(k) = \int_{0}^{\overline{2}} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} d\varphi -$ полный эллиптический

интеграл первого рода; ϕ — угол интегрирования.

На полиимидном носителе целесообразно формирование копланарной конструкции с верхним



Рис. 2. СВЧ тракты: a — микрополосок, b — копланар Fig. 2. Microwave frequency paths: a — microstrip; b — coplanar

– НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 18, № 10, 2016 —



Рис. 3. Структура полиимидного шлейфа

Fig. 3. Structure of the polyimide transmission line

и нижним расположением нулевой шины, которые соединены между собой посредством набора металлизированных переходных отверстий. Вклад боковых нулевых шин в волновое сопротивление тракта значительно меньше, чем нижних, так как толщина диэлектрика h в несколько раз меньше, чем расстояние от центрального полоска до боковой нулевой шины s (рис. 2).

В качестве основы гибкого шлейфа взят двухсторонний фольгированный полиимид марки DuPont Ругаlux LF 9121R. Особенность данного материала заключается в отсутствии адгезива между проводящим слоем меди и диэлектрическим слоем полиимида, что достигается методом горячей накатки медной фольги на подготовленную поверхность полиимидной пленки. Толщина диэлектрика составляет 50 мкм, толщина меди с каждой стороны равна 18 мкм.

Основные технологические процессы изготовления полиимидного шлейфа субтрактивным методом с использованием сухого пленочного фоторезиста:

- формирование отверстий в материале Ø300 мкм;
- активация поверхности под химическую металлизацию;
- металлизация отверстий в два этапа (1 — химическая, 2 — гальваническая);
- формирование рисунка в фоторезисте;
- гальваническое наращивание меди (~15 мкм);
- никелирование (~3...5 мкм);
- иммерсионное золочение (~1 мкм);
- снятие фоторезиста;
- травление меди по металлорезисту.

По завершению технологического цикла получаем полиимидный шлейф с толщиной металлизации 40 мкм и шириной полоска 120 мкм (рис. 3). В качестве финишного покрытия используется иммерсионное золото с подслоем никеля. Золото обеспечивает высокую надежность при сборке шлейфа.

Проведено моделирование волнового сопротивления СВЧ конструкции в зависимости от ширины центрального полоска и диэлектрической константы материала копланарной структуры на частотах до 10 ГГц (рис. 4).

Следует отметить, что величине 50-омного стандартного волнового сопротивления соответствует ширина полоска от 90 до 117 мкм. В связи с тем, что имеются технологические ограничения на минимальный топологический зазор, который составляет порядка 100 мкм, важную роль играет измерение реальной величины диэлектрической проницаемости полиимида. Прямые измерения емкости на этих частотах практически невозможны, поэтому определение диэлектрической проницаемости в указанном диапазоне частот проводилось путем измерения скорости распространения сиг-



Рис. 4. Влияние геометрических размеров полоска на волновое сопротивление СВЧ копланарной конструкции



нала в полосковой линии рефлектометрическим методом [4].

В микрополосковых линиях основными типами волн являются волны ТЕМ-типа. Скорость распространения волны определятся следующим образом:

$$v = c/(\varepsilon_{\to \Phi\Phi})^{1/2}$$

где ($\epsilon + 1$)/2 < $\epsilon_{3\phi\phi}$ < ϵ (ϵ — диэлектрическая проницаемость материала подложки, на которой выполнена микрополосковая линия); *с* — скорость света.

В микрополосковых линиях с относительно широкой сигнальной шиной ($w \gg h$) вся энергия электрического поля концентрируется в диэлектрике под полоском, поэтому $\varepsilon_{эф\phi} = \varepsilon$, таким образом, $\varepsilon = (c/v)^2$. Измеряя время *T* прохождения сигнала через полосковую линию известной длины *L*, можно определить скорость распространения волны (рис. 5). Для отраженного сигнала скорость распространения определяется двойным пробегом сигнала v = 2L/T.

Следует отметить, что при прохождении сигнала через СВЧ конструкцию фронт зондирующего перепада (10 пс) ухудшился до 33,5 пс. Используя известное выражение $f = 0,35/t_r$, где $t_r - дли$ тельность фронта проходного сигнала, получаем значение полосы пропускания 10,4 ГГц [5].

На рис. 6 приведены экспериментальные исследования зависимости диэлектрической проницаемости от частоты для СВЧ гибкого копланарного шлейфа.

Следует отметить значительное снижение диэлектрической проницаемости от 3,4 до 2,25 при увеличении частоты. Низкочастотные экспериментальные измерения диэлектрической константы емкостным методом дают значения 3,6...3,7, что соответствует удельной емкости 0,43 п Φ /мм² для полиимида толщиной 50 мкм. Результаты, приведенные на рис. 5 и 6, получены с помощью стробоскопического осциллографа Keysight DCA-X 86100D с блоком рефлектометра N1055A.

Проведено исследование *S* параметров квазикопланарной конструкции для определения согласования с 50-омным трактом, а также для измерения полосы пропускания тракта по уровню 3 дБ.



Рис. 5. Прохождение прямого и отраженного сигналов в СВЧ полиимидной копланарной конструкции (длина линии 3,6 см, ширина полоска 100 мкм)

Fig. 5. Passage of the direct and reflected signals in the microwave frequency polyimide coplanar design (line length is 3,6 cm, strip width is 100 μ m)



Рис. 6. Диэлектрическая проницаемость полиимида как функция от частоты Fig. 6. Dielectric permeability of the polyimide as a frequency function

Результаты измерения *S*-параметров, полученные с использованием анализатора цепей Keysight PNA Network Analyzer N5227A, показывают, что согласование по входу -11,3 дБ (рис. 7, *a*), полоса пропускания составляет 10,7 ГГц (рис. 7, *b*). Из этого следует, что экспериментальные результаты, полученные с помощью анализатора цепей, соответствуют рефлектометрическим измерениям.

Выводы

Разработаны волноводные тракты на полиимидной основе, обеспечивающие соединение как печатных плат, так и СВЧ кристаллов ИМС в 3Dисполнении. Проведены теоретические и экспериментальные исследования устройства, подтверждающие работоспособность конструкции в диапазоне до 12 ГГц. При этом прямые потери на прохождение, включая разъемы, в диапазоне до 12 ГГц



Рис. 7. Зависимость S-параметров тракта на полиимидном носителе: *a* — измерения входного согласования (S11); *b* — измерение потерь (S21)

Fig. 7. Dependence of S parameters of the path on a polyimide carrier: a - measurements of the input coordination (S11), b - measurement of losses (S21)

не превышают 0,0833 дБ/мм. Входное согласование не хуже –11,3 дБ. Входные согласование и проходные потери существенно зависят от входных/выходных разъемов. Использование более высокочастотных разъемов позволит повысить полосу пропускания конструкции до 15 ГГц.

Список литературы

1. **Тюльпанов В., Васильев А.** Сборка интегральных схем по технологии 3D-интеграции // Наноиндустрия. 2013. № 7 (45). С. 28—36.

2. **IPC-2141.** Controlled Impedance Circuit Boards and High-Speed Logic Design, April 1996, IPC-2141. URL: http://kazus.ru/nuke/modules/Downloads/pub/147/0/IPC%202141% 20Controlled%20Z%20PCB%20.pdf (дата обращения 17.02.2016).

3. **Wadell B. C.** Transmission Line Design Handbook, Artech House. 1991, 517 p.

4. Глебович Г. В., Андрианов А. В., Введеннский Ю. В. и др. Исследование объектов с помощью пикосекундных импульсов / Под ред. Г. В. Глебовича. М.: Радио и связь, 1984. 256 с.

5. Burkhardt A., Gregg C., Staniforth J. Calculation of PCB Track Impedance. URL: http://www.polarinstruments.com/ support/cits/IPC1999.pdf (дата обращения 16.02.2016).

V. P. Timoshenkov, D. Sc., Professor, valeri04@hotmail.com, D. V. Rodionov, Principal Engineer, denis.rodionov@gmail.com, A. I. Khlybov, Ph. D., Senior Researcher, alex1818@yandex.ru, A. S. Musatkin, Engineer, musatkin.a@hotmail.com, D. V. Vertianov, Principal Engineer, vdv.vertyanov@gmail.com.

National Research University of Electronic Technology MIET

Research of 3D Flexible Microwave Polyimide T-line Assembly for the Systems in Packages

Major trends in microelectronics are associated with reduction of the weight and size parameters, increase of the frequency response and decrease of the power consumption. The three-dimensional (3D) integration technology is important for improvement of the manufacturing parameters of the electronic equipment. The key technique of 3D integration is the use of the ultra-thin (20...35 μ m) crystals stacked with Si interposer boards using the through-silicon vectors (TSV). This technique works well for the relatively low frequency signals. But in case of the microwave signals there are limitations associated with manufacturing of the transmission lines (T-lines) on a conductive silicon base (crystal chip, interposer). It is possible to resolve this problem successfully by using a flexible flat polyimide T-lines, including the microwave transmission lines, as well as the low-frequency signal lines, a power bus and a ground plate.

On a polyimide film base the $50-\Omega$ and $75-\Omega$ microstrips or coplanar lines may be formed using the microwave technology. An advantage of a microstrip is its simplicity of calculation and implementation. Its disadvantage is an additional inductance in the ground plane. This "parasitic" inductance appears as a result of connection of the respective pads on the integrated circuit and a ground bus on the back side of the microstrip structure.

The coplanar structure is devoid of this disadvantage, since the ground and signal lines are arranged in one plane. The polyimide carrier has expedient design with the coplanar upper and lower locations of the ground plane, which are interconnected by sets of metallic through plate windows. The contribution of the lateral side ground to the impedance is considerably smaller than that of the lower one, since the dielectric thickness is usually much smaller than the distance from the central strip of the line to the ground side.

Simulation of the impedance of the microwave structure, depending on the width of the central strip and the dielectric constant of the material. The magnitude of the standard 50- Ω impedance corresponds to the width from 90 up to 117 μ m of the strip. It plays an important role in measuring of the actual value of the permittivity of the polyimide. Direct measurements of the capacity at the microwave frequencies are almost impossible, so, determination of the dielectric constant in the specified frequency range was done by measuring the propagation speed of the strip line by the Time-domain reflectometry (TDR) method.

Measurements show significant reduction of the dielectric constant from 3,4 down to 2,25 with an increase of the frequency. Lowfrequency experimental measurements of the dielectric constant capacitive method give values of 3,6-3,7, which correspond to the specific capacitance of 0,43 pF/mm for 50- μ m thick polyimide.

A study of S-parameters of a quasi-coplanar structure was done to determine the approval of the 50- Ω impedance, as well as to measure the bandwidth frequency. The results of S-parameter measurements show that S11 = -11,3 dB, and the bandwidth is equal to 10,7 GHz.

Three dimension (3D) assembly of the microwave polyimide transmission line (T-line) for a system in package was investigated. Flexible T-lines may be used for 3D RF connection of the integrated circuits or RF PCBs. The transmission lines were created by using a polyimide film with metal lines deposited on it. The thicknesses of the metal and polyimide film were 39μ and 50μ . Theoretical calculations and computer simulations of the impedance for the microstrip and coplanar lines were done. The wave impedance versus the geometric dimensions and dielectric constant for transmission line were presented. Experimental research of the flexible T-lines was done in the frequency range up to 12 GHz. The direct transmission loss, including RF connectors, did not exceed 0,0833 dB/mm.

Keywords: three dimension (3D) assembly, integrated circuit, S-parameters, polyimide, flexible transmission line

Introduction

The major trends in the microelectronics are connected with a decrease of weight and dimensions, increase of the speed and lowering of the power consumption. The technology of the three-dimensional (3D) integration plays an essential role in improvement of the products' parameters. The key method of the 3D integration is the use of the ultrathin (20...35 µm) crystals collected in a package (stack) with application of the switching subcrystal boards-interposers, with the through metalized transition apertures [1]. The technology works well for the low-frequency signals. In case of the microwave frequency range there are restrictions connected with manufacture of the transfer transmission lines on the conducting silicon basis (crystal chip, interposer). The problem can be solved by using a flexible polyimide loop including the microwave frequency transmission lines, low-frequency signal lines, buses of power supply and earth. At that, application of such a loop is possible for connection of the printed circuit boards and integrated circuits stacked in 3D packages (fig. 1).

In this connection a topical task is development of the microwave frequency transmission lines on a polyimide carrier, measurement and research of their parameters in a wide frequency range.

Development of a design of the microwave frequency transmission lines on a polyimide carrier

On a polyimide film it is possible to form both 50- Ω and 75- Ω microstrip and coplanar transmission lines (fig. 2) applied in the microwave frequency technologies. For calculation of the wave resistance of the designs the express (engineering) or more accurate theoretical (scientific) approaches are used.

For the engineering calculations of the microstrip lines (MSL), which ensure accuracy of 15...20 %, is expedient to use the following correlation [2]

$$Z_{0,\text{MIII}} = \frac{87}{(\varepsilon_r + 1.41)^{1/2}} \ln\left[\frac{5.98h}{0.8w + t}\right].$$
 (1)

Parameters ε_r , *h*, *w*, *l* are presented in fig. 2.

An advantage of the microstrip is simplicity of calculation and realization. Among its drawbacks is the additional inductance in the chain of the zero bus. This "parasitic" inductance appears as a result of connection of the corresponding platforms on the integrated circuit and the zero bus on the reverse side of the microstrip design.

The coplanar design has no such drawbacks, because the zero and signal buses are located in one plane. The engineering calculation of the wave resistance of the coplanar lines (CPL) was done by the following correlations [3]:

$$Z_{0,\text{KIIII}} = \frac{60\pi}{\sqrt{\epsilon_{eff}}} \frac{1}{\frac{K(k)}{K(k')} + \frac{K(k_1)}{K(k'_1)}},$$
(2)

where
$$k = \frac{w}{w+2s}$$
, $k' = \sqrt{1-k^2}$, $k_1 = \frac{\tanh\left(\frac{\pi w}{4h}\right)}{\tanh\left(\frac{\pi (w+2s)}{4h}\right)}$,

$$k_{1}' = \sqrt{1 - k_{1}^{2}}, \ \varepsilon_{eff} = \frac{1 + \varepsilon_{r} \frac{K(k')}{K(k)} \frac{K(k_{1})}{K(k_{1}')}}{1 + \frac{K(k')}{K(k)} \frac{K(k_{1})}{K(k_{1}')}}$$

 $K(k) = \int_{0}^{\overline{2}} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} \, d\varphi - \text{ is a full elliptic integral of the first}$

kind, φ – integration angle.

On a polyimide carrier it is expedient to form coplanar designs with the top and bottom arrangement of the zero bus, which are connected by means of a set of metalized transition apertures. The contribution of the lateral zero buses to the wave resistance of the path is considerably less, than that of the bottom ones, because thickness of dielectric h is several times less, than the distance from the central strip to the lateral zero bus s (fig. 2).

As a basis for the flexible transmission line we took the double-sided foil-coated polyimide of DuPont Pyralux LF 9121R. A specific feature of the material consists in absence of adhesive between the conducting layer of copper and the dielectric layer of polyimide, which is achieved due to a hot knurl of copper foil on a prepared surface of the polyimide films. Thickness of the dielectric is 50 μ m, thickness of copper from each side is equal to 18 μ m.

The basic technological processes of manufacturing of a polyimide transmission line by the subtractive method with the use of a dry film photoresist:

- formation of \emptyset 300-µm apertures in the material;
- surface activation for the chemical metallization;
- metallization of the apertures in two stages (1 chemical, 2 – galvanic);
- formation of drawing in the photoresist;
- galvanic growing of copper (~15 μm);
- nickel plating (~3...5 μm);
- immersion gilding (~1 μm);
- removal of the photoresist;
- copper etching on the metalresist.

After termination of the cycle we get a polyimide transmission line with thickness of metallization of 40 μ m and strip width of 120 μ m (fig. 3). As a finishing coating the immersion gold with a nickel sublayer is used. Gold ensures high reliability during the line assembly.

Modeling of the wave resistance of the microwave frequency design was done depending on the width of the central strip and the dielectric constant of the material of the coplanar structure on frequencies up to 10 GHz (fig. 4). A strip width from 90 up to 117 μ m corresponds to the value of 50- Ω standard wave resistance. Since there are technological restrictions on the minimal topological gap of about 100 μ m, an important role is played by measurement of the real dielectric permeability of the polyimide. Direct measurements of the capacity on these frequencies are practically impossible, therefore, determination of the dielectric permeability in the specified range of frequencies was done by measurement of the speed of signal propagation in a strip line by means of reflectometry [4].

In the microstrip lines the basic types of waves are TEM waves. The speed of the wave propagation is defined in the following way:

$$v = c/(\varepsilon_{\ni \Phi \Phi})^{1/2},$$

where $(\varepsilon + 1)/2 < \varepsilon_{\Im \Phi \Phi} < \varepsilon$ (ε — dielectric permeability of the substrate material, on which the microstrip line is made, *c* — light velocity).

In the microstrip lines with rather wide signal bus $(w \gg h)$ the energy of the electric field is concentrated in the dielectric under the strip, therefore $\varepsilon_{\Im \varphi \varphi} = \varepsilon$, and thus, $\varepsilon = (c/v)^2$. By measuring the time of passage of a signal through a strip line of the known length *L*, it is possible to determine the speed of the wave propagation (fig. 5). For a reflected signal the speed of propagation is determined by a double run of a signal v = 2L/T.

It is necessary to point out, that during the signal passage through the microwave frequency design the front of the probing differential (10 ps) worsened down to 33,5 ps. Using expression $f = 0.35/t_r$, where t_r — is duration of the front of a passing signal, we receive the value of the passband equal to 10,4 GHz [5].

Fig. 6 presents experimental research of the dependence of the dielectric permeability on the frequency for the microwave frequency of the flexible coplanar transmission line.

It is necessary to point out a considerable decrease in the dielectric permeability from 3,4 down to 2,25 during a frequency increase. Low-frequency measurements of a dielectric constant by the capacitor method give 3,6...3,7, which corresponds to the specific capacity of 0,43 pF/mm² for the polyimide with thickness of 50 μ m. The results presented in fig. 5 and 6 were received by means of Keysight DCA-X 86100D stroboscopic oscillograph with N1055A reflectometer unit.

Research was done of the *S*-parameters of a quasicoplanar design for determination of coordination with a 50- Ω path, and also for measurement of the pass-band of the path at the level of 3 dB. The results of measurement of the *S*-parameters, received with the use of Keysight PNA Network Analyzer N5227A chain analyzer demonstrated, that the coordination on the input was 11,3 dB (fig. 7, *a*), and the pass-band was equal to 10.7 GHz (fig. 7, *b*). From this it follows, that the experimental results received by means of the chain analyzer correspond to the reflectometer measurements.

Conclusions

Waveguide transmission lines on polyimide basis were developed, ensuring connection of the printed-circuit boards and microwave frequency IC crystals in a 3D version. Theoretical and the experimental researches of the device were done confirming the operability of the design up to 12 GHz. At that, the real loss through passage, including sockets, did not exceed 0,0833 dB/mm. The input coordination was not worse than 11,3 dB. The input coordination and losses through passage essentially depended on the input/output sockets. Use of more high-frequency sockets will allow us to raise the passband of the design up to 15 GHz.

References

1. **Tiulpanov V., Vasiliev A.** Sborka integralnyh shem po tehnologii 3D integracii, *Nonoindustriy*, 2013, no. 7 (45), pp. 28–36.

2. **IPC-2141** — Controlled Impedance Circuit Boards and High-Speed Logic Design, April 1996, IPC-2141. URL: http:// kazus.ru/nuke/modules/Downloads/pub/147/0/IPC%202141% 20Controlled%20Z%20PCB%20.pdf

3. Brian C. Wadell. *Transmission Line Design Handbook*. Artech House, Norwood, MA, 1991, 517 p.

4. Glebovitch G. V., Andrianov A. V., Vvedenski U. V. Issledovanie obektov s pomochiu picosekundnih impulsov, Moscow, Radio i sviaz, 1984, 256 p.

5. Burkhardt A., Gregg C., Staniforth J. Calculation of PCB Track Impedance. URL: http://www.polarinstruments.com/support/cits/IPC1999.pdf

Технический редактор Т. А. Шацкая. Корректор Е. В. Комиссарова.

Сдано в набор 19.08.2016. Подписано в печать 22.09.2016. Формат 60×88 1/8. Заказ MC1016. Цена договорная

Оригинал-макет ООО «Адвансед солюшнз». Отпечатано в ООО «Адвансед солюшнз». 119071, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 19, стр. 1. Сайт: www.aov.ru

656 -

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

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.