

# НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

Том 18. № 11 ◆ 2016

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

## 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

## Редакционная коллегия:

Абрамов И. И., д.ф.-м.н., проф. (Беларусь)  
Агеев О. А., д.т.н., проф.

Андреев А., к.ф.-м.н., (Великобритания)

Андреевский 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.

Тодуя П. А., д.т.н., проф.

Шубарев В. А., д.т.н., проф.

## Отв. секретарь

Лысенко А. В.

## Редакция:

Григорин-Рябова Е. В.

Чугунова А. В.

### Учредитель:

Издательство "Новые технологии"

## СОДЕРЖАНИЕ

Издается с 1999 г.

### НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Ларионов Ю. В. Вариация изображения выступа в ходе его многократного сканирования в низковольтном РЭМ . . . . . 659

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Шукевич Я. И., Баркалин В. В., Таратын И. А., Реутская О. Г. Моделирование динамики работы СВЧ МЭМС-переключателя . . . . . 666

### МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ

Рубан О. А. Исследование поляризации в гетероструктурах с квантовой ямой AlGaN/GaN методом вольт-фарадовых характеристик . . . . . 675

Барулина М. А., Панкратов В. М. Аналитическое решение плоской нестационарной задачи теплопроводности для фотонно-кристаллического волокна с воздушным сердечником . . . . . 680

Тополов В. Ю., Ермаков И. А. Пьезоэлектрические свойства и гидростатические параметры нового 2—0—2-композита на основе кристалла релаксора-сегнетоэлектрика . . . . . 692

Рембеза С. И., Кошелева Н. Н., Свистова Т. В., Рембеза Е. С., Агапов Б. Л., Плотникова Е. Ю., Белоусов С. А., Носов А. А. Электрофизические свойства пленок  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  ( $x = 0 \dots 0,5$ ) для прозрачной электроники . . . . . 699

Данилина Т. И., Чистоедова И. А., Попов А. А. Формирование микрорельефа и исследование его влияния на коэффициент оптического вывода светодиода на основе GaN . . . . . 708

### ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

Смолин В. К. Высокочастотная микроэлектроника на структурах с кремниевыми подложками . . . . . 713

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](mailto:nmst@novtex.ru)

# Journal of NANO- and MICROSYSTEM TECHNIQUE *NANO- I MIKROSISTEMNAYA TEHNika*

ISSN 1813-8586

Vol. 18

No. 11

2016

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. (Tech.), 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.microsystems.ru/eng](http://www.microsystems.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

### NANOTECHNOLOGY AND SCANNING PROBE MICROSCOPY

**Larionov Yu. V.** Low-Voltage SEM: Repeated Scans of a Protrusion  
None Monotonically Change its Image . . . . . 663

### MODELLING AND DESIGNING OF MNST

**Shukevich Ya. I., Barkalin V. V., Taratyn I. A., Reutskaya O. G.**  
Simulation of the Dynamics of Operation of RF MEMS Switch . . . . . 672

### SCIENCE OF MATERIALS AND TECHNOLOGICAL BASICS OF MNST

**Ruban O. A.** Investigation of Polarization in the Quantum Well  
Heterostructures of AlGaN/GaN by the Method of Current-Voltage  
Characteristics . . . . . 678

**Barulina M. A., Pankratov V. M.** Analytical Solution for a Plane  
Nonstationary Heat Conduction Problem for the Air-core Photonic  
Band-gap Fibers . . . . . 687

**Topolov V. Yu., Ermakov I. A.** Piezoelectric Properties and Hydro-  
static Parameters of the Novel 2—0—2 Composite Based on a Relaxor-  
Ferroelectric Single Crystal . . . . . 696

**Rembeza S. I., Kosheleva N. N., Svistova T. V., Rembeza E. S.,  
Agapov B. L., Plotnikova E. Yu., Belousov S. A., Nosov A. A.**  
Electrophysical Properties of  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  ( $x = 0..0.5$ ) Films  
for Transparent Electronics . . . . . 705

**Danilina T. I., Chistoyedova I. A., Popov A. A.** Formation of a  
Microrelief and Research of its Influence on the Optical Output Coef-  
ficient of GaN-based LED . . . . . 711

### MICRO- AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

**Smolin V. K.** High-Frequency Microelectronics Based on Silicon  
Substrate Structures . . . . . 718

# **Нанотехнологии и зондовая микроскопия**

## **NANOTECHNOLOGY AND SCANNING PROBE MICROSCOPY**

УДК 537.533.35

**Ю. В. Ларионов**, ст. науч. сотр., luv@kapella.gpi.ru,  
Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва

### **ВАРИАЦИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ ВЫСТУПА В ХОДЕ ЕГО МНОГОКРАТНОГО СКАНИРОВАНИЯ В НИЗКОВОЛЬТНОМ РЭМ**

*Поступила в редакцию 14.04.2016*

*Зафиксирована сложная вариация изображения выступа, сформированного на поверхности кремния, при многократных его сканированиях с паузами в низковольтном растровом электронном микроскопе. Явление объяснено наведением электрического заряда в приповерхностном слое кремния и особенностю осаждения контаминационной пленки в этом режиме сканирования.*

**Ключевые слова:** нанометрология, рельефная структура, низковольтный РЭМ, режим сканирования с паузами, контаминация, поверхностная диффузия

#### **Введение**

Изображения микроэлектронных структур в растровом электронном микроскопе (РЭМ-изображения) обычно формируются пучком медленных вторичных электронов (МВЭ), эмитируемых их поверхностью. Эмиссия зависит от наклона участков поверхности и от работы выхода МВЭ из них, которая определяется состоянием ее поверхности (в том числе приповерхностным зарядом, наводимым падающим пучком). Пучок МВЭ при малой энергии электронов в падающем пучке особо чувствителен к параметрам сканирования РЭМ и электрическим свойствам материала. Так, при вариации энергии электронов пучка (0...2 кэВ) эмиссия МВЭ успевает достичь максимума и уменьшиться, при этом эмиссионный ток может быть меньше или больше тока в падающем пучке. Несовпадение токов в падающем и эмитированном пучках ведет к накоплению заряда, приводящему к вариации потока МВЭ и, следовательно, изображения.

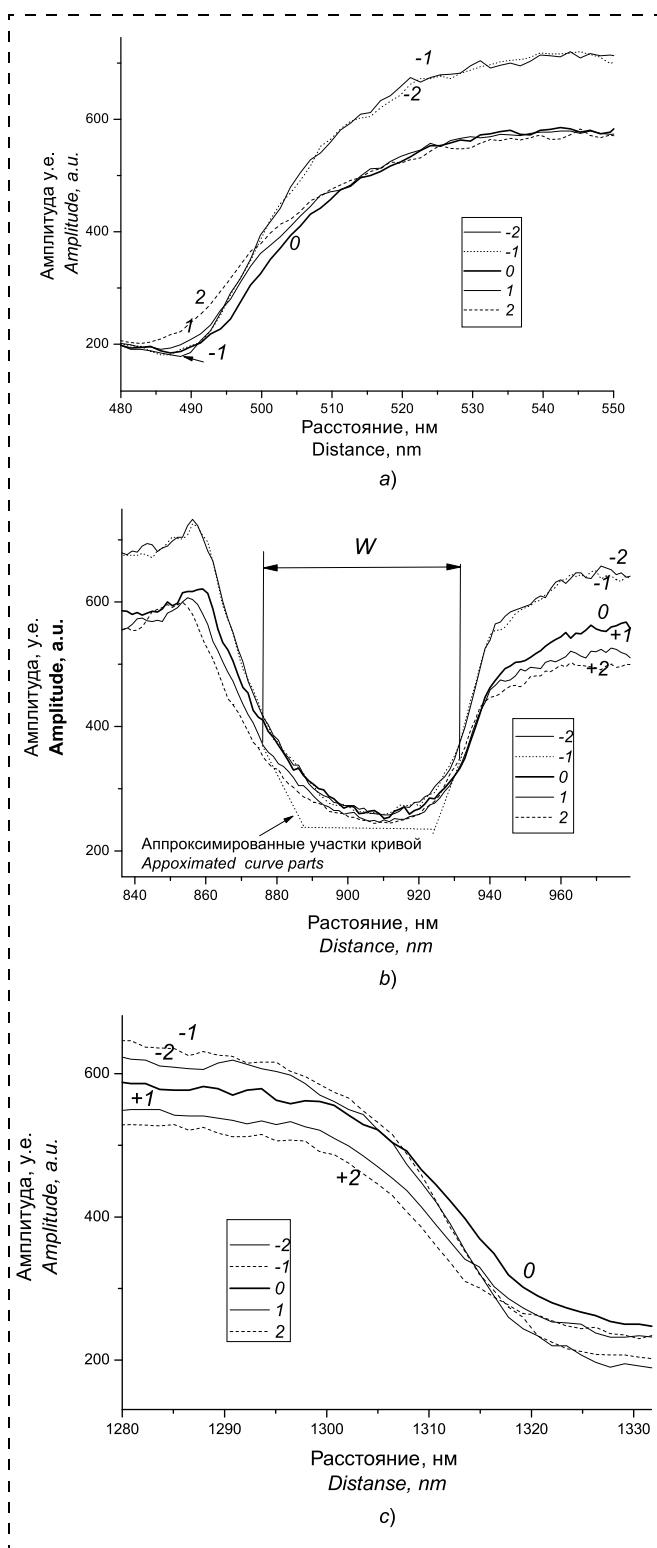
Топологические структуры меры МШПС-2К [1], предназначеннной для поверки РЭМ и АСМ, выполнены в высокоомном кремнии, который сам по себе способен накапливать поверхностный заряд в ходе сканирования поверхности. Однако структуры покрыты естественным слоем оксида, который может хранить наведенный заряд после окончания сканирования. Время накопления заряда и его релаксации может зависеть от параметров непрерыв-

ваемого сканирования структур и продолжительности пауз между сканами.

На структурах меры МШПС-2К уже проведено несколько метрологических исследований в низковольтном режиме сканирования (например, [2]), однако исследования чувствительности изображения к вариации параметров сканирования до сего времени неизвестны. Цель нашей работы — оценить влияние этих параметров на вариацию ширины верхнего основания (ВО) выступов — одной из основных измеряемых величин для этой меры.

#### **Условия эксперимента**

Были многократно отсканированы два выступа тест-объекта с топологией, подобной топологии меры МШПС-2К. Тест-объекты были расположены на одной пластине кремния КЭФ 4.5. Оба выступа сканировали в РЭМ S4800 пучком с энергией электронов 1 кэВ при рабочем отрезке 4,8 мм при времени сканирования одного изображения 10 с. Изображение выступа 1 фиксировалось при увеличении 80.000Х, изображение выступа 2 — при увеличении 35.000Х. Оба выступа непрерывно сканировали 16 раз, после чего делалась пауза на ~14 мин. Далее сканирования продолжали в непрерываемом режиме. Результаты каждого сканирования изображения фиксировались в компьютере, после чего обрабатывались с помощью программы обработки и анализа изображений на основе программной платформы NDPL [3]. Первым результатом работы



**Рис. 1. Изменения кривых ВС в ходе пяти последовательных сканирований с паузой выступа 2:** а — кривые соответствуют левой части выступа; б — его середине, в — его правой части. Кривые ( $-2$  и  $-1$ ), полученные до паузы, почти совпадают, кривая (0) (сразу после паузы) заметно отличается от них, кривые ( $+1$ ,  $+2$ ) соответствуют сканам после скана (0)

*Fig. 1. Change of VC during five successive scans with a pause of the projection 2: a — the curves correspond to the left part of the ledge; b — to the middle one, c — to the right one. Curves ( $-2$  and  $-1$ ) before the pause are almost identical, the curve (0) (after a pause) is markedly different from them, curves ( $+1$ ,  $+2$ ) correspond to the scans after the scan (0)*

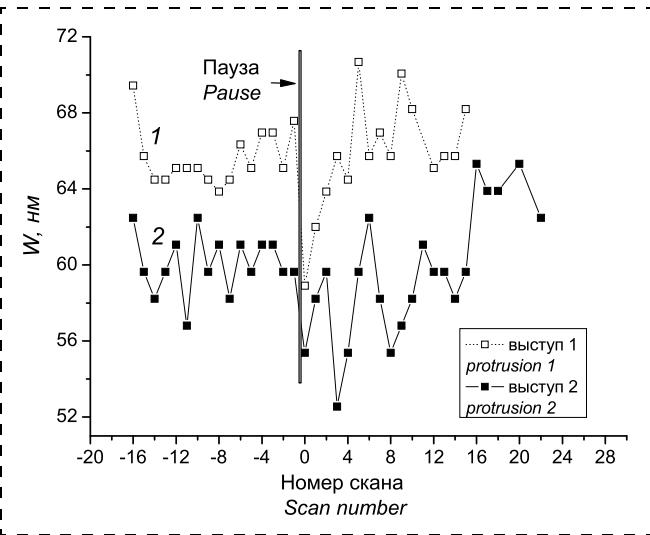
программы являются кривые видеосигнала (ВС), представляющие собой зависимости амплитуды ВС от положения пучка в каждой строке сканирования (для каждого из 2560 пикселей, составляющих строку). Далее на изображении выбирался участок, составленный 20 последовательными строками (сканами), "привязанный" к опорной точке — локальному дефекту на изображении. Программа проводила усреднение амплитуд ВС по всем 20 строкам для каждого из пикселей в строке. Привязка участка сканирования к опорной точке позволила сравнивать кривые ВС, полученные в разных сканах выступа.

## Результаты

На рис. 1, а—с представлены три набора кривых ВС, соответствующих начальному, серединному и конечному участкам скана для выступа 2. В каждом наборе присутствуют пять кривых, отображающих вариацию амплитуды для пяти последовательных сканов. Два первых скана предшествовали паузе (см. кривые  $-2$  и  $-1$ ), один скан выполнен сразу после паузы (кривая 0), сканы ( $+1$ ) и ( $+2$ ) — следовали сразу за сканом (0). Для удобства сопоставления кривых они были смещены по осям  $X$  и  $Y$ : видно, что значения амплитуды всех кривых ВС практически совпадают в точке с координатами (910, 270), соответствующей прохождению пучка по середине выступа.

Как видно, пауза в последовательности сканов приводит к изменению формы кривых ВС. Так, уменьшается контраст для всех кривых (сравните кривые ( $-2$ ,  $-1$ ) и остальные). Любопытно, что исходный контраст кривой ВС (не показана) резко увеличился уже после первых сканов, при этом его исходно симметричная относительно середины форма оказалась несимметричной и сохранилась для всех кривых на рис. 1. Как видно из рис. 1, при уменьшении контраста ВС сразу после паузы произошло и резкое уширение средних участков кривых (см. рис. 1, б, кривые  $+1$ ,  $+2$ ). При этом участки кривых ВС, соответствующие и левому, и правому склонам выступа (см. рис. 1, а и в) согласованно сместились влево (при неизменном положении середины кривых), т. е. кривая ВС неконформно изменила свою форму. Подобное изменение формы кривой ВС зафиксировано также при сканировании выступа 1.

Вариации серединных участков кривой ВС в ходе сканирования позволили оценить изменения значений ширины верхнего основания (ВО) выступов  $W$ . В соответствии с методикой работы [4] значения ширины  $W$  измерялись как расстояния между серединами смежных участков изменения амплитуды, расположенных между пиками аппроксимированной кривой ВС (см. рис. 1, б). На рис. 2 представлены изменения значений величины  $W$  для выступов 1 и 2 в ходе их последовательных сканирований с паузами (кривые 1 и 2). Калибровку расстояния по оси сканирования осуществляли по



**Рис. 2. Изменение ширины верхнего основания выступов 1 и 2 в ходе их последовательных сканирований с паузой**

*Fig. 2. Change of the width of the upper base of the projections 1 and 2 during consecutive scans with a pause*

периоду в расположении соседних выступов, известному с высокой точностью. На обеих кривых на рис. 2 заметен квазипериодический шум в значениях ширины, размах амплитуды которого составляет около 2 нм. (Воспроизведимость значений ширины в одной и той же точке профиля выступа по многократно воспроизводимым кривым ВС составила 1...2 нм). Этот шум не скрывает, однако, сложную динамику изменения размеров, имеющую общие черты для исследованных образцов. Так, наличие паузы приводит в обоих случаях к резкому уменьшению значений ширины (скакок размеров для кривой 1 на рис. 2 достигает ~10 нм). Вариацию изображений и переходные процессы на кривых ВС вызывают как начало сканирования, так и паузы. Начальные вариации заметны для кривых 1 и 2 в сканах (-16...-13) на рис. 2. Уменьшение  $W$  при уширении средних участков кривой (см. рис. 1, б) определяется резким уменьшением контраста среднего участка кривой ВС.

Представленная динамика изменений значений ширины выступа противоречит представлению о ее увеличении в ходе последовательных сканирований выступа в результате осаждения контаминационной пленки. Заметный тренд к уширению выступов проявляется лишь на сканах, последующих за паузой, для каждой из кривых. Именно этот тренд, по-видимому, объясняется ростом контаминационной пленки.

### Обсуждение результатов

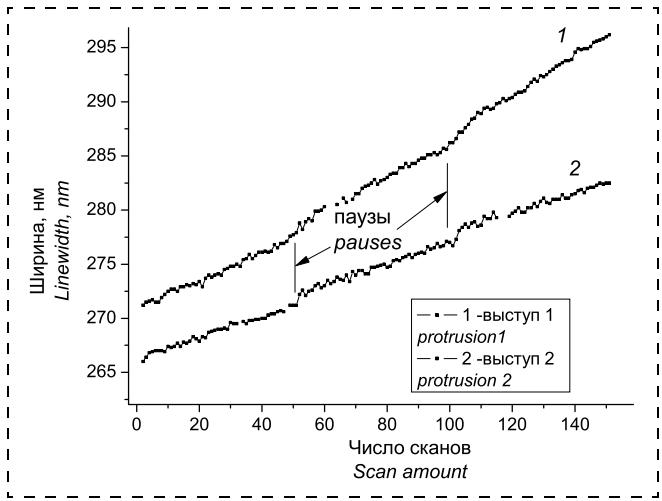
Немонотонный характер изменения формы кривых ВС и ширины верхнего основания в ряду последовательных сканирований выступа в низковольтном РЭМ отображает сложную картину физических процессов на его поверхности. Она не может быть сведена к монотонному уширению вы-

ступа вследствие осаждения пленки, возникающему при сканировании выступа в высоковольтном РЭМ. Но и осаждение пленки в низковольтном РЭМ должно отличаться от соответствующего в высоковольтном РЭМ.

Действительно, при малой энергии электронов заметно уменьшается участок поверхности, которого достигают обратно рассеянные электроны (ОРЭ) из подложки, рождающие МВЭ у самой ее границы. Если при энергии электронов 20 кэВ такой участок определяется радиусом круга на поверхности в ~2,7 мкм [5], то при энергии 1 кэВ этот радиус должен сократиться до ~20 нм. МВЭ, рожденные потоком ОРЭ и выходящие из поверхности, взаимодействуют с подвижными углеводородными частицами (УВЧ), приводя к высаживанию последних на эту поверхность и образованию пленки. Вследствие практического равенства площадей участка сканирования и участка эмиссии МВЭ из поверхности в низковольтном РЭМ сформированная пленка не должна заметно выходить за пределы участка сканирования. Такое соотношение площадей заметно отличается от соответствующего соотношения для высоковольтного РЭМ, где участок эмиссии МВЭ намного превышает площадь сканирования. В результате, большая часть УВЧ высаживается за пределами участка сканирования, который остается свободным от контаминации. В случае низковольтного РЭМ блокировка подвижных УВЧ за пределами области сканирования не происходит и они почти все осаждаются на участке сканирования. Поэтому уширение в этом случае должно происходить преимущественно в ходе сканирования, а паузы не способны влиять на этот процесс (в высоковольтном РЭМ уширение в ходе сканирования отсутствует, а скачок ширины происходит сразу после паузы [6]).

Подтверждение предполагаемого характера уширения ВО выступов представлено на рис. 3. Эксперимент был проведен в измерительном РЭМ S9260 (Hitachi) при энергии электронов в пучке 0,8 кэВ и токе 6 пА. Изображение выступов формировалось последовательно 50 раз без прерывания сканирования, после чего происходили паузы на 1–2 мин и дальнейшее продолжение сканирования (непрерываемые сканы: 1–50, 51–100, 101–150, см. рис. 3). В свою очередь, каждое из 50 сканирований, в результате которого формировалось одно изображение, получалось усреднением по 32 непрерываемым сканам. Это позволило резко уменьшить влияние шумов на изображение. Так, если на рис. 2 шумы приводят к вариации ширины ВО при сканированиях в ~2 нм, то на рис. 3 они уменьшаются до 0,2...0,3 нм.

Из рис. 3 видно, что уширение происходит почти полностью в ходе непрерываемых сканирований, а паузы приводят лишь к относительно слабому увеличению уширения (до ~0,5 нм за одну паузу). Последние уширения не носят, однако, скачкооб-



**Рис. 3. Динамика уширения ВО в ходе 150 сканов двух выступов в РЭМ S9260. Видны участки ускоренного уширения после пауз**  
*Fig. 3. Dynamics of widening of UB at 150 scans of the two protrusions (SEM S9260). The areas of accelerated widening after the pause are visible*

разного характера, которые можно связать с контаминационным ростом после паузы (как в высоковольтном РЭМ), они происходят за 3–12 сканов.

Любопытно, что темп уширения различен для выступов 1 и 2, а также для выступа 1 при первой и последней последовательности циклов сканирования. Это свидетельствует о существовании влияющих на этот темп величин, которые связаны с объектом контроля, а не с режимом сканирования. По-видимому, именно это и привело к разным наклонам кривых 1 и 2 на рис. 3. В работе [2] зафиксирован результат разной скорости уширения для выступов, которые по разному сканировали, но и по разному размещали на тест-объекте. В этой работе нет убедительных свидетельств, что разница в уширении не могла быть связана с разным размещением выступов.

Наиболее заметная особенность кривых на рис. 1 — немонотонное изменение их формы, а кривых на рис. 2, 3 — относительно резкое изменение ширины ВО после пауз. На наш взгляд, эти особенности можно объяснить наведением и релаксацией пространственного заряда в приповерхностном слое выступа и связанным с этим изменением эмиссии МВЭ из поверхности выступа. Предположительно, заряд приходит в состояние динамического равновесия после начала сканирования и паузы со скана 5–6 для кривых 1 и 2 на рис. 2 и проявляется в достижении меньших значений ширины ВО. После пауз на обеих кривых отчетливо проявляются тренды к увеличению ширины, что мы связываем с результатом осаждения контаминационной пленки. На рис. 3 зафиксировано относительно резкое увеличение роста размеров, также связанное с паузами. Отсутствие скачкообразного изменения размеров после паузы (характерного для высоковольтного РЭМ) и вариация ускорения роста ширины на разных участках кри-

вых убеждают в том, что причиной этих изменений также является вариация заряда после пауз.

В работе [7] предположено, что темп уширения может определяться значением накопленного заряда. Если на разных выступах накапливается разный заряд, то скорость роста контаминационной пленки на этих выступах способна варьироваться (как на кривой 1, рис. 3). Изменение накопленного заряда после пауз способно изменить и скорость роста пленки (рис. 3, кривая 1, сканы 1–50 и 100–150).

Поскольку вариация значений ширины выступа в последовательности сканов определяется, как оказалось, несколькими причинами, то контаминационное уширение выступов следует определять в условиях, исключающих воздействие на измеряемую величину влияющих факторов. Одним из таких факторов может быть формирование подповерхностного заряда. Поскольку при первом сканировании равновесное состояние заряда не достигается, то уширение следует определять как разницу в значениях ширины при последнем и первом сканах после установления зарядового равновесия.

## Заключение

Изображение выступа в низковольтном РЭМ, кривая видеосигнала от него и геометрические размеры его верхнего основания способны немонотонно или неравномерно изменяться в ходе многократного сканирования этой структуры. Такой характер изменений усиливается при наличии пауз в сканировании. В частности, выявлено неконформное изменение амплитуды кривых ВС на участках, соответствующих левой и правой частям выступа. Эти вариации профиля ВС затрудняют использование методики измерения размеров выступа [4], если измерения проводят многократно с паузами между ними. Затруднения должны возникнуть не только при измерении геометрических параметров выступа, но и при измерении увеличения РЭМ и диаметра его пучка.

Обнаруженные явления объяснены вариацией электрического заряда в приповерхностном слое выступа, которая влияет на эмиссию МВЭ из него. Вариация заряда определяется и параметрами сканирования, и расположением сканируемого выступа по отношению к соседним структурам.

Другую часть изменений размеров верхнего основания выступа можно объяснить результатом формирования контаминационной пленки на его поверхности. Выяснилось, что модель ее формирования отлична от соответствующей модели для пучка с высокой энергией электронов. Оказалось, что контаминационное уширение зависит от расположения выступа по отношению к другим структурам и от состояния его поверхности.

*Автор благодарит В. Б. Митюхляева и Ю. В. Озерица за проведение экспериментов по контаминации выступов в РЭМ.*

## Список литературы

1. Меры рельефные нанометрового диапазона из монокристаллического кремния. Национальный стандарт РФ, ГОСТ Р 8.628.2007. М.: Стандартинформ, 2007.
2. Гавриленко В. П., Кузин А. Ю., Митюхляев В. Б., Раков А. В., Тодуа П. А., Филиппов М. Н., Шаронов В. А. Исказение профиля рельефных элементов на поверхности монокристаллического кремния в результате их контаминации в низковольтном растровом электронном микроскопе // Измерительная техника. 2013. № 3. С. 12–15.
3. Программа анализа изображений микроскопов, программная платформа NDPL. URL: <https://yadi.sk/i/YtOL8GEid9nK4>, 2009.
4. Gavrilenko V. P., Novikov Yu. A., Rakov A. V., Filippov M. N., Todua P. A. Method for linear measurements in the nanometer range // Meas. Sci. Technol. 2008. Vol. 18. N. 2. P. 367–374.
5. Kanaya K., Okayama S. Penetration and energy loss theory of electrons in solid targets // J. Phys. D. 1972. № 5. P. 43–58.
6. Ларионов Ю. В. Зависимость контаминации рельефной структуры от режима сканирования РЭМ // Нано- и микросистемная техника. 2016. № 8. С. 467–471.
7. Cresswell M. W., Allen R. A., Guthrie W. F., Murbato C. E., Dixson R. G., Hunt A. Comparison of SEM and HRTEM CD measurements extracted from test structures having feature linewidths from 40 to 240 nm // IEEE Transaction and measurement, 2008. Vol. 57. N 1. P. 100–109.

**Yu. V. Larionov**, Senior Research Scientist, luv@kapella.gpi.ru

A. M. Prokhorov General Physics Institute, Russian academy of Science, Moscow

## Low-Voltage SEM: Repeated Scans of a Protrusion None Monotonically Change its Image

*Stability of metrological parameters of a measure in time is its important property. This quality is subjected to a test by exposure of a protrusion from a linear measure in the nanometer range produced on a silicon surface to an electron beam in vacuum. A complex variation of the protrusion image under repeated scans of the electron beam with pauses arises in a low voltage SEM. The phenomenon is explained by assumption that the electric charge induced by the electron beam in the under-surface silicon layer is changing with time. These changes influence the emission of the slow secondary electrons from the silicon surface, which form the measure image. An additional reason for the image variation is deposition of a contamination film, which forms under low-voltage scans on the surface and enlarges the width of the protrusion.*

**Keywords:** nanometrology, relief structure, low-voltage SEM, scanning regime with pauses, contamination, surface diffusion of the hydrocarbon particles

### Introduction

Images of microelectronic structures in the scanning electron microscope (SEM-images) are generally formed by a beam of slow secondary electrons (SSE), emitted by their surface. Emission depends on the slope of surface's portions, and the work function of SSE which is determined by the state of its surface (including the near-surface charge induced by the incident beam). SSE beam at a low electrons' energy in the incident beam is sensitive to the parameters of SEM scanning and electrical properties of the material. Thus, at the electron beam energy variation (0...2 keV), the SSE emission reaches a maximum and declines. At this, the emission current can be smaller or larger than the current in the incident beam. The mismatch of currents in the incident and emitted beams leads to charge accumulation, leading to variations of SSE flow and, hence, the image.

The topological structure of MSHPS-2K measure [1] for verification of SEM and AFM are made in high-resistivity silicon, which is able to accumulate surface charge during the scanning of surface. However, the structures are covered with a natural oxide layer that can store the induced charge after the scan is completed. The time for charge accumulation and its relaxation may depend on the parameters of uninterrupted scanning of structures and duration of pauses between the scans.

The metrology research were made on MSHPS-2K structures in low-voltage scanning mode [2], but the studies of sensitivity of an image to variations of scanning parameters hitherto unknown. The purpose of the work is to assess the impact of parameters on the variation of the width of the upper base (UB) of the projections — one of the main measured values for this measure.

### Experimental conditions

Two projections of the test object with the topology, same with the topology of MSHPS-2K measure were scanned. Test-objects located on the same silicon wafer KEF 4.5. Both projections were scanned by SEM S4800 by the beam with electron energy of 1 keV at an operating interval of 4.8 mm at the scanning time of 10 s. The projection of image 1 was recorded with the zoom of 80.000X, projection of image 2 — with the zoom of 35.000X. Both projections were continuously scanned 16 times with pauses for ~14 min. Further scanning was continued in uninterruptible mode. The scanning results were recorded in computer, then processed by image processing and analysis software on NDPL platform [3]. The first results are the video curves (VC), representing the dependencies of the VC amplitude from the beam position in each scanning line (for each of the 2560 pixels that make the line). Then the site was selected on image, composed of 20 consecutive rows (scans), "tied" to the reference point —

local defect in the image. The software conducted averaging of the amplitudes by 20 rows for each of pixel in a row. Binding of the scanning site to the reference point has allowed to compare the video curves obtained in different scans of a projection.

## Results

Fig. 1, *a–c* presents three sets of VC curves corresponding to the initial, middle and final sections of the scan of the projection 2. Each set contains five curves that represent variation in amplitude for five consecutive scans. The first two scans preceded to a pause (curves  $-2$  and  $-1$ ), one scan was made immediately after a pause (curve 0), scans ( $+1$ ) and ( $+2$ ) followed the scan (0). For ease of reference, the curves are shifted along the axes  $X$  and  $Y$ : it is seen that all VC curves' amplitude practically coincide at the point with coordinates (910, 270) corresponding to the beam passing through the middle of a projection.

The pause in scan sequence leads to a change in the shape of VCs. Thus, the contrast is lowered for all curves (compare the curves  $(-2, -1)$  and the rest). Curiously, that the original contrast of the curve (not shown) increased sharply after the first scans, while it initially symmetrical relative to the middle of the shape became asymmetrical and was retained for all of the curves in fig. 1. As can be seen, with a decrease of the VC contrast immediately after the pause, a sharp widening of the middle sections of the curves has occurred (fig. 1, *b*, curves 1, 2). At this, the plots of the VC curves corresponding to the left and the right sides of the projection (fig. 1, *a* and *c*) consistently shifted to the left (at a fixed position of the curves' middle), i.e., the VC curve non-conformably changed its shape. Such a change in shape of VC curve was recorded by scanning of the projection 1.

Variations of VC's middle sections during the scan allowed to estimate changes in the upper base of projections  $W$ . In accordance with the procedure [4], the width  $W$  was measured as the distance between the centers of adjacent sections of the amplitude changes located between the peaks of the approximated VC curve (fig. 1, *b*). Fig. 2 shows changes in the value of  $W$  for the projections 1 and 2 in the course of their successive scans with pauses (curves 1 and 2).

The calibration of the distance along the scanning axis was carried out on period in the location of the neighboring protrusions, known with high accuracy. On both curves visible quasi-periodic noise in the values of the width, the amplitude of which is about 2 nm. (The reproducibility of the width in the same point of the profile of the protrusion repeatedly reproducible curves VS was 1...2 nm). This noise does not hide, however, the complex dynamics of the dimensions that have something in common for the studied samples. So, a pause leads in both cases to a dramatic reduction in the width (leap size for the curve 1 in fig. 2 reaches  $\sim 10$  nm). The variation of images and transition processes on curves VS call as the beginning of a scan and pause. The

initial variation notable for curves 1 and 2 in the scans ( $-16\dots-13$ ). Reducing  $W$  for widening the middle parts of the curve (fig. 1, *b*) is defined by a sharp decrease of the contrast of the middle part of the curve entirely.

Presents the dynamics of changes in the width of the ledge is contrary to the idea of its increase during successive scans of the protrusion resulting from the deposition contamination of the film. A noticeable trend towards broadening of the tabs appears only on the scans subsequent to the pause for each of the curves. It was it, apparently, due to the growth of this film.

## Discussion of results

Non monotonic change of the shape of the curves VS and the width of the upper base in a series of consecutive scans of the protrusion in the low voltage SEM shows a complicated picture of physical processes on its surface. It can't be reduced to monotonic broadening of the protrusion due to the deposition of the film, appearing when scanning of the projection in the high-voltage REM. But the film deposition in low-voltage SEM must be different from the corresponding in the high voltage SEM.

Indeed, when low-energy electrons significantly decreases of the area of the surface which reach back scattered electrons (BEE) of the substrate, giving birth to MBE at the edge of it. If at electron energy of 20 keV such a plot is determined by the radius of the circle on the surface of  $\sim 2.7$   $\mu\text{m}$  [5], at the energy 1 keV, this radius should be reduced to  $\sim 20$  nm. MAE, born WEM flow in and out of the surface, interact with movable hydrocarbon particles (UHF), leading to planting the last on this surface and the formation of the film. Owing to the practical equality of the areas of the scan and plot of the emission of MBE from the surface in the low voltage SEM of the formed film must not significantly exceed the limits of the scanning site. This ratio of areas is markedly different from the corresponding ratio for high-voltage SEM where the site of emission of MBE is much higher than the scanning area. As a result, most part of the UHF landed beyond the site of the scan, which remains free from contamination. In the case of low-voltage RAM lock mobile UHF outside of the scan is not happening, and they are almost all deposited on the scanning site. The broadening in this case should occur predominantly during the scan and pause are not able to influence the process (in the high-voltage SEM widening during the scan is missing and the jump in width occurs immediately after a pause [6]).

Confirmation of the expected nature of broadening IN the projections shown in fig. 3. The experiment was carried out in measuring S9260 SEM (Hitachi) with energy of electrons in the beam is 0.8 keV and a current of 6 PA. The image of the protrusions were formed successively 50 times without any interruption of scanning, and then occurred a pause for 1–2 min and further continuation of scan (non-interruptible scans: 1–50, 51–100, 101–150, fig. 3). Each of the 50 scans, which formed one image was obtained by averaging 32 scans

uninterrupted. It is possible to reduce the influence of noise on the image. So, if in fig. 2 noise lead to variation IN the width in the scan  $\sim 2$  nm, fig. 3 they are reduced to  $0.2\ldots 0.3$  nm.

Fig. 3 shows that the broadening takes place almost entirely during an uninterrupted scan, and pause only lead to a relatively weak increase of the broadening (up to  $\sim 0.5$  nm per pause). The recent widening are not, however, the intermittent character, which can be linked to contamination growth after a pause (as in high-voltage SEM), they occur in 3 to 12 scans.

Interestingly, the rate of broadening is different for the projections 1 and 2, as well as for projection 1, with the first and last sequence of scanning cycles. This suggests an influence on the rate values associated with the test object, not scan mode. Apparently, this has led to different slopes of the curves 1 and 2 in fig. 3. In [2] was the result of different rates of widening for the projections, which has scanned, and placed on the test object. In this work there is convincing evidence that the difference in the broadening could not be associated with a different placement of the protrusions.

The most notable feature of the curves in fig. 1 — non-monotonic change in shape, and the curves in fig. 2, 3 is a relatively abrupt change UB width after a pause. In our view, these features can be attributed to the guidance and relaxation of space charge in the surface layer of the projection, and the associated change in emission of MBE from the surface of the ledge. Presumably, the charge reaches a state of dynamic equilibrium after the start of the scan and pause the scan 5 and 6 for curves 1 and 2 in fig. 2 and appears to achieve smaller widths. After a pause on both curves clearly visible trends to increase of width, which we attribute to the result of deposition contamination film. In fig. 3 recorded a relatively sharp increase in growth, also associated with pauses. The absence of abrupt changes in the dimensions after a pause (characteristic of high-voltage SEM) and variation of the accelerating growth of the width in different parts of the curves imply that the cause of variation is also the variation of the charge after a pause.

In [7] assumed that the rate of widening may be determined by the value of accumulated charge. If on different ledges of different charge accumulates, the growth rate contaminazioni film on the tips is able to vary (as in curve 1, fig. 3). The change in accumulated charge after a pause can change and the growth rate of the film (fig. 3, curve 1, scans 1—50 and 100—150).

Since the variation of the width of the protrusion in a sequence of scans is determined, as it turned out, for several reasons, contamination broadening of the protrusions should be determined without influence on the measured quantity influencing factors. One such factor may be the formation of sub-surface charge. As with the first scan, the equilibrium charge state is not reached, the widening should be defined as the difference in widths when the last and first scans after the establishment of charge balance.

## Conclusion

The image of the projection in the low voltage SEM, the curve of signal from it and the geometric dimensions of the upper base capable of non-monotonic irregularly vary during repeated scanning of this structure. Such nature of changes increases with the presence of pauses in the scan. In particular, the non-conformal change in the amplitude curves of the armed forces on the portions corresponding left and right parts of the ledge. These variations of the profile of the armed forces complicate the use of methods of measurement of dimensions of the projection [4], if they spend many times with pauses between them. Difficulties must arise in the measurement of geometrical parameters of the projection and the measurement of the increase in SEM and the diameter of its beam.

The observed phenomena are explained by the variation of the electric charge in the surface layer of the projection, which affects emissions of MBE from it. The variation of the charge is determined by the scan settings and location of the scanned projection in relation to neighboring structures.

The other part of changes of the size of the upper base of the protrusion can be explained by the result of the formation of contaminations film on its surface. It turned out that the model of its formation is different from the model for the beam with high energy electrons. It turned out that contamination broadening depends on the location of the projection relative to other structures and from the state of its surface.

*The author thanks V. B. Mityukhlyev and Yu. V. Ozerin for conducting experiments on the contamination of the protrusions in the SEM.*

## References

1. **Meri** rel`efnie nanometrovogo diapazona iz monokristallicheskogo kremniya. Natsional`nii standart RF, GOST R 8.628.2007, Moscow, Standatrinform, 2007.
2. **Gavrivenko V. P., Kuzin A. Yu., Mitukhlyev V. B., Rakov A. V., Todua P. A., Sharonov V. A.** Iskazenie profilya rel`efnih elementov na poverhnosti monokristallicheskogo kremniya v rezultate ikh kontaminatsii v nizkovoltnom rastrovom mikroskopie, *Izmeritel'naya tekhnika*, 2013, no. 3, pp. 12—15.
3. **Programma** obrabotki i analiza izobrazhenii mikroskopov, platforma NDPL, URL: <https://yadi.sk/i/YtOL8GEid9nK4>, 2009.
4. **Gavrilko V. P., Novikov Yu. A., Rakov A. V., Filippov M. N., Todua P. A.** Method for linear measurements in the nanometer range, *Meas. Sci. Technol.*, 2008, vol. 18, no. 2, pp. 367—374.
5. **Kanaya K., Okayama S.** Penetration and energy loss theory of electrons in solid targets, *J. Phys. D.*, 1972, no. 5, pp. 43—58.
6. **Larionov Yu. V.** Zavisimost kontaminatsii rel`efnoyi strukturi ot regima scanirovaniya REM, *Nano i mikrosistemnaya tekhnika*, 2016, no. 8, pp. 467—471.
7. **Cresswell M. W., Allen R. A., Guthrie W. F., Murbito C. E., Dixson R. G., Hunt A.** Comparison of SEM and HRTEM CD measurements extracted from test structures having feature linewidths from 40 to 240 nm, *IEEE Transaction and measurement*, 2008, vol. 57, no. 1, pp. 100—109.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ MODELLING AND DESIGNING OF MNST

УДК 621.319.5

**Я. И. Шукевич**, магистр, мл. науч. сотр., e-mail: yaroslav.shukevich@gmail.com,  
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
**В. В. Баркалин**, канд. физ.-мат. наук, зав. лаб.,  
Белорусский национальный технический университет, г. Минск  
**И. А. Таратын**, канд. техн. наук, нач. отдела, **О. Г. Реутская**, магистр, науч. сотр.  
Минский НИИ радиоматериалов, г. Минск

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РАБОТЫ СВЧ МЭМС-ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЯ

Поступила в редакцию 15.04.2016

Численно промоделировано два варианта конструкции СВЧ МЭМС-переключателя с различными толщинами мембранны. Определена максимальная стабильная частота работы и минимальное изменение емкости при работе. Рассмотрены динамические процессы во время переключения.

**Ключевые слова:** МЭМС, МСТ, СВЧ переключатель, мембрана, метод конечных элементов, моделирование, динамика, электростатическое притяжение, электростатическая емкость, ВЧ техника, вольфрам

### Введение

В настоящее время МЭМС-переключатели являются широко распространенными изделиями микросистемной техники, применяемыми в различной ВЧ технике [1, 2]. Их конструирование с учетом требования длительной работы с много-миллионным числом циклов нагружения требует тщательного анализа напряженно-деформированного состояния мембранных элементов переключателя с целью избежать проявлений в них эффектов пластиичности и ползучести. Для расчета параметров подобных систем используют как аналитический подход [3, 4], так и численные методы, в частности, метод конечных элементов [5–7], который в данном случае является более предпочтительным, хотя и ресурсоемким.

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования СВЧ МЭМС-переключателя двух конструкций в статическом и динамическом режимах. Исследовано влияние геометрических характеристик мембранны, амплитуды и частоты притягивающего напряжения на условия работы переключателя.

### Конструкция и математическая модель переключателя

Конструкции рассматриваемых переключателей представлены на рис. 1 и 2.

#### Геометрические параметры переключателей

Толщина мембранны $h$ . . . . .	0,1; 0,4; 0,7 мкм
Ширина заземляющего электрода $W_1$ . . . . .	290 мкм
Ширина сигнального электрода $W$ . . . . .	120 мкм
Ширина мембранны $M_1$ . . . . .	100 мкм
Ширина мостика $M_2$ . . . . .	300 мкм
Длина узкой мембранны $L_1$ . . . . .	600 мкм
Длина широкой мембранны $L_2$ . . . . .	580 мкм
Ширина мембранны в узкой части $K_1$ . . . . .	100 мкм
Ширина мембранны в широкой части $K_2$ . . . . .	300 мкм
Зазор $H$ . . . . .	4 мкм

Конструкции отличаются способом крепления мембранны к несущим опорам, шириной и формой мембранны, а также участками металлизации, на которые подается управляющее напряжение. В переключателе с узкой мембранны последняя крепится к четырем опорам малой площади и управляющее напряжение подается на экранирующие электроды копланарной СВЧ линии, а в переклю-

чателе с широкой мембраной она крепится к двум широким опорам и напряжение подается на сигнальный электрод линии.

Так как СВЧ переключатели должны выдерживать миллионы циклов нагружения, материал мембраны должен обладать высокой стойкостью к пластическим деформациям, ползучести и температурной стабильностью [8, 9]. Была проведена численная оценка пластических деформаций широкой мембранны толщиной 1,5 мкм, изготовленной из вольфрама и алюминия под воздействием силы от 0 до 1,6 мН, обеспечивающей максимальный прогиб мембранны в ее центре до 2...2,5 мкм (рис. 3). Из представленных на рис. 3 данных следует, что вольфрам менее подвержен пластическому деформированию и способен выдерживать без пластических деформаций большие величины прогиба.

В мембранных обеих конструкций переключателя имеется массив отверстий размерами  $7 \times 7$  мкм для снижения эффекта аэродинамического сопротивления воздуха при срабатывании переключателя. На экранирующие и сигнальный электроды копланарной линии нанесен слой диэлектрика толщиной приблизительно 1 мкм, предохраняющий линию от короткого замыкания мембранный. Подложка линии выполнена из диэлектрика толщиной 50 мкм и диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_r = 10$ .

Моделирование работы переключателя осуществлялось методом конечных элементов в так называемой coupled-field постановке [10]. Общий алгоритм решения при этом выглядит следующим образом:

*Расчет электрических полей →  
→ Расчет силы электростатического притяжения → Определение прогиба мембранны под действием электростатики →  
→ Перерасчет новой конфигурации электрического поля с учетом изменившейся формы мембранны →  
→ Расчет электрических полей в новой геометрии.*

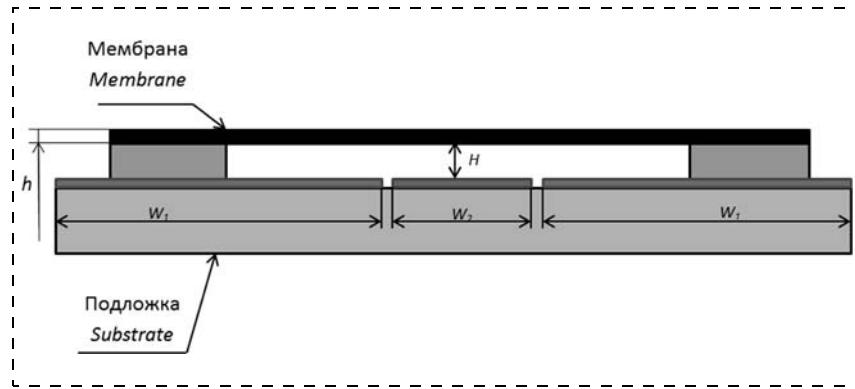


Рис. 1. Эскиз переключателя, поперечный разрез:  $W_1$  — ширина экранирующего электрода;  $W_2$  — ширина сигнального электрода;  $H$  — высота зазора;  $h$  — толщина мембранны

Fig. 1. Sketch of the switch, cross-section;  $W_1$  — width of the screening electrode;  $W_2$  — width of the alarm electrode;  $H$  — height of the gap;  $h$  — thickness of the membrane

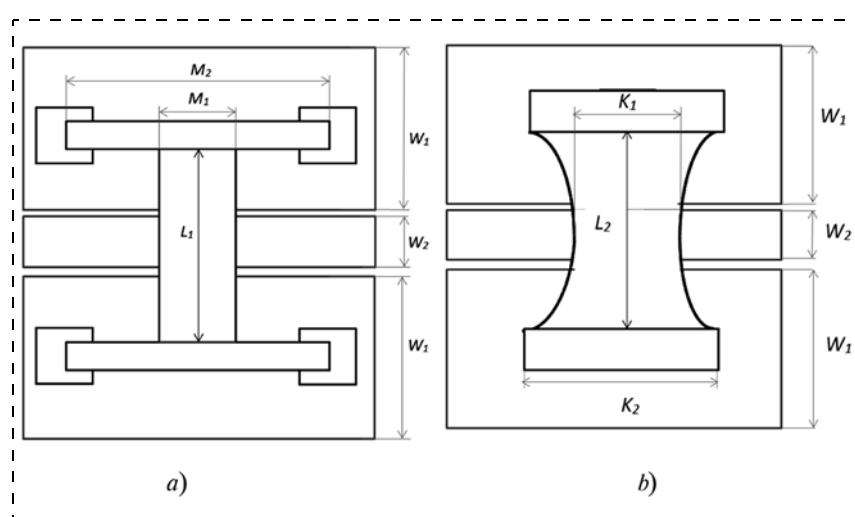


Рис. 2. Эскиз переключателя, вид сверху: a — вариант переключателя с узкой мембранны; b — вариант переключателя с широкой мембранны

Fig. 2. Sketch of the switch, top view: a — switch with a narrow membrane; b — switch with a wide membrane

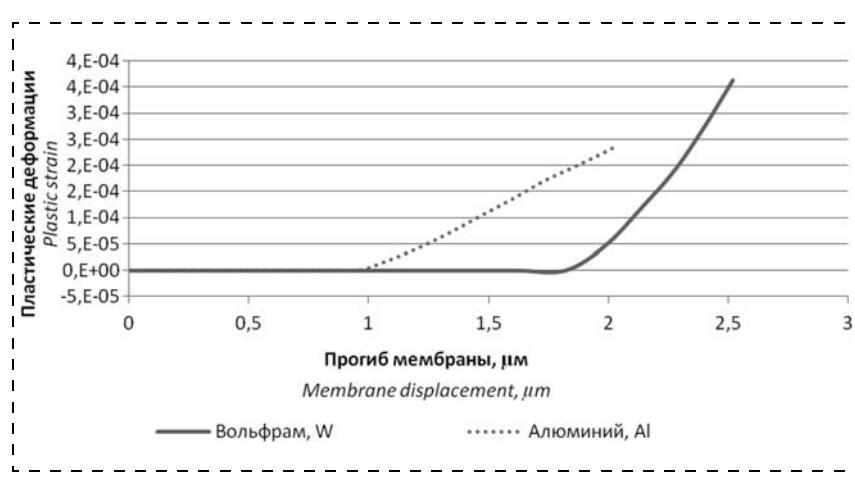


Рис. 3. Пластические деформации мембранны переключателя с широкой мембранны  
Fig. 3. Plastic deformations of the membrane of the switch with a wide membrane

Расчет выполняется в три вычислительных этапа:

1. Расчет силы электростатического прижима исходя из конфигурации электрического поля.

2. Расчет напряженно-деформированного состояния мембранны под действием пондеромоторной силы.

3. Расчет новой конфигурации электростатического поля.

Пондеромоторная сила электростатического притяжения вычисляется согласно определению поверхностного тензора Максвелла [10]:

$$T_s = -\frac{1}{2} \epsilon_0 (E \cdot E) n + \epsilon_0 (n \cdot E) E,$$

где  $E$  — напряженность электрического поля;  $n$  — нормаль к поверхности мембранны;  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная.

Для описания механических свойств мембранны в целях корректного учета нелинейности поведения тонкой мембранны при прогибе использовалась модель Мурнагана [11]:

$$W_s = \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) I_1^2 - 2\mu I_2 + \frac{1}{3} (l + 2m) I_1^3 - 2m I_1 I_2 + n I_3,$$

где  $l, m, n$  — модули упругости Мурнагана;  $\lambda, \mu$  — параметры Ламе;  $W_s$  — энергия деформации;  $I_1, I_2, I_3$  — инварианты тензора деформаций Грина — Лагранжа:

$$I_1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3;$$

$$I_2 = \varepsilon_1 \varepsilon_2 + \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 \varepsilon_3;$$

$$I_3 = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3;$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  — главные компоненты тензора деформаций.

Расчет деформаций мембранны осуществляется решением уравнения Коши [10]:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \cdot F : S;$$

$$F = I + \nabla \otimes u;$$

$$S = S_{ad} + C : \varepsilon = S_{ad} + \sigma;$$

$$S_{ad} = S_0 + S_{ext},$$

где  $\rho$  — плотность материала;  $C$  — тензор деформаций Коши — Грина;  $\varepsilon$  — тензор деформаций;  $S$  — второй тензор напряжений Пиоллы — Кирхгоффа;  $\sigma$  — тензор напряжений;  $S_0$  — начальные напряжения;  $S_{ext} \cdot n = T_s$ ,  $\otimes$  — операция прямого произведения.

Затем полученные значения смещений мембранны трансформировались в смещения сетки конечных элементов по методу Эйлера — Лагранжа [12], что позволило корректно проводить перерасчет электрического поля на каждом шаге итераций. Новые координаты  $x_0, y_0, z_0$  единичного узла в момент времени  $t$  вычисляются следующим образом:

$$x_0 = x(X_0, Y_0, Z_0, t);$$

$$y_0 = y(X_0, Y_0, Z_0, t);$$

$$z_0 = z(X_0, Y_0, Z_0, t),$$

где  $X_0, Y_0, Z_0$  — координаты единичного узла подвижной сетки в начальный момент времени;  $(x, y, z)$  — подвижная система координат;  $(X, Y, Z)$  — материальная система координат.

Материальные координаты  $X_0, Y_0, Z_0$  узла являются функциями геометрических (т.е. исходных) координат  $X_g, Y_g, Z_g$  и функции, определяющей их смещения  $u$  (в данном случае — результат вычислений смещения мембранны):

$$X_0 = X(X_g, Y_g, Z_g, u);$$

$$Y_0 = Y(X_g, Y_g, Z_g, u);$$

$$Z_0 = Z(X_g, Y_g, Z_g, u).$$

В общем виде соотношение между координатными системами записывается как

$$x = f(X, t) = f(g(X_g, u), t);$$

$$X = g(X_g, u);$$

$$X_m = h(X_g, i),$$

где  $f, g, h$  — векторные функции;  $t$  — время;  $i$  — номер итерации переразбиения. Исходными и фиксированными во времени являются геометрические координаты  $X_g$ .

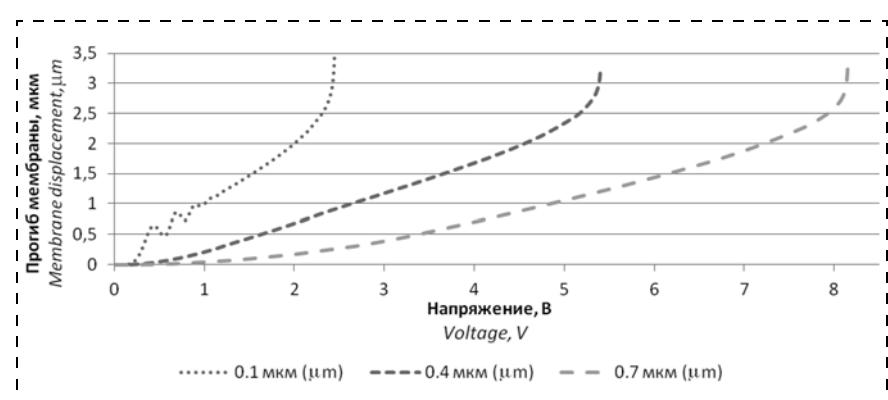


Рис. 4. Зависимость прогиба центра мембранны переключателя с узкой мембранны от приложенного напряжения при разных ее толщинах

Fig. 4. Dependence of the deflection of the centre of the membrane of the switch with a narrow membrane on voltage in case of its different thicknesses

Деформация элементов проводится как деформация виртуальных материалов. Рассчитывается минимум энергии деформации объема с подвижной сеткой  $V$ :

$$W = \int \left( \frac{\mu}{2} (I_1 - 3) + \frac{k}{2} (J - 1)^2 \right) dV,$$

где  $\mu$  и  $k$  — виртуальные сдвиговый и объемный модули; инварианты  $J = \det(\nabla_X \otimes x)$ ,  $I_1 = J^{-2/3} \text{Sp}((\nabla_X \otimes x)^t \cdot \nabla_X \otimes x)$ ;  $\text{Sp}$  — операция вычисления следа матрицы.

Критерием завершения расчета максимального электростатического напряжения прижима являлось достижение начального контакта подложки и мембраны. Однако непосредственно контактная задача не решалась из-за невозможности реализации конечных элементов нулевой толщины в данной модели, что необходимо для моделирования контакта. Рассматривалось два типа расчета:

- квазистатический — для определения предельного электрического напряжения и построения зависимости емкости переключателя от приложенного напряжения;
- динамический, для исследования работы переключателя в рабочем режиме.

## Результаты и обсуждение

**Квазистатический расчет.** Результаты квазистатического расчета СВЧ МЭМС-переключателя представлены на рис. 4 и 5. Следует отметить достаточно сильную чувствительность мембранных переключателей к приложенному напряжению после превышения некоторого порогового значения, что подтверждается результатами других исследований [3, 4, 13, 14]. Так, при напряжениях выше 2,2, 5,2 и 8,1 В для мембран толщиной 0,1, 0,4 и 0,7 мкм соответственно зависимость максимального прогиба мембранных переключателей асимптотически приближается к оси  $Y$ , что свидетельствует о переходе режима работы от свободного прогиба к контакту и создает

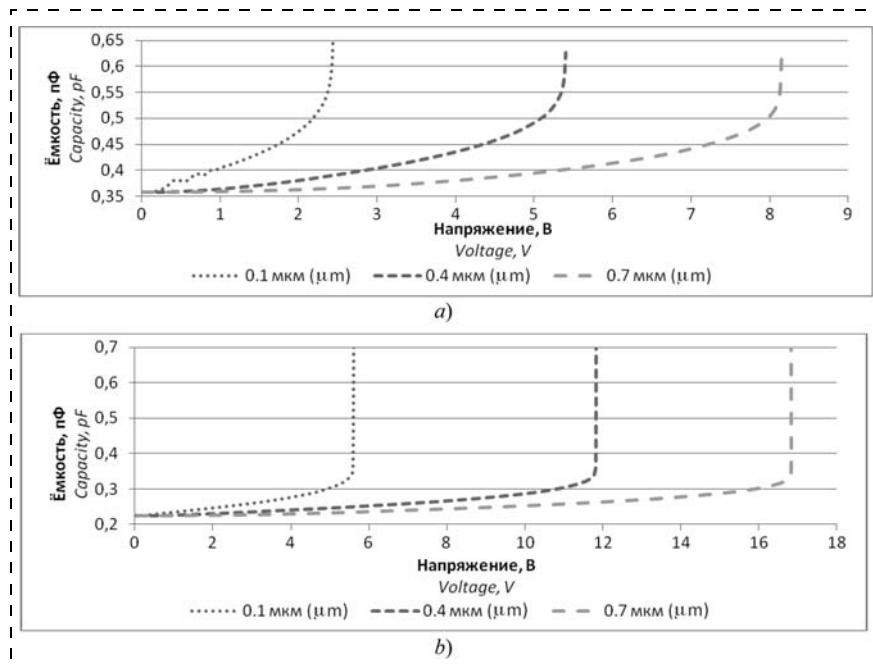


Рис. 5. Зависимость электрической емкости переключателя от приложенного напряжения при разных ее толщинах: *a* — узкая мембрана; *b* — широкая мембрана

Fig. 5. Dependence of the electric capacity of the switch on voltage in case of its different thicknesses: *a* — narrow membrane; *b* — wide membrane

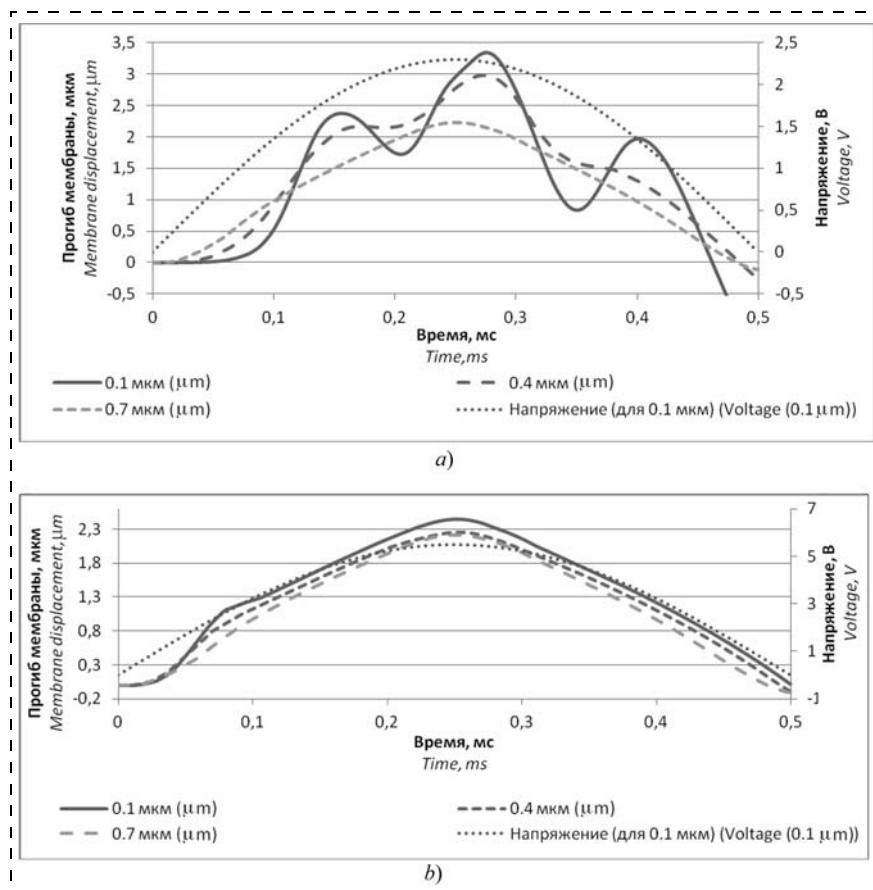
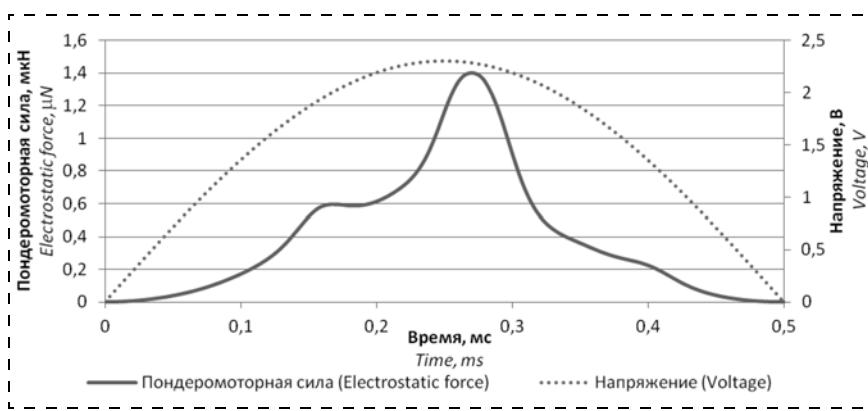


Рис. 6. Зависимость прогиба центра мембраны от времени и приложенного напряжения при частоте 1 кГц: *a* — узкая мембрана; *b* — широкая мембрана

Fig. 6. Dependence of the deflection of the membrane centre on time and voltage at frequency of 1 kHz: *a* — narrow membrane; *b* — wide membrane



**Рис. 7. Зависимость ponderомоторной силы, действующей на узкую мембрану, от приложенного напряжения (толщина 0,1 мкм)**

*Fig. 7. Dependence of the ponderomotive force influencing the narrow membrane on the applied voltage (thickness of 0.1 micrometers)*

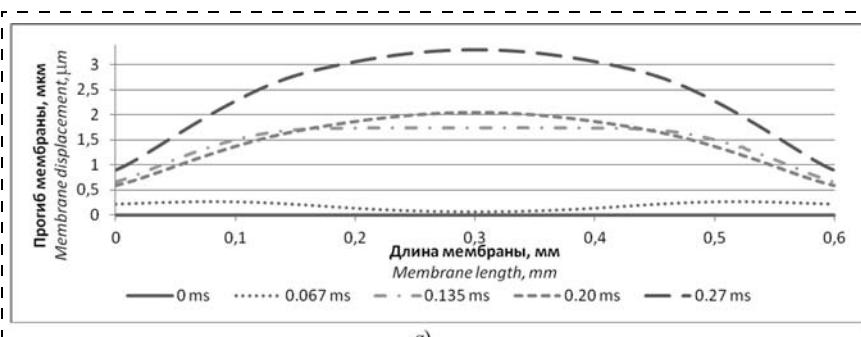
определенные трудности при моделировании — поведение мембранны в динамике сложно отследить при напряжениях порядка напряжения притяжения. На практике такое явление означает, что напряжение, при котором происходит значительный рост смещений и емкости, является напряжением переключения.

**Динамический расчет.** В динамическом расчете на электроды подавался сигнал синусоидальной формы с амплитудой, равной определенному ранее предельному напряжению для каждой толщины мембранны. Расчет проводился в пределах одного полупериода. В качестве характерных для СВЧ МЭМС-переключателей частот переключения выбирались две частоты: 1 и 0,1 кГц [13, 14]. Максимальный прогиб мембранны оценивался по смещениям ее геометрического центра.

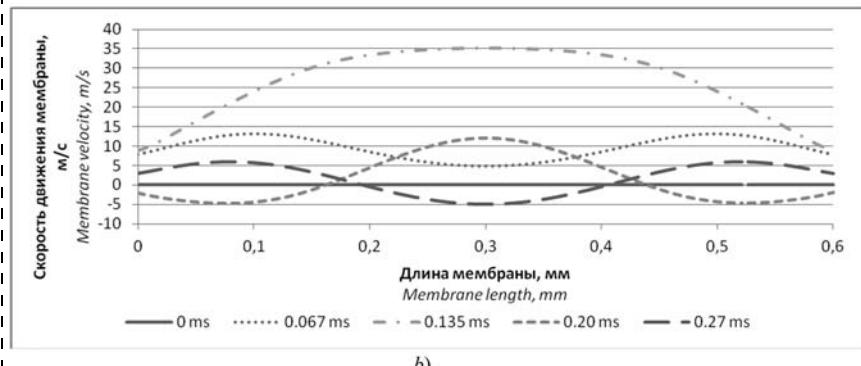
При частоте переключения 1 кГц узкая мембрана проявляет сложный, немонотонный характер изменения смещений (рис. 6, a), обнаруживая сходство с известным в технике МЭМС явлением snap-through effect [16–18]. Подобное явление наблюдается и при решении квазистатической задачи для тонкой узкой мембранны (немонотонное поведение прогиба при низких напряжениях на рис. 4). Пондеромоторная сила в этом случае также проявляет немонотонный характер (рис. 7), что связано с характером прогиба мембранны.

Прослеживается увеличение монотонности поведения мембранны с ростом ее толщины. Так, на толщине 0,7 мкм подобного "дребезга" в колебаниях практически не заметно. В случае использования более широкой и, соответственно, более жесткой мембранны эффект не проявляется даже на толщине 0,1 мкм (см. рис. 6, b).

На рис. 8 представлены продольные срединные профили деформированной узкой мембранны в различные моменты от времени. Из рисунка следует, что вначале



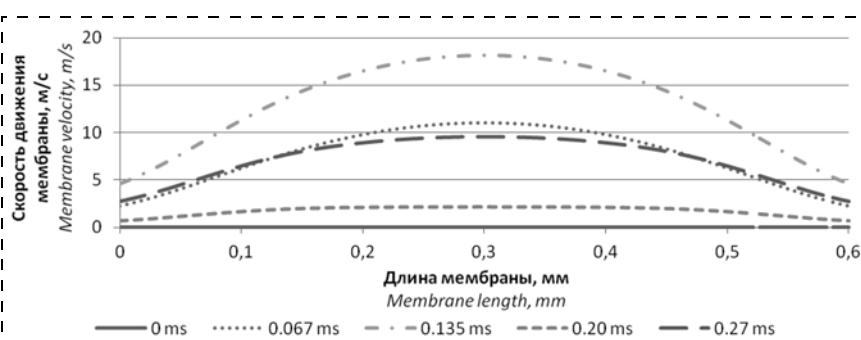
a)



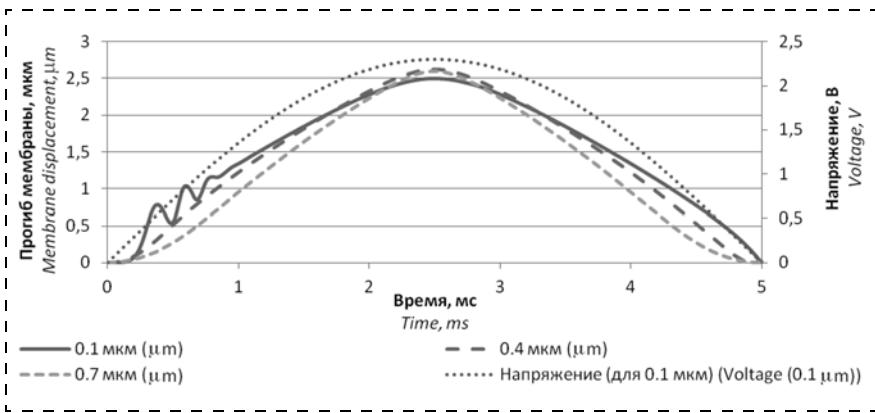
b)

**Рис. 8. Прогиб узкой мембранны толщиной 0,1 мкм в различные моменты времени:** a — смещение; b — скорость

*Fig. 8. Deflection of a narrow membrane with thickness of 0.1 micrometers in various moments: a — displacement: b — speed*



**Рис. 9. Скорость прогиба узкой мембранны толщиной 0,7 мкм в зависимости от времени**



**Рис. 10. Зависимость прогиба центра узкой мембранны от времени и приложенного напряжения при частоте 0,1 кГц**

*Fig. 10. Dependence of deflection of the centre of the narrow membrane on time and voltage at frequency of 0.1 kHz*

(до момента времени 0,067 мс) прогибаются только те части мембранны, что находятся вблизи притягивающих электродов, а уже затем приходит в движение центр, в результате чего по мемbrane проходит "волна" переменной скорости, которая при увеличении толщины мембранны до 0,7 мкм практически исчезает (рис. 9). При частоте колебаний 0,1 кГц узкая мембрана проявляет значительно более монотонный режим работы (рис. 10), однако при малых смещениях в начале процесса прогиба снова заметен некоторый "дребезг", аналогичный ранее рассмотренному поведению.

## Заключение

Промоделировано несколько вариантов СВЧ переключателя с мембранными различной толщины и конфигурации. Оптимальным материалом мембранны для предложенных конструкций с точки зрения долговечности и надежности является вольфрам. Пластические деформации во время работы переключателя отсутствуют, что обеспечивает высокую надежность системы. Согласно рассчитанным режимам работы частота переключения для рассмотренных систем составляет 0,1 кГц (1 кГц), а напряжение переключения — не более 8 В (17 В) для узкой и широкой мембранны соответственно. Емкость переключателя при срабатывании составляет не менее 0,6 пФ. Установлена значительная зависимость характера переключения от толщины и конфигурации мембранны, также обнаружена сложная форма смещений тонкой (0,1 мкм) мембранны в зависимости от напряжения. Узкая мембрана на мостике при высокой частоте работы (1 кГц) работает немонотонно, совершая волнобразные колебания. Уменьшить такой эффект возможно, увеличив жесткость (т.е. толщину и ширину) мембранны или же значительно снизив частоту притягивающего напряжения. Таким образом, из

выбранных двух конструкций наиболее оптимальной является широкая мембрана, которая обеспечивает монотонный прогиб при сравнительно малом напряжении притяжения и высокой для СВЧ переключателей частоты работы.

## Список литературы

1. Anagnostou D. E., Zheng G., Papa-polymerou J., Christodoulou C. G. Reconfigurable multifrequency antenna with RF-MEMS switches // U. S. Patent 7,589,674, Sept. 15, 2009.
2. Van Caekenbergh K., Sarabandi K. A 2-Bit Ka-Band RF MEMS Frequency Tunable Slot Antenna // IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. 2008. Vol. 7. P. 179–182.
3. Niessner M., Schrag G., Ianacci J., Wachutka G. Macromodel-based simulation and measurement of the dynamic pull-in of viscously damped RF-MEMS switches // Sensors and Actuators A. 2011. N. 172. P. 269–279.
4. Niessner M., Schrag G., Wachutka G. Non-linear model for the simulation of viscously damped RF-MEMS switches at varying ambient pressure conditions // Procedia Chemistry. 2009. N. 1. P. 618–621.
5. Kundu A., Sethi S., Mondal N. C. Analysis and optimization of two movable plates RF MEMS switch for simultaneous improvement in actuation voltage and switching time // Microelectronics Journal. 2010. Vol. 41. P. 257–265.
6. Guo F. M., Zhu Z. Q., Long Y. F. Study on low voltage actuated MEMS RF capacitive switches. // Sensors and Actuators A. 2003. N. 108. P. 128–133.
7. Chakraborty A., Gupta B., Sarkar B. Design, fabrication and characterization of miniature RF MEMS switched capacitor based phase shifter // Microelectronics Journal, 2014. N. 8. P. 1093–1102.
8. Davidson B. D., Seghete D., George S. M. et al. ALD tungsten NEMS switches and tunneling devices // Sensors and Actuators. 2011. N. 166. P. 269–276.
9. Klein S., Thilmont S., Ziegler V. et al. High temperature stable RF MEMS switch based on tungsten-titanium // Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems Conference, 2009. TRANSDUCERS. 2009. P. 1409–1412.
10. Comsol Multiphysics 5.1 Reference Guide. Comsol Inc, 2015.
11. Murnaghan F. D. Finite Deformation of an Elastic Solid. Springer, 1952.
12. Stein E., de Borst R., Hughes T. J. R. Encyclopedia of Computational Mechanics. 2004. Vol. 1: Fundamentals.
13. Yang M., Dai C., Shih P., Tsai Z. Capacitive RF switches manufactured by the CMOS-MEMS technique // Microelectronic Engineering. 2011. N. 88. P. 2242–2246.
14. Matmat M., Koukos K., Coccetti F., Idda T., Marty A., Escriba C., Fourniols J.-Y., Esteve D. Life expectancy and characterization of capacitive RF MEMS switches // Microelectronics Reliability. 2010. Vol. 50. P. 1692–1696.
15. Czarnecki P., Rottenberg X., Soussan P. et al. Effect of substrate charging on the reliability of capacitive RF MEMS switches // Sensors and Actuators. 2009. N. 154. P. 261–268.
16. Zhang Y., Zhao Y. Numerical and analytical study on the pull-in instability of micro-structure under electrostatic loading // Sensors and Actuators. 2006. N. 127. P. 366–380.
17. Das K., Batra R. C. Pull-in and snap-through instabilities in transient deformations of microelectromechanical systems // J. Micromech. Microeng. 2009. N. 3. P. 1–19.

**Ya. I. Shukevich<sup>1</sup>**, Master, Junior Researcher, [yaroslav.shukevich@gmail.com](mailto:yaroslav.shukevich@gmail.com),  
**V. V. Barkalin<sup>2</sup>**, Ph. D., Head of Laboratory, **I. A. Taratyn<sup>3</sup>**, Ph. D., Head of Department,  
**O. G. Reutskaya<sup>3</sup>**, Master, Researcher

<sup>1</sup> Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

<sup>2</sup> Belarusian National Technical University

<sup>3</sup> Minsk Research Institute of Radiomaterials

## Simulation of the Dynamics of Operation of RF MEMS Switch

*Two designs of RF MEMS switch with different configurations and thicknesses of the membranes were simulated in 3D geometry. Coupled-field finite elements time-domain sequential simulation with Eulerian-Lagrangian elements was used. Two switch designs with different stiffnesses and membrane thicknesses were simulated. The maximal operational frequency and switching capacity were calculated. The dynamical processes during the operational cycle were investigated, as well as the time instability and the snap-through effect.*

**Keywords:** MEMS, RF MEMS, RF switch, membrane, FEM, simulation, dynamics, electrostatic actuation, electrostatic capacity, tungsten

### Introduction

MEMS switches are widespread microsystem products applied in RF devices [1, 2]. Their designs, taking into account the requirements of a long operation with millions of loading cycles, demand a deep analysis of the shape of deformation of the membrane switch in order to avoid plasticity and fatigue in them. For calculation of such systems an analytical approach is often used [3, 4], as well as numerical methods, in particular, the FEM analysis [5–7], which is more preferable, although it is resource-intensive.

The given work presents the results of numerical modeling of RF MEMS switch of two designs in the static and time-domain modes, and studies the influence of the geometrical characteristics of the membrane, amplitude and frequency of the actuation voltage on the operating conditions of the switch.

### Switch design and model

Designs of the switches are presented in fig. 1 and 2.

#### Geometrical parameters of the switches

Thickness of the membrane $h$ . . . . .	0.1; 0.4; 0.7 $\mu\text{m}$
Width of the grounding electrode $W_1$ . . . . .	290 $\mu\text{m}$
Width of the alarm electrode $W$ . . . . .	120 $\mu\text{m}$
Width of the membrane $M_1$ . . . . .	100 $\mu\text{m}$
Width of the bridge $M_2$ . . . . .	300 $\mu\text{m}$
Length of the narrow membrane $L_1$ . . . . .	600 $\mu\text{m}$
Length of the wide membrane $L_2$ . . . . .	580 $\mu\text{m}$
Width of the membrane in the narrow part $K_1$ .	100 $\mu\text{m}$
Width of the membrane in the wide part $K_2$ . . .	300 $\mu\text{m}$
Gap $H$ . . . . .	4 $\mu\text{m}$

The designs differ by the method of membrane supporting, by the width and form of the membrane, and also by the sections of metallization, where the control voltage is supplied. In the switch with a narrow membrane the latter is fastened to four supportive surfaces of a small area, and the actuation voltage is applied to the screening electrodes of a coplanar RF line, while in the switch with a wide membrane it is fastened to two wide

supports and the voltage is applied to the actuation electrode of the line.

Since RF switches have to withstand millions of the loading cycles, the membrane material should have high resistance to the plastic deformations and fatigue, also temperature stability [8, 9]. A numerical simulation was done of the plastic deformations of a wide membrane with 1.5  $\mu\text{m}$  thickness made from tungsten and aluminum under the influence of a force from 0 up to 1.6 mN, ensuring the maximal deflection of the membrane in its centre up to 2...2.5  $\mu\text{m}$  (fig. 3). From the presented data it follows, that tungsten is less subjected to the plastic deformations and can withstand relatively big deflections without any plastic deformations.

In the membranes of both designs of the switch there is a number of holes with sizes of  $7 \times 7 \mu\text{m}$  to avoid aerodynamic resistance of the air during the switch operation. The screening and actuation electrodes of the coplanar line are covered with a dielectric layer with thickness of about 1  $\mu\text{m}$  protecting the line from a short circuit by membrane. The substrate is made of a dielectric with thickness of 50  $\mu\text{m}$  and dielectric permeability of  $\epsilon_r = 10$ .

Modeling of operation of the switch was carried out by FEM in coupled-field form [10]. At that, the solution algorithm is the following:

*Calculation of the electric fields → Calculation of the electrostatic actuation force → Definition of a deflection of the membrane under the influence of electrostatics → → Recalculation of a new configuration of the electric field with account of the changed membrane shape → → Calculation of the electric fields in a new geometry.*

The calculation is carried out in three computing stages:

1. Calculation of the electrostatic actuating force, calculated from the configuration of the electric field.

2. Calculation of the membrane deformed shape under the action of the electrostatic force.

3. Calculation of a new configuration of the electrostatic field.

The ponderomotive force of electrostatic actuation is calculated according to the definition of the Maxwell surface tensor [10]:

$$T_s = -\frac{1}{2}\varepsilon_0(E \cdot E)n + \varepsilon_0(n \cdot E)E,$$

where  $E$  — electric field;  $n$  — normal to the membrane surface;  $\varepsilon_0$  — electric constant.

For description of the mechanical properties of the membrane and influence of the nonlinearity of behaviour during a deflection the Murnaghan model was used [11]:

$$W_s = \frac{1}{2}(1+2\mu)I_1^2 - 2\mu I_2 + \frac{1}{3}(l+2m)I_1^3 - 2mI_1I_2 + nI_3,$$

where  $l, m, n$  — modules of elasticity of Murnaghan;  $\lambda, \mu$  — Lame parameters;  $W_s$  — energy of deformation;  $I_1, I_2, I_3$  — invariants of Green-Lagrange deformation tensor:

$$\begin{aligned} I_1 &= \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3; \\ I_2 &= \varepsilon_1\varepsilon_2 + \varepsilon_1\varepsilon_3 + \varepsilon_2\varepsilon_3; \\ I_3 &= \varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3; \end{aligned}$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  — main components the deformation tensor.

Calculation of the membrane deformations was carried out by solution of Cauchy equation [10]:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \nabla \cdot F : S; \\ F &= I + \nabla \otimes u; \\ S &= S_{ad} + C : \varepsilon = S_{ad} + \sigma; \\ S_{ad} &= S_0 + S_{ext}, \end{aligned}$$

where  $\rho$  — density;  $C$  — Cauchy-Green tensor of deformations;  $S$  — second Piola-Kirchhoff stress tensor;  $\sigma$  — stress tensor;  $S_0$  — initial stresses;  $S_{ext} \cdot n = T_s$ ,  $\otimes$  — operation of direct product.

The calculated values of the displacement of the membrane were transformed into mesh displacement via ALE method [12], which made it possible to recalculate the electric field at any stage of iterations. New coordinates of  $x_0, y_0, z_0$  unit node in the  $t$  time moment are calculated in the following way:

$$\begin{aligned} x_0 &= x(X_0, Y_0, Z_0, t); \\ y_0 &= y(X_0, Y_0, Z_0, t); \\ z_0 &= z(X_0, Y_0, Z_0, t), \end{aligned}$$

where  $X_0, Y_0, Z_0$  — co-ordinates of the moving mesh node during the initial moment of time;  $(x, y, z)$  — moving system of co-ordinates;  $(X, Y, Z)$  — material system of co-ordinates.

Material co-ordinates  $X_0, Y_0, Z_0$  of the node are the functions of the geometrical (initial)  $X_g, Y_g, Z_g$  frame and function  $u$ , defining their displacements (in this

case — the result of calculations of displacement of the membrane):

$$\begin{aligned} X_0 &= X(X_g, Y_g, Z_g, u); \\ Y_0 &= Y(X_g, Y_g, Z_g, u); \\ Z_0 &= Z(X_g, Y_g, Z_g, u). \end{aligned}$$

In a general view the correlation between the co-ordinate systems is written in the following way:

$$\begin{aligned} x &= f(X, t) = f(g(X_g, u), t); \\ X &= g(X_g, u); \\ X_m &= h(X_g, i), \end{aligned}$$

where  $f, g, h$  — vector functions;  $t$  — time;  $i$  — number of the meshing iteration. The initial and fixed in time are the geometrical co-ordinates of  $X_g$ .

Deformation of the elements is calculated as a deformation of the virtual materials. The minimum of energy of deformation of the volume with a moving mesh  $V$  is calculated:

$$W = \int_{\Omega} \left( \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) + \frac{k}{2}(J - 1)^2 \right) dV,$$

where  $\mu$  and  $k$  — virtual displacement and volume modules; invariants  $J = \det(\nabla_X \otimes x)$ ,  $I_1 = J^{-2/3} \text{Sp}((\nabla_X \otimes x)^t \cdot \nabla_X \otimes x)$ ;  $\text{Sp}$  — operation of calculation of the spur of matrix.

The finishing criterion of actuation voltage calculation was the achievement of the initial contact of the substrate and the membrane. However, the contact problem was not solved directly, because of zero thickness elements realization difficulties in our model, which is necessary for a contact modeling. Two types of calculation were considered:

- quasi-static analysis for definition of the actuation voltage and construction of the dependence of the capacity of the switch on the applied voltage;
- dynamic, time-domain analysis for switch work simulation in the operating conditions.

## Results and discussion

**Quasi-static calculation.** The results of calculation of RF MEMS switch are presented in fig. 4 and 5. It is important to mention a very high sensitivity of the switch membrane to the applied voltage after an exceeding of the threshold value, which is proved by the results of other researches [3, 4, 13, 14]. Thus at voltages over 2.2, 5.2 and 8.1 V for the membranes with thickness of 0.1, 0.4 and 0.7  $\mu\text{m}$  the dependence of the maximal deflection of the membrane on the voltage asymptotically comes nearer to axis  $Y$ , which testifies to transition of the mode of operation from a free deflection to a contact and creates certain difficulties during modeling — the behavior of the membrane during operation cycle is quite difficult to simulate at the voltages close to actuation voltage. This means, that the voltage

which produces considerable growth of displacements and capacity, is the actuation voltage.

**Dynamic calculation.** In this case a signal of a sinusoidal shape with the amplitude equal to the earlier determined actuation voltage for any membrane thickness was supplied to the electrodes. The calculation was done within one half-cycle. As characteristic for RF MEMS switches frequencies of switching two frequencies were selected: 1 and 0.1 kHz [13, 14]. The maximal deflection of the membrane was estimated by the displacement of its geometrical centre.

At the switching frequency of 1 kHz the narrow membrane revealed a complex, nonmonotonic character of displacement behavior (fig. 6, a), which is similar to well-known snap-through effect [16–18]. A similar phenomenon is observed while simulating a quasi-static model for a thin narrow membrane (a nonmonotonic deflection at low voltages (fig. 4). The electrostatic force also demonstrates a nonmonotonic character (fig. 7), which is strongly connected with the character of deflection of the membrane.

An increase in the monotony of the behavior of the membrane with the growth of its thickness is traced, thus at thickness of 0.7  $\mu\text{m}$  a similar "bounce" in fluctuations is practically not noticeable. In case of a wider and, accordingly, more rigid membrane the effect is not visible even on the thickness of 0.1  $\mu\text{m}$  (fig. 6, b).

Fig. 8 presents longitudinal median profiles of the deformed narrow membrane in various moments of time. At the beginning (till the moment of time of 0.067 ms) only the membrane parts, which are close to the actuation electrodes, are deflected, and only then the centre begins to move, and as a result "a wave" of a variable speed goes on the membrane and practically disappears with an increase of the thickness of the membrane up to 0.7 micrometers (fig. 9). At the 0.1 kHz the narrow membrane shows a much more monotonous operating mode (fig. 10), however, in case of small displacements at the beginning of the deflection process an appreciable "bounce" similar to the behavior considered above is observed again.

## Conclusion

Two versions of RF switch with membranes of various thicknesses and configurations were modeled. From the point of view of durability and reliability the optimal material for the offered designs is tungsten. There are no plastic deformations in a switch during its operation, which ensures high reliability of the system. According to the calculated cases, the frequency of switching for the considered systems is 0.1 kHz (1 kHz), and the voltage of switching is not more than 8 V (17 V) for the narrow and the wide membranes relatively. The switch capacity during operation is not less than 0.6 pF. The dependence of the character of switching on the thickness and configuration of the membrane was established, and a complex form of displacements of a

thin (0.1  $\mu\text{m}$ ) membrane depending on voltage was discovered. A narrow membrane on the bridge at high frequency (1 kHz) works in a nonmonotonic mode with wavy fluctuations. It is possible to reduce the effect by increasing the rigidity (i.e. thickness and width) of the membrane or by lowering considerably the frequency of the actuation voltage. Thus, out of the selected designs the most optimal is the wide membrane, which ensures a monotonous deflection at a rather small voltage of attraction and high for RF switches frequency of work.

## References

1. Anagnostou D. E., Zheng G., Papapolymerou J., Christodoulou C. G. Reconfigurable multifrequency antenna with RF-MEMS switches. *U. S. Patent 7,589,674, Sept. 15, 2009.*
2. Van Caekenbergh K., Sarabandi K. A 2-Bit Ka-Band RF MEMS Frequency Tunable Slot Antenna, *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2008, vol. 7, pp. 179–182.
3. Niessner M., Schrag G., Ianacci J., Wachutka G. Macromodel-based simulation and measurement of the dynamic pull-in of viscously damped RF-MEMS switches, *Sensors and Actuators A*, 2011, no. 172, pp. 269–279.
4. Niessner M., Schrag G., Wachutka G. Non-linear model for the simulation of viscously damped RF-MEMS switches at varying ambient pressure conditions, *Procedia Chemistry*, 2009, no. 1, pp. 618–621.
5. Kundu A., Sethi S., Mondal N. C. Analysis and optimization of two movable plates RF MEMS switch for simultaneous improvement in actuation voltage and switching time, *Microelectronics Journal*, 2010, vol. 41, pp. 257–265.
6. Guo F. M., Zhu Z. Q., Long Y. F. Study on low voltage actuated MEMS RF capacitive switches, *Sensors and Actuators A*, 2003, no. 108, pp. 128–133.
7. Chakraborty A., Gupta B., Sarkar B. Design, fabrication and characterization of miniature RF MEMS switched capacitor based phase shifter, *Microelectronics Journal*, 2014, no. 8, pp. 1093–1102.
8. Davidson B. D., Seghete D., George S. M. et al. ALD tungsten NEMS switches and tunneling devices, *Sensors and Actuators A*, 2011, no. 166, pp. 269–276.
9. Klein S., Thilmont S., Ziegler V. et al. High temperature stable RF MEMS switch based on tungsten-titanium, *Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems Conference, 2009. TRANSDUCERS*, 2009, pp. 1409–1412.
10. Comsol Multiphysics 5.1 Reference Guide. Comsol Inc, 2015.
11. Murnaghan F. D. *Finite Deformation of an Elastic Solid.*, Springer, 1952.
12. Stein E., de Borst R., Hughes T. J. R. Encyclopedia of Computational Mechanics, 2004, vol. 1: Fundamentals.
13. Yang M., Dai C., Shih P., Tsai Z. Capacitive RF switches manufactured by the CMOS-MEMS technique, *Microelectronic Engineering*, 2011, no. 88, pp. 2242–2246.
14. Matmat M., Koukos K., Coccetti F., Iddha T., Marty A., Escriba C., Fourniols J.-Y., Esteve D. Life expectancy and characterization of capacitive RF MEMS switches, *Microelectronics Reliability*, 2010, vol. 50, pp. 1692–1696.
15. Czarnecki P., Rottenberg X., Soussan P. et al. Effect of substrate charging on the reliability of capacitive RF MEMS switches, *Sensors and Actuators A*, 2009, no. 154, pp. 261–268.
16. Zhang Y., Zhao Y. Numerical and analytical study on the pull-in instability of micro-structure under electrostatic loading, *Sensors and Actuators A*, 2006, no. 127, pp. 366–380.
17. Das K., Batra R. C. Pull-in and snap-through instabilities in transient deformations of microelectromechanical systems, *J. Micromech. Microeng.*, 2009, no. 3, pp. 1–19.

# МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МНСТ SCIENCE OF MATERIALS AND TECHNOLOGICAL BASICS OF MNST

УДК 621.382.323

О. А. Рубан, инженер-исследователь, e-mail: myx.05@mail.ru,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт сверхвысокочастотной  
полупроводниковой электроники Российской академии наук (ИСВЧПЭ РАН), г. Москва

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ AlGaN/GaN МЕТОДОМ ВОЛЬТ-ФАРАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Поступила в редакцию 07.06.2016

Исследована релаксация в барьерном слое AlGaN/GaN гетероструктур на основе измерений вольт-фарадных характеристик GaN-HEMT. Определены распределение электронной плотности и внутреннее электростатическое поле, а также поляризация в GaN гетероструктуре. В рамках модифицированной модели Амбахера рассчитана пьезоэлектрическая составляющая поляризации. Анализ полученных значений поляризации позволил рассчитать степень релаксации в барьерном слое гетероструктуры. Были обнаружены электронные ловушки. Таким образом, была показана возможность применения вольт-фарадных характеристик для оценки качества кристаллической структуры барьера слоя в AlGaN/GaN гетероструктуре.

**Ключевые слова:** наноструктуры, нитрид галия, вольт-фарадные характеристики, пьезоэффект

### Введение

Транзисторы с высокой подвижностью электронов HEMT (*High-electron-mobility transistor*) на основе широкозонных гетероструктур AlGaN/GaN широко применяются в мощных приемо-передающих СВЧ-устройствах с рабочими частотами выше 8 ГГц [1]. В основе HEMT лежит гетероструктура с двухмерным электронным газом в квантовой яме.

Для моделирования и последующего изготовления СВЧ приборов на основе GaN HEMT необходимо иметь комплексное представление о гетероструктуре: состояние слоев, образующих квантовую яму, наличие электронных ловушек и концентрация электронов в канальном слое. В гетероструктурах AlGaN/GaN полярная природа соединений GaN и AlGaN приводит к их спонтанной поляризации  $P_{sp}$  [2, 3]. Кроме того, из-за растягивающих латеральных напряжений на границе раздела AlGaN/GaN, вызванных рассогласованием кристаллических решеток, возникает пьезоэлектрическая поляризация  $P_{pz}$  [4, 5]. В итоге на границе раздела AlGaN/GaN возникает суммарная поляризация  $P_{sum}$ , которая приводит к возникновению встроенного электрического поля. Данное поле вызывает накопление зарядов в квантовой яме, образуя двумерный электронный газ.

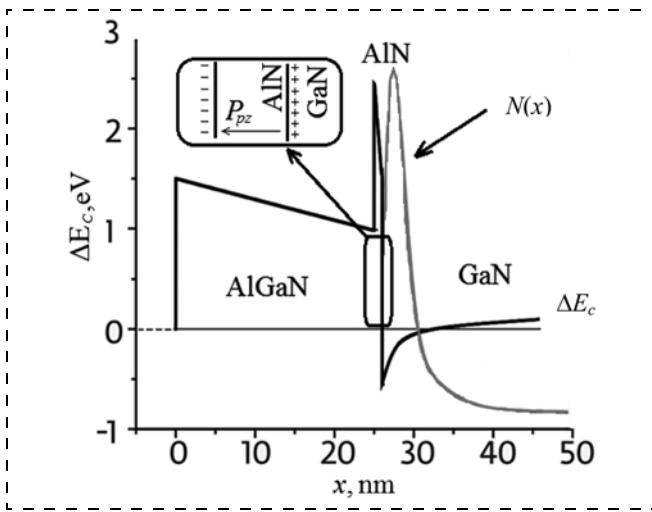
Для измерения параметров полупроводниковых материалов в настоящее время используется боль-

шое число разнообразных методов. Одним из них является метод вольт-фарадных характеристик. Одной из отличительных черт этих методов является то, что исследуется не монолитный полупроводник, а структура на основе полупроводника, обладающая емкостью: металл — полупроводник, металл — диэлектрик — полупроводник (МДП-структура) или  $p-n$ -переход. С их помощью проводят измерения концентрации легирующих примесей, глубоких уровней и их характеристик, генерационного времени неравновесных носителей заряда, плотности поверхностных состояний и их распределения по энергиям [6, 7]. В настоящей работе был использован метод измерения вольт-фарадных характеристик (ВФХ).

Целью настоящей работы является разработка способа для проведения анализа качества барьерных слоев гетероструктуры с помощью ВФХ.

### Экспериментальная часть

Исследовались гетероструктуры AlGaN/GaN, выращенные на подложках  $\text{Al}_2\text{O}_3$  методом осаждения металлогорганических соединений из газообразной фазы (MOC-гидридной эпитаксии). Для усиления пьезоэффекта был использован слой AlN толщиной 0,7 нм, период кристаллической решетки  $a$  этого слоя меньше чем у GaN и AlGaN ( $a_{\text{GaN}} = 0,316$  нм и  $a_{\text{AlN}} = 0,311$  нм соответственно



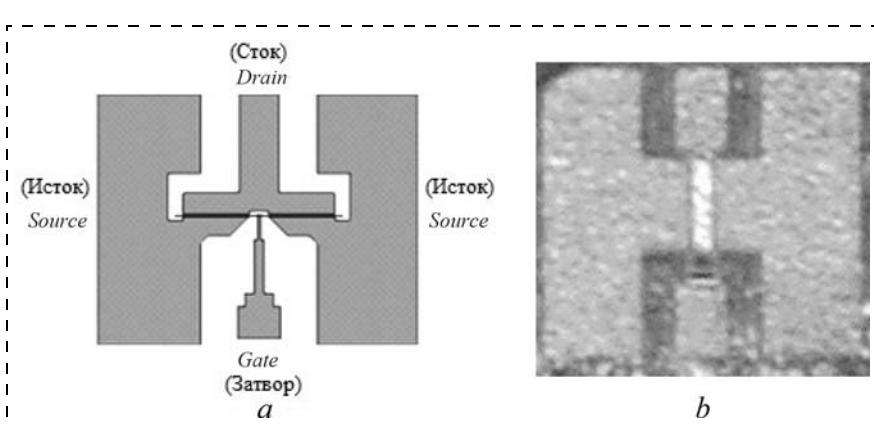
**Рис. 1.** Зонная диаграмма НЕМТ AlGaN/GaN. На выносе показано направление пьезоэлектрической поляризации в слое AlN:  $\Delta E_c$  — разница в значении энергии слоя и GaN;  $N(x)$  — профиль распределения электронов в квантовой яме

*Fig. 1. Zone diagram of HEMT AlGaN/GaN. In the output — direction of the piezoelectric polarization in AlN layer:  $\Delta E_c$  — difference in energy of the layer and GaN;  $N(x)$  — distribution profile of electrons in a quantum well*

		GaN	1.8 nm
Al <sub>0.32</sub> Ga <sub>0.68</sub> N	14 nm	Al <sub>0.29</sub> Ga <sub>0.71</sub> N	24 nm
AlN	0.7 nm	AlN	0.7 nm
GaN	2.6 μm	GaN	2.5 μm
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> substrate		Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> substrate	
<i>a</i>		<i>b</i>	

**Рис. 2.** Схема слоев и толщины гетероструктур исследуемых образцов: *a* — образец 1; *b* — образец 2

*Fig. 2. Diagram of the layers and thickness of the heterostructures of the investigated samples: *a* — sample 1; *b* — sample 2*



**Рис. 3.** Схема (*a*) и фотографическое изображение (*b*) тестового транзистора

[7]). В исследуемых гетероструктурах была сформирована квантовая яма с треугольным потенциальным профилем на гетерогранице AlN/GaN. Зонная диаграмма гетероструктуры с треугольной квантовой ямой представлена на рис. 1.

Конструкция исследованных гетероструктур схематически представлена на рис. 2. Исследуемые гетероструктуры различались толщиной и составом барьера слоя. В гетероструктуре образца 2 (рис. 2, *b*) был сформирован барьерный слой Al<sub>0.29</sub>Ga<sub>0.71</sub>N толщиной 24 нм, а в гетероструктуре образца 1 (рис. 2, *a*) был сформирован барьерный слой Al<sub>0.32</sub>Ga<sub>0.68</sub>N толщиной 14 нм. Вследствие меньшей толщины барьера слоя образец 1 имел меньшую подзатворную емкость, что позволяет получить более высокий диапазон рабочих частот.

Для проведения вольт-фарадных измерений на поверхности исследуемых гетероструктур были созданы тестовые двухзатворные транзисторы. Топология и фотографические изображения тестовых транзисторов показаны на рис. 3. Использование подобной топологии позволяет проводить измерение ВФХ.

Снятие ВФХ проводилось с помощью прибора Hewlett-Packard Precision LCR Meter. При измерениях использовались омический контакт (сток) и контакт Шоттки (затвор).

### Результаты и их обсуждения

Измеренные ВФХ показаны на рис. 4.

Распределения концентрации носителей заряда  $N$  от расстояния от поверхности образца  $x$  (рис. 5) рассчитывали с помощью стандартной процедуры дифференцирования [9]:

$$N(x) = \frac{C^3}{e\epsilon\epsilon_0 S^2} \frac{dU}{dC}, \quad (1)$$

где  $e$  — заряд электрона;  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость;  $\epsilon_0$  — диэлектрическая постоянная;  $C$  — измеренная емкость;  $S$  — площадь контакта Шоттки.

Из рис. 5, *a* видно, что в отличие от образца 2 в образце 1 пики соответствуют не только квантовой яме, но и заряженным ловушкам, причем концентрация носителей заряда в данных ловушках достигает значений, сравнимых с квантовой ямой. Это говорит о том, что в барьере слое присутствуют ловушки для электронов.

Для определения экспериментального значения поляризации  $P_{exp}$  было использовано следующее выражение:

$$P_{exp} = -(\epsilon - 1)\epsilon_0 \frac{dU}{dx}. \quad (2)$$

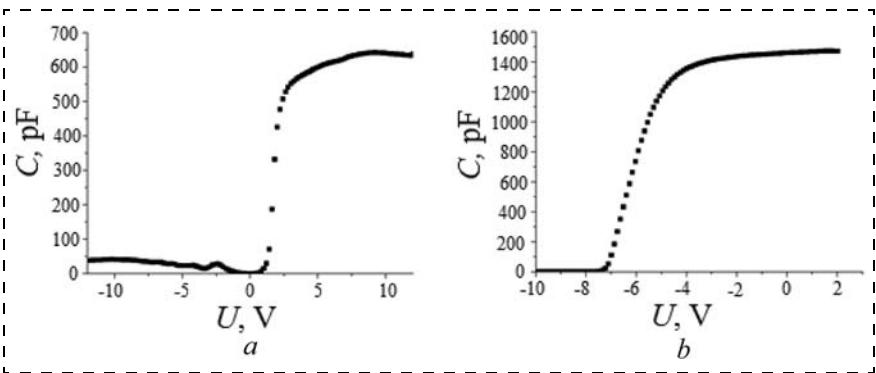


Рис. 4. Графики ВФХ для образца 1 (а) и для образца 2 (б)

Fig. 4. CVC diagrams for sample 1 (a) and sample 2 (b)

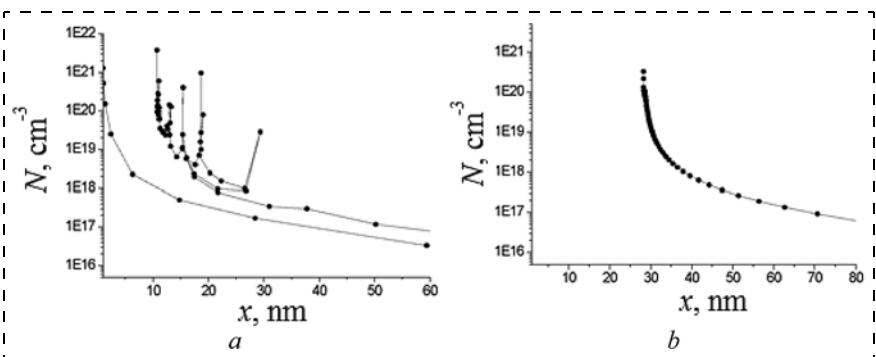


Рис. 5. Графики распределения электронной плотности в гетероструктурах для образца 1 (а) и для образца 2 (б)

Fig. 5. Diagrams of distribution of electronic density in the heterostructures for sample 1 (a) and sample 2 (b)

Для расчета пьезоэлектрической составляющей поляризации была модифицирована модель Амбахера [10] путем замены полностью упругодеформированного слоя GaN, выращенного на релаксированном слое AlGaN, на полностью упругодеформированный слой AlN, выращенный на релаксированном слое GaN, так как в исследуемых гетероструктурах была сформирована треугольная квантовая яма, а не прямоугольная, как это было сделано в модели Амбахера. Результатом этого является совпадение направлений пьезоэлектрической и спонтанной составляющих поляризации. Суммарная поляризация, являющаяся суперпозицией составляющих, создает поле, приводящее к возникновению электронов в квантовой яме. Пьезо-

#### Экспериментальные и расчетные значения поляризации в исследуемых гетероструктурах

*Experimental and calculated values of polarization in the investigated heterostructures*

№ образца <i>Samples</i>	$P_{exp}$ , C/m <sup>2</sup>	Расчетные значения <i>Calculated values</i>			$R, \%$
		$P_{pz}$ , C/m <sup>2</sup>	$P_{sp}$ , C/m <sup>2</sup>	$P_{sum}$ , C/m <sup>2</sup>	
1	-0,095	-0,052	-0,09	-0,142	90,4
2	-0,138				7,7

электрическая составляющая  $P_{pz}$  рассчитывалась по следующей формуле:

$$P_{pz} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right), \quad (3)$$

где  $a_0$  — значение решетки для GaN;  $a$  — значение решетки для AlN;  $e_{31}, e_{33}$  — пьезомодули AlN;  $C_{13}, C_{33}$  — коэффициенты упругой жесткости AlN.

Пьезоэлектрическая составляющая поляризации будет соответствовать полностью упругодеформированному барьерному слою. Степень релаксации была определена из отношения значений пьезоэлектрических составляющих поляризации, определенных из эксперимента через измерение ВФХ, и из модифицированной модели Амбахера, согласно следующему выражению:

$$R = \left( 1 - \frac{P_{exp} - P_{sp}}{P_{pz}} \right) 100 \%. \quad (4)$$

Результаты приведены в таблице. Видно, что для образца 2 определенное из эксперимента значение поляризации  $P_{exp}$  совпадает с рассчитанным суммарным значением поляризации  $P_{sum}$ . Это объясняется тем, что барьерный слой имеет низкую степень релаксации.

В образце 1  $P_{exp}$  совпадает со значением для спонтанной поляризации  $P_{sp}$ , что говорит об отсутствии пьезоэлектрической компоненты в данном образце вследствие высокой степени релаксации  $R$ . Это объясняется протеканием процесса пластической деформации. Так как на распределении электронной плотности в барьерных слоях (рис. 5, a) присутствуют ловушки, то можно предположить, что ими являются заряженные дислокационные линии [11]. Из данных, представленных в таблице, можно сделать вывод, что в образце 2 барьерные слои пластически деформированы, так как экспериментальное значение поляризации совпадает с рассчитанной по модифицированной модели Амбахера, что приводит к тому, что ловушки не образуются, и это видно из распределения электронной плотности (рис. 5, b).

#### Заключение

В результате расчета профиля концентрации электронов, основанном на измерении ВФХ, были обнаружены электронные ловушки, природу которых можно интерпретировать как заряженные дислокационные линии в барьерном слое образца 1. Также было определено отсутствие заряженных дислокационных линий в образце 2.

С помощью расчета поляризации на основании экспериментальных данных и модифицированной модели Амбахера была определена степень релаксации барьерных слоев в исследуемых гетероструктурах.

Предложенный метод позволяет определить необходимые для создания монолитной интегральной схемы (МИС) параметры. В случае использования ртутного зонда предложенный метод применим в качестве входного контроля пластин для уточнения расчетной модели при создании МИС, в результате чего увеличивается выход годных элементов и уменьшается расход дорогостоящих материалов.

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

#### Список литературы

1. **Федоров Ю. В.** Широкозонные гетероструктуры  $(Al,Ga,In)N$  и приборы на их основе для миллиметрового диапазона длин волн // ЭЛЕКТРОНИКА: наука, технология, бизнес. 2011. Т. 2. С. 00108.
2. **Bernardini F., Fiorentini V., Vanderbilt D.** Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 56. P. R10024.
3. **Bernardini F., Fiorentini V.** Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. P. R9427.
4. **Zoroddu A., Bernardini F., Ruggerone P., Fiorentini V.** First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64. P. 045208.
5. **Fiorentini V., Bernardini F., Sala F. D., Carlo A. D., Lugli P.** Effects of macroscopic polarization in III-V nitride multiple quantum wells // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 8849.
6. **Иванов П. А., Потапов А. С., Николаев А. Е., Лундин В. В., Сахаров А. В., Цацулыников А. Ф., Афанасьев А. В., Романов А. А., Осачев Е. В.** Вольт-фарадные характеристики МДП структур  $(Al/Ti)/Al_2O_3/n-GaN$  // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. С. 1061.
7. **Супрядкина И. А., Абгарян К. К., Бажанов Д. И., Мутигуллин И. В.** Исследование поляризаций нитридных соединений  $(Al, Ga, AlGa)N$  и зарядовой плотности различных интерфейсов на их основе // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. С. 79.
8. **Стрельченко С. С., Лебедев В. В.** Соединения АЗВ5. М.: Металлургия, 1984. 121 с.
9. **Смирнов В. И.** Неразрушающие методы контроля параметров полупроводниковых материалов и структур. Ульяновск: УлГУ, 2012. 75 с.
10. **Ambacher O.** Growth and applications of Group III-nitrides // J. Phys. D. 1998. Vol. 31. P. 2653.
11. **Тяпунина Н. А., Белозерова Э. П.** Заряженные дислокации и свойства щелочногалоидных кристаллов // Успехи физических наук. 1988. Т. 156. С. 683.

**O. A. Ruban**, Engineer-Researcher, myx.05@mail.ru,  
Institute of Microwave Semiconductor Electronics of RAS, Moscow

## Investigation of Polarization in the Quantum Well Heterostructures of AlGaN/GaN by the Method of Current-Voltage Characteristics

*Relaxation in the barrier layer of AlGaN/GaN heterostructures was studied on the basis of measurements of the current-voltage characteristics of GaN-HEMT. The electron density distribution and internal electrostatic field were determined, as well as polarization in the GaN heterostructure. Within the framework of the modified Ambacher model the piezoelectric component of polarization was calculated. An analysis of the obtained polarization values made it possible to calculate the degree of relaxation in the barrier layer of the heterostructure, where electronic traps were discovered. Thus, feasibility of application of the current-voltage characteristics for evaluation of the quality of the crystal structure of the barrier layer in the AlGaN/GaN heterostructure was proved.*

**Keywords:** nanostructures, gallium nitride, current-voltage characteristics, piezoelectric effect

### Introduction

The transistors with high-electron-mobility (HEMT) based on wide-zone AlGaN/GaN heterostructures are applied in powerful receiving-transmitting microwave devices with the working frequencies over 8 GHz [1]. At the heart of HEMT is a heterostructure with two-dimensional electron gas in a quantum well.

For modeling and manufacture of the microwave devices on the basis of GaN HEMT it is necessary to have an idea about the heterostructure: state of the layers forming a quantum well, presence of the electron traps and concentration of electrons in the channel layer. In AlGaN/GaN heterostructures the polar nature of GaN and AlGaN compounds leads to their spontaneous polarization  $P_{sp}$  [2, 3]. Besides, because of the stretching lateral strains on the border of AlGaN/GaN

section, caused by a mismatch of the crystal lattices, a piezoelectric polarization  $P_{pz}$  [4, 5] appears. As a result on the border of AlGaN/GaN section an aggregate polarization  $P_{sum}$  appears, which leads to occurrence of an embedded electric field. The given field causes accumulation of charges in a quantum well, forming a two-dimensional electron gas.

For measurement of the parameters of the semiconductor materials many methods are used. One of them is the method of the current-voltage characteristics (CVC). One of the distinctive features is the fact that the investigated semiconductor is not monolithic, but is a structure on the basis of a semiconductor possessing a capacity: metal — semiconductor, metal — dielectric — semiconductor (MIS structure) or  $p-n$  junction. With their help measurements are done of the

concentrations of the alloying impurities, deep levels and their characteristics, generation time of the non-equilibrium charge carriers, density of the surface states and their distribution by energies [6, 7]. In the present work the CVC method of measurement is used. The aim is development of a method for analysis of the quality of the barrier layers of a heterostructure by means of CVC.

## Experimental Part

AlGaN/GaN heterostructures were investigated, which were grown on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrates by deposition of the metalorganic compounds from the gaseous phase (MOS hydride epitaxy). For enhancing of the piezoelectric effect an AlN layer was used with thickness of 0.7 nm, the *a* period of the crystal lattice of this layer was less than that of GaN and AlGaN ( $a_{\text{GaN}} = 0.316 \text{ nm}$  and  $a_{\text{AlN}} = 0.311 \text{ nm}$ , accordingly [7]). In the investigated heterostructures a quantum well with a triangular potential profile on AlN/GaN heteroborder was formed. The zone diagram of the heterostructure with a triangular quantum well is presented in fig. 1.

The designs of the investigated heterostructures are presented in fig. 2. The heterostructures differed by the thickness and structure of the barrier layers. In the heterostructure of sample 2 (fig. 2, *b*) Al<sub>0.29</sub>Ga<sub>0.71</sub>N barrier layer was formed with thickness of 24 nm, and in the heterostructure of sample 1 (fig. 2, *a*) — barrier layer of Al<sub>0.32</sub>Ga<sub>0.68</sub>N with thickness of 14 nm. Owing to its smaller thickness, the barrier layer of sample 1 had smaller subgate capacity, which made it possible to get a higher range of the working frequencies.

For measurement of CVC on a surface of the heterostructures the test two-gate transistors were created. The topology and photographic images of the test transistors are shown in fig. 3. Use of such topology allows us to do CVC measurement.

Reading was done by means of Hewlett-Packard Precision LCR Meter. During the measurements the ohmic contact (drain) and Schottky contact (gate) were used.

## Results and their discussions

The results are presented in fig. 4. Distributions of the concentrations of the charge carriers *N* from the distance from the surface of sample *x* (fig. 5) were calculated by means of a standard differentiation procedure [9]:

$$N(x) = \frac{C^3}{e\varepsilon\varepsilon_0 S^2} \frac{dU}{dC}, \quad (1)$$

where *e* — electron charge;  $\varepsilon$  — dielectric permeability;  $\varepsilon_0$  — dielectric constant; *C* — measured capacity; *S* — area of Schottky contact.

From fig. 5, *a* it is visible that, unlike in sample 2, in sample 1 the peaks correspond not only to the quantum well, but also to the charged traps, and the concentration of the charge carriers in the given traps reaches the values, comparable with a quantum well. This means that in the barrier layer there are traps for electrons.

For the experimental determination of polarization  $P_{\text{exp}}$  the following expression was used:

$$P_{\text{exp}} = -(\varepsilon - 1)\varepsilon_0 \frac{dU}{dx}. \quad (2)$$

For calculation of the piezoelectric component of polarization the Ambacher model was modified [10] by replacement of the completely elastodeformed GaN layer grown on a relaxed AlGaN layer, with a completely elastodeformed AlN layer on relaxed GaN layer, because in the investigated heterostructures a triangular quantum well was formed, and not a rectangular one, as it was in the Ambacher model. The result is coincidence of the directions of the piezoelectric and spontaneous components of polarization. The total polarization, which is a superposition of the components, creates a field leading to occurrence of electrons in a quantum well. The piezoelectric component  $P_{pz}$  was calculated by the following formula:

$$P_{pz} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right), \quad (3)$$

where  $a_0$  — lattice value for GaN; *a* — lattice for AlN;  $e_{31}$ ,  $e_{33}$  — piezoelectric moduli of AlN;  $C_{13}$ ,  $C_{33}$  — factors of elastic rigidity AlN.

The piezoelectric component of polarization corresponds to the completely elastodeformed barrier layer. The relaxation degree is defined from the relation of the piezoelectric components of polarization determined from an experiment, through measurement, and from the modified Ambacher model, according to the expression:

$$R = \left( 1 - \frac{P_{\text{exp}} - P_{sp}}{P_{pz}} \right) 100 \%. \quad (4)$$

The results are presented in the table. For sample 2 polarization  $P_{\text{exp}}$  defined from the experiment coincides with the calculated total polarization  $P_{sum}$ . This is explained by the fact that the barrier layer has a low degree of relaxation. In sample 1  $P_{\text{exp}}$  coincides with the value for spontaneous polarization  $P_{sp}$  which testifies to absence of a piezoelectric component in it owing to a high degree of relaxation *R*. This is explained by the ongoing plastic deformation. Since in distribution of the electronic density in the barrier layers (fig. 5, *a*) there are traps, it is possible to assume, that they are the charged dislocation lines [11]. From table data it is possible to draw a conclusion, that in sample 2 the barrier layers are plastically deformed, because the experimental value of polarization will coincide with the one calculated by the modified Ambacher model, which leads to the fact that traps are not formed, and this is visible from the distribution of the electronic density (fig. 5, *b*).

## Conclusion

As a result of calculation of the profile of the concentration of electrons, based on measurement, the electronic traps were discovered, the character of which can be interpreted as charged dislocation lines, in the

barrier layer of sample 1. Also, absence of the charged dislocation lines in sample 2 was proved.

By means of calculation of polarization on the basis of the experimental data and modified Ambacher model the degree of relaxation of the barrier layers in the investigated heterostructures was defined.

The proposed method allows us to define the parameters, necessary for development of a monolithic integrated circuit (MIC). In case of a mercury probe, the method is applicable as the input control of the plates for specification of the calculated model for development of MIC, which increases the output of the suitable elements and decreases the cost of expensive materials.

*The work was done with the financial support of the Ministry of Education and Science of RF (grant agreement № 14.607.21.0124, the unique identifier of the project is RFMEFI60715X0124).*

### References

1. Fedorov Yu. V. Shirokozonnye geterostruktury (Al, Ga, In)N i pribory na ikh osnove dlya millimetrovogo diapazona dlin voln, *EHLEKTRONIKA: nauka, tekhnologiya, biznes*, 2011, vol. 2, pp. 00108.
2. Bernardini F., Fiorentini V., Vanderbilt D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III—V nitrides, *Phys. Rev. B.*, 1997, vol. 56, pp. R10024.
3. Bernardini F., Fiorentini V. Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions, *Phys. Rev. B.*, 1998, vol. 57, pp. R9427.
4. Zoroddu A., Bernardini F., Ruggerone P., Fiorentini V. First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory, *Phys. Rev. B.*, 2001, vol. 64, pp. 045208.
5. Fiorentini V., Bernardini F., Sala F. D., Carlo A. D., Lugli P. Effects of macroscopic polarization in III—V nitride multiple quantum wells, *Phys. Rev. B.*, 1999, vol. 60, pp. 8849.
6. Ivanov P. A., Potapov A. S., Nikolaev A. E., Lundin V. V., Sakharov A. V., Tsatsul'nikov A. F., Afanas'ev A. V., Romanov A. A., Osachev E. V. Volt-faradnye kharakteristiki MDP struktur (Al/Ti)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/n-GaN, *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov*, 2015, vol. 49, pp. 1061.
7. Supryadkina I. A., Abgaryan K. K., Bazhanov D. I., Muttigullin I. V. Issledovanie polaryazatsij nitridnykh soedinenij (Al, Ga, AlGa)N i zaryadovoj plotnosti razlichnykh interfejsov na ikh osnove, *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov*, 2013, vol. 47, pp. 79.
8. Strel'chenko S. S., Lebedev V. V. *Soedineniya A3B5*, Moscow, Metallurgiya, 1984, pp. 121.
9. Smirnov V. I. *Nerazrushayushchie metody kontrolya parametrov poluprovodnikovykh materialov i struktur*, Ul'yanovsk, UITU, 2012, 75 p.
10. Ambacher O. Growth and applications of Group III-nitrides, *J. Phys. D.*, 1998, vol. 31, pp. 2653.
11. Tyapunina N. A., Belozerova EH. P. Zaryazhennye dislokatsii i svojstva shhelochnogaloidnykh kristallov, *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1988, vol. 156, pp. 683.

УДК 531.383

М. А. Барулина, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., В. М. Панкратов, д-р техн. наук, зав. лаб.  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем точной механики  
и управления Российской академии наук (ИПТМУ РАН), г. Саратов  
E-mail: marina@barulina.ru, iptmuran@san.ru

## АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ПЛОСКОЙ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОЛОКНА С ВОЗДУШНЫМ СЕРДЕЧНИКОМ

Поступила в редакцию 18.04.2016

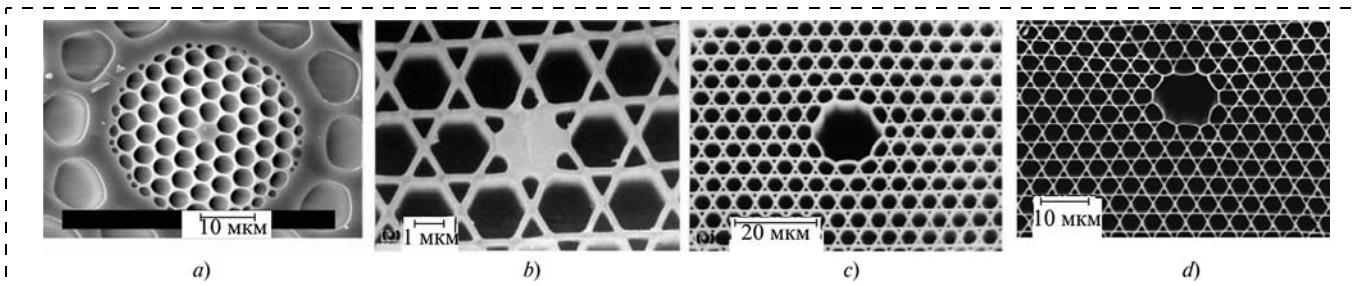
Представлено аналитическое решение плоской нестационарной задачи теплопроводности для нового типа оптического волокна — микроструктурированного (фотонно-кристаллического) волокна с воздушным сердечником, приобретающего все большую популярность для создания волоконно-оптических гироскопов. Аналитическое решение было получено с помощью метода интегральных преобразований и учитывает влияние на волокно нестационарного радиального теплового воздействия, изменяющегося по произвольному закону. Для частного случая, когда тепловое воздействие носит гармонический характер, получено решение, особенностю которого является практически полное исключение необходимости использования численных методов при моделировании.

**Ключевые слова:** фотонно-кристаллическое волокно, микроструктурированное волокно, волоконно-оптический гироскоп, аналитическое решение, метод интегральных преобразований, плоская нестационарная задача теплопроводности

### Введение

К настоящему времени разработан ряд новых типов оптических волокон, обладающих уникальными свойствами, обусловливающими их востребованность для создания различных оптических устройств и в том числе волоконно-оптических гироскопов (ВОГ) [1–6]. Фотонно-кристалличес-

кие волокна или микроструктурированные (МС) волокна — один из новых типов оптических волокон, приобретающий все большую популярность для построения и создания волоконных лазерных систем и нелинейно-оптических устройств, предназначенных для решения широкого круга научных и технологических задач [2–5]. Световоды



**Рис. 1. Изображения поперечных сечений некоторых типов микроструктурированных волокон:** а, б — волокна с малым размером сердцевины и высоким контрастом показателей преломления сердцевины и оболочки; в, г — МС волокно с полой сердцевиной

*Fig. 1. Images of cross-sections of some types of PCF: (a, b) — fibers with a small size of the core and high contrast of the indexes of refraction of the core and cladding; (c, d) — PCF with a hollow core*

этого класса представляют собой изготовленную из плавленого кварца или другого материала нано- или микроструктуру с периодической или апериодической системой цилиндрических воздушных отверстий, ориентированных вдоль оси волокна (рис. 1) [2, 3]. Уникальные свойства МС волокон с полой сердцевиной (рис. 1, с, д) определили их использование для волоконно-оптических гироскопов [3, 5, 6].

Тем не менее ряд вопросов использования МС волокна с воздушным сердечником для ВОГ остается не исследованным. Так, не в полной мере исследовано влияние нестационарных температурных воздействий на МС волокно, тогда как такие воздействия могут привести к деформации волокна и, соответственно, к изменению его оптических характеристик.

Целью работы является построение аналитического решения плоской задачи теплопроводности для фотонно-кристаллического волокна с воздушным сердечником в условиях нестационарного радиального теплового воздействия на него.

Достоинством аналитического решения, в отличие от конечно-элементного моделирования, является то, что для определения поля температуры в модели в определенный момент времени не надо вычислять поля температур в предшествующие моменты времени. Результаты расчетов с помощью аналитического решения не зависят от значения шага расчета, от разбиения модели на конечные элементы и т.д. Соответственно, существенно уменьшаются как время моделирования, так и требования к аппаратному и программному обеспечению.

Для достижения поставленной цели в работе поставлены и решены следующие задачи:

- построена и аналитически, с помощью метода интегральных преобразований, решена плоская нестационарная задача теплопроводности для МС волокна с воздушным сердечником, находящимся под нестационарным тепловым воздействием. Для частного случая, когда тепловое воздействие носит гармонический характер, получено решение, особенностью которого является полное исключение необходимости использования численных методов при моделиро-

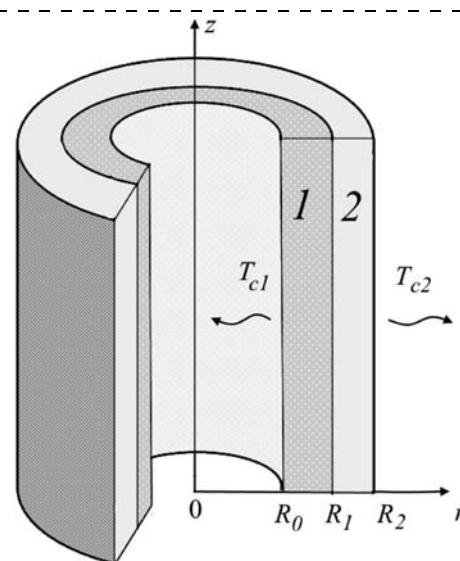
вании нестационарного теплового воздействия на волокно;

- разработано программное обеспечение, реализующее построенное решение; проверена адекватность полученного аналитического решения, проведено сравнение результатов, получаемых с помощью аналитического решения и в универсальной программе конечно-элементного моделирования ANSYS.

#### Постановка плоской нестационарной задачи теплопроводности для МС волокна

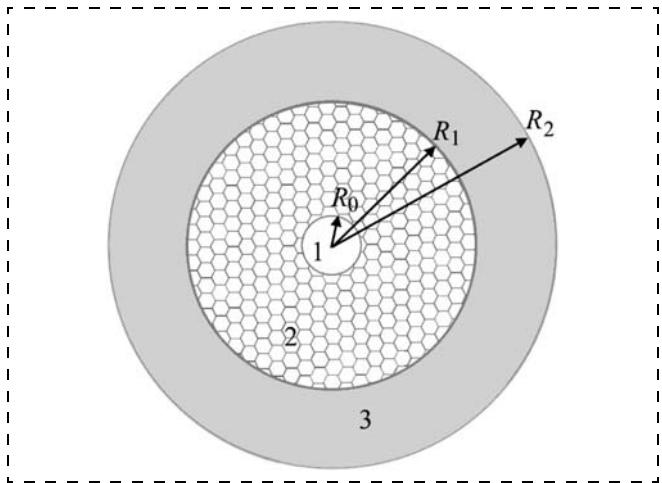
Для построения математической модели будем рассматривать МС волокно как длинный полый двуслойный цилиндр, на внешний слой которого действуют нестационарные температурные возмущения (рис. 2). Такая идеализация возможна, так как существует квадрупольный способ намотки волокна, при котором равноотстоящие от центра точки волокна располагаются в физически равных условиях [7].

Первым (внутренним) слоем является неоднородный цилиндр 1, представляющий собой микроча-



**Рис. 2. Двухслойный цилиндр**

*Fig. 2. Two-layer cylinder*



**Рис. 3. Поперечное сечение МС волокна:** 1 – воздух; 2 – МС оболочка; 3 – кожух

Fig. 3. Cross-section of PCF: 1 – air; 2 – honeycomb cladding; 3 – jacket

структурированную оболочку (МС оболочка). МС оболочка имеет вид сот и ее физические характеристики зависят [8, 9] от числа, расположения и вида воздушных отверстий (рис. 3). При построении математической модели в данной работе принималось, что МС оболочка представляет собой ячеистую структуру, ячейки которой имеют вид шестигранников. Тогда, согласно [8, 9], такую оболочку можно рассматривать как сплошное анизотропное тело, плотность которого будет определяться по формуле [9]

$$\rho = (1 - \eta)\rho_0, \quad (1)$$

где \$\rho\_0\$ – плотность кварца; \$\rho\$ и \$\eta\$ – плотность и пористость МС оболочки соответственно.

Пористость оболочки \$\eta\$ должна быть меньше 1. Значение \$\eta = 0\$ означает отсутствие отверстий в оболочке.

Вторым (внешним) слоем является однородный цилиндр, представляющий собой защитную оболочку волокна из акрилата.

Так как цилиндры длинные и тепловое воздействие на волокно является только функцией времени, то решаемая задача будет осесимметричной, и распределение температуры внутри цилиндров будем полагать функциями только радиальной координаты \$r\$ и времени \$t\$. Обозначим распределение температуры в первом и втором цилиндрах функциями \$T\_1 = T\_1(r, t)\$ и \$T\_2 = T\_2(r, t)\$ соответственно. Также предположим, что в начальный момент времени распределение температур в цилиндре определялось функцией \$T\_{0,i} = T\_{0,i}(r)\$, \$i = 1, 2\$. Температура среды внутри полого отверстия первого цилиндра и вокруг внешней поверхности второго цилиндра примем равной \$T\_{c,1}(t)\$ и \$T\_{c,2}(t)\$ соответственно. Радиальная координата \$r\$ для первого цилиндра изменяется в пределах \$R\_0 \leq r \leq R\_1\$; для второго цилиндра \$R\_1 \leq r \leq R\_2\$.

Уравнения, определяющие задачу теплопроводности для рассматриваемой системы [10], будут иметь следующий вид:

$$\frac{\partial T_i(r, t)}{\partial t} = a_i^2 \left( \frac{\partial^2 T_i(r, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_i(r, t)}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2; \quad (2)$$

$$T_i(r, 0) = T_{0,i}(r); \quad (3)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_0} - \alpha_1(T_1(R_0, t) - T_{c,1}(t)) = 0; \quad (4)$$

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_2} + \alpha_2(T_2(R_2, t) - T_{c,2}(t)) = 0; \quad (5)$$

$$T_1(R_1, t) = T_2(R_1, t); \\ \lambda_1 \frac{\partial T_1(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_1} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_1}, \quad (6)$$

где \$\lambda\_i\$, \$a\_i^2 = \lambda\_i/c\_i\rho\_i\$, \$\alpha\_i\$ – коэффициенты теплопроводности, температуропроводности и теплоотдачи соответственно; \$c\_i\$ – удельная теплоемкость; \$\rho\_i\$ – плотность; \$i = 1, 2\$ – номер цилиндра.

Соотношения (3) представляют собой начальные условия для рассматриваемой задачи. Теплобмен со средой через внутреннюю и внешнюю поверхности определяется выражениями (4) и (5) соответственно. Выражения (6) описывают условия совместности.

### Аналитическое решение

Аналитическое решение нестационарной задачи теплопроводности (2)–(6) получим с помощью метода интегральных преобразований [11]. Отметим, что попытка получения аналитического решения рассматриваемой задачи была сделана в работе [12], но при этом температуры среды \$T\_{c,1}\$ и \$T\_{c,2}\$ полагались постоянными.

Используем следующее интегральное преобразование [11] для исключения координаты \$r\$, вдоль которой свойства рассматриваемого цилиндра меняются ступенчато при \$r = R\_1\$ (\$\gamma\$-параметр):

$$\bar{T}_\gamma(t) = \frac{\lambda_1}{a_1^2} \int_{R_0}^{R_1} r_1 T_1(r_1, t) K_{1,\gamma}(r_1) dr_1 + \\ + \frac{\lambda_2}{a_2^2} \int_{R_1}^{R_2} r_2 T_2(r_2, t) K_{2,\gamma}(r_2) dr_2,$$

или в более краткой форме

$$\bar{T}_\gamma(t) = \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i T_i(r_i, t) K_{i,\gamma}(r_i) dr_i = \\ = \bar{T}_{1,\gamma}(t) + \bar{T}_{2,\gamma}(t), \quad (7)$$

$$R_{i-1} \leq r_i \leq R_i, \quad i = 1, 2.$$

Ядро  $K_{i,\gamma}(r_i)$  интегрального преобразования (7) является решением, определяемым с точностью до постоянного множителя, уравнения Штурма — Лиувилля с соответствующими однородными граничными условиями:

$$\frac{d^2 K_{i,\gamma}(r_i)}{dr_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{dK_{i,\gamma}(r_i)}{dr_i} + \frac{\gamma^2}{a_i^2} K_{i,\gamma}(r_i) = 0, \\ R_{i-1} \leq r_i \leq R_i, \quad i = 1, 2; \quad (8)$$

$$\text{при } r_1 = R_0 \quad \lambda_1 \frac{dK_{1,\gamma}(r_1)}{dr_1} - \alpha_1 K_{1,\gamma}(r_1) = 0; \quad (9)$$

$$\text{при } r_2 = R_2 \quad \lambda_2 \frac{dK_{2,\gamma}(r_2)}{dr_2} + \alpha_2 K_{2,\gamma}(r_2) = 0; \quad (10)$$

$$\text{при } r_1 = r_2 = R_1 \quad K_{1,\gamma}(r_1) = K_{2,\gamma}(r_2);$$

$$\lambda_1 \frac{dK_{1,\gamma}(r_1)}{dr_1} = \lambda_2 \frac{dK_{2,\gamma}(r_2)}{dr_2}. \quad (11)$$

Решением уравнения (8) будет следующее выражение:

$$K_{i,\gamma_n}(r_i) = A_{i,\gamma_n} J_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right) + B_{i,\gamma_n} Y_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right), \quad (12)$$

где  $J_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right)$  и  $Y_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right)$  — соответственно функции Бесселя и Неймана первого рода нулевого порядка;  $\gamma_n$  —  $n$ -й действительный положительный корень характеристического уравнения задачи Штурма — Лиувилля.

Постоянные  $A_{2,\gamma}$ ,  $B_{1,\gamma}$ ,  $B_{2,\gamma}$  находятся из граничных условий (9)–(12). Постоянная  $A_{1,\gamma}$  определяется из следующего условия нормировки ядра  $K_{i,\gamma}(r_i)$ :

$$\sum_{m=1,2} \frac{\lambda_m}{a_m^2} \int_{R_{m-1}}^{R_m} r_m K_{m,\gamma}(r_m) dr_m = 1.$$

В результате выражения для  $A_{i,\gamma}$ ,  $B_{i,\gamma}$  имеют следующий вид:

$$A_{1,\gamma} = D_\gamma f_{1,\gamma}(R_0) L_{7,\gamma}; \quad B_{1,\gamma} = -\frac{g_{1,\gamma}(R_0)}{f_{1,\gamma}(R_0)} A_{1,\gamma}; \\ A_{2,\gamma} = D_\gamma f_{2,\gamma}(R_2) L_{1,\gamma}; \quad B_{2,\gamma} = -\frac{g_{2,\gamma}(R_2)}{f_{2,\gamma}(R_2)} A_{2,\gamma}, \quad (13)$$

где

$$D_\gamma = \frac{\sqrt{2} a_1 a_2}{\sqrt{Z_{1,\gamma} a_2^2 L_{7,\gamma} + Z_{2,\gamma} a_1^2 L_{1,\gamma}}}; \\ Z_{1,\gamma} = \lambda_1 [R_1^2 (L_{1,\gamma}^2 + L_{2,\gamma}^2) - R_0^2 (L_{3,\gamma}^2 + L_{4,\gamma}^2)]; \\ Z_{2,\gamma} = \lambda_2 [R_2^2 (L_{5,\gamma}^2 + L_{6,\gamma}^2) - R_1^2 (L_{7,\gamma}^2 + L_{8,\gamma}^2)]; \\ L_{1,\gamma} = f_{1,\gamma}(R_0) J_0\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_0\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right); \\ L_{2,\gamma} = f_{1,\gamma}(R_0) J_1\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_1\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right);$$

$$L_{3,\gamma} = f_{1,\gamma}(R_0) J_0\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_0\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right); \\ L_{4,\gamma} = f_{1,\gamma}(R_0) J_1\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_1\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right); \\ L_{5,\gamma} = f_{2,\gamma}(R_2) J_0\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_0\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right); \\ L_{6,\gamma} = f_{2,\gamma}(R_2) J_1\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_1\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right); \\ L_{7,\gamma} = f_{2,\gamma}(R_2) J_0\left(\frac{\gamma R_1}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_0\left(\frac{\gamma R_1}{a_2}\right); \\ L_{8,\gamma} = f_{2,\gamma}(R_2) J_1\left(\frac{\gamma R_1}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_1\left(\frac{\gamma R_1}{a_2}\right); \\ g_{i,\gamma}(r) = \alpha_i J_0\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right) + (-1)^{i+1} \frac{\gamma \lambda_i}{a_i} J_1\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right); \\ f_{i,\gamma}(r) = \alpha_i Y_0\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right) + (-1)^{i+1} \frac{\gamma \lambda_i}{a_i} Y_1\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right).$$

Характеристическое уравнение для определения  $\gamma_n$  имеет следующий вид:

$$\frac{\lambda_1}{\alpha_1} L_{2,\gamma} L_{7,\gamma} - \frac{\lambda_2}{\alpha_2} L_{1,\gamma} L_{8,\gamma} = 0. \quad (14)$$

Применяя интегральное преобразование (7) к уравнению (2), получим

$$\sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial t} K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i - \\ - \sum_{i=1,2} \lambda_i \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \left( \frac{\partial^2 T_i(r_i, t)}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial r_i} \right) K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i = \\ = 0. \quad (15)$$

Первая сумма в выражении (15) представляет собой изображение частной производной по времени:

$$\frac{d\bar{T}_{\gamma_n}(t)}{dt} = \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial t} K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i. \quad (16)$$

Взяв интегралы во второй сумме в выражении (15) по частям 2 раза, учитывая условия совместности (6) и (11), и граничные условия (4), (5), (9), (10), получим вторую сумму в следующем виде:

$$\sum_{i=1,2} \lambda_i \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \left( \frac{\partial^2 T_i(r_i, t)}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial r_i} \right) K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i = \\ = \alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) T_{c,1}(t) + \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) T_{c,2}(t) - \\ - \gamma_n^2 \bar{T}_{\gamma_n}(t). \quad (17)$$

Таким образом, уравнение (2) с начальными условиями (3)–(6), записанное в изображениях, будет иметь следующий вид:

$$\frac{d\bar{T}_{\gamma_n}(t)}{dt} + \gamma_n^2 \bar{T}_{\gamma_n}(t) = \alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) T_{c,1}(t) + \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) T_{c,2}(t); \quad (18)$$

$$\bar{T}_{\gamma_n}(0) = \bar{T}_{0,\gamma_n},$$

где  $\bar{T}_{0,\gamma_n}$  — изображение начального условия (3);

$$\bar{T}_{0,\gamma_n} = \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i T_{0,i}(r_i) K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i. \quad (19)$$

Решением системы (18) будет следующая функция:

$$\bar{T}_{\gamma_n}(t) = e^{-\gamma_n^2 t} (C_{0,\gamma_n} + S_{\gamma_n}(t)), \quad (20)$$

где

$$S_{\gamma_n}(t) = \int_0^t (\alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) T_{c,1}(t) + \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) T_{c,2}(t)) e^{\gamma_n^2 t} dt; \quad (21)$$

$$C_{0,\gamma_n}(t) = \bar{T}_{0,\gamma_n}.$$

Обратные преобразования, учитывая нормированность ядра, найдем по формуле

$$T_i(r_i, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{T}_{\gamma_n}(t) K_{i,\gamma_n}(r_i). \quad (22)$$

**Рассмотрим частный случай**, когда начальная температура цилиндров постоянна и не зависит от радиальной координаты, и функции  $T_{c,1}(t)$  и  $T_{c,2}(t)$  могут быть выражены гармоническими функциями:

$$T_{0,i}(r_i) = T_{0,i} = \text{const};$$

$$T_{c,i}(t) = \mathcal{A}_{c,i} \cos(\omega_{c,i} t + \varphi_{c,i}), \quad (23)$$

где  $\mathcal{A}_{c,i}$ ,  $\omega_{c,i}$ ,  $\varphi_{c,i}$  ( $i = 1, 2$ ) — амплитуда, частота и сдвиг фазы соответственно.

Тогда, вычисляя интеграл в выражении (19), получим следующую формулу для вычисления  $\bar{T}_{0,\gamma_n}$ :

$$\bar{T}_{0,\gamma_n} = \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i T_{0,i}}{\gamma_n a_i} \left[ R_i \left( A_{i,\gamma_n} J_1 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_i \right) + B_{i,\gamma_n} Y_0 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_i \right) \right) - R_{i-1} \left( A_{i,\gamma_n} J_1 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_{i-1} \right) + B_{i,\gamma_n} Y_0 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_{i-1} \right) \right) \right]. \quad (24)$$

Интеграл в выражении (21) также вычисляется аналитически, и в результате получим следующее выражение для  $S_{\gamma_n}(t)$ :

$$S_{\gamma_n}(t) = \alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) \frac{\mathcal{A}_{c,1}}{\omega_{c,1}^2 + \gamma_n^4} \times \\ \times \left[ \chi_{1,\gamma_n}(t) e^{\gamma_n^2 t} - \phi_{1,\gamma_n}(t) \right] + \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) \frac{\mathcal{A}_{c,2}}{\omega_{c,2}^2 + \gamma_n^4} \times \\ \times \left[ \chi_{2,\gamma_n}(t) e^{\gamma_n^2 t} - \phi_{2,\gamma_n}(t) \right], \quad (25)$$

где функции  $\chi_{i,\gamma_n}(t)$  и  $\phi_{i,\gamma_n}(t)$  имеют следующий вид:

$$\chi_{i,\gamma_n}(t) = \omega_{c,i} \sin(\omega_{c,i} t + \varphi_{c,i}) + \gamma_n^2 \cos(\omega_{c,i} t + \varphi_{c,i});$$

$$\phi_{i,\gamma_n}(t) = \gamma_n^2 \cos(\varphi_{c,i}) + \omega_{c,i} \sin(\varphi_{c,i}). \quad (26)$$

Тогда, согласно формуле (22), выражение для определения температуры в МС волокне, находящемся под нестационарным тепловым воздействием, изменяющимся по гармоническому закону (23), имеет вид:

$$T_i(r_i, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left( \bar{T}_{0,\gamma_n} e^{-\gamma_n^2 t} + \alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) \frac{\mathcal{A}_{c,1}}{\omega_{c,1}^2 + \gamma_n^4} \times \right. \\ \times \left[ \chi_{1,\gamma_n}(t) - \phi_{1,\gamma_n}(t) e^{-\gamma_n^2 t} \right] + \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) \times \\ \times \left. \frac{\mathcal{A}_{c,2}}{\omega_{c,2}^2 + \gamma_n^4} \left[ \chi_{2,\gamma_n}(t) - \phi_{2,\gamma_n}(t) e^{-\gamma_n^2 t} \right] \right) K_{i,\gamma_n}(r_i). \quad (27)$$

Функции  $T_i(r_i, t)$ , определяемые выражением (27), представляют собой аналитическое решение нестационарной задачи теплопроводности (2)–(6) в случае тепловых воздействий, меняющихся по гармоническому закону (23), и начальной температуре МС оболочки и кожуха, не меняющейся по радиальной координате.

Таким образом, для определения температуры в МС волокне необходимо: из уравнения (14) определить собственные числа  $\gamma_n$ ; для каждого  $\gamma_n$  найти ядро  $K_{i,\gamma_n}(r_i)$ , определив значения коэффициентов по формулам (13); вычислить изображение начального условия по формуле (24); воспользовавшись соотношением (27), вычислить температуру в МС оболочке или в кожухе в момент времени  $t$ .

### Компьютерное моделирование

Для реализации построенных математических моделей было разработано специализированное программное обеспечение *MicroFiberTermo*, с помощью которого было промоделировано влияние температуры внешней среды на МС волокно с пористостью 0 % (однородный кварц), 60 % ( $\eta = 0,6$ ) и 90 % ( $\eta = 0,9$ ) и геометрическими параметрами  $R_0 = 20$  мкм,  $R_1 = 120$  мкм,  $R_2 = 220$  мкм [8].

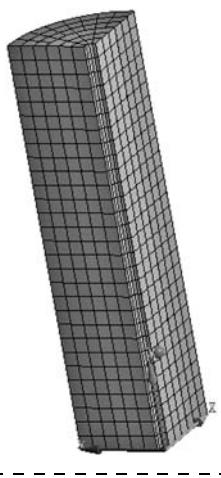


Рис. 4. Модель МС волокна в ANSYS

Fig. 4. Model of air-core PCF in ANSYS

При моделировании были приняты следующие физические и тепловые характеристики кварца:  $\rho = 2,2 \text{ г/см}^3$ , модуль упругости  $E = 72,4 \text{ ГПа}$ ,  $v = 0,17$ ,  $\lambda = 1,38 \text{ Вт/(м} \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $\alpha = 1 \cdot 10^{-4} \text{ Вт/(см}^2 \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $c = 740 \text{ Дж/(кг} \cdot ^\circ\text{C)}$ . Для волокон с различной пористостью физические параметры вычисляли по соответствующим формулам, тепловые параметры не изменялись [8, 13].

Физические и тепловые характеристики защитного кожуха из акрилата:  $\rho = 0,88 \text{ г/см}^3$ ,  $E = 0,5 \text{ ГПа}$ ,  $v = 0,37$ ,  $\lambda = 0,18 \text{ Вт/(м} \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $\alpha = 2,3 \times 10^{-4} \text{ Вт/(см}^2 \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $c = 750 \text{ Дж/(кг} \cdot ^\circ\text{C)}$  [8, 13].

На первом этапе была проведена проверка правильности программной и алгоритмической реализации полученного в работе аналитического решения рассматриваемой задачи. Для этого была построена модель в универсальной программе конечно-элементного моделирования ANSYS (рис. 4).

На рис. 5 показано изменение температуры на границе МС оболочки и кожуха ( $r = R_1$ ) для МС волокон с различной пористостью — 0 % ( $\eta = 0$ ), 60 % ( $\eta = 0,6$ ) и 90 % ( $\eta = 0,9$ ).

При моделировании полагалось, что начальная температура волокна была равна  $0^\circ\text{C}$ , кожух был теплоизолирован, температура внутри воздушного сердечника принималась равной  $20^\circ\text{C}$ .

Из рис. 5 видно, что различие значений температуры, получаемых с помощью разработанного программного обеспечения *MicroFiberTermo* и ANSYS, составляет не более 5 %, что подтверждает корректность алгоритмической реализации построенного аналитического решения.

На втором этапе было проведено компьютерное моделирование с помощью *MicroFiberTermo* влияния постоянных и изменяющихся по гармоническому закону тепловых воздействий на МС волокна с различной пористостью: 0 % ( $\eta = 0$ ), 60 % ( $\eta = 0,6$ ) и 90 % ( $\eta = 0,9$ ).

На рис. 6 показан график изменения температуры в точке  $r = R_1$  в случае отсутствия теплообмена с воздушным сердечником, полученный с помощью *MicroFiberTermo*. Температуру среды вокруг волокна принимали равной  $40^\circ\text{C}$ , начальная температура волокна была равна  $0^\circ\text{C}$ . На рис. 7 показано изменение температуры по радиальному координате в момент времени  $t = 0,06 \text{ с}$  на границе МС оболочки и кожуха ( $r = R_1$ ).

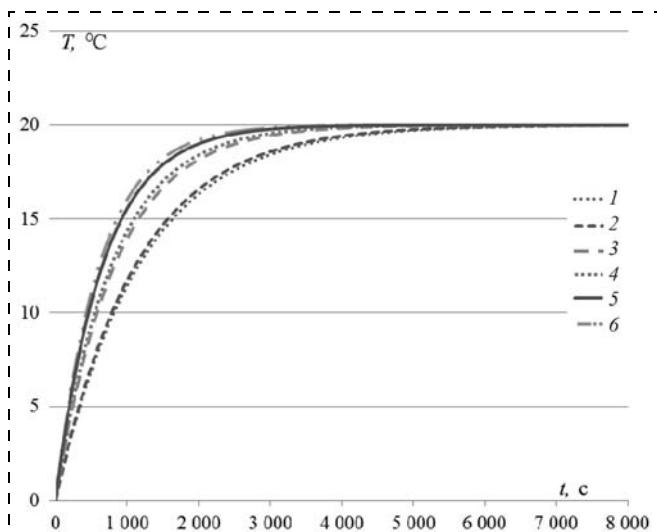


Рис. 5. Изменение температуры на границе МС оболочки и кожуха: 1, 3, 5 — решение ANSYS при  $\eta = 0, 0,6$  и  $0,9$  соответственно; 2, 4, 6 — решение *MicroFiberTermo* при  $\eta = 0, 0,6$  и  $0,9$

Fig. 5. Temperature change on the border of MS cladding and jacket: 1, 3, 5 — ANSYS solution at  $\eta = 0, 0,6$  and  $0,9$ , accordingly; 2, 4, 6 — *MicroFiberTermo* solution at  $\eta = 0, 0,6$  and  $0,9$

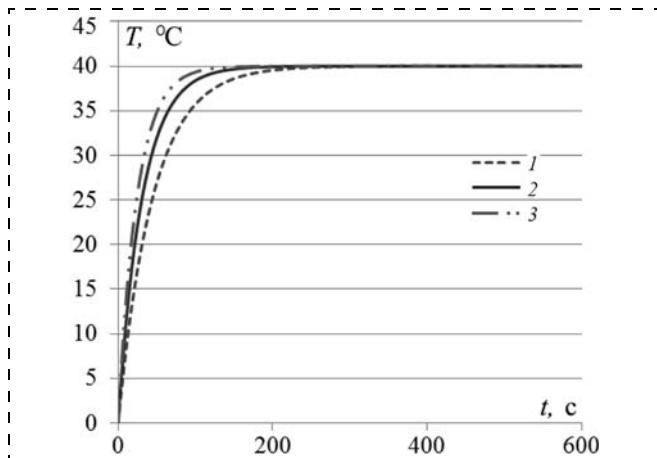


Рис. 6. Изменение температуры в точке  $r = R_1$ : 1 —  $\eta = 0$ ; 2 —  $\eta = 0,6$ ; 3 —  $\eta = 0,9$

Fig. 6. Temperature change at  $r = R_1$ : 1 —  $\eta = 0$ ; 2 —  $\eta = 0,6$ ; 3 —  $\eta = 0,9$

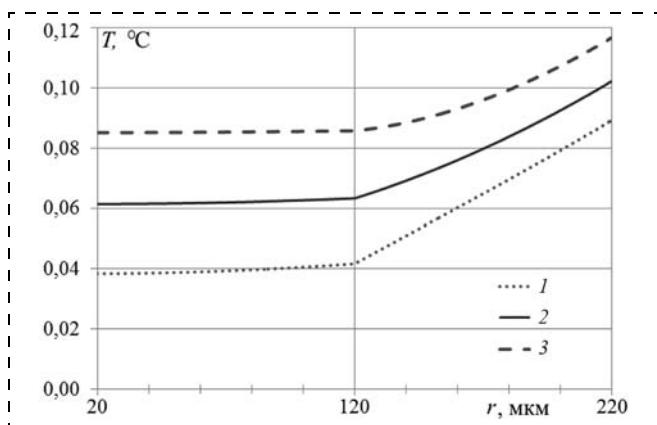
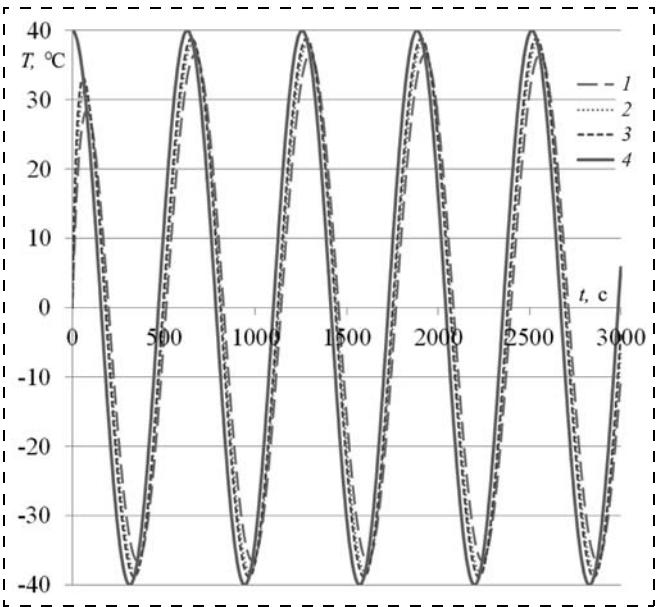


Рис. 7. Изменение температуры по радиусу в момент времени  $t = 0, 06 \text{ с}$ : 1 —  $\eta = 0$ ; 2 —  $\eta = 0,6$ ; 3 —  $\eta = 0,9$

Fig. 7. Temperature change by radius at time:  $t = 0,06 \text{ s}$ : 1 —  $\eta = 0$ ; 2 —  $\eta = 0,6$ ; 3 —  $\eta = 0,9$



**Рис. 8. Изменение температуры при  $r = R_1$  и гармоническом изменении  $T_{c,2}$ :** 1 —  $\eta = 0$ ; 2 —  $\eta = 0,6$ ; 3 —  $\eta = 0,9$ ; 4 —  $T_{c,2}$

Fig. 8. Temperature change at  $r = R_1$  and harmonic  $T_{c,2}$ : 1 —  $\eta = 0$ ; 2 —  $\eta = 0,6$ ; 3 —  $\eta = 0,9$ ; 4 —  $T_{c,2}$

Как видно из рис. 5 и рис. 6, чем больше пористость волокна, тем быстрее температура в точке  $r = R_1$  становится равной температуре окружающей среды. Другими словами, чем больше пористость волокна, тем быстрее выравнивается температура в нем.

Из рис. 7 следует, что изменение температуры в МС оболочке носит практически линейный характер, и чем больше пористость, тем меньше угол наклона этой прямой к оси  $r$ . Так, если тангенс угла наклона при  $\eta = 0$  составил  $3,28 \cdot 10^{-5}$ , то при  $\eta = 0,9$  тангенс наклона равен  $6,11 \cdot 10^{-6}$ . Перепад температуры в волокне  $\eta = 0$  и  $\eta = 0,9$  составил 0,0507 и  $0,0315^{\circ}\text{C}$  соответственно. То есть, чем больше пористость МС оболочки, тем меньше перепад температур в ней и, следовательно, тем меньше ожидаемые деформации, вызываемые температурными градиентами.

На рис. 8 показан график изменения температуры в точке  $r = R_1$  при гармоническом законе изменения температуры среды  $T_{c,2}$  вокруг кожуха. Амплитуда  $A_{c,2}$  принималась равной  $40^{\circ}\text{C}$ , частота  $\omega_{c,2} = 0,01$  рад/с, сдвиг фазы  $\phi_{c,2} = 0$ . Теплообмен с воздушным сердечником отсутствовал. Начальная температура волокна равна  $0^{\circ}\text{C}$ .

Как видно из рис. 8, при гармонически изменяющейся температуре  $T_{c,2}$  график температуры для волокна с  $\eta = 0,9$  в установившемся режиме практически повторяет график  $T_{c,2}$ .

Максимальная температура  $T_{c,2}$  достигается первый раз в момент времени  $t = 317$  с, тогда как максимальная температура в волокнах с  $\eta = 0$  и  $\eta = 0,9$  первый раз достигается при  $t = 353$  с и  $t = 338$  с со-

ответственно. Разница максимальных температуры  $T_{c,2}$  и температуры в волокне с  $\eta = 0,9$  составляет  $1,14^{\circ}\text{C}$ . Разница максимальных температуры  $T_{c,2}$  и температуры в волокне с  $\eta = 0$  составляет  $3,49^{\circ}\text{C}$ . Таким образом, из рис. 8 следует, что чем больше пористость волокна, тем температура быстрее реагирует на изменение температуры окружающей среды. Следовательно, температурные градиенты в таком волокне будут меньше, чем в обычном волокне, и, соответственно, следует ожидать меньших температурных деформаций, вызываемых такими градиентами.

### Заключение

В работе построено аналитическое решение плоской нестационарной задачи теплопроводности для нового типа оптического волокна — микроструктурированного волокна с воздушным сердечником, приобретающего все большую значимость для создания волоконно-оптических гироскопов. Аналитическое решение было получено с помощью метода интегральных преобразований, оно учитывает влияние на волокно нестационарного радиального теплового воздействия, изменяющегося по произвольному закону.

Для частного случая, когда тепловое воздействие носит гармонический характер, получено аналитическое решение, особенностью которого является практически полное исключение необходимости использования численных методов при моделировании.

Количественно показано, что чем больше пористость волокна, тем его температура быстрее реагирует на изменение температуры окружающей среды. Температурные градиенты в таком волокне будут меньше, чем в обычном волокне, и, соответственно, будут меньше ожидаемые вызываемые такими градиентами температурные деформации, которые являются одной из главных причин температурного дрейфа в волоконно-оптических гироскопах.

### Список литературы

1. Джашитов В. Э., Панкратов В. М., Голиков А. В. Математическое моделирование тепловых процессов в углеродных нанотрубках и фуллеренах // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 11. С. 3—9.
2. Желтиков А. М. Микроструктурированные световоды для нового поколения волоконно-оптических источников и преобразователей световых импульсов // Успехи физических наук. 2007. Т. 177, № 7. С. 737—762.
3. Terrel M. A., Digonnet M. J. F., Fan S. Resonant fiber optic gyroscope using an air-core fiber // Journal of lightwave technology. 2012. Vol. 30. N. 7. P. 931—937.
4. Ильин Н. А., Мишина Е. Д., Никонорова Т. В., Шерстюк Н. Э. Оптические свойства фотонно-кристаллических структур на основе монокристаллического GaAs // Нано- и микросистемная техника. 2011. № 3. С. 17—20.
5. Ramsay R. Photonic-crystal fiber characteristics benefit numerous applications. URL: <http://spie.org/x31636.xml>

6. Pinto A., Lopez-Amo M. Photonic Crystal Fibers for Sensing Applications // Journal of Sensors. 2012. Article ID 598178, 21 p., doi: 10.1155/2012/598178
7. Коркишко Ю. Н., Федоров В. А., Прилуцкий В. Е., Пономарев В. Г., Марчук В. Г., Морев И. В., Кострицкий С. М., Падерин Е. М., Несенюк Л. П., Буравлев А. С., Лисин Л. Г. Волоконно-оптический гироскоп навигационного класса точности // Гироскопия и навигация. 2008. № 1. С. 71–81.
8. Dangui V., Kim H. K., Digonnet M. J. F., Kino G. S. Phase sensitivity to temperature of the fundamental mode in air-guiding photonicbandgap fibers // Optic Express. 2005. Vol. 13, N. 18. P. 6669–6684.
9. Christensen R. M. Mechanics of cellular and other low-density materials // Int. Journ. Sol. Struct. 2000. Vol. 37. N. 1–2. P. 93–104.
10. Паркус Г. Неустановившиеся температурные напряжения. М.: Физматгиз, 1963. 252 с.
11. Кошляков Н. С., Глинэр Э. Б., Смирнов М. М. Уравнения в частных производных математической физики: учеб. пособие. М.: Высшая школа, 1970. 712 с.
12. Туголуков Е. Н. Решение задач теплопроводности методом конечных интегральных преобразований: учеб. пособие. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та. 2005. 116 с.
13. Materials Data Book. Cambridge University Engineering Department. 2003. URL: <http://www-mdp.eng.cam.ac.uk/web/library/enginfo/cueddatabooks/materials.pdf>

**M. A. Barulina**, Ph. D., Senior Researcher, **V. M. Pankratov**, D. Sc., Chief of Laboratory  
Precision Mechanics and Control Institute, RAS, Saratov, Russia  
E-mail: marina@barulina.ru, iptmuran@san.ru

## Analytical Solution for a Plane Nonstationary Heat Conduction Problem for the Air-core Photonic Band-gap Fibers

The authors present an analytical solution for a plane nonstationary problem of heat conduction for a new type of optical fibers — microstructured (photonic-crystal) fibers with an air core, which is becoming increasingly popular for development of the fiber optic gyroscopes. The analytical solution was obtained by using the method of the integral transformations, and it takes into account the nonstationary radial thermal influence, changing according to an arbitrary law. For the particular case, in which the thermal influence varies by harmonic law, the authors obtained a solution, which allows them to avoid almost completely the use of the numerical methods for computer modeling.

**Keywords:** photonic bandgap fibers, microstructured optical fibers, fiber optic gyroscope, thermal influence, nonstationary radial thermal influence

### Introduction

A number of optical fibers with the unique properties necessary for creation of optical devices, including, fiber-optical gyroscopes (VOG) [1–6] was developed. Photonic-crystal fibers (PCF) or microstructured (MS) fibers are a new type of optical fibers, popular for development of the fiber laser systems and nonlinear-optical devices for a wide range of scientific and technological objectives [2–5]. Light guides of this class are nano- or microstructures made of a fused quartz or another material with a periodic or aperiodic system of cylinder air apertures arranged along the fiber axis (fig. 1) [2, 3]. The unique properties of PCFs with a hollow core (fig. 1, c, d) determined their use for the fiber-optical gyroscopes [3, 5, 6].

Nevertheless, certain questions concerning VOG applications of the air-core PCFs have not been sufficiently studied yet. This refers to the non-stationary temperature influences on PCFs, whereas such influences can cause deformation of the fibers and change their optical characteristics.

The aim of the work is construction of an analytical solution to the plane problem of heat conduction for the photonic-crystal fibers with an air core in the conditions of a radial thermal impact on it.

An advantage of the analytical solution, in contrast to finite element modeling, is that for definition of a field of temperature at a certain moment it is not necessary to calculate the fields of temperatures at the pre-

vious moments of time. The results of calculations by means of the analytical solution do not depend on a step of calculation, splitting of a model into finite elements, etc. Accordingly, this essentially decreases the time of modeling and requirements to hardware and software.

For achievement of the set aim the following tasks were set and solved:

- By means of the method of integral transformations the plane nonstationary problem of heat conduction of PCF with an air core subjected to a non-stationary thermal influence was constructed and analytically solved. For a particular case, when the thermal influence varies by harmonic law, a solution was obtained, a specific feature of which is a complete rejection of the numerical methods for modeling of the thermal influence on the PCF.
- Original software that implements the obtained solution was developed; adequacy of the analytical solution was verified and the results of the analytical solution were compared also in the multipurpose finite element program ANSYS.

### Statement of a plane nonstationary problem of heat conduction for PCFs

For construction of a mathematical model we will consider PCF as a long hollow two-layer cylinder, the external layer of which is subjected to non-stationary temperature disturbances (fig. 2). Such idealization is possible, because there is a quadrupole way of winding of

a fiber, within which the points of the fiber, equidistant from the centre, are in physically equal conditions [7].

The inner layer is a heterogeneous cylinder  $I$ , representing a microstructured cladding (MS cladding). MS cladding looks like a honeycomb and its physical characteristics depend [8, 9] on the number, arrangement and kind of the air apertures (fig. 3). For construction of the mathematical model it was assumed, that the MS cladding represents a cell structure, the cells of which look like hexahedrons. Then, according to [8, 9], the cladding can be considered as a continuous anisotropic body, the density of which is defined under the following formula [9]

$$\rho = (1 - \eta)\rho_0, \quad (1)$$

where  $\rho_0$  — quartz density;  $\rho$  and  $\eta$  — density and porosity of the MS cladding.

Porosity of cladding  $\eta$  should be less than 1. Value  $\eta = 0$  means absence of apertures in it. The external layer is a homogeneous cylinder representing the fiber's protective jacket from acrylate.

Since the cylinders are long and thermal influence on the fiber is only a time function, the problem to be solved will be axisymmetric, and the distribution of temperature inside the cylinders will be considered as the functions of the radial coordinate  $r$  and time  $t$ . Let us designate the distribution of temperature in the internal and external cylinders as functions  $T_1 = T_1(r, t)$  and  $T_2 = T_2(r, t)$ . Let us also assume, that at the initial moment of time the distribution of temperatures in the cylinder was determined by functions  $T_{0,i} = T_{0,i}(r)$ ,  $i = 1, 2$ . The temperature of the environment inside the hollow aperture of the first cylinder and around the external surface of the second cylinder we will assume as equal to  $T_{c,1}(t)$  and  $T_{c,2}(t)$ . The radial coordinate  $r$  for the first cylinder changes within the limits of  $R_0 \leq r \leq R_1$ ; and for the second cylinder —  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

The equations defining the nonstationary problem of heat conduction for considered system [10] will have the following appearance:

$$\frac{\partial T_i(r, t)}{\partial t} = a_i^2 \left( \frac{\partial^2 T_i(r, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_i(r, t)}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2; \quad (2)$$

$$T_i(r, 0) = T_{0,i}(r); \quad (3)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_0} - \alpha_1(T_1(R_0, t) - T_{c,1}(t)) = 0; \quad (4)$$

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_2} + \alpha_2(T_2(R_2, t) - T_{c,2}(t)) = 0; \quad (5)$$

$$T_1(R_1, t) = T_2(R_1, t);$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_1} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_1}, \quad (6)$$

where  $\lambda_i$ ,  $a_i^2 = \lambda_i/c_i\rho_i$ ,  $\alpha_i$  — coefficients of heat conductivity, thermal diffusivity and heat transfer;  $c_i$  — the specific heat;  $\rho_i$  — density;  $i = 1, 2$  — cylinder number.

Expressions (3) represent the initial conditions for the considered problem. Heat exchange with the environment through the internal and external surfaces is defined by expressions (4) and (5). Expressions (6) describe compatibility conditions.

### Analytical solution

We will get the analytical solution to the non-stationary problem of heat conduction (2)–(6) with the help of integral transformations [11]. We should point out, that an attempt to get an analytical solution for the problem was made in [12], but the environment temperatures  $T_{c,1}$  and  $T_{c,2}$  were thought to be constants.

We will use an integral transformation [11] to exclude coordinate  $r$ , along which the properties of the considered cylinder vary stepwise at  $r = R_1$  ( $\gamma$ -parameter):

$$\bar{T}_\gamma(t) = \frac{\lambda_1}{a_1^2} \int_{R_0}^{R_1} r_1 T_1(r_1, t) K_{1,\gamma}(r_1) dr_1 +$$

$$+ \frac{\lambda_2}{a_2^2} \int_{R_1}^{R_2} r_2 T_2(r_2, t) K_{2,\gamma}(r_2) dr_2,$$

or in a brief form:

$$\bar{T}_\gamma(t) = \sum_{i=1, 2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i T_i(r_i, t) K_{i,\gamma}(r_i) dr_i =$$

$$= \bar{T}_{1,\gamma}(t) + \bar{T}_{2,\gamma}(t), \quad (7)$$

$$R_{i-1} \leq r_i \leq R_i, \quad i = 1, 2.$$

Kernel  $K_{i,\gamma}(r_i)$  of the integral transformation (7) is a solution which is determined up to a constant factor, of Sturm — Liouville problem with the corresponding homogeneous boundary conditions:

$$\frac{d^2 K_{i,\gamma}(r_i)}{dr_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{dK_{i,\gamma}(r_i)}{dr_i} + \frac{\gamma^2}{a_i^2} K_{i,\gamma}(r_i) = 0,$$

$$R_{i-1} \leq r_i \leq R_i, \quad i = 1, 2; \quad (8)$$

$$\text{at } r_1 = R_0 \quad \lambda_1 \frac{dK_{1,\gamma}(r_1)}{dr_1} - \alpha_1 K_{1,\gamma}(r_1) = 0; \quad (9)$$

$$\text{at } r_2 = R_2 \quad \lambda_2 \frac{dK_{2,\gamma}(r_2)}{dr_2} + \alpha_2 K_{2,\gamma}(r_2) = 0; \quad (10)$$

$$\text{at } r_1 = r_2 = R_1 \quad K_{1,\gamma}(r_1) = K_{2,\gamma}(r_2);$$

$$\lambda_1 \frac{dK_{1,\gamma}(r_1)}{dr_1} = \lambda_2 \frac{dK_{2,\gamma}(r_2)}{dr_2}. \quad (11)$$

Solution of the equation (8) will be the following expression:

$$K_{i,\gamma_n}(r_i) = A_{i,\gamma_n} J_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right) + B_{i,\gamma_n} Y_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right), \quad (12)$$

where  $J_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right)$  and  $Y_0\left(\frac{\gamma_n}{a_i} r_i\right)$  — functions of Bessel and Neumann of the first kind of a zero order;  $\gamma_n$  — real

root of the characteristic equation of Sturm — Liouville problem.

Constants  $A_{2,\gamma}$ ,  $B_{1,\gamma}$ ,  $B_{2,\gamma}$  are deduced from the boundary conditions (9)–(12). Constant  $A_{1,\gamma}$  is found from the kernel  $K_{i,\gamma}(r_i)$  normalization condition:

$$\sum_{m=1,2} \frac{\lambda_m}{a_m^2} \int_{R_{m-1}}^{R_m} r_m K_{m,\gamma}^2(r_m) dr_m = 1.$$

As a result the expressions for  $A_{i,\gamma}$ ,  $B_{i,\gamma}$  acquire the following form:

$$\begin{aligned} A_{1,\gamma} &= D_\gamma f_{1,\gamma}(R_0) L_{7,\gamma}; \quad B_{1,\gamma} = -\frac{g_{1,\gamma}(R_0)}{f_{1,\gamma}(R_0)} A_{1,\gamma}; \\ A_{2,\gamma} &= D_\gamma f_{2,\gamma}(R_2) L_{1,\gamma}; \quad B_{2,\gamma} = -\frac{g_{2,\gamma}(R_2)}{f_{2,\gamma}(R_2)} A_{2,\gamma}, \end{aligned} \quad (13)$$

where

$$\begin{aligned} D_\gamma &= \frac{\sqrt{2}a_1 a_2}{\sqrt{Z_{1,\gamma} a_2^2 L_{7,\gamma} + Z_{2,\gamma} a_1^2 L_{1,\gamma}}}; \\ Z_{1,\gamma} &= \lambda_1 [R_1^2(L_{1,\gamma}^2 + L_{2,\gamma}^2) - R_0^2(L_{3,\gamma}^2 + L_{4,\gamma}^2)]; \\ Z_{2,\gamma} &= \lambda_2 [R_2^2(L_{5,\gamma}^2 + L_{6,\gamma}^2) - R_1^2(L_{7,\gamma}^2 + L_{8,\gamma}^2)]; \\ L_{1,\gamma} &= f_{1,\gamma}(R_0) J_0\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_0\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right); \\ L_{2,\gamma} &= f_{1,\gamma}(R_0) J_1\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_1\left(\frac{\gamma R_1}{a_1}\right); \\ L_{3,\gamma} &= f_{1,\gamma}(R_0) J_0\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_0\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right); \\ L_{4,\gamma} &= f_{1,\gamma}(R_0) J_1\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right) - g_{1,\gamma}(R_0) Y_1\left(\frac{\gamma R_0}{a_1}\right); \\ L_{5,\gamma} &= f_{2,\gamma}(R_2) J_0\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_0\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right); \\ L_{6,\gamma} &= f_{2,\gamma}(R_2) J_1\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_1\left(\frac{\gamma R_2}{a_2}\right); \\ L_{7,\gamma} &= f_{2,\gamma}(R_2) J_0\left(\frac{\gamma_n R_1}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_0\left(\frac{\gamma_n R_1}{a_2}\right); \\ L_{8,\gamma} &= f_{2,\gamma}(R_2) J_1\left(\frac{\gamma_n R_1}{a_2}\right) - g_{2,\gamma}(R_2) Y_1\left(\frac{\gamma_n R_1}{a_2}\right); \\ g_{i,\gamma}(r) &= \alpha_i J_0\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right) + (-1)^{i+1} \frac{\gamma \lambda_i}{a_i} J_1\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right); \\ f_{i,\gamma}(r) &= \alpha_i Y_0\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right) + (-1)^{i+1} \frac{\gamma \lambda_i}{a_i} Y_1\left(\frac{\gamma r}{a_i}\right). \end{aligned}$$

The characteristic equation for definition of  $\gamma_n$  looks like:

$$\frac{\lambda_1}{\alpha_1} L_{2,\gamma} L_{7,\gamma} - \frac{\lambda_2}{\alpha_2} L_{1,\gamma} L_{8,\gamma} = 0. \quad (14)$$

Applying of the integral transformation (7) to the equation (2), we will get:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial t} K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i - \\ &- \sum_{i=1,2} \lambda_i \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \left( \frac{\partial^2 T_i(r_i, t)}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial r_i} \right) K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i = \\ &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

The first sum in expression (15) is the image of a partial time derivative:

$$\frac{d\bar{T}_{\gamma_n}(t)}{dt} = \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial t} K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i. \quad (16)$$

Taking integrals in the second sum of expression (15) in parts 2 times with account of compatibility (6) and (11), and boundary conditions (4), (5), (9), (10), we will get the second sum in the following form:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1,2} \lambda_i \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i \left( \frac{\partial^2 T_i(r_i, t)}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial T_i(r_i, t)}{\partial r_i} \right) K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i = \\ &= \alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) T_{c,1}(t) + \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) T_{c,2}(t) - \\ &- \gamma_n^2 \bar{T}_{\gamma_n}(t). \end{aligned} \quad (17)$$

Thus, the equation (2) with entry conditions (3)–(6) represented in images will look like:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{T}_{\gamma_n}(t)}{dt} + \gamma_n^2 \bar{T}_{\gamma_n}(t) &= \alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) T_{c,1}(t) + \\ &+ \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) T_{c,2}(t); \end{aligned} \quad (18)$$

$$\bar{T}_{\gamma_n}(0) = \bar{T}_{0,\gamma_n},$$

where  $\bar{T}_{0,\gamma_n}$  — image of the entry condition (3);

$$\bar{T}_{0,\gamma_n} = \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i}{a_i^2} \int_{R_{i-1}}^{R_i} r_i T_{0,i}(r_i) K_{i,\gamma_n}(r_i) dr_i. \quad (19)$$

Solution of the system (18) will be the following function:

$$\bar{T}_{\gamma_n}(t) = e^{-\gamma_n^2 t} (C_{0,\gamma_n} + S_{\gamma_n}(t)), \quad (20)$$

where

$$\begin{aligned} S_{\gamma_n}(t) &= \int_0^t (\alpha_1 R_0 K_{1,\gamma_n}(R_0) T_{c,1}(t) + \\ &+ \alpha_2 R_2 K_{2,\gamma_n}(R_2) T_{c,2}(t)) e^{\gamma_n^2 t} dt; \end{aligned} \quad (21)$$

$$C_{0,\gamma_n}(t) = \bar{T}_{0,\gamma_n}.$$

Considering normalization of the kernel, we will find the inverse transformation in accordance with the following formula

$$T_i(r_i, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{T}_{\gamma_n}(t) K_{i, \gamma_n}(r_i). \quad (22)$$

**Let us consider a particular case,** when the initial temperature of the cylinders is constant and does not depend on the radial coordinate and functions  $T_{c,1}(t)$  and  $T_{c,2}(t)$  can be expressed by the harmonic functions:

$$\begin{aligned} T_0(r_i) &= T_{0,i} = \text{const}; \\ T_{c,i}(t) &= \mathcal{A}_{c,i} \cos(\omega_{c,i} t + \varphi_{c,i}), \end{aligned} \quad (23)$$

where  $\mathcal{A}_{c,i}$ ,  $\omega_{c,i}$ ,  $\varphi_{c,i}$  ( $i = 1, 2$ ) — amplitude, frequency and phase shift.

Then, by calculation of the integral in expression (19) we will get the formula for calculation of  $\bar{T}_{0, \gamma_n}$ :

$$\begin{aligned} \bar{T}_{0, \gamma_n} = & \sum_{i=1,2} \frac{\lambda_i T_{0,i}}{\gamma_n a_i} \left[ R_i \left( A_{i, \gamma_n} J_1 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_i \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + B_{i, \gamma_n} Y_0 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_i \right) \right) - R_{i-1} \left( A_{i, \gamma_n} J_1 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_{i-1} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + B_{i, \gamma_n} Y_0 \left( \frac{\gamma_n}{a_i} R_{i-1} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

The integral in expression (21) is also calculated analytically, and, as a result, we get the following expression for  $S_{\gamma_n}(t)$ :

$$\begin{aligned} S_{\gamma_n}(t) = & \alpha_1 R_0 K_{1, \gamma_n}(R_0) \frac{\mathcal{A}_{c,1}}{\omega_{c,1}^2 + \gamma_n^4} \times \\ & \times \left[ \chi_{1, \gamma_n}(t) e^{\gamma_n^2 t} - \phi_{1, \gamma_n}(t) \right] + \alpha_2 R_2 K_{2, \gamma_n}(R_2) \frac{\mathcal{A}_{c,2}}{\omega_{c,2}^2 + \gamma_n^4} \times \\ & \times \left[ \chi_{2, \gamma_n}(t) e^{\gamma_n^2 t} - \phi_{2, \gamma_n}(t) \right], \end{aligned} \quad (25)$$

where functions  $\chi_{i, \gamma_n}(t)$  and  $\phi_{i, \gamma_n}(t)$  look like the following:

$$\begin{aligned} \chi_{i, \gamma_n}(t) &= \omega_{c,i} \sin(\omega_{c,i} t + \varphi_{c,i}) + \gamma_n^2 \cos(\omega_{c,i} t + \varphi_{c,i}); \\ \phi_{i, \gamma_n}(t) &= \gamma_n^2 \cos(\varphi_{c,i}) + \omega_{c,i} \sin(\varphi_{c,i}). \end{aligned} \quad (26)$$

Then, according to formula (22), the expression for determination of temperature in PCF subjected to non-stationary thermal influence, changing by the harmonic law (23), looks like:

$$\begin{aligned} T_i(r_i, t) = & \sum_{n=1}^{\infty} \left( \bar{T}_{0, \gamma_n} e^{-\gamma_n^2 t} + \alpha_1 R_0 K_{1, \gamma_n}(R_0) \frac{\mathcal{A}_{c,1}}{\omega_{c,1}^2 + \gamma_n^4} \times \right. \\ & \times \left[ \chi_{1, \gamma_n}(t) - \phi_{1, \gamma_n}(t) e^{-\gamma_n^2 t} \right] + \alpha_2 R_2 K_{2, \gamma_n}(R_2) \times \\ & \times \left. \frac{\mathcal{A}_{c,2}}{\omega_{c,2}^2 + \gamma_n^4} \left[ \chi_{2, \gamma_n}(t) - \phi_{2, \gamma_n}(t) e^{-\gamma_n^2 t} \right] \right) K_{i, \gamma_n}(r_i). \end{aligned} \quad (27)$$

Functions  $T_i(r_i, t)$ , determined by expression (27), represent an analytical solution for a non-stationary problem of heat conduction (2)–(6) in case of the thermal influences varying in accordance to the harmonic law (23), and initial temperature of PCF cladding and jacket not changing by the radial coordinate.

Thus, for determination of temperature in PCF it is necessary: to determine the eigenvalues  $\gamma_n$  of the equation (14); to find kernel  $K_{i, \gamma_n}$  for each  $\gamma_n$ , having defined coefficients according to formulas (13); to calculate the image of the initial condition according to formula (24); taking advantage of expression (27), to calculate temperature of any point of PCF cladding or jacket at a given time  $t$ .

## Computer modeling

For implementation of the mathematical models the original *MicroFiberTermo* software was developed, with the help of which the authors modeled the influence of the environment on PCF with porosity of 0 % (homogeneous quartz), 60 % ( $\eta = 0.6$ ) and 90 % ( $\eta = 0.9$ ) and geometrical parameters  $R_0 = 20 \mu\text{m}$ ,  $R_1 = 120 \mu\text{m}$ ,  $R_2 = 220 \mu\text{m}$  [8].

For the simulation the following physical and thermal characteristics of quarts were taken into account:  $\rho = 2.2 \text{ g/cm}^3$ ,  $E = 72.4 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.17$ ,  $\lambda = 1.38 \text{ W/(m} \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $\alpha = 1 \cdot 10^{-4} \text{ W/(cm}^2 \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $c = 740 \text{ J/(kg} \cdot ^\circ\text{C)}$ . For the fibers with various porosities the physical parameters were calculated by corresponding formulas, while the thermal parameters did not change [8, 13].

Physical and thermal characteristics of the protective acrylate jacket:  $\rho = 0.88 \text{ g/cm}^3$ ,  $E = 0.5 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.37$ ,  $\lambda = 0.18 \text{ W/(m} \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $\alpha = 2.3 \cdot 10^{-4} \text{ W/(cm}^2 \cdot ^\circ\text{C)}$ ,  $c = 750 \text{ J/(kg} \cdot ^\circ\text{C)}$  [8, 13].

At the first stage the correctness of the program and algorithmic realization of the obtained analytical solution of the considered problem was verified. For this purpose a model was constructed in ANSYS, a multi-purpose finite element program (fig. 4).

Fig. 5 demonstrates a temperature change on border of MS cladding and jacket ( $r = R_1$ ) for PCFs with various porosities — 0 % ( $\eta = 0$ ), 60 % ( $\eta = 0.6$ ) and 90 % ( $\eta = 0.9$ ).

For the simulation it was assumed, that the initial temperature of the fiber was equal to  $0^\circ\text{C}$ , the jacket was thermally insulated, and the temperature in the air core was equal to  $20^\circ\text{C}$ .

The fig. 5 shows that the difference in temperatures received by means of the developed *MicroFiberTermo* software and ANSYS was not more than 5 %, which confirmed the correctness of the algorithmic realization of the obtained analytical solution.

At the second stage by means of *MicroFiberTermo* a computer simulation was done of the constant and changing by the harmonic law thermal influences on

PCFs with various porosities: 0 % ( $\eta = 0$ ), 60 % ( $\eta = 0.6$ ) and 90 % ( $\eta = 0.9$ ).

Fig.6 presents a plot of the change of temperature in point  $r = R_1$  in case of absence of a heat exchange with the air core. The temperature of the environment around the fiber was assumed as equal to 40 °C, the initial temperature of the fiber was 0 °C. Fig. 7 change of temperature by a radial coordinate at the moment  $t = 0.06$  on the border of MS cladding and jacket ( $r = R_1$ ).

As one can see in fig. 5 and fig. 6, the higher is the porosity of the fiber, the sooner the temperature in point  $r = R_1$  becomes equal to the ambient temperature. In other words, the higher is the porosity of the fiber, the sooner the temperature in it is leveled out.

From fig. 7 it follows, that the temperature change in MS cladding has practically a linear character, and the higher is the porosity, the less is the angle of inclination of this straight line to axis  $r$ . Thus, if the tangent of the angle of inclination at  $\eta = 0$  is  $3.28 \cdot 10^{-5}$ , at  $\eta = 0.9$  it is equal to  $6.11 \cdot 10^{-6}$ . Temperature difference in the fiber  $\eta = 0$  and  $\eta = 0.9$  was 0.0507 °C and 0.0315 °C. That is, the higher was the porosity of MS cladding, the less was the difference of temperatures in it, and, hence, the less were the expected deformations caused by the temperature gradients.

Fig. 8 presents a plot of change of temperature in point  $r = R_1$  at the harmonic law of change of temperature of environment  $T_{c,2}$  around the jacket. Amplitude  $A_{c,2}$  was assumed as equal to 40 °C, frequency  $\omega_{c,2} = 0.01$  rad/s, phase shift  $\varphi_{c,2} = 0$ . Heat exchange with the air core was absent. The initial temperature of the fiber was equal to 0 °C.

As can be seen from fig. 8, the graph of temperature for the fiber with  $\eta = 0.9$  at a steady state is objectively identical to the graph of temperature  $T_{c,2}$ .

For the first time the maximal temperature  $T_{c,2}$  was reached at time  $t = 317$  s, whereas the maximal temperatures in the fibers with  $\eta = 0$  and  $\eta = 0.9$  for the first times were reached at  $t = 353$  s and  $t = 338$  s, accordingly. The difference between the maximal temperature  $T_{c,2}$  and temperature in the fiber with  $\eta = 0.9$  was 1.14 °C. The difference between the maximal temperature  $T_{c,2}$  and temperature in the fiber with  $\eta = 0$  was 3.49 °C. Thus, it follows, that the higher is the porosity of the fiber, the sooner the temperature reacts to a change of temperature of the environment. Hence, the temperature gradients in such a fiber will be less, than in a regular fiber, and smaller temperature deformations caused by the gradients should be expected.

## Conclusion

This work presents construction of an analytical solution for a plane non-stationary problem for a new optical fiber — air-core PCF, which acquires an increasing importance for development of the fiber-optical gyroscopes. The analytical solution was obtained by

means of integral transformations, and it takes into account the non-stationary radial thermal influence changing in accordance with the arbitrary law.

For a particular case, when the thermal influence conforms to harmonic law, an analytical solution was obtained, a specific feature of which was the almost complete exclusion of the need to use numerical methods during modeling.

It was quantitatively demonstrated, that the higher was the porosity of a fiber, the sooner its temperature reacted to the change of the ambient temperature. The temperature gradients in such a fiber were less, than in a regular fiber, and, accordingly, the temperature deformations caused by the gradients, one of the major reasons for a temperature drift in the fiber-optical gyroscopes, were less expected.

## References

1. Dzhashitov V. E., Pankratov V. M., Golikov A. V. Mathematical Modelling of Thermal Processes in Carbon Nanotubes and Fullerenes, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2014, no. 11, pp. 3–9.
2. Zheltikov A. M. Microstructure optical fibers for a new generation of fiber-optic sources and converters of light pulses, *Physics-Uspokhi*, 2007, vol. 50, no. 7, pp. 705–727.
3. Terrel M. A., Digonnet M. J. F., Fan S. Resonant fiber optic gyroscope using an air-core fiber, *Journal of lightwave technology*, 2012, vol. 30, no. 7, pp. 931–937.
4. Ilyin N. A., Nikonorova T. V., Sherstyuk N. E., Mishina E. D. Optical Properties of Photonic Crystal Structures Based on Single Crystalline GaAs, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2011, no. 3, pp. 17–20.
5. Ramsay R. Photonic-crystal fiber characteristics benefit numerous applications // URL: <http://spie.org/x31636.xml>
6. Pinto A., Lopez-Amo M. Photonic Crystal Fibers for Sensing Applications, *Journal of Sensors*, vol. 2012, Article ID 598178, 21 p., 2012. doi:10.1155/2012/598178
7. Korkishko Yu. N., Fedorov V. A., Prilutskii V. E., Ponamarev V. G., Marchuk V. G., Morev I. V., Kostritskii S. M., Paderin E. M., Nesenyuk L. P., Buravlev A. S., Lisin L. G. Navigation-grade interferometric fiber optical gyroscope, *Giroskopiya i navigatsiya*, 2008, no. 1, pp. 71–81.
8. Dangui V., Kim H. K., Digonnet M. J. F., Kino G. S. Phase sensitivity to temperature of the fundamental mode in air-guiding photonicbandgap fibers, *Optic Express*, 2005, vol. 13, no. 18, pp. 6669–6684.
9. Christensen R. M. Mechanics of cellular and other low-density materials, *Int. Journ. Sol. Struct.*, 2000, vol. 37, no. 1–2, pp. 93–104.
10. Parkus G. *Neustanovivshiesja temperaturnye naprjazhenija* (Unsteady thermal stresses). Moscow, Fizmatgiz, 1963. 252 p.
11. Koshljakov N. S., Gliner Je. B., Smirnov M. M. *Uravnenija v chastnyh proizvodnyh matematicheskoy fiziki: ucheb. posobie*, (Partial differential equations of mathematical physics. Textbook for Mechanics and mathematical faculties of universities), Moscow, Vysshaja shkola, 1970. 712 p.
12. Tugolukov E. N. *Reshenie zadach teploprovodnosti metodom konechnykh integralnykh preobrazovanii*: uchebnoe posobie. (Solution of heat conduction problems by the finite integral transformations: Textbook). Tambov: Izd-vo Tamb. gos. tekhn. un-ta, 2005, 116 p.
13. **Materials Data Book**, Cambridge University Engineering Department, 2003. URL: <http://www-mdp.eng.cam.ac.uk/web/library/enginfo/cuedatabooks/materials.pdf>

## ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ГИДРОСТАТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ НОВОГО 2—0—2-КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛА РЕЛАКСОРА-СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА

Поступила в редакцию 20.04.2016

*Впервые исследованы эффективные пьезоэлектрические свойства и гидростатический отклик композита со связностью 2—0—2. Композит содержит параллельно соединенные слои двух типов — кристалл 0,67Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—0,33PbTiO<sub>3</sub> и "включения сегнетокерамики типа PbTiO<sub>3</sub> — полиэтилен". Показана ключевая роль упругой анизотропии слоев, содержащих сегнетокерамику и полимер, в формировании высоких значений гидростатических пьезокоэффициентов  $d_h^* \sim 1 \text{ нКл}/\text{Н}$ ,  $e_h^* \sim 20 \text{ Кл}/\text{м}^2$ , квадрата параметра приема  $d_h^* g_h^* \sim 10^{-10} \text{ Па}^{-1}$  и других параметров 2—0—2-композита.*

**Ключевые слова:** кристалл релаксора-сегнетоэлектрика, сегнетокерамика, полиэтилен, микрогеометрия, пьезо-коэффициенты, гидростатический пьезоэлектрический отклик

### Введение

Кристаллы твердых растворов релаксоров-сегнетоэлектриков  $(1-x)\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$  (PMN—xPT) и  $(1-y)\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-y\text{PbTiO}_3$  (PZN—yPT) со структурой типа первовскита и с составами вблизи морфотропной фазовой границы представляют интерес как пьезоэлектрические компоненты современных композитов [1—4]. Формирование определенных доменных структур (*domain engineering*) [5] и поляризация кристаллов вдоль заданного кристаллографического направления (например, [001], [011] или [111] первовскитовой ячейки) открывают новые возможности управления физическими свойствами пьезоактивных композитов [3, 4]. Среди композитов на основе PMN—xPT или PZN—yPT, исследованных в последнее десятилетие, наиболее распространенными являются материалы со связностями 1—3 и 2—2 [1—4]. Несмотря на относительно простую микрогеометрию 2—2-композита до настоящего времени в литературе уделялось мало внимания вопросам, связанным с улучшением эффективных параметров этого материала. Тем не менее, недавно получен и исследован композит [6] типа 2—2 "сегнетокерамика (СК) типа PZT — гетерогенный полимер". Слои гетерогенного полимера содержат включения неорганического компонента (например, графита, кремния или феррита стронция), что приводит к улучшению некоторых параметров композита по сравнению с традиционным 2—2-композитом "СК — полимер". Например, при добавлении включений феррита стронция в полимерные слои достигаются более высокие значения коэффициента электромеханической связи (КЭС)  $k_t^*$ , соответствующего толщинной моде колебаний [6].

В настоящей работе мы рассматриваем параметры нового трехкомпонентного композита, в котором кристаллические слои, обладающие высокой

пьезоактивностью, взаимодействуют с гетерогенными слоями, содержащими изолированные СК включения. Цель статьи — проанализировать роль слоев "СК — полимер" в формировании пьезоэлектрических свойств и гидростатического отклика композита типа 2—2 на основе кристалла PMN—xPT.

### Структура нового композита и его эффективные параметры

Исследуемый композит представляет собой систему параллельно соединенных слоев, чередующихся регулярно вдоль оси  $OX_1$  (рис. 1). Слой первого типа представлен кристаллом релаксора-сегнетоэлектрика, главные кристаллографические оси которого  $X \parallel OX_1$ ,  $Y \parallel OX_2$ ,  $Z \parallel OX_3$ , а спонтанная поляризация  $P_s^{(1)} \parallel Z$ . Слой второго типа представляет собой систему "СК-включения — полимер" (см. вставку на рис. 1), а сфероидальная форма СК-включения в системе координат  $(X_1 X_2 X_3)$  задается одним из следующих уравнений:

$$(x_1/a_1)^2 + (x_2/a_1)^2 + (x_3/a_3)^2 = 1 \quad (1)$$

(для композита-1);

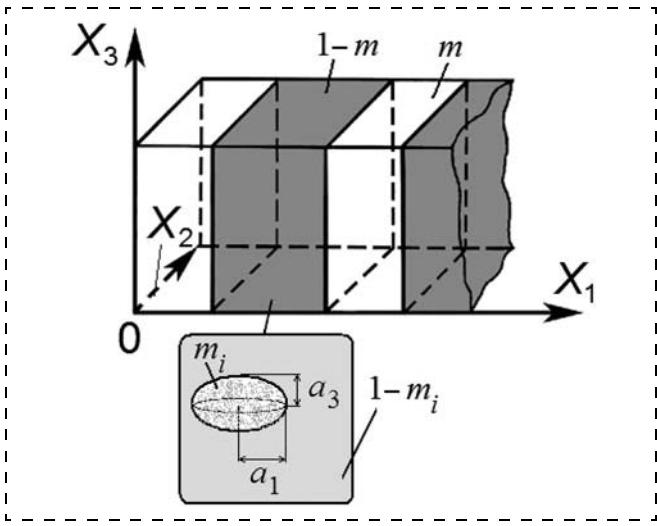
$$(x_1/a_3)^2 + (x_2/a_1)^2 + (x_3/a_1)^2 = 1 \quad (2)$$

(для композита-2);

$$(x_1/a_1)^2 + (x_2/a_3)^2 + (x_3/a_1)^2 = 1 \quad (3)$$

(для композита-3).

Предполагается, что значения  $a_i$  постоянны по всему композитному образцу и значительно меньше толщины его отдельного слоя. СК-включения распределены внутри полимерной среды так, что их центры симметрии находятся в вершинах прямоугольного параллелепипеда. Таким образом, композит, схематически представленный на рис. 1, описывается связностью 2—0—2. Ниже мы рассматриваем три модификации данного композита,



**Рис. 1. Схематическое изображение 2–0–2-композита "кристалл – СК – полимер".** ( $X_1X_2X_3$ ) – прямоугольная система координат, объемная концентрация слоев первого типа (кристалл) равна  $m$ , объемная концентрация слоев второго типа (СК – полимер, см. вставку) равна  $1 - m$ . Объемная концентрация сфероидальных СК-включений внутри полимерной среды в слое второго типа равна  $m_i$ , длины полуосей СК-включения равны  $a_1$  и  $a_3$

*Fig. 1. Schematic of 2–0–2-composite "crystal – FC – polymer". ( $X_1X_2X_3$ ) – a rectangular system of co-ordinates, volume concentration of layers of the first type (crystal) is equal to  $m$ , volume concentration of the layers of the second type (FC – polymer, inclusion) is equal to  $1 - m$ . Volume concentration of the spheroidal FC inclusions inside the polymeric environment in the layer of the second type is equal to  $m_i$ , the lengths of FC semiaxes of inclusion are equal to  $a_1$  and  $a_3$*

СК-включения в котором ориентированы согласно (1)–(3).

Для определения эффективных электромеханических свойств 2–0–2-композита мы используем матричный метод (структура типа 2–2) и метод эффективного поля (слои типа 0–3) [4]. Эффективные электромеханические свойства композита являются функциями  $X^*(m, m_i, \rho_i)$ , где  $\rho_i = a_1/a_3$  – отношение длин полуосей сфероидального СК-включения из (1)–(3). В качестве  $X^*$  выступают пьезомодули  $d_{ij}^*$ , упругие податливости  $s_{ab}^{*E}$  при электрическом поле  $E = \text{const}$  или диэлектрические проницаемости  $\epsilon_{pp}^{*\sigma}$  механически свободного образца.

Основываясь на знании эффективных свойств  $X^*(m, m_i, \rho_i)$  композита, мы исследуем его гидростатические пьезоэффициенты

$$d_h^* = d_{33}^* + d_{32}^* + d_{31}^*, \quad g_h^* = g_{33}^* + g_{32}^* + g_{31}^* \\ \text{и } e_h^* = e_{33}^* + e_{32}^* + e_{31}^*, \quad (4)$$

квадрат параметра приема

$$(Q_h^*)^2 = d_h^* g_h^* \quad (5)$$

и КЭС

$$k_h^* = d_h^* / (s_h^{*E} \epsilon_{33}^{*\sigma})^{1/2}, \quad (6)$$

где  $s_h^{*E} = s_{11}^{*E} + s_{22}^{*E} + s_{33}^{*E} + 2(s_{12}^{*E} + s_{13}^{*E} + s_{23}^{*E})$  – гидростатическая упругая податливость при  $E = \text{const}$

$= \text{const}$ . Пьезоэффициенты  $d_h^*$ ,  $g_h^*$  и  $e_h^*$  из (4) характеризуют пьезоактивность и пьезочувствительность композита под действием гидростатического давления. При гидростатическом воздействии  $(Q_h^*)^2$  из (5) характеризует отношение "сигнал – шум", а  $k_h^*$  из (6) – эффективность преобразования механической энергии в электрическую, и наоборот. Напомним, что пьезоэффициенты из (4) связаны между собой в соответствии с формулами [4] пьезоэлектрической среды  $d_{ij}^* = \epsilon_{if}^{*\sigma} g_{fj}^*$  и  $d_{kn}^* = e_{kf}^* s_{fn}^{*E}$ .

Компонент, формирующий слой первого типа, представляет собой поляризованный вдоль направления [001] перовскитовой ячейки кристалл PMN–0,33PT [7] с пьезомодулями  $d_{3j}^{(1)} \sim 10^{-9}$  Кл/Н. Компонентами слоев второго типа являются СК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> [8] и полиэтилен [9]. Выбор последних связан с большим различием между их упругими податливостями, а также с относительно небольшими диэлектрическими проницаемостями СК  $\epsilon_{pp}^{(2),\sigma} / \epsilon_0 \sim 10^2$  [8]. Анализ свойств слоя второго типа в композите-1 (ориентация СК включений в нем показана на вставке рис. 1) показывает, что пьезомодули  $d_{3j}^{(m)}$  этого слоя при  $0 < m_i \leq 0,3$  и  $0,01 \leq \rho_i \leq 100$  удовлетворяют условию  $|d_{3j}^{(m)}| < 10$  пКл/Н [10]. Вследствие низкой пьезоактивности данного слоя по сравнению с пьезоактивностью слоя PMN–0,33PT в дальнейшем будем считать композит (рис. 1) состоящим из пьезоактивных слоев первого типа и пьезопассивных слоев второго типа.

### Пьезоэлектрические свойства и гидростатический отклик 2–0–2-композита

Максимумы большинства гидростатических параметров из формул (4)–(6) имеют более высокие значения в случае композита-1 (см. таблицу). Более высокие значения  $\max e_h^*$  достигаются для композита-2 по сравнению с другими модификациями. Достаточно низкие объемные концентрации  $m$ , соответствующие  $\max g_h^*$ ,  $\max[(Q_h^*)^2]$  и  $\max k_h^*$ , связаны с существенным влиянием диэлектрической проницаемости  $\epsilon_{33}^{*\sigma}$  на данные гидростатические параметры. При увеличении объемной концентрации  $m$  диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_{33}^{*\sigma}$  возрастает достаточно медленно по сравнению с пьезомодулями  $|d_{3j}^*|$  (рис. 2), влияющими на гидростатический отклик композита в широком концентрационном интервале. Умеренные объемные концентрации  $m$ , при которых наблюдается  $\max d_h^*$  (см. таблицу), объясняются различиями между концентрационными зависимостями  $d_{3j}^*$  (рис. 2) вследствие влияния границ раздела различий между упругими свойствами слоев. Достаточно высокие концентрации  $m$ , при которых достигается  $\max e_h^*$  (см. таблицу), указывают на важную роль упругих свойств слоев в формировании гидростатического

**Максимумы гидростатических пьезокоэффициентов  $d_h^*$  (в пКл / Н),  $g_h^*$  (в мВ · м / Н) и  $e_h^*$  (в Кл / м<sup>2</sup>), квадрата параметра приема ( $Q_h^*$ )<sup>2</sup> (в  $10^{-12}$  Па<sup>-12</sup>) и КЭС  $k_h^*$  2—0—2-композита "кристалл PMN—0,33РТ — СК модифицированного PbTiO<sub>3</sub> — полиэтилен" при  $\rho_i = 100$  и различных  $m_i$**

*Maxima of the hydrostatic piezoelectric coefficients  $d_h^*$  (in pC/N),  $g_h^*$  (in mV·m / N) and  $e_h^*$  (in C/m<sup>2</sup>), squared figure of merit ( $Q_h^*$ )<sup>2</sup> (in  $10^{-12}$  Pa<sup>-12</sup>) and ECF  $k_h^*$  of the 2—0—2-composite "crystal PMN—0.33PT — FC modified PbTiO<sub>3</sub> — polyethylene" at  $\rho_i = 100$  and different values of  $m_i$*

$m_i$	max $d_h^*$	max $g_h^*$	max $e_h^*$	max [ $(Q_h^*)^2$ ]	max $k_h^*$
<b>Композит-1 Composite-1</b>					
<i>Composite-1</i>					
0,05	986 (0,219)	1730 (0,005)	19,2 (0,937)	391 (0,022)	0,593 (0,038)
0,10	1030 (0,219)	1730 (0,005)	18,3 (0,914)	419 (0,023)	0,678 (0,048)
0,15	1050 (0,222)	1670 (0,006)	17,7 (0,907)	416 (0,025)	0,722 (0,058)
0,20	1050 (0,227)	1590 (0,006)	17,1 (0,905)	402 (0,027)	0,749 (0,068)
0,25	1040 (0,232)	1490 (0,007)	16,7 (0,906)	383 (0,029)	0,767 (0,077)
0,30	1040 (0,239)	1400 (0,007)	16,3 (0,911)	361 (0,031)	0,780 (0,087)
<b>Композит-2 Composite-2</b>					
<i>Composite-2</i>					
0,05	514 (0,375)	338 (0,017)	20,8 (0,954)	46,9 (0,060)	0,187 (0,074)
0,10	420 (0,453)	188 (0,030)	20,7 (0,953)	24,7 (0,098)	0,147 (0,124)
0,15	360 (0,511)	126 (0,043)	20,7 (0,952)	15,7 (0,134)	0,126 (0,175)
0,20	316 (0,559)	92,5 (0,057)	20,6 (0,950)	11,0 (0,167)	0,112 (0,229)
0,25	282 (0,601)	71,6 (0,071)	20,5 (0,949)	8,05 (0,199)	0,102 (0,286)
0,30	254 (0,641)	58,6 (0,084)	20,4 (0,948)	6,15 (0,228)	0,0948 (0,345)
<b>Композит-3 Composite-3</b>					
<i>Composite-3</i>					
0,05	468 (0,399)	295 (0,016)	19,2 (0,927)	32,8 (0,059)	0,229 (0,151)
0,10	374 (0,494)	148 (0,027)	18,3 (0,914)	14,9 (0,107)	0,216 (0,304)
0,15	317 (0,563)	92,7 (0,041)	17,7 (0,907)	8,78 (0,157)	0,212 (0,437)
0,20	276 (0,620)	64,6 (0,056)	17,1 (0,905)	5,85 (0,204)	0,210 (0,545)
0,25	246 (0,672)	47,9 (0,074)	16,7 (0,906)	4,17 (0,250)	0,208 (0,625)
0,30	222 (0,719)	37,2 (0,093)	16,3 (0,911)	3,10 (0,293)	0,206 (0,685)

**П р и м е ч а н и я.** 1. В скобках указана объемная концентрация  $m$ , при которой достигается максимум данного параметра композита.

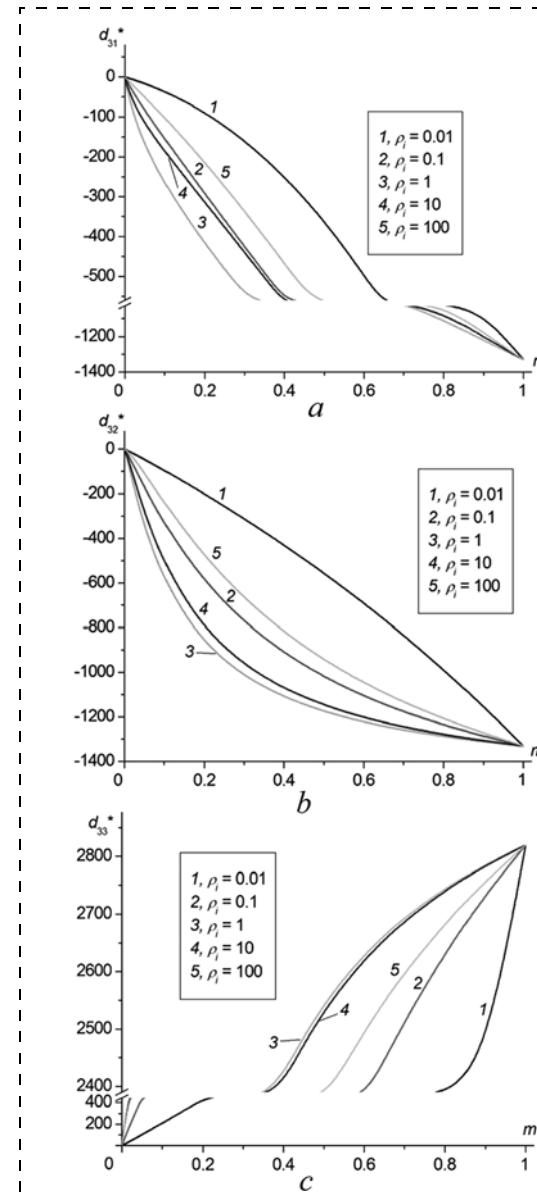
2. Как следует из экспериментальных данных [7], кристалл PMN—0,33РТ характеризуется гидростатическими параметрами  $d_h^* = 160$  пКл/Н,  $g_h^* = 2,20$  мВ · м/Н,  $e_h^* = 15,5$  Кл/м<sup>2</sup>,  $(Q_h^*)^2 = 0,352 \cdot 10^{-12}$  Па<sup>-1</sup>,  $k_h^* = 0,167$ .

*Notes. 1. In parentheses the volume fraction of  $m$  is indicated, at which the maximum of the given parameter of the composite is achieved.*

*2. As follows from the experimental data [7], crystal PMN—0.33PT is characterized by hydrostatic parameters  $d_h^* = 160$  pC/N,  $g_h^* = 2.20$  mV · m/N,  $e_h^* = 15.5$  C/m<sup>2</sup>,  $(Q_h^*)^2 = 0.352 \cdot 10^{-12}$  Pa<sup>-1</sup>,  $k_h^* = 0.167$ .*

отклика 2—0—2-композита. В этой области  $m$  ориентация и форма СК-включений играют пассивную роль, что в конечном итоге приводит к небольшим различиям между значениями  $\max e_h^*$  при различных  $m_i$  (см. таблицу). Заменительно, что такие небольшие различия наблюдаются в широком интервале  $0,01 \leq \rho_i \leq 100$ .

Обратим внимание также на немонотонное изменение пьезомодулей  $d_{3j}^*$  при  $m = \text{const}$  и изменении  $\rho_i$  (рис. 2). Изменение расположения кривых  $d_{3j}^*$  при  $\rho_i \approx 1$  связано с переходом от вытянутой формы СК-включений ( $\rho_i < 1$ ) к сплющенной форме ( $\rho_i > 1$ ). Такой переход приводит к существенным изменениям упругих свойств слоев второго типа. По нашему мнению, присутствие сильно



**Рис. 2. Пьезомодули  $d_{3j}^*$ , пКл/Н композита-1 при  $m_i = 0,1$**

*Fig. 2. Piezoelectric coefficients  $d_{3j}^*$ , pC/N of composite-1 at  $m_i = 0,1$*

сплющенных СК-включений ( $\rho_i \gg 1$ ), ориентированных согласно уравнению (1), способствует более эффективному повышению гидростатических параметров (4)—(6). Благодаря таким СК-включениям достигается значительная упругая анизотропия слоя второго типа, что влияет на пьезоэлектрический отклик и баланс пьезокоэффициентов композита из (4). Согласно нашим данным, при  $\rho_i = 100$  отношения модулей упругости слоя второго типа изменяются следующим образом:

$$s_{11}^{(m)} / s_{13}^{(m)} = -4,70, \quad s_{33}^{(m)} / s_{11}^{(m)} = 3,39 \quad (m_i = 0,05);$$

$$s_{11}^{(m)} / s_{13}^{(m)} = -4,52, \quad s_{33}^{(m)} / s_{11}^{(m)} = 5,69 \quad (m_i = 0,10);$$

$$s_{11}^{(m)} / s_{13}^{(m)} = -4,25, \quad s_{33}^{(m)} / s_{11}^{(m)} = 13,9 \quad (m_i = 0,30).$$

Эти отношения существенно влияют на пьезомодули  $d_{3j}^*$  и другие параметры.

Графики на рис. 3 показывают, что влияние СК-включений на гидростатические параметры композита-1 существенно уже при объемной концентрации СК-включений  $m_i = 0,10$ . При этом высокие значения  $\rho_i$  способствуют большим значениям гидростатических параметров  $d_h^*$  (рис. 3, a),  $(Q_h^*)^2$  (рис. 3, b) и  $k_h^*$  (рис. 3, d). Между этими параметрами наблюдается корреляция вследствие связей [4]  $(Q_h^*)^2 \sim (d_h^*)^2$  и  $k_h^* \sim d_h^*$ . Вместе с тем более высокие значения  $e_h^*$  в композите-1 достигаются при  $\rho_i \ll 1$  (рис. 3, c), а четкой корреляции между  $d_h^*$  и  $e_h^*$  не наблюдается из-за влияния упругих свойств анизотропных слоев двух типов. Кривая 9 на рис. 3, a показывает, что значение  $\max d_h^*$  родственного 2–2-композита в два с лишним раза меньше, чем  $\max d_h^*$  композита-1 при  $\rho_i = 100$  (см. кривую 8 на рис. 3, a).

Исследуемый композит-1 интересен и как материал с высокой пьезочувствительностью (рис. 4). При этом пьезокоэффициенты  $g_{33}^*$  и  $g_h^*$  уменьшаются с увеличением объемной концентрации кристалла  $m$  (т.е. слоев с высокой диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_{33}^{(1),\sigma}$ ), но проявляют заметную стабильность при увеличении объемной концентрации СК  $m_i$ . При  $\rho_i \gg 1$  влияние СК-включений на диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_{33}^{(1),\sigma}$  композита-1 уменьренное, что позволяет удерживать большие значения  $g_h^*$  и  $g_{33}^*$  (рис. 4) в широких интервалах  $m$  и  $m_i$ .

Эффективные параметры 2–0–2-композита можно сравнить с известными характеристиками 2–2-композитов "кристалл-сегнетоэлектрика – полимер", поскольку в литературе отсутствуют данные по 2–0–2-композитам на основе PMN–xPT, PZN–yPT или родственных кристаллов. Например, согласно данным [3], 2–2-композиты на основе кристаллов PMN–xPT, поляризованных вдоль [011] перовскитовой ячейки, характеризуются значениями  $d_h^* = (100...570)$  пКл/Н,

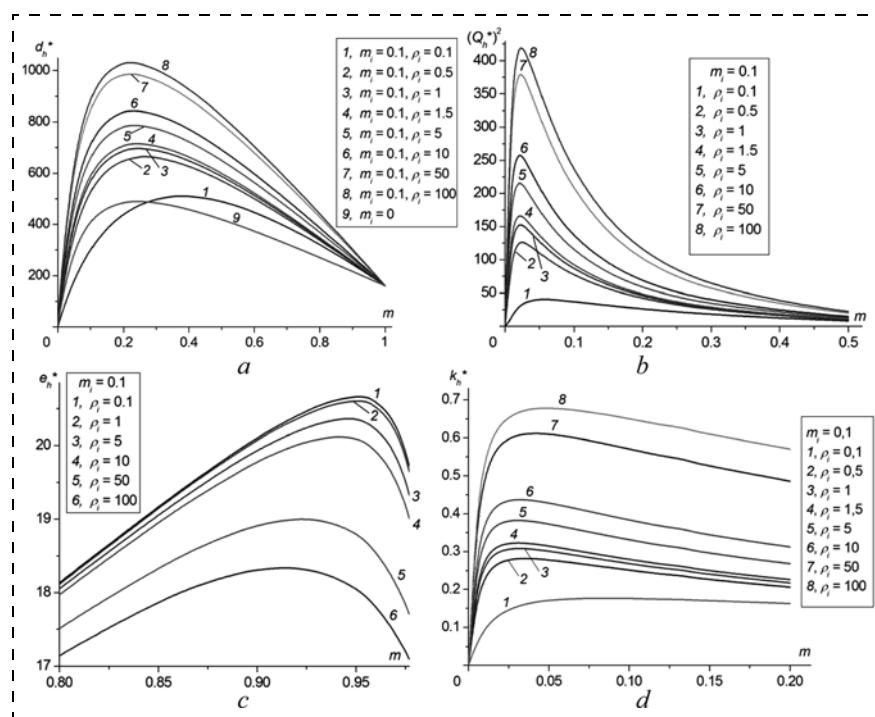


Рис. 3. Гидростатические параметры композита-1 при  $m_i = 0,1$ : пьезомодуль  $d_h^*$ , пКл/Н (a), квадрат параметра приема  $(Q_h^*)^2$ ,  $10^{-12}$  Па $^{-1}$  (b), пьезокоэффициент  $e_h^*$ , Кл/м $^2$  (c), КЭС  $k_h^*$  (d). Кривая 9 на графике a построена для 2–2-композита "кристалл PMN–0,33PT – полиэтилен"

Fig. 3. Hydrostatic parameters of composite-1 at  $m_i = 0.1$ : piezoelectric coefficient  $d_h^*$ , pC/N, (a) squared figure of merit  $(Q_h^*)^2$ ,  $10^{-12}$  Pa $^{-1}$  (b), piezoelectric coefficient  $e_h^*$ , C/m $^2$ (c), ECF  $k_h^*$  (d). Curve 9 on diagram a was constructed for 2–2-composite "crystal PMN–0.33PT– polyethylene"

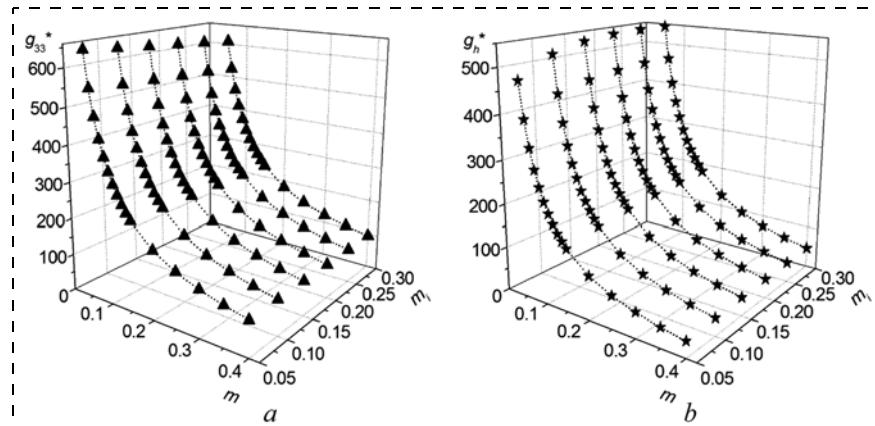


Рис. 4. Пьезокоэффициент  $g_{33}^*$ , мВ·м/Н (a) и гидростатический пьезокоэффициент  $g_h^*$ , мВ·м/Н (b) композита-1 при  $\rho_i = 100$  и различных  $m_i$  и  $m$

Fig. 4. Piezoelectric coefficient  $g_{33}^*$ , mV·m/N (a) and hydrostatic piezoelectric coefficient  $g_h^*$ , mV·m/N (b) of composite-1 at  $\rho_i = 100$  and different values of  $m_i$  and  $m$

$g_h^* = (12...161)$  мВ·м/Н и  $(Q_h^*)^2 = (1,9...92) \times 10^{-12}$  Па $^{-1}$ . По данным [4] значения  $\max d_h^* = 237$  пКл/Н,  $\max g_h^* = 441$  мВ·м/Н и  $\max[(Q_h^*)^2] = 33,6 \cdot 10^{-12}$  Па $^{-1}$  достигаются в 2–2-композите "[011]-поляризованный кристалл PZN–0,07PT – эластомер". Перечисленные выше параметры 2–2-композитов уступают параметрам, относящимся прежде всего к композиту-1 (см. рис. 3, 4 и таблицу).

## Заключение

В настоящей работе впервые проанализированы пьезоэлектрические свойства и гидростатические параметры (4)–(6) нового 2–0–2-композита "кристалл релаксора-сегнетоэлектрика — СК типа  $\text{PbTiO}_3$  — полимер" при трех вариантах ориентации СК-включений согласно формулам (1)–(3). Показана важная роль анизотропии упругих свойств слоев второго типа "СК — полимер" со связностью 0–3 в формировании высоких значений гидростатических параметров композита. Приведены интервалы объемных концентраций кристалла  $m$ , в которых достигаются большие значения гидростатических пьезокоэффициентов  $d_h^*$ ,  $g_h^*$ ,  $e_h^*$ , квадрата параметра приема  $(Q_h^*)^2$  и КЭС  $k_h^*$  композита на основе кристалла PMN–0,33PT, поляризованного вдоль [001]. По совокупности эффективных параметров можно констатировать, что данный 2–0–2-композит не имеет аналогов среди исследованных ранее композитов типа 2–2 и представляет интерес для гидроакустических и пьезосенсорных применений.

Авторы благодарны д. т. н., проф. Паничу А. Е., д. ф.-м. н., проф. Сахненко В. П., д. т. н., проф. Нестерову А. А., д. т. н., проф. Паринову И. А. (ЮФУ, Ростов-на-Дону) и Prof. Dr. C. R. Bowen (University of Bath, Бат, Великобритания) за интерес к тематике исследований современных пьезоэлектрических материалов и ценные замечания. Прикладные научные исследования проведены при финансовой поддержке

Минобрнауки России (проект RFMEFI57814X0088) с использованием оборудования ЦКП "Высокие технологии" ЮФУ.

## Список литературы

1. Ren K., Liu Y., Geng X. et al. Single crystal PMN—PT/epoxy 1–3 composite for energy-harvesting application // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2006. Vol. 53, N. 3. P. 631–638.
2. Wang F., He C., Tang Y. Single crystal 0.7Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—0.3PbTiO<sub>3</sub> / epoxy 1–3 piezoelectric composites prepared by the lamination technique // Materials Chemistry and Physics. 2007. Vol. 105, N. 1. P. 273–277.
3. Li L., Zhang S., Xu Z. et al. Hydrostatic piezoelectric properties of [011] poled Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—PbTiO<sub>3</sub> single crystals and 2–2 lamellar composites // Applied Physics Letters. 2014. Vol. 104, N. 3.
4. Topolov V. Yu., Bisegna P., Bowen C. R. Piezo-active composites. Orientation effects and anisotropy factors. Berlin, Heidelberg: Springer, 2014. 169 p.
5. Zhang S., Li F. High performance ferroelectric relaxor-PbTiO<sub>3</sub> single crystals: Status and perspective // Journal of Applied Physics. 2012. Vol. 111, N. 3. P. 031301–50 p.
6. Dong X., Xin C., Shifeng H. Investigation of inorganic fillers on properties of 2–2 connectivity cement/polymer based piezoelectric composites // Construction and Building Materials. 2015. Vol. 94. P. 678–683.
7. Zhang R., Jiang B., Cao W. Elastic, piezoelectric, and dielectric properties of multidomain 0.67Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—0.33PbTiO<sub>3</sub> single crystals // Journal of Applied Physics. 2001. Vol. 90, N. 7. P. 3471–3475.
8. Ikegami S., Ueda I., Nagata T. Electromechanical properties of PbTiO<sub>3</sub> ceramics containing La and Mn. Journal of the Acoustical Society of America. 1971. Vol. 50, N. 4A. P. 1060–1066.
9. Evans K. E., Alderson K. L. The static and dynamic moduli of auxetic microporous polyethylene. Journal of Materials Science Letters. 1992. Vol. 11, N. 24. P. 1721–1724.
10. Topolov V. Yu., Bowen C. R., Bisegna P., Panich A. E. Effect of the matrix subsystem on hydrostatic parameters of a novel 1–3-type piezo-composite. Functional Materials Letters. 2015. Vol. 8, N. 5.

V. Yu. Topolov, D. Sc., Corresponding Member of the Russian Academy of Natural Sciences, Professor, vutopolov@sedu.ru, I. A. Ermakov, Student  
Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

## Piezoelectric Properties and Hydrostatic Parameters of the Novel 2–0–2 Composite Based on a Relaxor-Ferroelectric Single Crystal

The effective piezoelectric properties and hydrostatic response of the 2–0–2 composite based on the relaxor-ferroelectric single crystal were studied for the first time. The aim of the present paper is to analyze the role of the ceramic/polymer layers during formation of the piezoelectric properties and the related hydrostatic parameters of the aforementioned composite. The composite represents a system of parallel-connected layers of the following two types. The first type of the layers is the [001]-poled domain-engineered 0.67Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—0.33PbTiO<sub>3</sub> single crystal. The second type of the layers contains inclusions of the PbTiO<sub>3</sub>-type of ferroelectric ceramic distributed in a polyethylene matrix. The key role of the elastic anisotropy of the ceramic-polymer layers is proved by the high values of the hydrostatic piezoelectric coefficients  $d_h^* \sim 1 \text{ nC/N}$ ,  $e_h^* \approx 20 \text{ C/m}^2$ , squared figure of merit  $d_h^* g_h^* \sim 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$ , and other parameters of the studied 2–0–2 composite. Its performance has no analogs among the modern piezo-active 2–2-type composites.

**Keywords:** relaxor-ferroelectric single crystal, ferroelectric ceramic, polyethylene, connectivity, microgeometry, piezoelectric coefficients, hydrostatic piezoelectric response, figure of merit, electromechanical coupling factor, elastic anisotropy

## Introduction

Crystals of solid solutions of relaxor-ferroelectric materials  $(1 - x)\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3 - x\text{PbTiO}_3$  (PMN–xPT) and  $(1 - y)\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3 - y\text{PbTiO}_3$  (PZN–yPT)

with the structure of the perovskite type and compositions close to the morphotropic phase boundary are of interest as piezoelectric components of composites [1–4]. Domain engineering [5] and polarization of crystals along a set direction (for example, [001], [011]

or [111] of a perovskite unit cell) open opportunities for control of the physical properties of the piezo-active composites [3, 4]. Among the investigated composites based on PMN–xPT or PZN–yPT the most widespread are the materials with 1–3 and 2–2 connectivities [1–4]. Notwithstanding a rather simple microgeometry of 2–2-composites, not much attention was given in literature to the questions connected with improvement of the effective parameters of this material. Nevertheless, the composite [6] of the 2–2 "ferroelectric ceramics (FC) PZT — heterogeneous polymer" type was manufactured and investigated. Layers of the heterogeneous polymer contain inclusions of an inorganic component (graphite, silicon or strontium ferrite), which leads to improvement of the parameters of the composite in comparison to the traditional 2–2-composite "FC — polymer". For example, addition of inclusions of strontium ferrite in the polymeric layers improves the values of the electromechanical coupling factor (ECF)  $k_t^*$ , corresponding to the thickness oscillation mode [6].

In the present work we consider parameters of a novel three-component composite, in which the crystal layers with high piezo-activity interact with the heterogeneous layers containing isolated FC inclusions. The aim of the message is to analyze the role of "FC — polymer" layers in formation of the piezoelectric properties and the hydrostatic response of the 2–2 type composite based on PMN–xPT crystal.

### Structure of the novel composite and its effective parameters

The composite is a system of parallel-connected layers alternating regularly along the axis  $OX_1$  (fig. 1). The layer of the first type is represented by a crystal of relaxor-ferroelectric, the main crystallographic axes of which are  $X \parallel OX_1$ ,  $Y \parallel OX_2$ ,  $Z \parallel OX_3$ , and spontaneous polarization is  $P_s^{(1)} \parallel Z$ . The layer of the second type is "FC inclusions — polymer" system (insert in fig. 1), while the spheroidal form of inclusion of FC in the  $(X_1 X_2 X_3)$  co-ordinate system is set by one of the equations:

$$(x_1/a_1)^2 + (x_2/a_1)^2 + (x_3/a_1)^2 = 1 \quad (1)$$

(for composite-1);

$$(x_1/a_3)^2 + (x_2/a_1)^2 + (x_3/a_1)^2 = 1 \quad (2)$$

(for composite-2);

$$(x_1/a_1)^2 + (x_2/a_3)^2 + (x_3/a_1)^2 = 1 \quad (3)$$

(for composite-3).

It is assumed, that  $a_i$  is constant in the whole sample and is considerably less than the thickness of its separate layer. FC inclusions are distributed in the polymeric medium, so that their centers of symmetry are in apices of a rectangular parallelepiped. Thus, the composite shown in fig. 1 is described by 2–0–2 connectivity. Below we consider three modifications of the given

composite, wherein the FC inclusions are oriented according to (1)–(3).

For determination of the effective electromechanical properties of the 2–0–2-composite we will use the matrix method (structure of the 2–2 type) and the effective field method (layers of the 0–3 type) [4]. The effective electromechanical properties of the composite are functions  $X^*(m, m_i, \rho_i)$ , where  $\rho_i = a_1/a_3$  is a ratio of the lengths of the semiaxes of the spheroidal FC inclusion from (1)–(3). The role of  $X^*$  is played by the piezoelectric moduli, elastic compliances of  $s_{ab}^{*E}$  at the electric field  $E = \text{const}$  or dielectric permittivities  $\epsilon_{pp}^{*\sigma}$  in a mechanically free state.

On the basis of knowledge of the effective properties of  $X^*(m, m_i, \rho_i)$  composite, we will investigate its hydrostatic piezoelectric coefficients:

$$d_h^* = d_{33}^* + d_{32}^* + d_{31}^*, \quad g_h^* = g_{33}^* + g_{32}^* + g_{31}^* \\ \text{and } e_h^* = e_{33}^* + e_{32}^* + e_{31}^*, \quad (4)$$

squared figure of merit

$$(Q_h^*)^2 = d_h^* g_h^* \quad (5)$$

and ECF

$$k_h^* = d_h^* / (s_h^{*E} \epsilon_{33}^{*\sigma})^{1/2}, \quad (6)$$

where  $s_h^{*E} = s_{11}^{*E} + s_{22}^{*E} + s_{33}^{*E} + 2(s_{12}^{*E} + s_{13}^{*E} + s_{23}^{*E})$  — the hydrostatic elastic compliance at  $E = \text{const}$ . The piezoelectric coefficients  $d_h^*$ ,  $g_h^*$  and  $e_h^*$  from (4) characterize the piezo-activity and piezo-sensitivity of the composite under action of the hydrostatical pressure. At the hydrostatic influence  $(Q_h^*)^2$  from (5) characterizes the "signal — noise" ratio, and  $k_h^*$  from (6) characterizes the efficiency of transformation of the mechanical energy into electric energy and vice-versa. We should remind, that the piezoelectric coefficients from (4) are linked among themselves according to formulas [4] of the piezoelectric medium  $d_{ij}^* = \epsilon_{if}^{*\sigma} g_{fj}^*$  and  $d_{kn}^* = e_{kf}^* s_{fn}^{*E}$ .

The component forming the layer of the first type represents a poled PMN–0.33PT crystal [7] with piezoelectric coefficients  $d_{3j}^{(1)} \sim 10^{-9} \text{ C/N}$ , the direction of the crystal polarization is [001] of the perovskite unit cell. Components of the layers of the second type are modified  $\text{PbTiO}_3$  FC [8] and polyethylene [9]. Selection of the latter is connected with big distinctions between their elastic compliances, and also with rather small dielectric permittivities of FC  $\epsilon_{pp}^{(2),\sigma} / \epsilon_0 \sim 10^2$  [8]. Analysis of properties of the layer of the second type in composite-1 (FC orientation of inclusions in it is shown in the insert of fig. 1) demonstrates, that the piezoelectric moduli  $d_{3j}^{(m)}$  of this layer at  $0 < m_j \leq 0.3$  and  $0.01 \leq \rho_i \leq 100$  meet condition  $|d_{3j}^{(m)}| < 10 \text{ pC/N}$  [10]. Because of a low piezo-activity of the given layer in comparison to the piezo-activity of PMN–0.33PT layer, hereinafter we will consider that the composite (fig. 1) consists of the piezo-active layers of the first type and the piezo-passive layers of the second type.

## Piezoelectric properties and hydrostatic response of the 2—0—2-composite

Maxima of most hydrostatic parameters from formulas (4)–(6) have higher values in case of composite-1 (table). Higher values of  $\max e_h^*$  are achieved for composite-2 in comparison to the other modifications. Rather low volume concentrations  $m$ , corresponding to  $\max g_h^*$ ,  $\max[(Q_h^*)^2]$  and  $\max k_h^*$  are connected with a considerable influence of dielectric permittivity  $\varepsilon_{33}^{*\sigma}$  on the hydrostatic parameters. With an increase of the volume concentrations of  $m$ , the dielectric permittivity  $\varepsilon_{33}^{*\sigma}$  increases slowly in comparison with the piezoelectric coefficients  $|d_{3j}^*|$  (fig. 2), influencing the hydrostatic response of the composite in a wide volume-fraction range. The moderate volume fractions of  $m$ , at which  $\max d_{3j}^*$  (table) is observed, are explained by the distinctions between the volume-fraction dependences  $d_{3j}^*$  (fig. 2) due to the influence of the section borders of the distinctions between the elastic properties of the layers. Rather high concentrations of  $m$ , at which  $\max e_h^*$  is achieved, point to the important role of the elastic properties of the layers in formation of the hydrostatic response of the 2—0—2-composite. In this  $m$  range, the orientation and shape of inclusions play a passive role, which finally leads to small distinctions between the values of  $\max e_h^*$  at various values of  $m_i$ . It is significant, that such small distinctions are observed in a wide range of  $0.01 \leq \rho_i \leq 100$ .

Let us also pay attention to a non-monotonic change of the piezoelectric moduli  $d_{3j}^*$  at  $m = \text{const}$  and change of  $\rho_i$  (fig. 2). The change in arrangement of curves  $d_{3j}^*$  at  $\rho_i \approx 1$  is connected with transition from a prolate shape of FC inclusions ( $\rho_i < 1$ ) to a one ( $\rho_i > 1$ ). Such a transition leads to essential changes of the elastic properties of the layers of the second type. In our opinion, the presence of strongly oblate FC inclusions ( $\rho_i \gg 1$ ), focused according to the equation (1), promotes a more effective increase of the hydrostatic parameters (4)–(6). Due to such FC inclusions an elastic anisotropy of the layer of the second type is achieved, which influences the piezoelectric response and the balance of the piezoelectric coefficients of the composite from (4). According to our data, at  $\rho_i = 100$  the ratios of the elastic constants of the layer of the second type change as follows:

$$s_{11}^{(m)} / s_{13}^{(m)} = -4.70, s_{33}^{(m)} / s_{11}^{(m)} = 3.39 \quad (m_i = 0.05);$$

$$s_{11}^{(m)} / s_{13}^{(m)} = -4.52, s_{33}^{(m)} / s_{11}^{(m)} = 5.69 \quad (m_i = 0.10);$$

$$s_{11}^{(m)} / s_{13}^{(m)} = -4.25, s_{33}^{(m)} / s_{11}^{(m)} = 13.9 \quad (m_i = 0.30).$$

These ratios essentially influence the piezoelectric coefficients  $d_{3j}^*$  and other parameters.

Diagrams in fig. 3 show, that the influence of FC inclusions on the hydrostatic parameters of composite-1 is essential already at the volume fraction of FC inclu-

sions  $m_i = 0.10$ . At that, high  $\rho_i$  values to larger values of the hydrostatic parameters  $d_h^*$  (fig. 3, a),  $(Q_h^*)^2$  (fig. 3, b) and  $k_h^*$  (fig. 3, d). Between these parameters a correlation is observed owing to relations [4]  $(Q_h^*)^2 \sim (d_h^*)^2$  and  $k_h^* \sim d_h^*$ . At the same time high values of  $e_h^*$  in composite-1 are achieved at  $\rho_i \ll 1$  (fig. 3, c), while there is no a clear correlation between  $d_h^*$  and  $e_h^*$  because of the influence of the elastic properties of the anisotropic layers of two types. The curve 9 in fig. 3, a shows, that the value of  $\max d_h^*$  of the related 2—2-composite is less than a half of the  $\max d_h^*$  value of composite-1 at  $\rho_i = 100$  (curve 8 in fig. 3, a).

The investigated composite-1 is of interest as a material with a high piezo-sensitivity (fig. 4). At that, the piezoelectric coefficients  $g_{33}^*$ ,  $g_h^*$  decrease with an increase of the volume concentration of crystal  $m$  (i.e. layers with a high dielectric permittivity  $\varepsilon_{33}^{(1),\sigma}$ ), but demonstrate stability at an increase in the volume fraction of FC  $m_i$ . At  $\rho_i \gg 1$  the influence of FC inclusions on the dielectric permittivity  $\varepsilon_{33}^{*\sigma}$  of composite-1 is moderate, which makes it possible to maintain high  $g_h^*$  and  $g_{33}^*$  (fig. 4) in wide ranges of  $m$  and  $m_i$ .

Effective parameters of the 2—0—2-composite can be compared with the known characteristics of 2—2-composites of "relaxor-ferroelectric crystal — polymer", because in literature there are no data on 2—0—2-composites based on PMN—xPT, PZN—yPT or related crystals. For example, according to [3], 2—2-composites based on PMN—xPT crystals, poled along [011] of the perovskite unit cell, are characterized by  $d_h^* = (100...570) \text{ pC/N}$ ,  $g_h^* = (12...161) \text{ mV} \cdot \text{m/N}$  and  $(Q_h^*)^2 = (1.9...92) \cdot 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ . According to work [4], values of  $\max d_h^* = 237 \text{ pC/N}$ ,  $\max g_h^* = 441 \text{ mV} \cdot \text{m/N}$  and  $\max[(Q_h^*)^2] = 33.6 \cdot 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$  are achieved in a 2—2-composite "[011]-polarized crystal PZN—0.07PT — elastometer". The above-enumerated parameters of the 2—2-composites concede to the parameters related, first of all, to composite-1 (fig. 3, 4 and table).

## Conclusion

The authors of the work have been the first to analyze the piezoelectric properties and hydrostatic parameters (4)–(6) of the novel 2—0—2-composite of the "relaxor-ferroelectric crystal — PbTiO<sub>3</sub> FC — polymer" type, including three versions of orientation of FC inclusions according to formulas (1)–(3). They demonstrated the role of anisotropy of the elastic properties of the layers of the second type "FC — polymer" with 0—3 connectivity at the formation of high hydrostatic composite parameters. They also presented crystal volume-fraction ranges  $m$ , in which high hydrostatic piezoelectric coefficients  $k_h^*$ ,  $g_h^*$  and  $e_h^*$ , squared figure of merit  $(Q_h^*)^2$  and ECF  $k_h^*$  were achieved for the composite based on PMN—0.33PT crystal, polarized along [001]. By the sum total of the effective parameters it is possible to ascertain, that the 2—0—2-composite has no analogues among the investigated 2—2 composites

and is of interest for hydroacoustic and piezo-sensor applications.

The authors express their gratitude to Prof. A. E. Panich, D. Sc., Prof. V. P. Sakhnenko, D. Sc., Prof. A. A. Nesterov, D. Sc., Prof. I. A. Parinov, D. Sc. (SFU, Rostov-on-Don), and Prof. Dr. C. R. Bowen (University of Bath, Bath, Great Britain) for their interest to the topics of research of modern piezoelectric materials and for their valuable remarks. The applied research works were implemented with the financial support of the Ministry of Education and Science of Russia (project RFMEFI57814X0088) with the use of equipment provided by TsKP High Technologies, SFU.

## References

1. Ren K., Liu Y., Geng X. et al. Single crystal PMN—PT/epoxy 1—3 composite for energy-harvesting application, *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, 2006, vol. 53, no. 3, pp. 631—638.
2. Wang F., He C., Tang Y. Single crystal 0.7Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—0.3PbTiO<sub>3</sub> / epoxy 1—3 piezoelectric composites prepared by the lamination technique, *Materials Chemistry and Physics*, 2007, vol. 105, no. 1, pp. 273—277.
3. Li L., Zhang S., Xu Z. et al. Hydrostatic piezoelectric properties of [011] poled Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—PbTiO<sub>3</sub> single crystals and 2—2 lamellar composites, *Applied Physics Letters*, 2014, vol. 104, no. 3, pp. 032909-5 p.
4. Topolov V. Yu., Bisegna P., Bowen C. R. Piezo-active composites. *Orientation effects and anisotropy factors*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2014. 169 p.
5. Zhang S., Li F. High performance ferroelectric relaxor-PbTiO<sub>3</sub> single crystals: Status and perspective, *Journal of Applied Physics*, 2012, vol. 111, no. 3, pp. 031301-50 p.
6. Dong X., Xin C., Shifeng H. Investigation of inorganic fillers on properties of 2—2 connectivity cement/polymer based piezoelectric composites, *Construction and Building Materials*, 2015, vol. 94, pp. 678—683.
7. Zhang R., Jiang B., Cao W. Elastic, piezoelectric, and dielectric properties of multidomain 0.67Pb(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub>—0.33PbTiO<sub>3</sub> single crystals, *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 90, no. 7, pp. 3471—3475.
8. Ikegami S., Ueda I., Nagata T. Electromechanical properties of PbTiO<sub>3</sub> ceramics containing La and Mn, *Journal of the Acoustical Society of America*, 1971, vol. 50, no. 4A, pp. 1060—1066.
9. Evans K. E., Alderson K. L. The static and dynamic moduli of auxetic microporous polyethylene, *Journal of Materials Science Letters*, 1992, vol. 11, no. 24, pp. 1721—1724.
10. Topolov V. Yu., Bowen C. R., Bisegna P., Panich A. E. Effect of the matrix subsystem on hydrostatic parameters of a novel 1—3-type piezo-composite, *Functional Materials Letters*, 2015, vol. 8, no. 5, pp. 155004-4 p.

УДК 538.95

С. И. Рембеза<sup>1</sup>, д-р физ.-мат. наук, проф., зав. каф., e-mail: rembeza@yandex.ru,  
Н. Н. Кошелева<sup>1</sup>, канд. техн. наук, доц., Т. В. Свистова<sup>1</sup>, канд. техн. наук, доц.,  
Е. С. Рембеза<sup>2</sup>, д-р физ.-мат. наук, проф., Б. Л. Агапов<sup>3</sup>, канд. физ.-мат. наук, вед. инженер,  
Е. Ю. Плотникова<sup>1</sup>, канд. техн. наук, доц., ассистент, С. А. Белоусов<sup>1</sup>, аспирант, А. А. Носов<sup>1</sup>, магистрант  
<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
"Воронежский государственный технический университет", г. Воронеж  
<sup>2</sup> Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
"Воронежский государственный университет", г. Воронеж  
<sup>3</sup> ЗАО НИИ Электронной техники, г. Воронеж

## ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> (*x* = 0...0,5) ДЛЯ ПРОЗРАЧНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Поступила в редакцию 26.04.2016

Тонкие пленки переменного состава (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> (*x* = 0...0,5) изготовлены методом ионно-лучевого распыления в атмосфере Ar мишней, составленных из полосок SnO<sub>2</sub> и ZnO. Исследовано влияние элементного состава пленок (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> на их структуру, электрофизические и оптические свойства. Определены оптимальные соотношения оксидов цинка и олова для использования пленок в приборах прозрачной электроники.

**Ключевые слова:** керамическая мишень, ионно-лучевое напыление, элементный состав, электрофизические свойства, оптические свойства

## Введение

Широкозонные металлооксидные полупроводники SnO<sub>2</sub>, ZnO, In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и другие обладают шириной запрещенной зоны более 3 эВ [1], прозрачны в видимой области оптического спектра и применяются при изготовлении солнечных элементов [2], прозрачных токопроводящих покрытий [3], поле-

вых транзисторов [4], датчиков газов [5] и других изделий электроники. Для использования оксидных полупроводников в различных микроэлектронных приборах материалы пленок должны обладать конкретными электрофизическими параметрами и удовлетворять определенным требованиям к значениям концентрации и подвижности носи-

телей зарядов, а также к величине прозрачности в видимом диапазоне оптического спектра. Для изменения электрических свойств металлооксидов можно использовать легирование примесями или синтез многокомпонентных оксидов, например,  $\text{SnO}_2$  с добавками  $\text{ZnO}$  [6].

Цель статьи — исследовать влияние элементного состава пленок  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  при  $x = 0 \dots 0,5$  на их электрофизические свойства и оценить возможности применения многокомпонентных металлооксидных пленок в изделиях прозрачной электроники.

## Материалы и методика эксперимента

На первом этапе изготовления тонких пленок  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  гидротермальным методом были синтезированы порошки  $\text{ZnO}$  (99,97 %) и  $\text{SnO}_2$  (99,97 %) с размером зерен 7 и 4,8 нм соответственно [6]. Затем из порошков металлооксидов методом сухого прессования были изготовлены керамические навески размером  $1 \times 7,5$  см.

Керамические навески  $\text{ZnO}$  и  $\text{SnO}_2$  были сформированы в наборную мишень [7] для ионно-лучевого распыления [8]. Мишень имеет общую длину 27 см, ширину 7,5 см и содержит 23 навески  $\text{ZnO}$  и 4 навески  $\text{SnO}_2$  (рис. 1). В качестве подлож-

жек для напыления пленок использовались стекла для микропрепараторов ( $2,5 \times 7,5$  см), спектр пропускания которых известен. Подложки закреплялись в установке распыления на расстоянии 80 мм параллельно мишени. Распыление мишени проводилось в атмосфере аргона под давлением  $6 \times 10^{-4}$  Торр. Время процесса — 300 мин при температуре подложки 80 °С.

Рентгеновский микроанализ образцов осуществлялся методом энергодисперсионного анализа вторичных электронов на приборе JXA-840 в следующем режиме работы: ускоряющее напряжение от 10 до 15 кэВ, диаметр пучка порядка 1 мкм, точность определения элементного состава порядка 0,01 ат. % для тяжелых металлов.

Измерение толщины напыленных образцов проводилось на интерференционном микроскопе МИИ-4.

Поверхностное сопротивление тонких пленок измерялось четырехзондовым методом на установке ЦИУС-4. Для определения удельного сопротивления поверхность сопротивление умножалось на толщину пленки. Диапазон измерений поверхностного сопротивления составил  $0,1 \dots 10^7$  Ом/□ с погрешностью  $\pm 4,5$  %. Расстояние между зондами в четырехзондовой головке равно  $(1 \pm 0,02)$  мм.

Степень кристаллизации образцов и их фазовый состав исследовались методом рентгеновской дифракции (XRD) на спектрометре Bruker 2D Phazer.

Оптические свойства синтезированных пленок исследовались с помощью двухлучевого спектрометра СПЕКС СПП-715М. Определялся спектр пропускания пленок, на основе которого рассчитывался коэффициент поглощения и определялась ширина запрещенной зоны металлооксидных пленок различного состава.

Сканирование поверхности на атомно-силовом микроскопе FemtoScan-001 позволило получить представление о микрорельфе исследуемых тонких пленок. Разрешающая способность данного метода 0,1...1 нм по горизонтали и 0,01 нм по вертикали. Визуализация проводилась средствами компьютерной графики в виде 3D- и 2D-изображений. Точность подведения иглы 2 Å. Погрешность измерений до 2,5 %.

## Результаты и их обсуждение

Установлено, что средняя толщина напыленных пленок  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  составляет  $2,9 \pm 0,1$  мкм, следовательно, средняя скорость роста пленок не превышает  $v_{cp} = 10$  нм/мин.

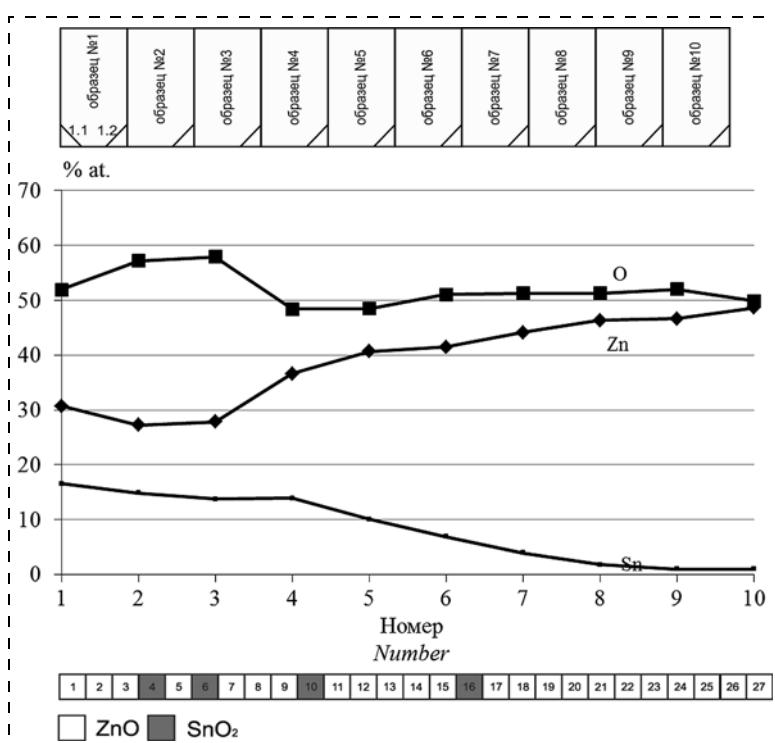


Рис. 1. Распределение атомов олова, цинка и кислорода в пленках  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$ ; в нижней части рисунка расположена схема размещения навесок  $\text{ZnO}$  и  $\text{SnO}_2$  вдоль мишени. В верхней части рисунка показано расположение образцов и их угловых фрагментов для элементного анализа

Fig. 1. Distribution of the atoms of tin, zinc and oxygen in  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  films; the bottom part of the figure depicts placement of  $\text{ZnO}$  and  $\text{SnO}_2$  shots along the target. The top part of the figure presents arrangement of the samples and their angular fragments for an element analysis

На рис. 1 приведены распределение элементного состава атомов Zn, Sn и O в образцах № 1–10 (верхняя часть рисунка) и размещение навесок ZnO и SnO<sub>2</sub> вдоль распыляемой мишени (в нижней части рисунка). Анализ элементного состава напыленных образцов показал, что в области с малым числом навесок SnO<sub>2</sub> (в образцах № 6–10) концентрация атомов олова меняется от 4 до 1 ат. %, что соответствует 12 и 3 ат. % SnO<sub>2</sub> соответственно. В области образцов № 1...4, где имеются три навески оксида олова и 10 навесок оксида цинка, количество цинка примерно в два раза больше количества олова (30 ат. % Zn и 16 ат. % Sn соответственно). Распределение элементов Sn и Zn по всем образцам составило от 16,53 до 0,96 ат. % для олова и от 28,66 до 48,64 ат. % для Zn, что отражено в табл. 1. Таким образом, выбранное размещение керамических навесок ZnO и SnO<sub>2</sub> в составной мишени позволило изготовить набор образцов (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> со значениями  $x = 0,03...0,5$ .

По данным рентгенофазового анализа все напыленные пленки имели аморфную структуру.

На рис. 2 и в табл. 2 для образцов № 2–9 приведены значения удельных сопротивлений, измеренных по методу Ван дер Пау, а также значения концентраций и подвижностей носите-

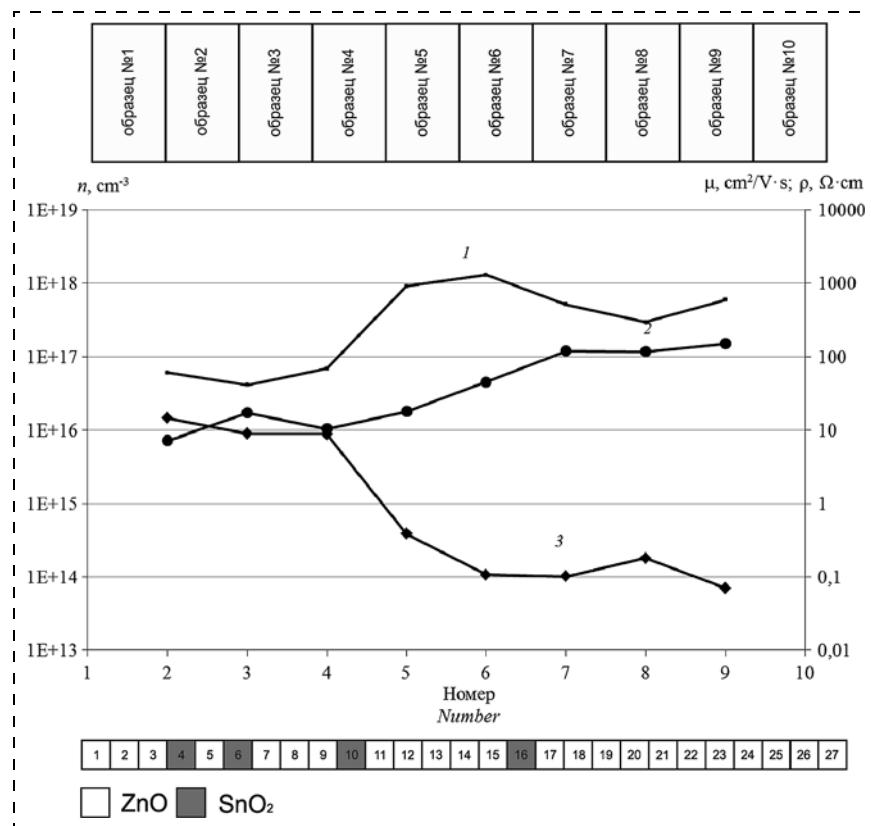


Рис. 2. Зависимость концентрации  $n$  (1) (левая ось), а также подвижности носителей заряда  $\mu$  (2) и удельного сопротивления  $\rho$  (3) (правая ось) в пленках  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  от элементного состава до отжига. Размещение образцов приведено вверху и навесок ZnO и SnO<sub>2</sub> внизу рисунка

Fig. 2. Dependence of concentration  $n$  (1) (left axis), and also mobility of the charge carriers  $\mu$  (2) and specific resistance  $\rho$  (3) (the right axis) in  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  films on the element composition before annealing. Placement of the samples is presented in the upper part and of ZnO and SnO<sub>2</sub> shots in the lower part of the figure

лей заряда, определенных из эффекта Холла. Как видно на рис. 2, электросопротивление аморфных пленок монотонно снижается от  $\rho = 14,5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$

Таблица 1

Распределение концентрации атомов Zn, Sn и O в зависимости от номера образца и положения на мишени ZTO

Table 1

*Distribution of the concentrations of Zn, Sn and O atoms depending on a sample's number and position on ZTO target*

Zn, at. %	28,66	30,73	27,21	27,84	36,64	40,7	41,48	44,11	46,31	46,63	48,64
Sn, at. %	13,78	16,53	14,86	13,72	13,89	10,03	6,85	3,95	1,77	0,97	0,96
O, at. %	54,18	54,97	57,19	57,91	48,42	48,46	51,07	51,31	51,27	51,99	49,9
№ of sample	1,1	1,2	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$d$ , cm.	0	2,5	5	7,5	10	12,5	15	17,5	20	22,5	25

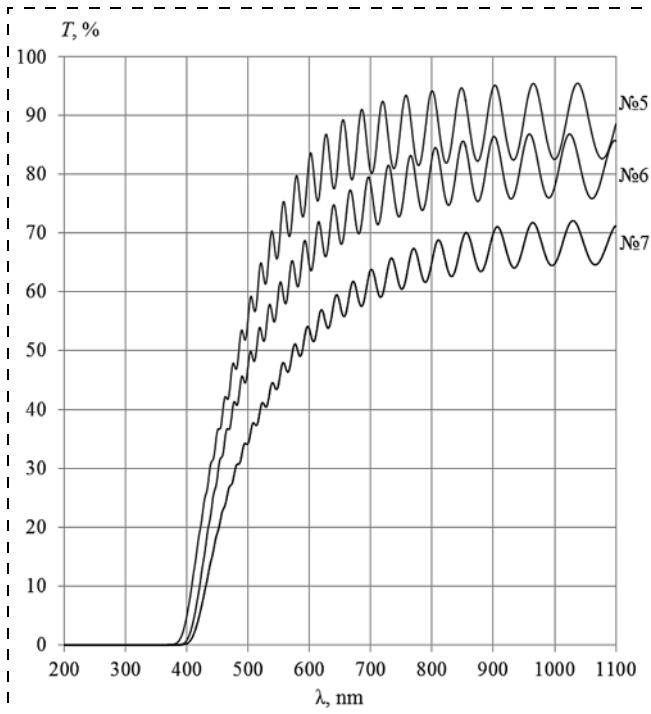
Таблица 2

Распределение удельного сопротивления  $\rho$ , концентрации  $n$  и подвижности  $\mu$  носителей заряда в образцах  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  до отжига

Table 2

*Distribution of specific resistance  $\rho$ , concentration  $n$  and mobility  $\mu$  of the charge carriers in samples  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  before annealing*

Sn, at. %	14,86	13,72	13,89	10,03	6,85	3,95	1,77	0,97
№ of sample	2	3	4	5	6	7	8	9
$\rho$ , $\Omega \cdot \text{см}$	14,5	9	9	0,39	0,1	0,1	0,2	0,07
$\mu$ , $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	7	17	10	18	45	120	116	150
$n_0$ , $\text{cm}^{-3}$	$6 \cdot 10^{16}$	$4 \cdot 10^{16}$	$6 \cdot 10^{16}$	$9 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{18}$	$5 \cdot 10^{17}$	$3 \cdot 10^{17}$	$6 \cdot 10^{17}$



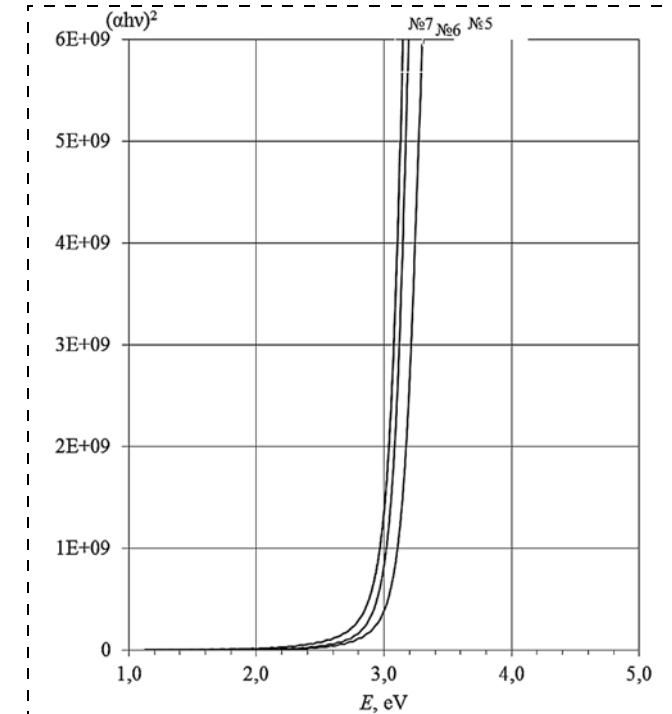
**Рис. 3. Спектр пропускания тонких пленок  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  (образцы № 5 – № 7)**

Fig. 3. Transmission spectrum of thin films  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  (samples № 5 – № 7)

на образце № 2 (50 ат. %  $\text{SnO}_2$ ) до  $\rho = 0,07 \text{ Ом} \cdot \text{см}$  на образце № 9 (3 ат. %  $\text{SnO}_2$ ). Так же монотонно с уменьшением концентрации  $\text{SnO}_2$  в пленках  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  возрастает в несколько раз подвижность носителей заряда.

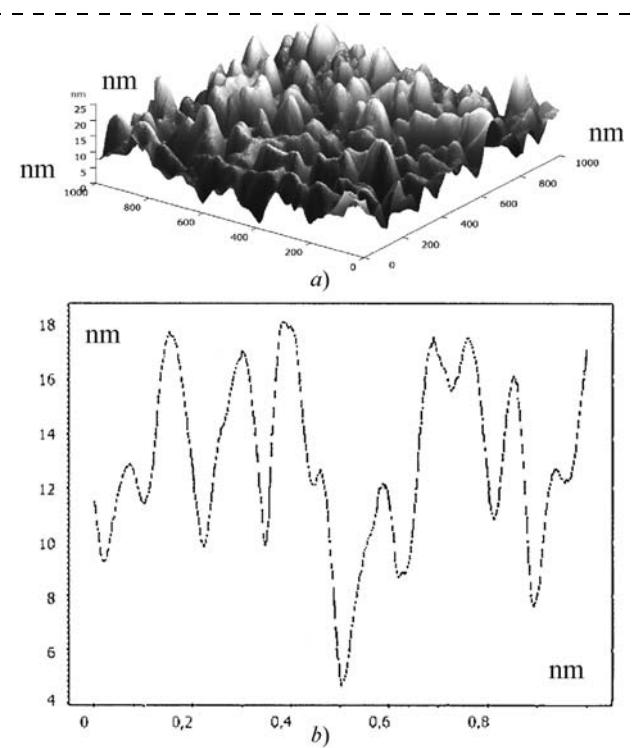
Наиболее интересно в исследованных аморфных пленках  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  поведение концентрации носителей заряда, которая изменяется от  $(4...6) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  в образцах № 2–4 (содержание  $\text{SnO}_2$  50 и 40 ат. % соответственно) до  $10^{18} \text{ см}^{-3}$  в образцах № 5 (30 ат. %  $\text{SnO}_2$ ) и № 6 (20 ат. %  $\text{SnO}_2$ ), затем снижается до уровня  $(3...6) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  в образцах № 7–9 (12 и 3 ат. %  $\text{SnO}_2$  соответственно). Такое поведение может быть обусловлено изменениями фазового состава синтезированных пленок.

В образцах  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  с большим содержанием  $\text{SnO}_2$  (более 20 ат. %) ранее были обнаружены две многокомпонентные кристаллические формы, а именно тригональный ильменит ( $\text{ZnSnO}_3$ ) [9] и кубическая шпинель ( $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$ ) [10]. Фаза ильменита обладает ограниченной термической стабильностью и, например, в объемных образцах переход из фазы  $\text{ZnSnO}_3$  в фазы  $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$  и  $\text{SnO}_2$  наблюдается при температуре ниже  $600^\circ\text{C}$ , но скорость перехода очень мала [9]. Как было показано ранее [10], ширина запрещенной зоны  $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$  составляет 3,35 эВ. Таким образом, в соответствии с соотношениями фаз  $\text{ZnO}$  и  $\text{SnO}_2$  можно предположить, что пленки (образцы № 2...4) содержат



**Рис. 4. Спектры поглощения тонких пленок  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  (образцы № 5 – № 7) для прямозонных фундаментальных переходов в координатах  $(ahv)^2 = f(hv)$**

Fig. 4. Spectra of absorption of thin films  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  (samples № 5 – № 7) for the direct band fundamental junctions in  $(ahv)^2 = f(hv)$  coordinates



**Рис. 5. Микрорельеф тонкой пленки  $\text{ZnO}-\text{SnO}_2$  с концентрацией атомов Sn 10,11 ат. %, Zn 41,03 ат. % (a); профиль распределения неоднородностей поверхности (нм) пленки (образец № 8) (b)**

Fig. 5. Microrelief of the thin film of  $\text{ZnO}-\text{SnO}_2$  with the concentration of atoms of Sn of 10,11 at. %, of Zn of 41,03 at. % (a); profile of distribution of the surface heterogeneities (nm) of the film (sample № 8) (b)

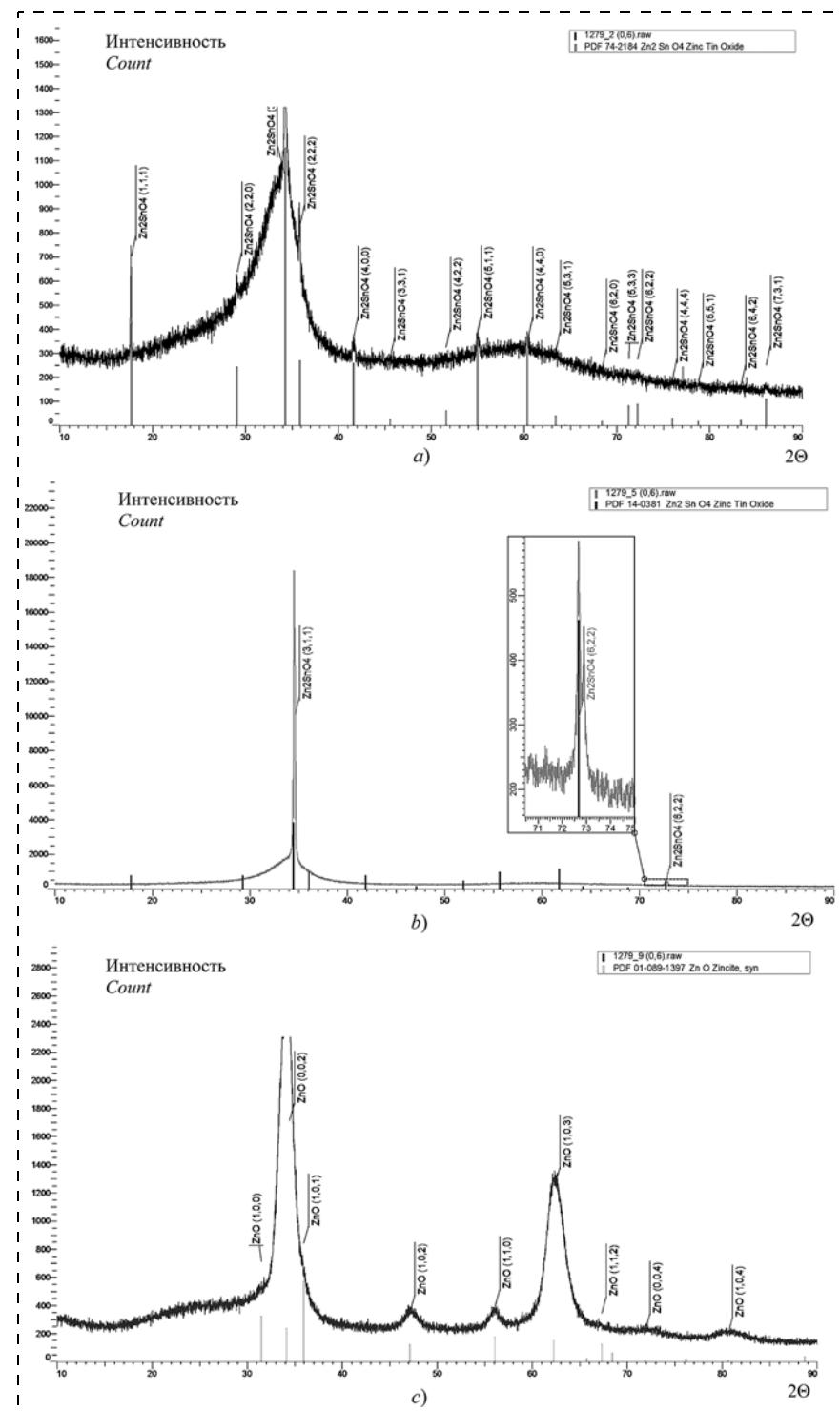
аморфную фазу  $ZnSnO_3$  (соотношение  $ZnO:SnO_2$  как 1:1), а образцы № 5...7 содержат аморфную фазу  $Zn_2SnO_4$  (соотношение  $ZnO:SnO_2$  как 2:1), которая характеризуется достаточно низкими значениями удельного сопротивления и может быть использована в аморфном виде для изготовления прозрачных проводящих слоев в фотовольтаике или проводящих истока, стока и затвора тонкопленочного полевого транзистора.

Оптические свойства аморфных пленок  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  разного состава оценивались с точки зрения их прозрачности в видимом диапазоне света и значений ширины запрещенной зоны. На рис. 3 приведены спектры пропускания образцов № 5...7, содержащих фазу  $Zn_2SnO_4$ . Обнаружено, что прозрачность всех образцов в видимом диапазоне имеет значения  $T = 70\ldots90\%$ , наибольшей прозрачностью  $T = 90\%$  характеризуется образец № 5. Из интерференционной части спектра пропускания выполнена оценка значений коэффициентов преломления исследованных пленок [11], которые равны  $n = 2,3$  для образца № 5,  $n = 2,6$  для образца № 6 и  $n = 2,3$  для образца № 7.

Спектры поглощения в координатах  $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$  для этих образцов приведены на рис. 4. Установлено, что спектр поглощения пленок хорошо спрямляется в координатах  $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$ , что свидетельствует о прямых межзонных переходах [1]. Ширина запрещенной зоны образцов № 5—7 составляет  $3 \pm 0,1$  эВ и уменьшается по мере роста концентрации Zn в образцах. Полученные значения  $\Delta E_g$  меньше, чем измеренные ранее у массивных образцов [10], по-видимому, из-за большой дефектности и избытка вакансий кислорода в напыленных пленках.

Сканирование поверхности образцов с использованием атомно-силового микроскопа позволило получить представление о микрорельефе исследуемых тонких пленок  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$ . На рис. 5 приведены изображения микро-

рельефа (*a*) и профиля распределения неоднородностей поверхности (*b*) (образец № 8 — концентрация атомов Sn 10,1 ат. %, Zn 41,0 ат. %). На исследованной площади перепад высот рельефа составил порядка 14 нм. По профилю распределения



**Рис. 6. XRD анализ тонких пленок  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  после отжига при  $T = 580\text{ }^{\circ}\text{C}$  в течение 6 ч: *a* — образец № 2 с соотношением  $ZnO$  и  $SnO_2$  как 1:1; *b* — образец № 5 с соотношением  $ZnO$  и  $SnO_2$  как 2:1; *c* — образец № 9, содержащий 97 %  $ZnO$**

**Fig. 6. XRD analysis of thin films  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  after annealing at  $T = 580\text{ }^{\circ}\text{C}$  during 6 h: *a* — sample № 2 with correlation of  $ZnO$  and  $SnO_2$  of 1:1; *b* — sample № 5 with correlation of  $ZnO$  and  $SnO_2$  of 2:1; *c* — sample № 9, containing 97 % of  $ZnO$**

высоты неоднородностей можно визуально оценить размер поверхностных агломератов, находящихся на поверхности образца, который составляет от 10 до 18 нм. При анализе образцов с различной концентрацией ZnO и SnO<sub>2</sub> было выяснено, что при увеличении доли оксида цинка в образцах шероховатость поверхности пленки снижается.

Длительный высокотемпературный отжиг на воздухе металлооксидных пленок приводит к их доокислению и кристаллизации [6]. Например, пленка SnO<sub>2</sub> кристаллизуется после нескольких часов отжига на воздухе при 500 °C, а пленка ZnO кристаллизуется при температурах выше 570 °C. На рис. 6 представлен XRD анализ пленок (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> (образцы № 2, № 5 и № 9) после отжига при температуре 580 °C в течение 6 ч. У всех образцов после отжига увеличилась прозрачность на (5...10) % и возросло электросопротивление за счет доокисления пленок на воздухе.

Образец № 2 (рис. 6, a), содержащий вдвое больше атомов Zn по сравнению с атомами олова, только начал кристаллизоваться в фазе Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>, оставаясь в основном в аморфном состоянии. То есть аморфная фаза Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> проявляет высокую устойчивость при высоких (580 °C) температурах. Рентгеновский спектр образца № 2 (рис. 6, a) свидетельствует о его аморфном состоянии с небольшим присутствием кристаллической фазы Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>. Эти образцы имеют в своем составе примерно одинаковое количество ZnO и SnO<sub>2</sub> (1:1) и могут содержать фазы как ильменита (ZnSnO<sub>3</sub>), так и шпинели (Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>). Однако на рентгенограмме наблюдаются только слабые пики Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>, возможно, из-за низкой термической устойчивости фазы ZnSnO<sub>3</sub>, переходящей при термообработке в фазу Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> [9].

Образец № 5 характеризуется соотношением ZnO и SnO<sub>2</sub> как 2:1 и в его составе наиболее вероятно присутствие фазы Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>. Это предположение подтверждается структурой рентгеновского спектра (рис. 6, b), который свидетельствует о наличии кристаллической фазы Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> и интенсивных рефлексах от плоскостей (311) и (622).

Пленка ZnO, содержащая менее 3 ат. % SnO<sub>2</sub>, после термообработки на воздухе при 580 °C в течение 6 ч начала кристаллизоваться (рис. 6, c). Широкие рефлексы на рентгеновском спектре указывают на малый размер зерен кристаллов ZnO.

Таким образом, электрофизические свойства образцов № 5—№ 7, наиболее подходящих по своим параметрам для использования в прозрачной электронике, обусловлены наличием в их составе фазы кубической шпинели Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>.

## Заключение

Пленки переменного состава (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> с  $x = 0 \dots 0,5$  изготовлены распылением составной мишени из керамических фрагментов ZnO и SnO<sub>2</sub>. Установлен характер влияния элементного состава пленок на их электрические и оптические свойства и обнаружено, что все пленки в аморфном состоянии имеют высокую электропроводность и прозрачность в видимом диапазоне света.

Наибольшей электропроводностью обладают пленки состава (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> в соотношении 2:1, при котором образуется фаза кубической шпинели Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>. Эти пленки в аморфном виде могут использоваться в прозрачной электронике в качестве проводящих слоев и покрытий либо в качестве истока, стока и затвора тонкопленочного полевого транзистора.

*Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания министерства науки и образования РФ грант № 3.574.2014/К на выполнение научно-исследовательской работы в сфере научной деятельности.*

## Список литературы

1. Wager J. F. Transparent electronics // Science. 2003. Vol. 300. P. 1245–1246.
2. Ooa T. Z., Chandrab R. D., Yantaraa N., Prabhakarb R. R. Zinc Tin Oxide (ZTO) electron transporting buffer layer in inverted organic solar cell // Organic Electronics. 2012. Vol. 13. P. 870–874.
3. Minami T., Nanto H., Shooji S., Takata S. The stability of zinc oxide transparent electrodes fabricated by R. F. magnetron sputtering // Thin Solid Films. 1984. Vol. 111. P. 167–174.
4. Gorr P., Holzer P., Riedl T., Kowalsky W. Stability of transparent zinc tin oxide transistors under bias stress // Appl. Phys. Lett. 2007. Vol. 90. P. 063502.
5. Lampe V., Muller J. Thin film oxygen sensors made of reactively sputtered ZnO // Sens. Actuators. 1989. Vol. 18. P. 269–284.
6. Рембеза С. И., Кошелева Н. Н., Рембеза Е. С., Свистова Т. В. и др. Синтез многокомпонентных металлооксидных пленок различного состава (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> ( $x = 1-0,5$ ) // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48, № 8. С. 1147–1151.
7. Рембеза С. И., Кошелева Н. Н., Рембеза Е. С., Свистова Т. В. и др. Многокомпонентные наноструктурированные пленки (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> ( $x = 0,5 \dots 1$ ) для газовой сенсорики и прозрачной электроники // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 8. С. 32–36.
8. Золотухин И. В., Калинин Ю. Е., Стогней О. В. Новые направления физического материаловедения. Воронеж: Воронежский государственный технический университет, 2000. 360 с.
9. Kovacheva D., Petrov K. Preparation of crystalline ZnSnO<sub>3</sub> from Li<sub>2</sub>SnO<sub>3</sub> by low-temperature ion exchange // Solid State Ionics. 1998. Vol. 109. P. 327–332.
10. Young D. L., Moutinho H., Yan Y., Coutts T. J. Growth and characterization of radio frequency magnetron sputter-deposited zinc stannate, Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>, thin films // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 92. P. 310–319.
11. Рембеза С. И., Синельников Б. М., Рембеза Е. С., Каргин Н. Н. Физические методы исследования материалов твердотельной электроники. Ставрополь: СевКавГТУ, 2002, 432 с.

**S. I. Rembeza<sup>1\*</sup>**, D. Sc., Professor, Head of Chair, rembeza@yandex.ru,  
**N. N. Kosheleva<sup>1</sup>**, Ph. D., Associate Professor, **T. V. Svitsova<sup>1</sup>**, Ph. D., Associate Professor,  
**E. S. Rembeza<sup>2</sup>**, D. Sc., Professor, **B. L. Agapov<sup>3</sup>**, Ph. D., Leading Engineer,  
**E. Yu. Plotnikova<sup>1</sup>**, Ph. D., Associate Professor, **S. A. Belousov<sup>1</sup>**, Postgraduate Student,  
**A. A. Nosov<sup>1</sup>**, Undergraduate

<sup>1</sup> Voronezh State Technical University, Voronezh

<sup>2</sup> Voronezh State University, Voronezh

<sup>3</sup> Electronic Engineering Research Center, Voronezh

## Electrophysical Properties of $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$ ( $x = 0 \dots 0.5$ ) Films for Transparent Electronics

*Thin films of variable composition  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  ( $x = 0 \dots 0.5$ ) were prepared in the Ar environment by the method of ion-beam sputtering of targets composed from  $SnO_2$  and  $ZnO$  bars. The influence of the element composition of  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  ( $x = 0 \dots 0.5$ ) films on their structure, electrophysical and optical properties was investigated. The optimal proportions of zinc and tin oxides for application of the films in the devices for transparent electronics were determined.*

**Keywords:** ceramic target, ion-beam sputtering, element composition, electrical properties, optical properties

### Introduction

Wide-zone metal-oxide semiconductors of  $SnO_2$ ,  $ZnO$ ,  $In_2O_3$  have the width of the forbidden zone more than 3 eV [1], they are transparent in the visible spectrum and are applied for manufacture of the solar elements [2], transparent current-carrying coatings [3], field transistors [4], gas sensors [5] and other products. For use of the oxide semiconductors in the microelectronic devices the materials of the films should have concrete parameters and meet certain requirements to the concentration and mobility of the charge carriers, and also to the transparency in the visible range of the optical spectrum. The electric properties of the metallic oxides can be changed due to doping, use of impurities or synthesis of multicomponent oxides, for example,  $SnO_2$  with additives of  $ZnO$  [6].

The aim of the article is to investigate the influence of the composition of films  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  at  $x = 0 \dots 0.5$  on their electrophysical properties and to estimate a possibility of application of the multicomponent metallic oxide films in the products of transparent electronics.

### Materials and methods of the experiment

At the first stage of production of  $(SnO_2)_x(ZnO)_{1-x}$  thin films by the hydrothermal method the powders of  $ZnO$  (99.97 %) and  $SnO_2$  (99.97 %) were synthesized with the grain sizes of 7 and 4.8 nm [6]. Then ceramic shots (1 × 7.5 cm in size) were made from the powders of the metallic oxides by the method of dry pressing.

The ceramic shots of  $ZnO$  and  $SnO_2$  were formed into a composite target [7] for the ion-beam scattering [8]. The target had length of 27 cm, width of 7.5 cm and contained 23 shots of  $ZnO$  and 4 shots of  $SnO_2$

(fig. 1). Glasses were used as substrates for the micro-preparations (2.5 × 7.5 cm) with the known transmission spectrum. The substrates were fixed in the scattering installation at the distance of 80 mm, parallel to the target. The target scattering was done in the argon atmosphere under pressure of  $6 \times 10^{-4}$  Torr. The process time was 300 min at the substrate temperature of 80 °C.

The X-ray microanalysis of the samples was carried out by the energy-dispersive analysis of the secondary electrons on JXA-840 device in the following mode: the accelerating voltage was from 10 up to 15 keV, the diameter of the beam was about 1 micrometer, the accuracy of the element composition was about 0.01 at. % for the heavy metals. Measurement of the thickness of the deposited samples was done on MII-4 interferential microscope. Surface resistance of the thin films was measured by the four-probe method on TsIUS-4 installation. For determination of the specific resistance, the surface resistance was multiplied by the thickness of the film. The range of measurements of the surface resistance was  $0.1 \dots 10^7 \Omega/\square$  with an error of  $\pm 4.5\%$ . The distance between the probes in the four-probe head was equal to  $(1 \pm 0.02)$  mm.

The degree of crystallization of the samples and their phase composition was investigated by x-ray diffraction (XRD) on Bruker 2D Phazer spectrometer.

The optical properties of the synthesized films were investigated by means of SPEKS CPP-715M two-beam spectrometer. The films' transmission spectrum was determined, on the basis of which the absorption coefficient was calculated and the width of the forbidden zone of the metallic oxide films of different compositions was defined.

Scanning of the surface by FemtoScan — 001 atomic-force microscope provided an idea about the micro-relief of the thin films. The resolution power of the method was 0.1...1 nm (horizontal) and 0.01 nm (vertical). Visualization was done by means of the computer graphics in the form of 3D- and 2D-images. Accuracy of positioning of the needle was 2 Å. Measurement error equaled to 2.5 %.

## Results and their discussion

It was established that the average thickness of the films  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  was equal to  $2.9 \pm 0.1 \mu\text{m}$ , and the average speed of their growth did not exceed  $v_{\text{cp}} = 10 \text{ nm/min}$ .

Fig. 1 presents distribution of the element composition of the atoms of Zn, Sn and O in samples № 1—10 (upper part of the figure) and placement of the samples of ZnO and SnO<sub>2</sub> along the scattered target (lower part of the figure). Analysis of the element composition of the samples demonstrated, that in the area with a small number of samples of SnO<sub>2</sub> (samples № 6—10) the concentration of the atoms of tin varied from 4 to 1 at. %, which corresponded, accordingly, to 12 and 3 at. % of SnO<sub>2</sub>. In the field of samples № 1—4, where there were three shots of tin oxide and 10 shots of zinc oxide, the quantity of zinc was approximately twice as much as that of tin (30 at. % of Zn and 16 at. % of Sn). Distribution of Sn and Zn in all the samples was from 16.53 up to 0.96 at. % of tin and from 28.66 up to 48.64 at. % of Zn (table. 1). Thus, the chosen placement of the ceramic shots of ZnO and SnO<sub>2</sub> in a compound target allowed to make a set of samples  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  with values of  $x = 0.03...0.5$ .

According to the data of the X-ray-phase analysis, all the films had an amorphous structure. Fig. 2 and table 2 present for samples № 2—9 the values of the specific resistance measured by the method of Van der Pauw, and also the values of the concentrations and the mobility of the charge carriers defined from the effect of Hall. Apparently, the electrical resistance of the amorphous films monotonously decreases from  $\rho = 14.5 \Omega \cdot \text{cm}$  on sample № 2 (50 at. % of SnO<sub>2</sub>) down to  $\rho = 0.07 \Omega \cdot \text{cm}$  on sample № 9 (3 at. % of SnO<sub>2</sub>). In the same monotonous way, with the reduction of the concentration of SnO<sub>2</sub> in  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  films the mobility of the charge carriers increased several times.

Of most interest in  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  amorphous films was the behavior of the concentration of the charge carriers, which changed from  $(4...6) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in samples № 2—4 (content of SnO<sub>2</sub> 50 at. % and 40 at. %) up to  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  in samples № 5 (30 at. % of SnO<sub>2</sub>) and № 6 (20 at. % of SnO<sub>2</sub>), then decreased down to the level of  $(3...6) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  in samples № 7—9 (12 at. % and 3 at. % of SnO<sub>2</sub>, accordingly).

Such a behavior could be caused by the changes in the phase composition of the synthesized films.

In samples  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  with a big content of SnO<sub>2</sub> (over 20 at. %) two multi-component crystal forms were discovered earlier, namely, trigonal ilmenite ( $\text{ZnSnO}_3$ ) [9] and cubic spinel ( $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$ ) [10]. The phase of ilmenite had a limited thermal stability and, for example, in the volume samples a transition from the phase of  $\text{ZnSnO}_3$  into the phases of  $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$  and SnO<sub>2</sub> was observed at temperature below 600 °C, but the speed of the transition was very slow [9]. As it was demonstrated above [10], the width of the forbidden zone of  $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$  was 3.35 eV. Thus, according to the correlations of the phases of ZnO and SnO<sub>2</sub> it is possible to assume, that the films (samples № 2...4) contained the amorphous phase of  $\text{ZnSnO}_3$  (correlation of ZnO:SnO<sub>2</sub> was 1:1), and samples № 5...7 contained the amorphous phase of  $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$  (correlation of ZnO:SnO<sub>2</sub> was 2:1), which was characterized by rather low values of the specific resistance and could be used in the amorphous form for manufacturing of the transparent conducting layers in photovoltaics or the conducting source, drain and gate of a thin-film field transistor.

The optical properties of the amorphous films  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$  of different compositions were estimated from the point of view of their transparency in the visible range of light and values of the width of the forbidden zone. Fig. 3 presents transmission spectra in the visible range of light of samples № 5...7, containing phase  $\text{Zn}_2\text{SnO}_4$ . It was discovered that the transparency of the samples in the visible range had values of  $T = 70...90 \%$ , and sample № 5 had the highest transparency of  $T = 90 \%$ . Concerning the interferential part of the transmission spectrum an estimation was done of the values of the refraction coefficients of the films [11], which were  $n = 2.3$  for sample № 5,  $n = 2.6$  for sample № 6 and  $n = 2.3$  for sample № 7.

The absorption spectra in the co-ordinates  $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$  for these samples are presented in fig. 4. It was established that the absorption spectra of the films was well rectified in the co-ordinates  $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$ , which testified to the presence of straight inter-zone junctions [1]. The width of the forbidden zone of samples № 5—7 had the value of  $3 \pm 0.1 \text{ eV}$  and it diminished with the growth of concentration of Zn in the samples. The obtained values of  $\Delta E_g$  were smaller than the ones of the earlier measured massive samples [10], apparently, due to the higher defectiveness and excessive vacancies of hydrogen in the deposited films.

Scanning of the surfaces of the samples with the use of an atomic-force microscope provided an idea about the microrelief of the investigated thin films  $(\text{SnO}_2)_x(\text{ZnO})_{1-x}$ . Fig. 5 presents the microrelief im-

ages (*a*) and the profile of distribution of the surface heterogeneities (*b*) (sample № 8 — the concentration of the atoms of Sn was 10.1 at. %, of Zn — 41.0 at. %). On the area the difference in the relief heights was about 14 nm. By the profile of distribution of the height heterogeneities it was possible to estimate the size of the surface agglomerates, which was from 10 up to 18 nm. As a result of the analysis of the samples with various concentrations of ZnO and SnO<sub>2</sub> it was found out, that with an increase of the share of zinc oxide in the samples the roughness of the film surface decreased.

A prolonged high-temperature annealing of the films in the air leads to their additional oxidation and crystallization [6]. For example, SnO<sub>2</sub> film crystallizes after several hours of annealing in the air at 500 °C, while ZnO film crystallizes at the temperature over 570 °C. Fig. 6 presents XRD analysis of (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> films (samples № 2, № 5 and № 9) after annealing at 580 °C during 6 hours. After annealing the transparency of all the samples increased by (5...10) % and so did the electrical resistance due to additional oxidation of the films in the air.

Sample № 2 (fig. 6, *a*) containing twice as much of Zn atoms in comparison with the atoms of tin, just started to crystallize in Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> phase, remaining in the amorphous state. That is, the amorphous phase of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> demonstrates high stability at temperatures up to 580 °C. The x-ray spectrum of sample № 2 (fig. 6, *a*) testifies to its amorphous state with a small presence of the crystal phase of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>. These samples have in their composition roughly the same quantity of ZnO and SnO<sub>2</sub> (1:1) and may contain ilmenite (ZnSnO<sub>3</sub>) and spinels (Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>). However, only weak peaks of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> are observed in the roentgenogram, probably due to a low thermal stability of ZnSnO<sub>3</sub> during transition to Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> phase [9].

Sample № 5 is characterized by correlation of ZnO and SnO<sub>2</sub> of 2:1, and presence of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> phase is most probable in its composition. This assumption is proved by the X-ray spectrum (fig. 6, *b*), which testifies to the presence of the crystal phase of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> and intensive reflexes from the planes (311) and (622).

ZnO film, containing less than 3 at. % of SnO<sub>2</sub> after a thermal processing in the air at 580 °C during 6 hours, began to crystallize (fig. 6, *c*). The wide reflexes in the X-ray spectrum point to the small dimensions of ZnO crystal grains.

Thus, the electrophysical properties of samples № 5—№ 7, the most suitable by their parameters for the transparent electronics, are explained by the presence in their composition of the phase of the cubic spinel of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>.

## Conclusion

Films of variable composition of (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> with x = 0...0.5 were made by scattering of a compound target from the ceramic fragments of ZnO and SnO<sub>2</sub>. The authors established the character of the influence of the element composition of the films on their electrical and optical properties and discovered that all the films in the amorphous state had high electroconductivity and transparency in the visible range of light.

Films of (SnO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(ZnO)<sub>1-x</sub> composition had the highest electroconductivity in correlation of 2:1, at which the phase of the cubic spinel of Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> was formed. These films in an amorphous form can be used in the transparent electronics as the conductor layers and coverings, or as a source, drain and gate of a thin-film field transistor.

*The work was carried out with the financial support for R & D of the Ministry of Science and Education of the Russian Federation (grant № 3.574.2014/K).*

## References

1. Wager J. F. Transparent electronics, *Science*, 2003, vol. 300, pp. 1245–1246.
2. Ooa T. Z., Chandrab R. D., Yantaraa N., Prabhakarb R. R. Zinc Tin Oxide (ZTO) electron transporting buffer layer in inverted organic solar cell, *Organic Electronics*, 2012, vol. 13, pp. 870–874.
3. Minami T., Nanto H., Shooji S., Takata S. The stability of zinc oxide transparent electrodes fabricated by R. F. magnetron sputtering, *Thin Solid Films*, 1984, vol. 111, pp. 167–174.
4. Gorn P., Holzer P., Riedl T., Kowalsky W. Stability of transparent zinc tin oxide transistors under bias stress, *Appl. Phys. Lett.*, 2007, vol. 90, pp. 063502.
5. Lampe V., Muller J. Thin film oxygen sensors made of reactively sputtered ZnO, *Sens. Actuators*, 1989, vol. 18, pp. 269–284.
6. Rembeza S. I., Kosheleva N. N., Rembeza E. S., Svitstova T. V., Plotnikova E. Ju., Suvaci E., Ozel E., Tunçolü G., Açıksarı C. *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2014, vol. 48, no. 8, pp. 1147–1151 (in Russian).
7. Rembeza S. I., Kosheleva N. N., Rembeza E. S., Svitstova T. V., Plotnikova E. Ju., Agapov B. L., Grechkina M. V. *Nano- i mikrosistemnaja tehnika*, 2014, vol. 8, no. 8, pp. 32–36 (in Russian).
8. Zolotuhin I. V., Kalinin Ju. E., Stognej O. V. *Novye napravlenija fizicheskogo materialovedenija* (New directions of physical materials science), Voronezh, VGU, 2000, 360 p. (in Russian).
9. Kovacheva D., Petrov K. Preparation of crystalline ZnSnO<sub>3</sub> from Li<sub>2</sub>SnO<sub>3</sub> by low-temperature ion exchange, *Solid State Ionics*, 1998, vol. 109, pp. 327–332.
10. Young D. L., Moutinho H., Yan Y., Coutts T. J. Growth and characterization of radio frequency magnetron sputter-deposited zinc stannate, Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>, thin films, *J. Appl. Phys.*, 2002, vol. 92, pp. 310–319.
11. Rembeza S. I., Sinel'nikov B. M., Rembeza E. S., Karagin N. N. *Fizicheskie metody issledovanija materialov tverdogo tel'noj elektroniki* (Physical research methods of materials solid state electronics), Stavropol: SevKavGTU, 2002, 432 p. (in Russian)

**Т. И. Данилина**, канд. техн. наук, проф., e-mail: danti123@mail.ru, **И. А. Чистоедова**, канд. техн. наук, доц., e-mail: innachist@mail.ru, **А. А. Попов**, студент, e-mail: part.94@yandex.ru  
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск

## ФОРМИРОВАНИЕ МИКРОРЕЛЬЕФА И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ВЛИЯНИЯ НА КОЭФФИЦИЕНТ ОПТИЧЕСКОГО ВЫВОДА СВЕТОДИОДА НА ОСНОВЕ GaN

Поступила в редакцию 10.05.2016

*Исследовано влияние просветляющих покрытий на световыводящей поверхности светодиода на основе GaN при наличии в них микрорельефа различной конфигурации на коэффициент оптического вывода. Для решения поставленной задачи разработана технология формирования микрорельефа в покрытиях на основе SiO<sub>2</sub> и реализовано моделирование влияния размеров и конфигурации микрорельефа на коэффициент оптического вывода.*

**Ключевые слова:** светодиод на основе GaN, микрорельеф, микроострия, коэффициент оптического вывода, электронно-лучевая литография, прямая контактная фотолитография, просветляющие оптические покрытия, NEMO LED

### Введение

В настоящее время одной из основных задач в исследовании полупроводниковых светодиодов на основе нитрида галлия и его твердых растворов является увеличение внешнего квантового выхода светодиода [1].

Внешний квантовый выход излучения  $\eta_{ext}$  светодиодного кристалла определяется двумя основными параметрами: внутренним квантовым выходом  $\eta_{int}$  и коэффициентом оптического вывода  $\eta_{extract}$ :

$$\eta_{ext} = \eta_{int}\eta_{extract}.$$

Эффект полного внутреннего отражения, заключающийся в локализации света внутри структуры светодиода, снижает вероятность выхода фотонов за пределы полупроводника. Поэтому вводится коэффициент оптического вывода излучения, определяемый как отношение числа фотонов, излученных светодиодом, к числу фотонов, образованных в активной области в единицу времени [2]. Коэффициент оптического вывода можно оценить следующим образом:

$$\eta_{extract} = \frac{P/(hv)}{P_{int}/(hv)},$$

где  $P$  — мощность оптического излучения, выходящего за пределы светодиода;  $P_{int}$  — мощность оптического излучения из активной области;  $hv$  — энергия фотона.

Таким образом, эффект полного внутреннего отражения на границе материала с высокой оптической плотностью (полупроводника) и материала с низкой оптической плотностью (сапфировой подложки и (или) воздуха) является ключевым фактором, ограничивающим эффективность вывода света. Для светодиодных кристаллов на основе InGaN/GaN-гетероструктур критический угол со-

ставляет ~23° (показатели преломления GaN и сапфира соответственно 2,5 и 1,6). Таким образом, лишь малая часть фотонов, падающих на границу раздела под углом, лежащим в диапазоне 0...23°, способна покинуть кристалл.

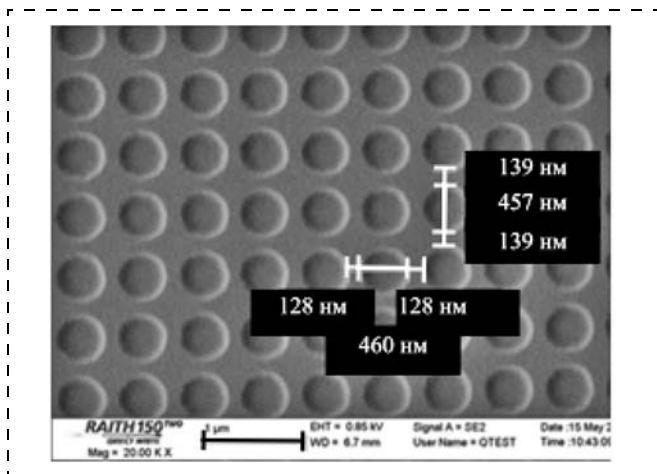
Повышение внешнего квантового выхода излучения возможно за счет создания рассеивающих свет поверхностей и использования просветляющих оптических покрытий.

Целью данной работы является разработка технологии формирования микрорельефа в просветляющих покрытиях и моделирование коэффициента оптического вывода.

### Технология формирования микрорельефа с помощью электронно-лучевой литографии

Технология формирования микрорельефных поверхностей в просветляющих покрытиях разрабатывалась на примере пленок SiO<sub>2</sub> с использованием электронно-лучевой литографии и контактной фотолитографии. Способ изготовления светодиода с использованием микрорельефа в просветляющем покрытии, полученным методом электронно-лучевой литографии, защищен патентом [3].

Для создания микрорельефа методом электронно-лучевой литографии на полупроводниковую пластину наносилась пленка SiO<sub>2</sub> с помощью плазмохимического осаждения (ПХО) толщиной 80 нм. Резистивную маску формировали в слое позитивного резиста ПММА 950. Экспонирование и совмещение осуществлялось на электронном литографе Raith 150<sup>two</sup> с ускоряющим напряжением 30 кВ и дозой экспонирования  $D = 450$  мкКл/см<sup>2</sup>. Экспонированные области резиста проявлялись в смеси органических растворителей метилизобутилкетона и изопропилового спирта. Время проявления определялось экспериментально по качеству вскрытых окон в резисте. Через полученную резистив-



**Рис. 1. Изображение микрорельефа, полученного в слое  $\text{SiO}_2$  методом электронно-лучевой литографии (время травления образца 40 с)**

*Fig. 1. Image of the microrelief received in  $\text{SiO}_2$  layer by the method of electron-beam lithography (time of etching of the sample was 40 s)*

ную маску с диаметром окон 0,5 мкм и расстоянием между ними 0,5 мкм проводилось изотропное травление слоя  $\text{SiO}_2$ . Контроль полученного изображения в  $\text{SiO}_2$  осуществлялся с помощью электронного микроскопа Raith 150<sup>two</sup>. Вид микрорельефа определялся временем травления. На рис. 1 представлено изображение микрорельефа, полученного в слое  $\text{SiO}_2$  методом электронно-лучевой литографии.

Из рис. 1 видно, что после травления в течение 40 с имеется регулярная структура в виде круглых отверстий в слое  $\text{SiO}_2$  глубиной 70 нм, диаметром 460 нм и расстоянием между ними 130 нм. Плотность отверстий составляла  $2,8 \cdot 10^8$  шт./см<sup>2</sup>. Между углублениями в слое  $\text{SiO}_2$  образуется микрорельеф в виде пирамидок, которые расположены на сплошном слое  $\text{SiO}_2$  толщиной 10 нм. При увеличении времени травления до 85 с в слое  $\text{SiO}_2$  образуется микрорельеф в виде микроострий с регулярной структурой. Таким образом, при реализации метода электронно-лучевой литографии за счет изменения времени травления слоя  $\text{SiO}_2$  можно управлять конфигурацией микрорельефа.

### Технология формирования микрорельефа с помощью контактной фотолитографии

Для формирования микроострий методом прямой и обратной ("взрывной") контактной фотолитографии использовалась двухслойная маска на основе резистов ЭРП-40 — ФП-051Шу-0,5. Экспонирование проводилось через фотошаблон с диаметром отверстий 1,31 мкм и расстоянии между окнами 1,43 мкм. Методом обратной фотолитографии в слое  $\text{SiO}_2$  были получены микроострия в виде усеченных трапеций высотой 439 нм, размером верхнего основания 1,384 мкм, размером нижнего

основания 1,83 мкм (рис. 2). Плотность острей составляет  $2,5 \cdot 10^7$  шт./см<sup>2</sup>.

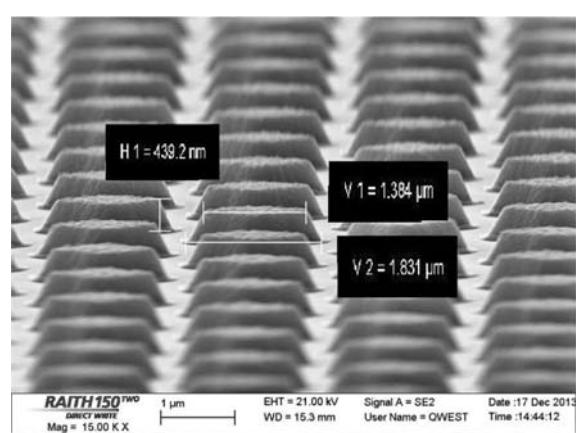
Микрорельеф, полученный методом прямой фотолитографии, представляет собой упорядоченные, местами соединенные между собой микроострия в оставшемся слое  $\text{SiO}_2$ . Высота острей 439 нм, расстояние между ними 1,5 мкм, диаметр нижнего основания 0,43 мкм. Плотность острей составляет  $1,6 \cdot 10^8$  шт./см<sup>2</sup>.

### Моделирование коэффициента оптического вывода

Для исследования влияния микрорельефной поверхности на коэффициент оптического вывода было проведено моделирование с помощью программного продукта NEMO LED, разработанного на кафедре физической электроники ТУСУР [4].

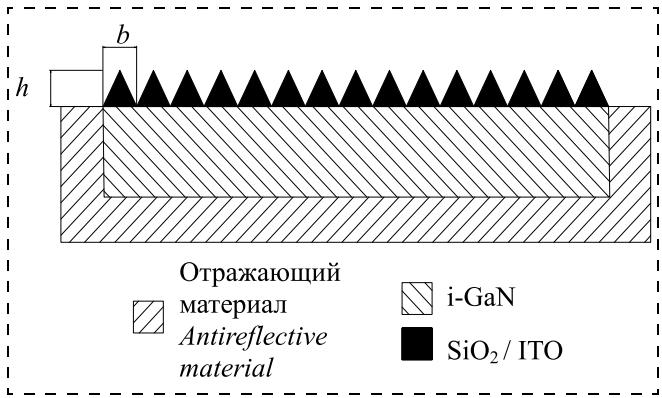
Данный программный продукт позволяет моделировать распространение светового луча в многослойных структурах с разным показателем преломления слоев, а также исследовать влияние микрорельефных просветляющих покрытий на относительное число квантов света, покинувших кристалл (коэффициент оптического вывода).

Для исследования влияния микрорельефа, сформированного в просветляющем покрытии из  $\text{SiO}_2$  и ITO с оптической толщиной  $\lambda/2$ , в программном продукте NEMO LED была разработана модель, в которой боковые и нижняя грани кристалла нитрида галлия (показатель преломления  $n_{\text{GaN}} = 2,5$ ) закрывались отражающим материалом. На верхнюю световыводящую грань кристалла наносилась тонкая пленка с меньшим, чем у нитрида галлия, показателем преломления ( $n_{\text{SiO}_2} = 1,43$ ,  $n_{\text{ITO}} = 1,9$ ), а в ней формировался микрорельеф различной конфигурации (рис. 3). Излучение в данной структуре возникает в слое нитрида галлия.



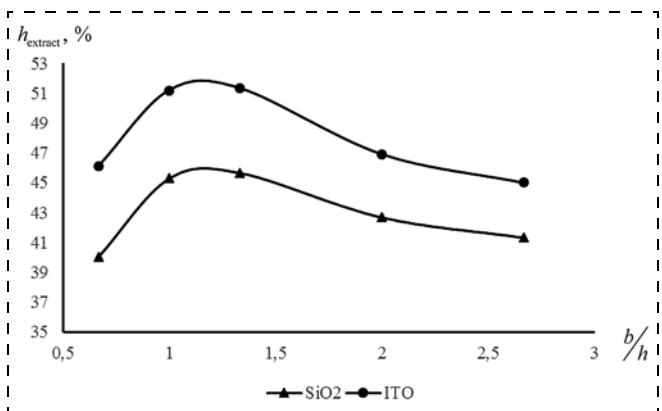
**Рис. 2. Изображение микрорельефа, полученного в слое  $\text{SiO}_2$  методом обратной фотолитографии**

*Fig. 2. Image of the microrelief received in  $\text{SiO}_2$  layer by the method of reverse photolithography*



**Рис. 3. Модельное представление структуры с микрорельефом в оптическом покрытии**

*Fig. 3. Modeling presentation of the structure with a microrelief in an optical coating*



**Рис. 4. Зависимость коэффициента оптического вывода от соотношения ширина/высота микроострия**

*Fig. 4. Dependence of the optical output coefficient on the width/height correlation of a micropoint*

Данная модель позволяет исследовать эффективность вывода света с верхней грани, поскольку учитываются кванты, не испытавшие отражения при прохождении границы между активной областью и световыводящим слоем (GaN). Определяя относительное число квантов, вышедших с верхней грани при различных конфигурациях микрорельефной поверхности, можно оценивать влияние микрорельефа на коэффициент оптического вывода светодиода.

### Анализ результатов моделирования

Анализ полученных результатов моделирования показывает, что для структуры без просветляющего покрытия значение коэффициента оптического вывода составляет  $h_{extract} = 0,37$ . Следовательно, из кристалла вышло только 37 % всех фотонов, прошедших в световыводящий слой GaN из активной области. Нанесение просветляющих покрытий приводит к увеличению коэффициента оптического вывода: для пленки SiO<sub>2</sub> было получено значение  $h_{extract} = 0,41$ , а для пленки ITO  $h_{extract} = 0,43$ .

Формирование микрорельефной поверхности в просветляющем покрытии из SiO<sub>2</sub> в виде пирамидок, полученных методом электронно-лучевой литографии, приводит к увеличению коэффициента оптического вывода до значения  $h_{extract} = 0,44$ . Аналогичные результаты были получены для микрорельефа, сформированного методом обратной контактной фотолитографии.

Установлено, что уменьшение расстояния между пирамидками приводит к дальнейшему увеличению числа квантов света, вышедших из кристалла, при сохранении соотношения размеров нижнего основания пирамидки к верхнему 3:1, что соответствует углу при основании 56,3°.

При моделировании микрорельефа в виде микроострий изменялось соотношение ширины и высоты микроострия  $b/h$ , а также расстояние между остриями. Было установлено, что наибольшим значением коэффициента оптического вывода обладают структуры с микрорельефной поверхностью, где основание острия соизмеримо с его высотой и элементы микрорельефа расположены плотно друг к другу (рис. 4).

Для структур с соотношением  $b/h = 4/3$  было получено максимальное значение коэффициента оптического вывода:  $h_{extract} \approx 51\%$  для просветляющего покрытия из ITO и  $h_{extract} \approx 45,6\%$  для пленки из SiO<sub>2</sub>.

### Заключение

Установлено, что наличие просветляющих покрытий и формирование микрорельефа в них приводит к увеличению коэффициента оптического вывода. Разработанные технологии формирования микрорельефа в просветляющих покрытиях позволяют обеспечить регулярную структуру с высокой плотностью острий  $10^7 \dots 10^8$  шт./см<sup>2</sup>.

Наибольший коэффициент оптического вывода достигается при выполнении требуемого соотношения геометрических размеров и конфигурации микрорельефа, обеспечивающих угол микрорельефа при основании порядка 50...60°.

### Список литературы

1. Данилина Т. И., Попов А. А. Моделирование коэффициента оптического вывода светодиода на основе GaN при наличии микрорельефа на световыводящей поверхности // Доклады Томского гос. ун-та систем управления и радиоэлектроники. 2015. № 4 (38). С. 83—85.
2. Шуберт Ф. Светодиоды: Пер. с англ. Под ред. А. Э. Юновича. 2-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 496 с.
3. Патент 2504867 РФ. Способ изготовления светодиода РФ / Т. И. Данилина, П. Е. Троян, И. А. Чистоедова (РФ). № 2012100323/28, заявл. 10.01.2012, опубл. 20.01.2014. Бюл. № 2.
4. Мухамадеев Р. А., Данилина Т. И. Программа для проектирования светодиодов с повышенным внешним квантовым выходом "NEMO LED" // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2015616575, Апрель, 17, 2015.

## Formation of a Microrelief and Research of its Influence on the Optical Output Coefficient of GaN-based LED

This work is devoted to investigation of the influence on the light output coefficient of the antireflective coatings with different configurations of the micro-relief formed on the light output surface of GaN-based LED. The technology of the micro-relief fabrication in  $\text{SiO}_2$  based antireflective coatings was developed with the use of the electron-beam lithography (EBL) and contact photolithography. In case of EBL the configuration of the micro-relief depends on the etching time. A regular microstructure consisting of pyramids or microedges was obtained and its density equaled to  $2.8 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ . Simulation of the influence of the microrelief of various proportions and configurations on the optical output coefficient was implemented in NEMO LED software. It was discovered, that the micro-relief fabrication with the electron-beam lithography and contact photolithography increased the optical output coefficient. The pyramidal micro-relief surface of  $\text{SiO}_2$  antireflective coating, which was obtained by EBL, increases the optical output coefficient up to 0.44.

**Keywords:** GaN based LED, micro-relief, microedges, optical output coefficient, electron-beam lithography, contact photolithography, antireflective coatings, NEMO LED software, microstructure, density of microedges

### Introduction

One of the primary goals in the research of the semiconductor light-emitting diodes based on gallium nitride and its solid solutions is an increase of the external quantum efficiency of a light-emitting diode [1].

The external quantum efficiency  $\eta_{ext}$  of a light-emitting diode crystal is defined by two key parameters: an internal quantum efficiency  $\eta_{int}$  and the optical output coefficient  $\eta_{extract}$ :

$$\eta_{ext} = \eta_{int}\eta_{extract}$$

The effect of total internal reflection, consisting in localization of the light inside the structure of a light-emitting diode, reduces probability of the photons' escape from a semiconductor. Therefore, a coefficient of optical output of radiation is introduced, defined as the relation of the number of the photons radiated by a light-emitting diode, to the number of the photons formed in the active area in a unit of time [2]. The optical output coefficient can be estimated as follows:

$$\eta_{extract} = \frac{P/(hv)}{P_{int}/(hv)},$$

where  $P$  — power of the optical radiation escaping from a light-emitting diode;  $P_{int}$  — power of the optical radiation from the active area;  $hv$  — energy of a photon.

Thus, the effect of total internal reflection on the border of a material with a high optical density (semiconductor) and a material with a low optical density (a sapphire substrate or air) is the key factor limiting the efficiency of the output of light. For the light-emitting diode crystals based on InGaN/GaN-heterostructures the critical angle is  $\sim 23^\circ$  (the refractive indexes of GaN and sapphire are 2.5 and 1.6). Thus, only a small part of the photons falling on the section border at an angle within the range of  $0\ldots 23^\circ$  can leave a crystal.

An increase of the external quantum efficiency is possible due to creation of the light-dispersing surfaces and use of the antireflective coatings.

The aim of the work is development of a technology for formation of a microrelief in the antireflective coatings and simulation of the optical output coefficient.

### Technology for formation of a microrelief by means of the electron-beam lithography

Formation of the microrelief surfaces in the antireflective coatings was developed on the example of  $\text{SiO}_2$  films with the use of the electron-beam lithography and contact photolithography. The method for manufacture of a light-emitting diode with the use of microrelief in the antireflective coatings, received by electron-beam lithography, is protected by a patent [3].

For creation of a microrelief by means of an electron-beam lithography a  $\text{SiO}_2$  film with thickness of 80 nm was deposited on a semi-conductor substrate by means of plasma-chemical deposition (PCD). A resistive mask was formed in the layer of PMMA 950 positive resist. Exposure and combination were carried out on Raith 150<sup>two</sup> electronic lithographer with accelerating voltage of 30 kV and exposure dose of  $D = 450 \mu\text{mC/cm}^2$ . The exposed areas of the resist were developed in a mix of organic solvents of methyl isobutyl ketone and isopropyl alcohol. Time of development was determined by the quality of the windows opened in the resist. Through a resistive mask with diameter of its windows of 0.5  $\mu\text{m}$  and the distance between them of 0.5  $\mu\text{m}$  an isotropic etching of  $\text{SiO}_2$  layer was done. The image control in  $\text{SiO}_2$  was carried out by means of Raith 150<sup>two</sup> electronic microscope. Image of the microrelief was defined by the etching time. Fig. 1 presents an image of the microrelief received in  $\text{SiO}_2$  layer by the electron-beam lithography.

From fig.1 it is visible, that after etching during 40 s a regular structure appears in the form of round apertures in  $\text{SiO}_2$  layer with depth of 70 nm, diameter of 460 nm and the distance between them of 130 nm. The density of the apertures was  $2.8 \cdot 10^8 \text{ pieces/cm}^2$ . Between the deepenings in  $\text{SiO}_2$  layer a microrelief was formed in the form of pyramids, located on a continuous layer of  $\text{SiO}_2$  with thickness of 10 nm. If the etching time was

increased up to 85 s, a microrelief was formed in  $\text{SiO}_2$  layer in the form of microedges with a regular structure. Thus, during the electron-beam lithography due to the change of the time of etching of  $\text{SiO}_2$  layer it was possible to control the configuration of the microrelief.

### Formation of a microrelief by the contact photolithography

For formation of the microedges by the direct and reverse ("explosive") contact photolithography a two-layer mask on the basis of ERP-40—FP-051Shu-0.5 resists was used. Exposure was done through a photo mask with aperture diameters of 1.31  $\mu\text{m}$  and the distance between the windows of 1.43 micrometers. Due to the reverse lithography in  $\text{SiO}_2$  layer microedges were obtained in the form of truncated trapeziums with the height of 439 nm, the size of the top base of 1.384  $\mu\text{m}$ , and the bottom base of 1.83  $\mu\text{m}$  (fig. 2). The density of the edges was equal to  $2.5 \cdot 10^7$  pieces/ $\text{cm}^2$ .

The microrelief obtained by the direct photolithography was a set of ordered microedges locally connected between themselves in the remaining  $\text{SiO}_2$  layer. The height of the points was 439 nm, the distance between them was 1.5  $\mu\text{m}$ , the diameter of the bottom basis was 0.43  $\mu\text{m}$ . The density of the points was  $1.6 \cdot 10^8$  pieces/ $\text{cm}^2$ .

### Modeling of the optical output coefficient

For research of the influence of a microrelief surface on the optical output coefficient, simulation was done by means of NEMO LED software developed in the Chair of Physical Electronics of Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics [4]. The given product allows us to model propagation of a light beam in the multilayered structures with different refraction indexes of the layers, and investigate the influence of the microrelief antireflective coatings on the relative number of the quanta of light, which escaped from the crystal (optical output coefficient).

For research of the influence of the microrelief in the antireflective coatings from  $\text{SiO}_2$  and ITO with optical thickness of  $\lambda/2$  in NEMO LED software, a model was developed, in which the lateral and bottom faces of the crystal of gallium nitride (refraction index  $n_{\text{GaN}} = 2.5$ ) were covered by a reflecting material. On the top light-extracting face of the crystal side a thin film was deposited with a smaller, than that of gallium nitride, refraction index ( $n_{\text{SiO}_2} = 1.43$ ,  $n_{\text{ITO}} = 1.9$ ), and a micro relief of various configurations was formed in it (fig. 3). Radiation in the structure arose in the layer of gallium nitride.

The given model allows us to investigate the efficiency of the output of light from the top face, because it takes into account the quanta, which had no reflection during the passage of the border between the active area and the light-extracting layer (GaN). By defining the relative number of the quanta, which left the top face at various configurations of the microrelief surface, it is possible to estimate the influence of a microrelief on the coefficient of optical output of a light-emitting diode.

### Analysis of the results of simulation

Analysis of the received results shows, that for a structure without an antireflective coating the optical output coefficient is  $h_{\text{extract}} = 0.37$ . Hence, the crystal was left by 37 % of the photons, which came into the light-extracting layer of GaN from the active area. Deposition of the antireflective coatings increased this coefficient: for  $\text{SiO}_2$  film we received  $h_{\text{extract}} = 0.41$ , and for ITO film —  $h_{\text{extract}} = 0.43$ .

Formation of a microrelief surface in an antireflective coating from  $\text{SiO}_2$  in the form of pyramids, obtained by the electron-beam lithography, resulted in an increase of the optical output coefficient up to  $h_{\text{extract}} = 0.44$ . Similar results were received for a microrelief formed by the reverse contact photolithography.

It was established, that reduction of the distance between the pyramids resulted in the further increase of the number of quanta of light, which escaped from the crystal, with preservation of the correlation of the sizes of the bottom basis of a pyramid to the top one of 3:1, which corresponds to the angle at the basis — 56.3°.

During simulation of a microrelief in the form of microedges the correlation between the width and height of the microedge  $b/h$  changed, and so did the distance between the points. It was established, that the greatest optical output coefficient was in the structures with a microrelief surface, where the edge's basis was commensurable with its height, and the microrelief elements were located densely to each other (fig. 4).

For the structures with the correlation of  $b/h = 4/3$  the maximal value of the optical output coefficient was received:  $h_{\text{extract}} \approx 51$  % for the antireflective coating from ITO and  $h_{\text{extract}} \approx 45.6$  % for the  $\text{SiO}_2$  film.

### Conclusion

It was established, that presence of the antireflective coatings and formation of a microrelief in them increased the optical output coefficient. The technologies developed for formation of a microrelief in the antireflective coatings allow us to ensure a regular structure with a high density of edges —  $10^7 \dots 10^8$  pieces/ $\text{cm}^2$ .

The greatest optical output coefficient can be reached at the demanded correlation of the geometrical sizes and configuration of the microrelief, which ensure a microrelief angle at the basis of about 50...60°.

### References

1. Danilina T. I., Popov A. A. Modelirovaniye koefitsienta opticheskogo vyyoda svetodioda na osnove GaN pri nalichii mikrorel'efa na svetovydyodjashej poverhnosti, *Doklady tomskogo gosudarstvennogo universiteta system opravlenija i radioelektroniki*, 2015, no. 4 (38), pp. 83—85. (in Russian).
2. Shubert F. *Svetodiody*. Per. s angl. Pod red. A. Je. Junovičha. 2<sup>nd</sup> edition. Moscow, FIZMATLIT, 2008. 496 p. (in Russian).
3. Pat. 2504867 RF. *Sposob izgotovlenja svetodioda RF*, T. I. Danilina, P. E. Trojan, I. A. Chistoedova (RF). N 2012100323/28, zayav. 10.01.2012, opubl. 20.01.2014. Bjul N 2. (in Russian).
4. Myhamadeev R. A., Danilina T. I. *Programma dlja proektirovaniya sverodiodov s povyshennym vneshnim kvanovym vyhodom "NEMO LED"*, Svidetel'stvo o gosudarstvennoj registraci program dlja JeVM N 2015616575, April, 17, 2015. (in Russian).

# ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ MICRO- AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

УДК 621.382

**В. К. Смолин**, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., e-mail: niiis@niiis.nnov.ru  
ФГУП "ФНПЦ НИИ измерительных систем им. Ю. Е. Седакова"

## ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ МИКРОЭЛЕКТРОНИКА НА СТРУКТУРАХ С КРЕМНИЕВЫМИ ПОДЛОЖКАМИ

Поступила в редакцию 21.04.2016

Основная цель разработки нового поколения полупроводниковых СВЧ устройств для создания современной беспроводной аппаратуры народохозяйственного, военного и космического назначения — снижение потребляемой мощности, возможность обработки высокоскоростных потоков данных. В рамках данной работы выполнен обзор принципов создания транзисторных структур и монолитных интегральных СВЧ устройств на основе полупроводниковых структур, имеющих в своем составе кремниевую подложку. К таким структурам относятся как собственно пластины монокристаллического кремния с приборными слоями кремния различного типа проводимости, так и гетероструктуры типа "кремний на изоляторе" и "GaN на кремнии". Проведен сравнительный анализ характеристик транзисторных структур различного конструктивного исполнения. Описываются основные приемы формирования полупроводниковых приборных слоев.

**Ключевые слова:** монолитные СВЧ интегральные схемы, кремниевые транзисторы, гетероструктуры, SiGe, GaN

### Введение

В обозримой перспективе лидирующую роль в качестве основного полупроводникового материала сохранит кремний (и кремниевые технологии). С использованием кремниевых подложек производится около 95 % всех полупроводниковых приборов. Кремний является одним из наиболее благоприятных материалов по эффективной мощности в диапазоне 100...2000 МГц. Большинство современных микропроцессоров реализованы в КМОП-базисе, поскольку он обеспечивает минимальное статическое энергопотребление и очень малое потребление на низких и средних рабочих частотах, а также высокую плотность упаковки элементов (проектные нормы в серийном производстве составляют 0,13 мкм) и простоту технологической реализации [1—3].

Новые материалы GaN, SiC позволили улучшить статические, динамические и тепловые параметры СВЧ транзисторов. Прорыв в области создания мощных GaN транзисторов стал возможен благодаря разработке технологии эпитаксиального выращивания нитрида галлия на пластинах кремния с кристаллографической ориентацией (111) диаметром до 150 мм.

В предлагаемой работе рассмотрены особенности проектирования и изготовления СВЧ транзис-

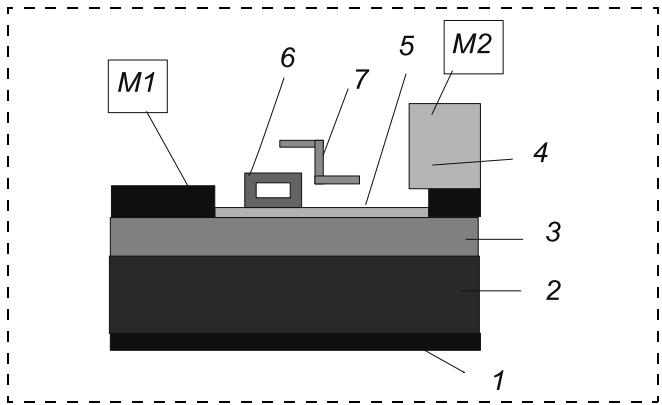
торов на структурах, содержащих кремниевую пластину в качестве несущей конструкции.

### Интегральные схемы на объемном кремнии и на структурах КНИ

Кремниевые биполярные, MOSFET- и LDMOS-транзисторы занимают существенную долю рынка для аппаратуры в диапазоне до 2 ГГц.

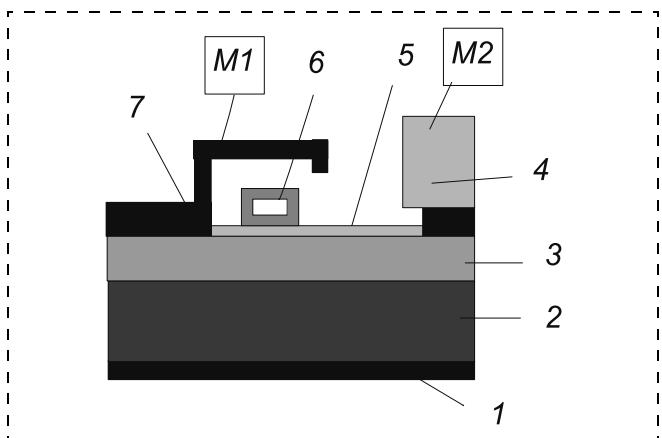
Биполярная кремниевая технология наиболее распространена, отработана, и продукты на ее основе получаются более дешевыми. Например, большинство СВЧ транзисторов компании Advanced Power Technology для авионики и радаров являются биполярными [4].

В последние годы заметна тенденция перехода к технологии LDMOS (Laterally Diffused Metal Oxide Semiconductors), которая обеспечивает наилучшие характеристики транзисторов, таких как линейность, усиление, тепловые режимы, устойчивость к рассогласованию, высокий КПД, запас по рассеиваемой мощности, надежность [5]. Существуют два основных класса конструкций LDMOS-транзисторов. Первый основывается на использовании экрана для обеспечения изоляции стока от затвора и уменьшения емкости обратной связи. Как правило, такую конструкцию применяют при длине затвора 0,5 мкм (рис. 1). Второй класс конструкций



**Рис. 1. Вертикальный разрез структуры ячейки типового LDMOS-транзистора, использующего заземленный экран:** 1 — исток; 2 —  $p^+$ -подложка; 3 — приборный слой (области не детализированы); 4 — сток; 5 — подзатворный диэлектрик; 6 — затвор; 7 — металлизированная область; M1 — металл 1; M2 — металл 2

*Fig. 1. Vertical section of the cell structure of LDMOS transistor using an earthed screen: 1 — source; 2 —  $p^+$ -substrate; 3 — instrument layer (the areas are not detailed); 4 — drain; 5 — subgate dielectric; 6 — gate; 7 — metallized area; M1 — metal 1; M2 — metal 2*



**Рис. 2. Вертикальный разрез структуры ячейки типового LDMOS-транзистора, использующего заземленную металлическую область:** 1 — исток; 2 —  $p^+$ -подложка; 3 — приборный слой (области не детализированы); 4 — сток; 5 — подзатворный диэлектрик; 6 — затвор; 7 — экран; M1 — металл 1; M2 — металл 2

*Fig. 2. Vertical section of the cell structure of a typical LDMOS transistor using an earthed metalized area: 1 — source; 2 —  $p^+$ -substrate; 3 — instrument layer (the areas are not detailed); 4 — drain; 5 — subgate dielectric; 6 — gate; 7 — screen; M1 — metal 1; M2 — metal 2*

(используется при длине затвора менее 0,5 мкм) основывается на применении заземленной металлической области и позволяет не только уменьшить емкость обратной связи, но и понизить значение дрейфа тока между стоком и затвором (рис. 2) [6]. LDMOS-транзисторы целесообразно применять для работы на частотах порядка 1 ГГц; при этом обеспечивается мощность в нагрузке до 300 Вт в импульсном режиме работы [4].

Полевые транзисторы на гетероструктурах КНИ в настоящее время являются самыми высокочастотными из всех типов транзисторов (например, 3,3 ТГц в варианте IBM). Быстродействие этого ти-

па транзисторов основано на увеличении подвижности электронов в канале, что достигается вследствие пространственного разделения проводящего канала и ионизированных примесных центров. В настоящее время наибольшие успехи достигнуты в разработке малошумящих полевых транзисторов на гетероструктурах, которые широко используются в спутниковых системах связи. Так, на частоте  $f = 20$  ГГц достигнут коэффициент шума  $K_{\text{ш}}$  менее 1 дБ при коэффициенте усиления  $K_p = 12$  дБ, на частоте  $f = 40$  ГГц  $K_{\text{ш}} < 2$  дБ при  $K_p = 7$  дБ [7]. Потери СВЧ излучения интегральных схем (ИС) на объемном кремнии, стандартных КНИ ИС и оптимизированных КНИ ИС на высокоомных подложках на частоте 10 ГГц составляют соответственно  $-20$ ,  $-30$  и  $-60$  дБ [8].

В результате исследования высокочастотных и шумовых свойств КНИ  $n$ -МОП-транзисторов из библиотеки отечественной КНИ КМОП-технологии с проектными нормами 0,35 мкм установлено, что значения частоты единичного усиления и максимальной частоты генерации составляют 15...20 и 90 ГГц соответственно, что подтверждает возможность реализации усилительных, смесительных и генераторных ИС с рабочим диапазоном частот 1,2...1,65 ГГц. Проведенная экспериментальная оценка уровней стойкости разработанных функциональных блоков к дозовому и импульсному воздействию ионизирующего излучения (ИИ) показывает, что тиристорный эффект и катастрофические отказы не обнаруживаются до уровня  $5 \cdot 10^{12}$  ед./с [9].

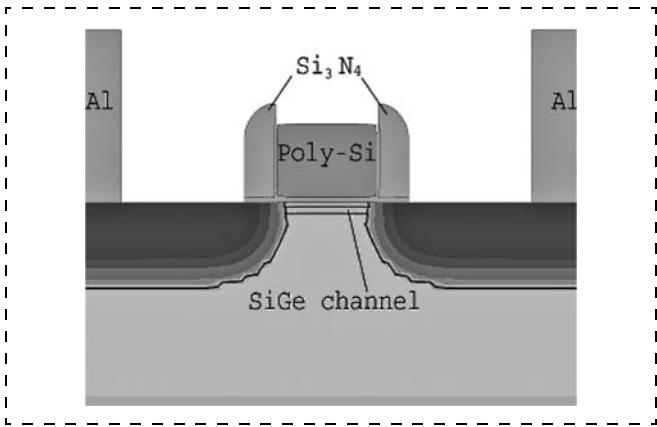
Особенности неклассических МОП-структур приведены в работе [10].

### Структуры на основе полупроводникового соединения кремний—германий

Рабочие частоты лучших современных "чисто" кремниевых приборов не превышают 15...25 ГГц. Однако многие подвижные беспроводные системы должны работать на частотах более 30 ГГц [11].

Изменение ширины запрещенной зоны кремния за счет добавления германия и установления определенного профиля его распределения привело к получению нового материала (SiGe) с интересными полупроводниковыми свойствами. Совершенствование SiGe-транзисторов привело к появлению кремний-германиевых БиКМОП-схем, что послужило развитию самого перспективного направления работ в области SiGe-технологии — объединение гетеротранзисторов (ГБТ) со специализированными КМДП-элементами.

К основным достоинствам SiGe-ГБТ в сравнении с кремниевыми биполярными транзисторами относятся: более высокая максимальная частота генерации (до 120 ГГц); низкий коэффициент шума



**Рис. 3. Структура SiGe ГМОПТ**  
Fig. 3. Structure of SiGe HMOS

(ГБТ с шириной эмиттерной полосы 0,18 мкм имеет коэффициент шума 0,4 дБ на частоте 2 ГГц); высокие коэффициент усиления по мощности и КПД в режиме усиления мощности (до 70 %). Для большинства беспроводных систем связи, работающих в диапазоне 900 МГц...2,4 ГГц, привлекательность SiGe устройств заключается в возможности улучшения других характеристик системы, в первую очередь — потребляемой мощности [12—14]. На сегодняшний день разработан самый быстродействующий SiGe транзистор с минимальным топологическим размером 0,13 мкм и с максимальной частотой 798 ГГц [15].

Решить проблему снижения потребляемой мощности с преодолением эффектов короткого и узкого канала и уменьшения толщины подзатворного диэлектрика до 5...10 нм позволяет технология МОП-транзисторов с Si/SiGe гетероструктурным каналом (SiGe ГМОПТ). Структура такого SiGe ГМОП изображена на рис. 3. Из-за разных постоянных решетки на границе сплава Si/SiGe появляются двумерные упругие напряжения деформации. Эти напряжения приводят к увеличению подвижности носителей в канале транзистора, что приводит к увеличению быстродействия транзистора и уменьшению сопротивления канала [16].

Основным конструктивным отличием SiGe биполярных транзисторов от традиционных кремниевых является область базы, которая формируется либо эпитаксией, либо ионной имплантацией герmania [17]. Для эпитаксиального выращивания полупроводниковых структур SiGe используется преимущественно метод молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) [18—23].

### Гетероструктуры на основе GaN

Удачное сочетание электрофизических свойств позволяет создавать приборы на основе GaN с рекордно высокими параметрами на частотах до 100 ГГц и выше [24—28]. Дозовые эффекты в на-

ногетероструктурных полевых транзисторах с затвором Шоттки на GaN начинают проявляться при достаточно высоких (порядка  $10^6$  рад) уровнях при облучении гамма-квантами. Структурные дефекты при воздействии флюенсами протонов и быстрых реакторных нейтронов не оказывают существенного влияния на характеристики GaN транзисторных наногетероструктур до уровней порядка  $10^{14} \text{ см}^{-2}$ . В случае облучения высокоэнергетичными ионами деградация характеристик GaN транзисторных структур наблюдается при уровнях  $10^{10} \dots 10^{11} \text{ см}^{-2}$  и существенно зависит от энергии и атомного номера ионов [29].

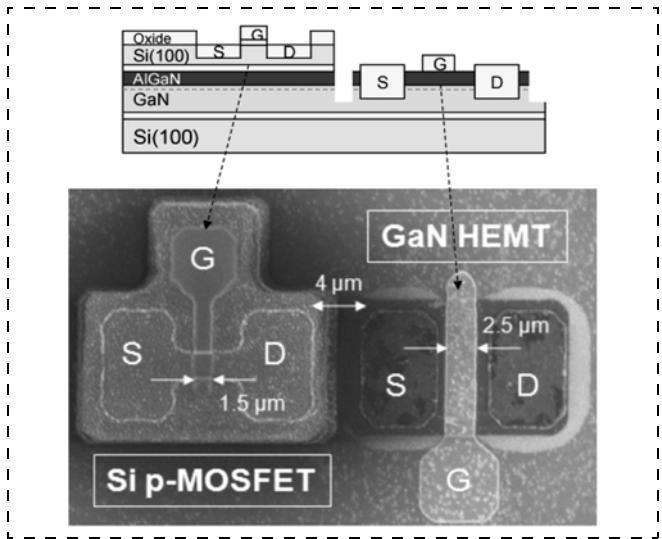
Основные электрические и физико-химические свойства GaN, а также анализ развития полупроводниковых приборов на гетероструктурах, в том числе и на GaN-on-Si, приведены в работах [30—45]. Очевидно, что исследования, разработки и производство ориентированы прежде всего на силовую электронику и монолитные интегральные схемы (МИС). Применение GaN транзисторов в устройствах СВЧ диапазона рассмотрено в работах [46—58].

Подложки для эпитаксиальных структур GaN должны иметь минимальное расхождение с нитридом галлия по параметрам решетки и КТР, хорошую теплопроводность для снятия тепловых ограничений и хорошие изолирующие свойства, обеспечивающие малые потери на СВЧ; в настоящее время этим требованиям отвечают подложки из  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , SiC и Si(111) [59]. Методы выращивания на подложках Si(111) диаметром до 150 мм пленок GaN, пригодных для изготовления НЕМТ приведены в [60, 61].

В отличие от кремниевых приборов на гетероструктурах кремний-на-диэлектрике (КНД), приборный слой GaN оказывается встроенным в многослойную композицию, одна часть которой, соединенная с подложкой, служит для снижения дефектности и уровня механических напряжений, а другая (подзатворная область) — для управления условиями протекания тока в канале [62—67].

На рис. 4 и 5 (см. третью сторону обложки) представлены поперечные сечения мощного транзистора фирмы NEC GaN [45] на Si и НЕМТ-транзистора с подзатворным диэлектриком из  $\text{HfO}_2$ , обеспечивающим снижение токов утечки [45]. На рис. 6 представлен фрагмент поперечного сечения совмещенной схемы на кремниевых подложках, изготавливаемых с использованием приборных слоев GaN и Si, и топологический рисунок МДП на  $p$ -Si и GaN НЕМТ-транзисторов [68]. Технологический процесс формирования светодиодов на основе GaN, в которых кремниевая подложка используется как вспомогательный материал, представлен на рис. 7 (см. третью сторону обложки) [70].

Коммерчески доступные GaN усилители и транзисторы несмотря на очевидные преимущества ог-



**Рис. 6. Поперечное сечение структуры и топологический рисунок МДП на p-Si и GaN НЕМТ-транзисторов**

Fig. 6. Cross-section of the structure and a topological figure of MIS on p-Si and GaN HEMT transistors

раничены диапазоном до 4...6 ГГц; верхняя частота исследовательских образцов достигает 90 ГГц. Однако многие исследователи уверены в том, что устройства на основе GaN в скором времени вытеснят материал GaAs из области мощных усилителей.

## Заключение

Одним из приоритетных направлений развития современной физики полупроводников является развитие технологии формирования гетероструктур, которое необходимо для улучшения параметров приборов твердотельной микроэлектроники. Среди различных полупроводниковых материалов кремний является основным материалом микроэлектроники. Это связано с уникальным сочетанием его свойств и высоким уровнем технологии синтеза этого материала и приборов на его основе.

Актуальность поисковых исследований и разработки технологий изготовления КНИ-нанотранзисторов и интегральных схем определяется прежде всего тем, что в обозримом будущем прогнозируется разработка и производство на основе КНИ-структур систем гигагерцового и терабитного диапазонов.

## Список литературы

- 1. Козлов Ю. Ф.** Современное состояние и проблемы обеспечения электронной промышленности РФ специальными материалами. URL: [www.sciteclibrary.ru/techcourier/expert/doc\\_kozlov1.doc](http://www.sciteclibrary.ru/techcourier/expert/doc_kozlov1.doc)
- 2. Боднарь Д.** Мощные СВЧ-транзисторы и корпуса для российского и зарубежных рынков // Электронные компоненты. 2013. № 1. С. 1–6.
- 3. Будяков А. С.** Состояние и перспективы СВЧ и КВЧ МИС на основе кремниевых технологий класса система на кристалле // Твердотельная электроника. Сложные функциональные блоки РЭА. Материалы научно-технической конференции. М.: МНТОРЭС им. А. С. Попова, 2011. 214 с.
- 4. Шаропин Ю.** СВЧ-транзисторы компании Advanced Power Technology для авионики и радаров // Компоненты и технологии. 2006. № 1. С. 108–110.
- 5. Мощные СВЧ-транзисторы Philips Semiconductors.** URL: [http://vk.com/schem\\_net\\_payalnik](http://vk.com/schem_net_payalnik)
- 6. Фармикуон Г., Боури Ф., Бёргер Дж.** и др. Технология мощных СВЧ LDMOS-транзисторов для радарных передатчиков L-диапазона и авиационных применений // Компоненты и технологии. 2007. № 10. С. 14–16.
- 7. Завражнов Ю. В., Каганова И. И., Мазель Е. З.** и др. Мощные высокочастотные транзисторы / Под ред. Е. З. Мазеля. М.: Радио и связь, 1985. 176 с.
- 8. Асеев А. Л., Попов В. П., Володин В. П., Марютин В. Н.** Перспективы применения структур кремний-на-изоляторе в микро- и наноэлектронике и микросистемной технике // Микросистемная техника. 2002. № 9. С. 3.
- 9. Елесин В. В., Назарова Г. Н., Чуков Г. В., Кабальнов Ю. А., Титаренко А. А.** Исследование возможности разработки радиационно-стойких БИС навигационного назначения по отечественной КМОП КНИ технологии с нормами 0,35 мкм // Микроэлектроника. 2012. Т. 41, № 4. С. 291–303.
- 10. Майская В.** Будущее транзисторных структур. Насколько справедлив закон Мура? // Электроника: НТБ. 2002. № 3. С. 64–67.
- 11. Валентинова М.** SiGe-технология — процесс пошел // Электроника: НТБ. 1999. № 5–6.
- 12. Громузов Д. В., Краснюк А. А.** Материаловедение для микро- и наноэлектроники: Учебное пособие. М.: МИФИ, 2008. 156 с.
- 13. Перевезенцев А. В.** СВЧ твердотельные приемные модули на GaN и SiGe гибридных и монолитных интегральных схемах. Автореферат дисс. на соискание ученой степени канд. техн. наук, Москва, 2012.
- 14. Самый быстрый транзистор.** URL: <http://www.osp.ru/pcworld/>
- 15. Новый рекорд быстродействия SiGe транзисторов.** URL: <http://phys.org/news/2014-02-silicon-germanium-chip.htm>
- 16. Li P., Liao W.** Analysis of Si/SiGe channel pMOSFETs for deep-submicron scaling // Solis-State Electronics. 2002. N. 46. P. 39–44.
- 17. Lombardo S., Pinto A., Rainieri V., Ward P., Campisano S. U.** Si/ $Ge_xSi_{1-x}$  HBTs with the  $Ge_xSi_{1-x}$  base formed by high dose Ge implantation in Si. // IEDM. 1995. P. 1019–1022.
- 18. Разработка** методов молекулярно-пучковой эпитаксии для выращивания многослойных полупроводниковых структур на основе кремния, германия и твердого раствора кремний—германий. URL: <http://www.nifti.unn.ru/>
- 19. Матвеев А., Денисов С. А., Чалков В. Ю., Шептуров В. Г., Степихова М. В., Дроздов М. Н.** и др. Периодические гетероструктуры Si/SiGe, выращенные на si(100) из атомарного потока Si и молекулярного потока моногермана // Физика твердого тела. Вестник ННГУ им. Н. И. Лобачевского. 2014. № 1 (2). С. 84–87.
- 20. Лобанов Д. Н., Новиков А. В., Красильник З. Ф.** Метод молекулярно-пучковой эпитаксии и его применение для формирования SiGenanoструктур. Практикум. Нижний Новгород: ННГУ, 2010. 37 с.
- 21. Денисов С. А.** Молекулярно-пучковая эпитаксия из сублимационного источника слоев кремния и гетероструктур SiGe/Si на сапфире. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Н. Новгород, 2012.
- 22. Алексеев А., Филаретов А., Чалый В., Погорельский Ю.** Молекулярно-пучковая эпитаксия. Оборудование и результаты. URL: <http://www.nanometer.ru/>
- 23. SimiTEg STE 3532.** Установка молекулярно-пучковой эпитаксии. URL: <http://www.rusnanonet.ru/>
- 24. Лаврентьев М., Гелерман Д.** Новое поколение твердотельных усилителей мощности в системах спутниковой связи и вещания // ПЕРВАЯ МИЛЯ. 2013. № 3. С. 64–67.
- 25. Васильев А. Г., Колковский Ю. В., Концевой Ю. А.** СВЧ приборы и устройства на широкозонных полупроводниках. М.: ТЕХНОСФЕРА. 2011. 416 с.

26. **Федоров Ю.** Широкозонные гетероструктуры и приборы на их основе для миллиметрового диапазона длин волн // ЭЛЕКТРОНИКА: НТБ. 2011. № 2. С. 92–107.
27. **Данилин В. Н., Жукова Т. А.** и др. Транзистор на GaN пока самый "крепкий орешек" // ЭЛЕКТРОНИКА: НТБ. 2005. № 4. С. 20–29.
28. **Куликов Е. В., Москалюк В. А.** Высокочастотные параметры нитрида галлия // Техника и приборы СВЧ. 2008. № 2. С. 48–52.
29. **Громов Д. В., Матвеев Ю. А., Назарова Г. Н.** Исследование влияния ионизирующих излучений на характеристики гетероструктурных полевых транзисторов на нитриде галлия // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем — 2012 / Сборник трудов. М.: ИППМ РАН. 2012. С. 598–603.
30. **Самсонов Г. В., Кулик О. П., Полищук В. С.** Получение и методы анализа нитридов. Киев: Наукова думка, 1976. 316 с.
31. **Minsky M. S., White M., Liu E. J.** Room-temperature photoenhanced wet etching of GaN // Appl. Phys. Lett., 1996, vol. 68, N. 11. P. 1531–1533.
32. **Перспективы** рынка силовых устройств на основе технологии GaN-on-Si. URL: [www.russianelectronics.ru/leader-review/doc/62109/](http://www.russianelectronics.ru/leader-review/doc/62109/)
33. **Кишинский А. А.** Твердотельные СВЧ усилители мощности на нитриде галлия — состояние и перспективы развития // Материалы 19 Крымской конференции "СВЧ техника и телекоммуникационные технологии", Севастополь: Вебер, 2009. Т. 1. С. 11–16.
34. **Алексеев А., Красовицкий Д., Петров С.** и др. Многослойные гетероструктуры AlN/AlGaN/ GaN/AlGaN — основа новой компонентной базы твердотельной СВЧ-электроники // Компоненты и технологии. 2008. № 2. С. 138–142.
35. **Никитин Д.** Обзор GaN-транзисторов компании United Monolithic Semiconductors // Компоненты и технологии. 2013. № 2. С. 132–133.
36. **Аветисян Л.** Усилитель Доэрти и его реализация на компонентах компании Gree // Современная электроника. 2012. № 5. С. 62–65.
37. **Васильев А., Данилин В., Жукова Т.** Новое поколение полупроводниковых материалов и приборов: через GaN к алмазу / Электроника: НТБ. 2007. № 4. С. 68–76.
38. **Гольцовка М.** Мощные GaN-транзисторы — истинно революционная технология // Электроника: НТБ. 2012. № 4. С. 86–100.
39. **Туркин А.** Обзор развития технологии полупроводниковых гетероструктур на основе нитрида галлия (GaN) // Полупроводниковая светотехника. 2011. № 6. С. 6–9.
40. **Войтович В., Гордеев А., Думаневич А.** Si, GaAs, SiC, GaN — силовая электроника. Сравнение, новые возможности // Силовая электроника. 2010. № 5. С. 4–10.
41. **Макдональд Т.** Преимущества силовых приборов на базе GaN от International Rectifier // Новости электроники. 2010. № 7.
42. **GaN power transistors eliminate current collapse, cut power loss.** URL: [www.eetasia.com/ART\\_8800639119\\_765245\\_NP\\_a4849b54.HTM](http://www.eetasia.com/ART_8800639119_765245_NP_a4849b54.HTM).
43. URL: [\t\\\_blank.](http://www.nec.com)
44. **Seok O., Ahn W., Han M.-K.** High-breakdown voltage and low on-resistance AlGaN/GaN on Si MOS-HEMTs employing an extended TaN gate on HfO<sub>2</sub> gate insulator. / doi: 10.1049/el.2013.0697. P. 425.
45. **Нанотехнологии** в электронике / Под ред. Ю. А. Чаплыгина. М.: Техносфера, 2005. 448 с.
46. **Janssen P. B., van Heijningen M., Provenzano G.** et al. X-band Robust AlGaN/GaN ReceiverMMICs with over 41 dBm Power Handling, Compound Semiconductor Integrated Circuits Symposium, 2008.
47. **Bettidi A., Corsaro F., Cetronio A.** et al. X-Band GaN-HEMT LNA Performance versus Robustness Trade-Off, EuMIC, 2009.
48. **Мокеров В. Г., Кузнецов А. Л., Федоров Ю. В.** и др. AlGaN/GaN-СВЧ HEMT-транзисторы с пробивным напряжением выше 100 В и с предельной частотой усиления по мощности  $f_{\max}$  до 100 ГГц // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43. Вып. 4. С. 561–567.
49. **Коколов А. А., Черкашин М. В.** Построение и характеристики СВЧ монолитных усилителей мощности на основе полупроводниковых материалов GaAs и GaN // Доклады ТУСУРа. Часть 2. декабрь 2011. № 2 (24). С. 17–23.
50. **Micovic M.** W-band GaN MMIC with 842 mW output power / M. Micovic, A. Kurdoghlian, K. Shinohara et al. // Microwave Symposium Digest (MTT), 2010 IEEE MTT-S International. — 23–28 May. 2010. P. 237–239.
51. **Викулов И.** GaN-микросхемы приемопередающих модулей АФАР: европейские разработки // ЭЛЕКТРОНИКА НТБ. 2009. № 7. С. 90–97.
52. URL: <http://pa.compejournal.ru/>
53. **Singhal S.** et al. Qualification and Reliability of a GaN Process Platform // CS MANTECH Conference, May 14–17. 2007. P. 83–86.
54. **Schuh P.** GaN MMIC based T/R-Module Front-End for X-Band Applications // EwMIC Conference Proceedings. 2008. P. 274–277.
55. **Майская В.** СВЧ-полупроводниковые технологии-статус равен. Но у кого он равнее? // Элементная база электроники. 2006. № 5.
56. **Громов Д. В., Краснюк А. А.** Материаловедение для микро- и наноэлектроники: Учебное пособие. М.: МИФИ, 2008. 156 с.
57. **Двоешерстов М. Ю., Чередник В. И., Беляев А. В., Денисова А. В., Сидорин А. П.** Гетероэпитаксиальные структуры AlN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> для акустоэлектронных СВЧ устройств // Современные научные технологии. Физико-математические науки. 2010. № 9. С. 24–30.
58. **Сидорин А. П., Беляев А. В., Двоешерстов М. Ю.** и др. Технология изготовления SWR-BAW акустоэлектронных резонаторов на основе гетероэпитаксиальных структур AlN/GaN/Si(111) // Сб. трудов научной конференции "Сессия Научного совета РАН по акустике и XXV сессия Российского акустического общества". 2012. Т. 1. С. 288–290.
59. **Молекулярно-лучевая** эпитаксия и гетероструктуры: Пер. с английского / Под ред. акад. Ж. И. Алферова и д-ра физ.-мат. наук проф. Ю. В. Шмарцева. М.: Мир. 1989. С. 589.
60. **Каталог** фирмы Eudyna Device. URL: [www.eudyna.com/e/productse/newproduct-se/gan\\_hemt\\_era.html](http://www.eudyna.com/e/productse/newproduct-se/gan_hemt_era.html).
61. **Шарофидинов Ш. Ш., Головатенко А. А., Никитина И. П., Середова Н. В., Мынбаева М. Г., Бугров В. Е., Одноблюдов М. А., Степанов С. И., Николаев В. И.** Толстые эпитаксиальные слои нитрида галлия на кремниевой подложке // Materials Physics and Mechanics 22. 2015. С. 53–58.
62. **Сорокин Л. М., Калмыков А. Е., Бессолов В. Н.** и др. Структурная характеристика эпитаксиальных слоев GaN на кремнии: влияние буферных слоев // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37, Вып. 7. С. 72–78.
63. **Бузынин Ю. Н., Дроздов Ю. Н., Дроздов М. Н.** и др. Гетероэпитаксиальные пленки GaN на подложках кремния с буферными слоями на основе пористого материала // Известия РАН, серия ФИЗИЧЕСКАЯ. 2008. Т. 72, № 11. С. 1583–1587.
64. URL: [www.albany.edu/WBGOptronixlab/research/research](http://www.albany.edu/WBGOptronixlab/research/research).
65. **Бессолов В. Н., Лукьянов А. В., Кукушкин С. А.** и др. Полупроводниковый прибор. Патент РФ № 2446511, опубл. 27.03.2012.
66. **Патент США № 6610144**, 2000.
67. **Патент США № 7612361**, 2009.
68. URL: [http://eeecs-newsletter.edu/wp-cjtent/uhloads/2009/11/palacion\\_fig.png](http://eeecs-newsletter.edu/wp-cjtent/uhloads/2009/11/palacion_fig.png).
69. **Богданович Б. Ю., Графутин В. И., Калугин В. В.** и др. Технологии и методы исследования структур КНИ. М.: МИЭТ. 2003. 289 с.
70. **Xiong Chi, Pernice W., Ryu K. K.** et al. Integrated GaN photonic circuits on silicon (100) for second harmonic generation // OPTICS EXPRESS, 2011, Vol. 19, N. 11. P. 10462–10470.

## High-Frequency Microelectronics Based on Silicon Substrate Structures

*A major goal of development of the new-generation semiconductor microwave devices for modern wireless applications in the economic, military and space sectors is reduction of the consumed energy and fast data processing. This study presents a review of the principles for development of the transistor structures and monolithic integrated microwave devices based on the semiconductor structures comprising a silicon substrate. Those structures include both the single-crystalline silicon wafers themselves with the device silicon layers of different conductivity types and the heterostructures of the "silicon-on-insulator" and "GaN-on-silicon" types. Characteristics of different designs of the transistor structures were comparatively analyzed, and the basic methods for formation of the semiconductor device layers were described.*

**Keywords:** monolithic microwave integrated circuits, silicon transistors, heterostructures, SiGe, GaN

### Introduction

In the foreseeable future the leading role of the basic semiconductor material will still be played by silicon (and its technologies), 95 % of all the semi-conductor devices are produced with the use of the silicon substrates. Silicon is one of the optimal materials by its effective power in the range of 100—2000 MHz. Most of the microprocessors are realized in CMOS basis, because it ensures a minimal static energy consumption and small consumption on low and medium working frequencies, high density of packing of elements (design standards in a batch production are 0.13 micrometers) and simplicity of realization [1—3].

New GaN, SiC materials allowed to improve the static, dynamic and thermal parameters of the microwave transistors. A breakthrough in the field of development of powerful GaN transistors became possible due to invention of epitaxial growth of GaN on the silicon wafers with crystallographic orientation (111) and diameter up to 150 mm.

The given work presents features of designing and manufacturing of the microwave transistors on the structures containing a silicon wafer as the bearing design.

### Integrated circuits on volume silicon and SOI structures

Silicon bipolar, MOSFET and LDMOS transistors have an essential share of the market of equipment in the range up to 2 GHz.

The bipolar silicon technology is most wide-spread, well-developed, and the products on its basis turn out to be cheaper. For example, most of the microwave transistors from Advanced Power Technology Co. for avionics and radars are bipolar [4].

There is an obvious trend for transition to LDMOS technology (Laterally Diffused Metal Oxide Semiconductors), which ensures the best characteristics of the transistors, such as linearity, amplification, thermal modes, stability to a mismatch, coefficient of efficiency, dissipated power reserve and reliability, [5]. There are two basic designs of LDMOS transistors. The first is based on the use of a screen to ensure insulation of a drain from a gate and reduction of the feedback capacity. As a rule, such a design is applied at the length of a gate of 0.5  $\mu\text{m}$  (fig. 1). The second design (length of a gate is less than 0.5  $\mu\text{m}$ ) is based on application of the earthed metal area and it allows to reduce the feedback capacity and to lower the current drift between the drain and the gate (fig. 2) [6]. It is more expedient to apply LDMOS transistors for work on frequencies of about 1GHz; at that, the power is ensured at a load up to 300 W in a pulse operating mode [4].

Field transistors on SOI heterostructures are the most high-frequency ones of all the transistors (for example, 3.3 THz in IBM version). Their speed of operation is based on increase of mobility of electrons in the channel, which is achieved due

to a space division of the conductive channel and the ionized impurity centers. The greatest success was achieved in development of the low-noise field transistors on the heterostructures, which are used in the satellite communication systems. Thus, on frequency  $f = 20$  GHz the noise coefficient of  $K_{\text{III}}$  less than 1 dB was reached at amplification coefficient of  $K_p = 12$  dB, on frequency  $f = 40$  GHz  $K_{\text{III}} < 2$  dB at  $K_p = 7$  dB [7]. The losses of the microwave radiation of the integrated circuits (IC) on volume silicon, standard SOI IC and optimized SOI IC on high-resistance substrates on frequency 10 GHz were, accordingly —20, —30 and —60 dB [8].

As a result of research of the high-frequency and noise properties of SOI  $n$ -MOS transistors from the library of domestic SOI CMOS technologies with design norms of 0.35  $\mu\text{m}$  it was established, that the frequencies of the unity gain and maximal generation were 15...20 and 90 GHz, accordingly, which confirmed a possibility of realization of the amplifying, mixing and generating IC with the working range of frequencies of 1.21.65 GHz. An experimental estimation of the levels of resistance of the functional units to a doze and pulse influence of the ionizing radiation (IR) shows that a tiristor effect and catastrophic failures are not observed up to the level of  $5 \cdot 10^{12}$  units/s [9]. Features of nonclassical MOS structures are presented in [10].

### Structures on the basis of silicon-germanium semi-conductor compound

The working frequencies of the best modern "purely silicon" devices do not exceed 1525 GHz. However, many mobile wireless systems have to work on the frequencies exceeding 30 GHz [11].

Change of the width of the forbidden zone of silicon at the expense of addition of germanium and establishment of a profile of its distribution led to obtaining of a new material (SiGe) with interesting semi-conductor properties. Improvement of SiGe transistors led to appearance of silicon-germanium BiCMOS circuits, which promoted development of the most promising direction of works in the field of SiGe technology — integration of the heterotransistors (HBT) with special CMOS elements.

Among the advantages of SiGe-HBT in comparison with the silicon bipolar transistors are: higher maximal frequency of generation (up to 120 GHz), low noise coefficient (HBT with the width of the emitter strip of 0.18  $\mu\text{m}$  has the noise coefficient of 0.4 dB on frequency of 2 GHz), amplification coefficient on power and coefficient of efficiency in the mode of power amplification (up to 70 %). For most wireless communication systems working in the range of 900 MHz ... of 2.4 GHz, the SiGe devices are promising because of the potentials for improvement of the other characteristics of the

system, first of all — power consumption [12–14]. The highest-speed SiGe transistor was developed with the minimal topological size of 0.13 micrometers and maximal frequency of 798 GHz [15].

The problem of a decrease of the power consumption with overcoming of the effects of the short and narrow channel and reduction of the thickness of the subgate dielectric down to 510 nm can be solved by means of MOS transistor technology with Si/SiGe heterostructure channel (SiGe HMOS). The structure of such SiGe HMOS is presented in fig. 3. Because of different constants of the lattice on the border of Si/SiGe alloy the two-dimensional elastic stresses of deformation appear. They lead to an increase of mobility of the carriers in the transistor channel, a speed increase of the transistor and reduction of the resistance of the channel [16].

The basic design distinction of SiGe bipolar transistors from the silicon ones is the area of the base, which is formed by either epitaxy, or ionic implantation of germanium [17]. For the epitaxial growth of SiGe semi-conductor structures the molecular beam epitaxy (MBE) is used [18–23].

### Heterostructures on GaN basis

A successful combination of the electrophysical properties allows us to develop devices on the basis of GaN with the record-breaking high parameters on frequencies up to 100 GHz and over [24–28]. The doze effects in the nanoheterostructured field transistors with Schottky-gate on GaN begin to be visible at high (about  $10^6$  rad) levels at a gamma-quantum irradiation. The structural defects under the influence of proton fluences and fast reactor neutrons do not affect the characteristics of GaN transistor nanoheterostructures up to the levels of about  $10^{14}$  cm $^{-2}$ . In case of an irradiation by high-energy ions a degradation of the characteristics of GaN transistor structures is observed at the levels of  $10^{10} \dots 10^{11}$  cm $^{-2}$  and it depends on the energy and atomic number of the ions [29].

The basic electric and physical-chemical properties of GaN, the analysis of development of the semi-conductor devices on heterostructures, including on GaN-on-Si, are presented in the works [30–45]. It is obvious, that research and development, and manufacture are focused on the power electronics and monolithic integrated circuits (MIC). Application of GaN transistors in the microwave range devices is considered in [46–58].

Substrates for the epitaxial GaN structures should have a minimal divergence with GaN by the lattice and coefficient of thermal expansion parameters, good heat conductivity for removal of the thermal restrictions and good insulating properties ensuring small losses on the microwave frequency; these requirements are met by the substrates from Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SiC and Si(111) [59]. The methods for growing of GaN films, suitable for manufacture of HEMT, on the substrates with diameter up to 150 mm, are presented in [60–61].

Unlike the silicon devices on heterostructures of silicon-on-dielectric (SOD), the instrument layer of GaN appears embedded into a multilayer composition, one part of which, interfaced with the substrate, promotes a decrease of the defectiveness and of the level of mechanical stresses, while another (subgate area) — ensures control of the conditions for passing of a current in the channel [62–67].

Fig. 4 and 5 (see 3-rd side of the cover) present cross-sections of a powerful GaN transistor from NEC Co [45] on Si and a HEMT transistor with a subgate dielectric from HfO<sub>2</sub>, which ensures a decrease of the leak currents [45]. Fig. 6 (see 3-rd the side of cover) presents a fragment of a cross-section

of a combined circuit on the silicon substrates made with the use of GaN and Si instrument layers, and a topological figure of MIS on p-Si and GaN HEMT transistors [68]. The technological process for formation of the light-emitting diodes on the basis of GaN, in which a silicon substrate is used as an auxiliary material, is presented in fig. 7 [70].

The commercially available GaN amplifiers and transistors, despite their advantages, are limited by the range of 4...6 GHz; the top frequency of the examined samples reached 90 GHz. However, many researchers believe that the devices on the basis of GaN will soon supplant the GaAs material in the area of powerful amplifiers.

### Conclusion

One of the priority directions of development of the modern physics of semiconductors is the technology for formation of the heterostructures, which is necessary for improvement of the parameters of the solid-state microelectronic devices. Among the semiconductors, silicon is the basic material for microelectronics and this is due to a unique combination of its properties and a high level of synthesis of this material and devices.

The importance of the basic research and development of the manufacturing techniques of SOI nanotransistors and IC is defined, first of all, by the fact that good prospects are predicted for development and manufacture of the gigahertz and terabit ranges on the basis of SOI in the foreseeable future.

### References

1. **Kozlov Yu. F.** Sovremennoe sostoyanie i problemy obespecheniya elektronnoj promyshlennosti RF spetsial'nymi materialami. URL: [www.sciteclibrary.ru/techcourier/expert/doc\\_kozlov1.doc](http://www.sciteclibrary.ru/techcourier/expert/doc_kozlov1.doc)
2. **Bodnar' D.** Moschnye SVCh-tranzistory i korpusa dlya rossiskogo i zarubezhnykh rynkov, *Elektronnye komponenty*, 2013, no. 1, pp. 1–6.
3. **Budyakov A. S.** Sostoyanie i perspektivy SVCh i KVCh MIS na osnove kremnjevih tehnologij klassa sistema na kristalle, *Tverdotel'naya elektronika. Slozhnye funktsional'nye bloki REA. Materialy nauchno-tehnicheskoy konferencii*, Moscow: MNTORES im. A. S. Popova, 2011, 214 p.
4. **Sharopin Yu.** SVCh — tranzistory kompanii Advanced Power Technology dlya avioniki i radarov, *Komponenty i tehnologii*, 2006, no. 1, pp. 108–110.
5. **Moschnye SVCh-tranzistory Philips Semiconductors.** URL: [http://vk.com/cxem\\_net\\_payalnik](http://vk.com/cxem_net_payalnik)
6. **Farmikoun G., Bouri F., Berger Dzh.** i dr. Tehnologiya moschnyh SVCh LDMOS-tranzistorov dlya radarnyh peredatchikov L-diapazona i aviacionnykh primenenij, *Komponenty i tehnologii*, 2007, no. 10, pp. 14–16.
7. **Zavrazhnov Yu. V., Kaganova I. I., Mazel' E. Z.** i dr.; Pod red. E. Z. Mazelya. *Moschnye vysokochastotnye tranzistory*. Moscow: Radio i svyaz', 1985. 176 p.
8. **Aseev A. L., Popov B. P., Volodin V. P., Maryutin V. N.** Perspektivy primeneniya struktur kremnij-na-izolyatore v mikro- i nano-elektronike i mikrosistemnoj tekhnike, *Mikrosistemnaya tekhnika*, 2002, no. 9, pp. 3.
9. **Elesin V. V., Nazarova G. N., Chukov G. V., Kabal'nov Yu. A., Titarenko A. A.** Issledovanie vozmozhnosti razrabotki radiacionno-stojkikh BIS navigacionnogo naznacheniya po otechestvennoj KMOP KNI tekhnologii s normami 0.35 mkm, *Mikroelektronika*, 2012, vol. 41, no. 4, pp. 291–303.
10. **Majskaya V.** Budushee tranzistornyh struktur. Naskol'ko spravedliv zakon Mura? *Elektronika: NTB*, 2002, no. 3, pp. 64–67.
11. **Valentinova M.** SiGe-tehnologiya — process poshel, *Elektronika NTB*, 1999, no. 5–6.
12. **Gromov D. V., Krasnyuk A. A.** *Materialovedenie dlya mikro- i nano'elektroniki*: Uchebnoe posobie. Moscow, MIFI, 2008, 156 p.
13. **Perevezencev A. V.** SVCh tverdotel'nye priemyne moduli na GaN i SiGe gribidnyh i monolitnyh integral'nyh shemah, *Avtoreferat dissertacii na soiskaniye uchenoj stepeni kandidata tehnicheskikh nauk*, Moscow, 2012.
14. **Samyj** bystryj tranzistor. URL: <http://www.osp.ru/pcworld/>
15. **Novyj rekord bystrodejstviya SiGe tranzistorov.** URL: <http://phys.org/news/2014-02-silicon-germanium-chip.htm>
16. **Li P., Liao W.** Analysis of Si/SiGe channel pMOSFETs for deep-submicron scaling, *Solid-State Electronics*, 2002, no. 46, pp. 39–44.
17. **Lombardo S., Pinto A., Raineri V., Ward P., Campisano S. U.** Si/Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub> HBTs with the Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub> base formed by high dose Ge implantation in Si, *IEDM*, 1995, pp. 1019–1022.

18. **Razrabotka metodov molekulyarno-puchkovoj epitaksii dlya vyraschivaniya mnogoslojnyh poluprovodnikovyh struktur na osnove kremniya, germaniya i tverdogo rastvora kremniy-germanij.** URL: <http://www.nifti.unn.ru/>
19. **Matveev A., Denisov S. A., Chalkov V. Yu., Shengurov V. G., Stepihova M. V., Drozdov M. N.** i dr. Periodicheskie geterostruktury Si/SiGe, vyraschennye na si(100) iz atomarnogo potoka Si i molekul-yarnogo potoka monogermana, *Fizika tverdogo tela. Vestnik NNGU im. N. I. Lobachevskogo*, 2014, no. 1 (2), pp. 84–87.
20. **Lobanov D. N., Novikov A. V., Krasil'nik Z. F.** Metod molekulyarno-puchkovoj epitaksii i ego primenenie dlya formirovaniya SiGe na nosotruktur Praktikum. Nizhnij Novgorod, NNGU, 2010. 37 p.
21. **Denisov C. A.** Molekulyarno-puchkovaya epitaksiya iz sublimacionnogo istochnika sloev kremniya i geterostruktur SiGe/Si na sapfire. Avtoreferat dissertacii na soiskanie uchenoj stepeni kandidata fiziko-matematicheskikh nauk, N. Novgorod, 2012.
22. **Alekseev A., Filaretov A., Chalyj V., Pogorel'skij Yu.** Molekulyarno-puchkovaya epitaksiya. Oborudovanie i rezul'taty. URL: <http://www.nanometer.ru/>.
23. **SimiTeg STE 3532. Ustanovka molekulyarno-puchkovoy epitaksii.** URL: <http://www.rusnanonet.ru/>
24. **Lavrent'ev M., Gelerman D.** Novoe pokolenie tverdotel'nyh usilitel'j moschnosti v sistemakh sputnikovoy svyazi i veschaniya, *PERVAYA MILYA*, 2013, no. 3, pp. 64–67.
25. **Vasil'ev A. G., Kolkovskij Yu. V., Koncevoj Yu. A.** SVCh pribory i ustrojstva na shirokozonnnyh poluprovodnikah, Moscow: TEHNOsfERA, 2011, 416 p.
26. **Fedorov Yu.** Shirokozonnnye geterostruktury i pribory na ih osnove dlya millimetrovogo diapazona dlin voln, *ELEKTRONIKA NTB*, 2011, no. 2, pp. 92–107.
27. **Danilin V. N., Zhukova T. A.** i dr. Tranzistor na GaN poka samyj "krepkij oreshhek", *ELEKTRONIKA: NTB*, 2005, no. 4, pp. 20–29.
28. **Kulikov E. V., Moskalyuk V. A.** Vysokochastotnye parametry nitrida galliya, *Tekhnika i pribory SVCh*, 2008, no. 2, pp. 48–52.
29. **Gromov D. V., Matveev Yu. A., Nazarova G. N.** Issledovanie vliyanija ioniziruyushchih izluchenij na harakteristiki geterostrukturnyh polevykh tranzistorov na nitride galliya, *Problemy razrabotki perspektivnyh mikro- i nano'elektronnyh sistem-2012. Sbornik trudov*, Moscow, IPPM RAN, 2012, pp. 598–603.
30. **Samsonov G. V., Kulik O. P., Polischuk V. S.** Poluchenie i metody analiza nitridov, Kiev, Naukova dumka, 1976, 316 p.
31. **Minsky M. S., White M., Liu E. J.** Room-temperature photoenhanced wet etching of GaN, *Appl. Phys. Lett.*, 1996, vol. 68, no. 11, pp. 1531–1533.
32. **Perspektivnyj rynok silovyh ustrojstv na osnove tehnologii GaN-on-Si.** URL: [www.russianelectronics.ru/leader-r/review/doc/62109/](http://www.russianelectronics.ru/leader-r/review/doc/62109/)
33. **Kischinskij A. A.** Tverdotel'nye SVCh usiliteli moschnosti na nitride galliya — sostoyanie i perspektivi razvitiya. *Materialy 19 Krymskoj konferencii "SVCh tekhnika i telekommunikacionnye tehnologii"*, Sevastopol', Veber, 2009, vol. 1, pp. 11–16.
34. **Alekseev A., Krasovskij D., Petrov S.** i dr. Mnogoslojnye geterostruktury AlN/AlGaN/ GaN/AlGaN — osnova novoj komponentnoj bazy tverdotel'noj SVCh- elektroniki, *Komponenty i tehnologii*, 2008, no. 2, pp. 138–142.
35. **Nikitin D.** Obzor GaN- tranzistorov kompanii United Monolithic Semiconductors, *Komponenty i tehnologii*, 2013, no. 2, pp. 132–133.
36. **Avetisyan L.** Usilitel' Do'erti i ego realizaciya na komponentnoj kompanii Gree, *Sovremennoj elektronika*, 2012, no. 5, pp. 62–65.
37. **Vasil'ev A., Danilin V., Zhukova T.** Novoe pokolenie poluprovodnikovyh materialov i priborov: cherez GaN k almazu, *Elektronika NTB*, 2007, no. 4, pp. 68–76.
38. **Gol'cova M.** Moschnye GaN-tranzistoryistinno revolyucionnaya tehnologiya, *Elektronika NTB*, 2012, no. 4, pp. 86–100.
39. **Turkin A.** Obzor razvitiya tehnologii poluprovodnikovyh geterostruktur na osnove nitrida galliya (GaN), *Poluprovodnikovaya svetotehnika*, 2011, no. 6, pp. 6–9.
40. **Vojtovich V., Gordeev A., Dumanevich A.** Si, GaAs, SiC, GaN — silovaya elektronika. Sravnenie, novye vozmozhnosti, *Silovaya elektronika*, 2010, no. 5, pp. 4–10.
41. **Makdonald T.** Preimushchestva silovyh priborov na baze GaN ot International Rectifier, *Novosti elektroniki*, 2010, no. 7.
42. **GaN power transistors eliminate current collapse, cut power loss.** URL: [www.eetasia.com/ART\\_8800639119\\_765245\\_NP\\_a4849b54.htm](http://www.eetasia.com/ART_8800639119_765245_NP_a4849b54.htm)
- <file:///C:/Documents%20and%20Settings\svk.NIIIS\Rabochij%20stol\www.eetasia.com\ART\_8800639119\_765245\_NP\_a4849b54.HTM>. 43. URL: <<http://www.nec.com/>> 't \_blank.'
44. **Seok O., Ahn W., Han M.-K.** High-breakdown voltage and low on-resistance AlGaN/GaN on Si MOS-HEMTs employing an extended TaN gate on HfO<sub>2</sub> gate insulator/. doi: 10.1049/el.2013.0697, P. 425.
45. **Nanotehnologii** v elektronike. Pod red. Yu. A. Chaplygina. Moscow: Tehnosfera, 2005. 448 p.
46. **Janssen P. B., van Heijningen M., Provenzano G.** et al. X-band Robust AlGaN/GaN ReceiverMMICs with over 41 dBm Power Handling, Compound Semiconductor Integrated Circuits Symposium, 2008.
47. **Bettidi A., Corsaro F., Cetronio A.** et al. X-Band GaN-HEMT LNA Performance versus Robustness Trade-Off, *EuMIC*, 2009.
48. **Mokerov V. G., Kuznecov A. L., Fedorov Yu. V.** i dr. AlGaN/GaN-SVCh HEMT-tranzistory s probivnym napryazheniem vyshe 100V i s predel'noj chastotoj usileniya po moschnosti f max do 100 GGc, *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2009, vol. 43, iss. 4, pp. 561–567.
49. **Kokolov A. A., Cherkashin M. V.** Postroenie i harakteristiki SVCh monoliticheskikh usilitel'j moschnosti na osnove poluprovodnikovyh materialov GaAs i GaN, *Doklady TUSURa*, dekabr' 2011, no. 2 (24), chast' 2, pp. 17–23.
50. **Micovic M.** W-band GaN MMIC with 842 mW output power / M. Micovic, A. Kurdoghlian, K. Shinohara et. al., *Microwave Symposium Digest (MTT), 2010 IEEE MTT-S International*. 23–28 May, 2010, pp. 237–239.
51. **Vikulov I.** GaN-mikroschemy priemoperedayuschih modulej AFAR: evropejskie razrabotki, *ELEKTRONIKA NTB*, 2009, no. 7, pp. 90–97.
52. URL: <<http://pa.compeljournal.ru/>>.
53. **Singhal S.** et al. Qualification and Reliability of a GaN Process Platform, *CS MANTECH Conference*, May 14–17, 2007, pp. 83–86.
54. **Schuh P.** GaN MMIC based T/R-Module Front-End for X-Band Applications, *EwMIC Conference Proceedings*, 2008, pp. 274–277.
55. **Majskaya V.** SVCh — poluprovodnikovye tehnologii-status raven. No u kogo na ravne? *Elementnaya baza elektroniki*, 2006, № 5.
56. **Gromov D. V., Krasnyuk A. A.** Materialovedenie dlya mikro- i nanoelektroniki. Uchebnoe posobie, Moscow: MIFI, 2008. 156 p.
57. **Dvoesherstov M. Yu., Cherednik V. I., Belyaev A. V., Denisoval A. V., Sidorin A. P.** Geteroepitaksial'nye struktury AlN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dlya akustoelektronnyh SVCh ustrojstv, *Sovremennye naukoemkie tehnologii. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2010, no. 9, pp. 24–30.
58. **Sidorin A. P., Belyaev A. V., Dvoesherstov M. Yu.** i dr. Tehnologiya izgotovleniya SWR-BAW akustoelektronnyh rezonatorov na osnove geteroepitaksial'nyh struktur AlN/GaN/Si(111), *Sbornik trudov nauchnoj konferencii "Sessiya Nauchnogo soveta RAN po akustike i XXV sessiya Rossijskogo akusticheskogo obshestva"*, 2012, vol. 1, pp. 288–290.
59. **Molekularno-luchevaya** epitaksiya i geterostruktury. Perevod s anglijskogo. Pod redakcijej akad. Zh. I. Alferova i d-ra fiz.-mat. nauk prof. Yu. V. Shmarceva, Moscow: Mir, 1989, 589 p.
60. **Katalog** firmy Eudyna Device. URL: [www.eudyna.com/e/productse/newproduct-se/gan\\_hemt\\_era.html](http://www.eudyna.com/e/productse/newproduct-se/gan_hemt_era.html).
61. **Sharofidinov Sh. Sh., Golovatenko A. A., Nikitina I. P., Sere-dova N. V., Myntbaeva M. G., Bugrov V. E., Odnoblyudov M. A., Stepanov S. I., Nikolaev V. I.** Tolstyje epitaksial'nye sloi nitrida galliya na kremniyevoj podlozhke, *Materials Physics and Mechanics* 22 (2015), pp. 53–58.
62. **Sorokin L. M., Kalmykov A. E., Bessolov V. N.** i dr. Struktur-naya harakterizacija epitaksial'nyh sloev GaN na kremniy: vliyanie bufernnyh sloev, *Pis'ma v ZhTF*, 2011, vol. 37, iss. 7, pp. 72–78.
63. **Buzynin Yu. N., Drozdov Yu. N., Drozdov M. N.** i dr. Geteroepitaksial'nye plenki GaN na podlozhkakh kremniya s bufernymi sloyami na osnove poristogo materiala, *Izvestiya RAN, seriya FIZICHESKAYA*, 2008, vol. 72, no. 11, pp. 1583–1587.
64. URL: [www.albany.edu/WBGOptronixlab/research/research](http://www.albany.edu/WBGOptronixlab/research/research).
65. **Bessolov V. N., Luk'yanov A. V., Kukushkin S. A.** i dr. Poluprovodnikovyy pribor. Patent RF № 2446511, opubl. 27.03.2012.
66. Patent SSHA № 6610144, 2000.
67. Patent SSHA № 7612361, 2009.
68. URL: <[http://eeecs-newsletter.edu/wp-cjtent/uploads/2009/11/palacion\\_fig.png](http://eeecs-newsletter.edu/wp-cjtent/uploads/2009/11/palacion_fig.png)>.
69. **Bogdanovich B. Yu., Grafutin V. I., Kalugin V. V.** i dr. *Tehnologii i metody issledovaniya struktur KNI*: Moscow, MI ET, 2003. 289 p.
70. **Xiong Chi, Pernice W., Ryu K. K.** et al. Integrated GaN photonic circuits on silicon (100) for second harmonic generation, *OPTICS EXPRESS*, 2011, vol. 19, no. 11, pp. 10462–10470.

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.

Технический редактор Т. А. Шацкая. Корректор Е. В. Комиссарова.

Сдано в набор 21.09.2016. Подписано в печать 22.10.2016. Формат 60×88 1/8. Заказ MC1116. 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](http://www.aov.ru)