

VIII Всероссийская конференция «Проблемы разработки перспективных микрои наноэлектронных систем» (серия «МЭС»)

МЭС-2018

пройдет 1 – 5 октября 2018 г. в Зеленограде

Организатор конференции – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем проектирования в микроэлектронике Российской академии наук (ИППМ РАН), соорганизаторы конференции – Казенное предприятие г. Москвы «Корпорация развития Зеленограда» и Московское научно-техническое общество радиотехники, электроники и связи имени А. С. Попова.

Среди учредителей конференции – Российская академия наук, Федеральное агентство научных организаций, Российский фонд фундаментальных исследований (РФФИ), Департамент науки, промышленной политики и предпринимательства г. Москвы, Префектура Зеленоградского АО г. Москвы, ФИЦ «Информатика и управление» РАН, ОАО «Концерн радиостроения ВЕГА», НИУ «МИЭТ», Южный федеральный университет. В число официальных партнеров и спонсоров конференции входят Фонд инфраструктурных и образовательных программ, Фонд «Сколково», АО «ИНТЕЛ А/О», ФГБУН Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, НПК «Технологический центр».

Рейтинг конференций серии «МЭС» неуклонно растет. Увеличивается число участников (в 2016 г. – более 250), к организации конференции привлекаются новые предприятия. Труды конференции, включая англоязычные издания, включены в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (Перечень ВАК). В будущем планируется включение Трудов конференции в научные базы Web of Science и Scopus.

Как и прежде, конференция «МЭС» этого года посвящена актуальным вопросам автоматизации проектирования микроэлектронных схем, систем на кристалле, IP-блоков и новой элементной базы по следующим научным направлениям:

- теоретические аспекты проектирования микро- и наноэлектронных систем (МЭС);
- методы и средства автоматизации проектирования микро- и наноэлектронных схем и систем (САПР СБИС);
- опыт разработки цифровых, аналоговых, цифро-аналоговых, радиотехнических функциональных блоков СБИС;
- особенности проектирования СБИС для нанометровых технологий;
- системы на кристалле перспективной РЭА.

Также особое внимание будет уделено вопросам разработки интегральных схем для космического применения.

В рамках конференции пройдет сессия-презентация научно-технических достижений российских и зарубежных компаний, а также организаций, способствующих развитию микроэлектроники и информационных технологий в России. Запланировано проведение выставки программных продуктов и оборудования, используемого в микроэлектронной отрасли.

Более подробную информацию о конференции можно получить на web-caйте http://www.mes-conference.

Том 20. № 8 � 2018

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ПРИКЛАДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Журнал включен в международные базы данных на платформе Web of Science: Chemical Abstracts Service (CAS), которая входит в Medline, и Russian Science Citation Index (RSCI).

Журнал индексируется в системе Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) и включен в международную базу INSPEC. Журнал включен в Перечень международных реферируемых баз данных по научному направлению 02.00.00 химические науки и в Перечень научных и научно-технических изданий ВАК России по научным направлениям: 01.04.00 физика, 05.27.00 электроника. Журнал выпускается при научно-методическом руководстве Отделения нанотехнологий и информационных технологий Российской академии наук Статьи имеют DOI и печатаются в журнале на русском и английском языках

ISSN 1813-8586 DOI: 10.17587/issn1813-8586

Излается с 1999 г.

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 Грибов Б. Г., д.х.н., чл.-кор. РАН Ковальчук М. В., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН Кульчин Ю. Н., д.ф.-м.н., проф., акад. РАН Лабунов В. А., д.т.н., проф., акад. НАНБ (Беларусь) Рыжий В. И., д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. РАН Сауров А. Н., д.т.н., проф., акад. РАН Сигов А. С., д.ф.-м.н., проф., акад. РАН Чаплыгин Ю. А., д.т.н., проф., акад. РАН Шевченко В. Я., д.х.н., проф., акад. РАН

Редакционная коллегия:

Абрамов И. И., д.ф.-м.н., проф. (Беларусь) Андреев А., к.ф.-м.н. (Великобритания) Астахов М. В., д.х.н., проф. Бакланов М. Р., д.х.н., проф. (Китай) Басаев А. С., к.ф.-м.н. Викулин В. В., к.х.н., д.т.н., проф. Горнев Е. С., д.т.н., проф. Карякин А. А., д.х.н., проф. Кузнецов В. И., д.т.н. (Нидерланды) Леонович Г. И., д.т.н., проф. Панин Г. Н., к.ф.-м.н., проф. (Южная Корея) Панич А. Е., д.т.н., проф. Пожела К., д.ф.-м.н. (Литва) Рыжий М. В., д.т.н., проф. (Япония) Сантос Э. Х. П., PhD, Ful. Prof. (Бразилия) Сингх К., к.т.н. (Индия) Телец В. А., д.т.н., проф. Хабибуллин Р. А., к.ф.-м.н. Шашкин В. И., д.ф.-м.н., проф. Шубарев В. А., д.т.н., проф.

Релакция:

Антонов Б. И. (директор изд-ва) Лысенко А. В. (отв. секретарь) Чугунова А. В. Фокин В. А., к.х.н. (ред. перевода) Шетинкин Д. А. (сайт)

СОДЕРЖАНИЕ _____

НАНОТЕХНОЛОГИИ И ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ

Мараева Е. В., Мошников В. А., Пронин И. А., Якушова Н. Д., Аверин И. А. Определение фрактальной размерности на основе анализа изображений атомно-силовой микроскопии металлооксидных нано-

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ MHCT

Абросимова Н. Д., Смолин В. К. Анализ проблем развития технологии структур для создания радиационно-стойких КМОП СБИС 456 Козлов Г. В., Долбин И. В. Применение правила смесей для описания модуля упругости полимерных нанокомпозитов 466 Синёв И. В., Тимошенко Д. А., Жуков Н. Д., Севостьянов В. П. Свойства механически диспергированных до наноразмерного состоя-

элементы мнст

Масальский Н. В. Логические вентили на двухзатворных КНИ КМОП-нанотранзисторах с неравномерно легированным каналом . . 481 Григорьев Д. М., Годовицын И. В., Амеличев В. В., Ильков А. В. Исследование влияния параметров акустического отверстия на амплитудно-частотную характеристику МЭМС-микрофона 491 Аристов В. В., Никулов А. В., Перминов А. П. Возможный способ увеличения рабочего напряжения термоэмиссионных преобразовате-497

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И БИОЭЛЕКТРОНИКА

Волобуев А. Н. Применение линейного коэффициента поглошения излучения в веществе для реконструкции изображения в компьютерном рентгеновском томографе 505

Аннотации и статьи на русском и английском языках доступны на сайте журнала (http://microsystems.ru; http://novtex.ru/nmst/) в разделе "Архив статей с 1999 г.".

ПОДПИСКА:

Адрес для переписки: 107076 Москва, по каталогу "Пресса России" (индекс 27849) Стромынский пер., д. 4 e-mail: nmst@novtex.ru

в редакции журнала (тел./факс: (499) 269-55-10)

Учредитель: Издательство "Новые технологии"

© Издательство "Новые технологии", "Нано- и микросистемная техника", 2018

INTERDISCIPLINARY, SCIENTIFIC, TECHNIQUE AND PRODUCTION JOURNAL

NANO- and MICROSYSTEMS **TECHNOLOGY**

(Title "NANO- I MIKROSISTEMNAYA TEKHNIKA")

ISSN 1813-8586 DOI: 10.17587/issn1813-8586

CHIEF EDITOR

Maltsev P. P., Dr. Sci. (Tech.), Prof.

DEPUTY CHIEF EDITOR

Luchinin V. V., Dr. Sci. (Tech.), Prof.

DEPUTY CHIEF EDITOR

Shur M. S., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof. (USA)

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., Acad. RAS Gribov B. G., Dr. Sci. (Chem.), Cor.-Mem. RAS Kovalchuk M. V., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Kuljchin Yu. N., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Acad. RAS Labunov V. A. (Belorussia), Sci. (Tech.), Acad. NASB Ryzhii V. I., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor.-Mem. RAS Saurov A. N., Dr. Sci. (Tech.), Prof., Acad. 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. Andreev A. (UK), Cand. Sci. (Phys.-Math.), Prof. Astahov M. V., Dr. Sci. (Chem.), Prof. Baklanov M. R., Dr. Sci. (Chem.), Prof. (China) Basaev A. S., Cand. Sci. (Phys.-Math.) Gornev E. S., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Karjakin A. A., Dr. Sci. (Chem.), Prof. Khabibullin R. A., Cand. Sci. (Phys.-Math.) Kuznetsov V. I., Dr. Sci. (Tech.) (Netherlands) Leonovich G. I., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Panich A. E., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Panin G. N., PhD, Prof. (South Korea) Pozhela K. (Lithuania), Dr. Sci. (Phys.-Math.) Ryzhii M. V., (Japan), Dr. Eng., Prof. Santos E. J. P., PhD, Prof. (Brasil) Shubarev V. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Shashkin V. I., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof. Singh K., PhD (India) Telets V. A., Dr. Sci. (Tech.), Prof. Vikulin V. V., Cand. Chem. Sci., Dr. Sci. (Tech.), Prof.

Editorial staff:

Antonov B. I. (Director Publ.) Lysenko A. V. (Executive secretary) Chugunova A. V. Fokin V. A., Cand. Sci. (Chem.) Shchetinkin D. A. (site)

The Journal is included in the international databases of the chemical sciences — Chemical Abstracts Service (CAS) 2018 and of the engineering sciences - INSPEC, and it is also indexed in the Russian Science Citation Index (RSCI) based on the Web of Science platform.

The Journal is included in the Russian System of Science Citation Index and the List of Journals of the Higher Attestation Commission of Russia. Its articles have DOI and are printed in the Journal in Russian and English languages. The Journal is published under the scientific-methodical guidance of the Branch of Nanotechnologies and Information Technologies of the Russian Academy of Sciences.

Vol. 20

No. 8

CONTENTS

NANOTECHNOLOGY AND SCANNING PROBE MICROSCOPY

Maraeva E. V., Moshnikov V. A., Pronin I. A., Yakushova N. D., Averin I. A. The Definition of the Fractal Dimension Based on Image Analysis of Atomic Force Microscopy Data for Metal Oxide Nano-

SCIENCE OF MATERIALS AND TECHNOLOGICAL BASICS OF MNST

Abrosimova N. D., Smolin V. K. Analysis of the Problems of Structures Technology Development for Radiation-Hardness CMOS VLSIs Kozlov G. V., Dolbin I. V. Application of the Mixtures Rule for Description of the Elastic Modulus of the Polymer Nanocomposites . . 471 Sinev I. V., Timoshenko D. A., Zhukov N. D., Sevostyanov V. P. Properties of Mechanically Dispersed Nano-Sized Single Crystals of

MICRO- AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

Masalsky N. V. Logical Gates on Double-Gate SOI CMOS Nano-Grigor'ev D. M., Godovitsyn I. V., Amelichev V. V., Il'kov A. V. The

Influence of Acoustic Port Parameters on Frequency Response of Aristov V. A., Nikulov A. V., Perminov A. P. A Method to Increase

MOLECULAR ELECTRONICS AND BIOELECTRONICS

Volobuev A. N. Application of Linear Absorption Factor of Radiation in Substance for Reconstruction of the Image in a Computer X-Ray

Our:

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

Фланотехнологии и зондовая микроскопия Папотесноооду AND Scanning Probe Microscopy

УДК 621.315.592

DOI: 10.17587/nmst.20.451-455

Е. В. Мараева, канд. физ.-мат. наук, ассистент, e-mail: jenvmar@mail.ru, **В. А. Мошников**, д-р физ.-мат. наук, проф., e-mail: vamoshnikov@mail.ru, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова-Ленина, г. Санкт-Петербург, **И. А. Пронин** канд техн наук доц. e-mail: pronin i90@mail.ru, **Н. Л. Якушора** 20

И. А. Пронин, канд. техн. наук, доц., e-mail: pronin_i90@mail.ru, **Н. Д. Якушова,** аспирант, e-mail: yand93@mail.ru, **И. А. Аверин,** д-р техн. наук, проф., e-mail: nano-micro@mail.ru, Пензенский государственный университет, г. Пенза

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ МЕТАЛЛООКСИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Поступила в редакцию 26.02.2018

Исследованы нанокомпозиции на основе оксида цинка с различными добавками (Fe, Cu) методами сканирующей зондовой микроскопии. Выполнена оценка фрактальной размерности нанокомпозитов в графической программе отображения и анализа данных сканирующей зонной микроскопии Gwyddion. Выявлена связь между технологическими режимами получения (состав, температура отжига) и значениями фрактальной размерности исследуемых образцов. Установлено, что при отсутствии легирующих добавок морфология поверхности зависит от условий термообработки незначительно. Введение легирующих добавок (Fe, Cu) приводит к изменению рельефа поверхности и образованию системы радиально расходящихся микроканалов.

Ключевые слова: оксид цинка, фрактальная размерность, атомно-силовая микроскопия, газовые сенсоры

Введение

В настоящее время нанокомпозиты на основе оксидов металлов широко используются для создания сенсоров газов с перколяционной структурой [1—4]. Устройства на их основе позволяют достичь экстремально высоких значений газочувствительности (более 100 000) [5—7]. Одним из актуальных способов исследования таких структур является фрактальный анализ на основе данных атомно-силовой микроскопии (ACM). Существуют различные подходы для оценки фрактальной размерности наноструктур — метод подсчета кубов, триангуляции, метод спектра мощности. Все эти методы реализуются в графической программе отображения и анализа данных сканирующей зонной микроскопии (C3M) *Gwyddion*.

Целью настоящей работы является изучение особенностей рельефа поверхности нанокомпозитов на основе оксида цинка и определение влияния состава и температуры отжига исследуемых материалов на их фрактальную размерность.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

В настоящей работе для исследований была приготовлена серия образцов на основе оксида цинка с добавками меди и железа, прошедших термообработку в различных температурных режимах (150 °C, 600 °C). Особенности технологии получения образцов отражены в работе [8].

Исследование морфологии поверхности нанокомпозитов на основе оксида цинка проводили методами сканирующей зондовой микроскопии с помощью атомно-силового микроскопа *NTEGRA* (HT-MДТ, Россия) с использованием кремниевых зондов марки *NSG* с радиусом закругления 10 нм в полуконтактном режиме. Оценка фрактальной размерности нанокомпозитов осуществлялась в графической программе отображения и анализа дан-



Рис. 1. АСМ-изображение поверхности образца состава ZnO, легированного Fe, отожженного при T = 600 °C, размер области сканирования 50 × 50 мкм

Fig. 1. AFM image of the sample of ZnO composition alloyed by Fe, annealed at T = 600 °C, the size of the scanned area $-50 \times 50 \ \mu m$



Рис. 2. АСМ-изображение поверхности образца состава ZnO, легированного Fe, отожженного при T = 600 °C, размер области сканирования 10×10 мкм

Fig. 2. AFM image of the sample of ZnO composition alloyed by Fe, annealed at T = 600 °C, the size of the scanned area $-50 \times 50 \ \mu m$

ных сканирующей зонной микроскопии *Gwyddion* методами подсчета кубов и триангуляции на основе анализа ACM-изображений.

В ходе исследования серии методом атомносиловой микроскопии было установлено, что для всех образцов характерно наличие плотноупакованной разветвленной системы зерен. Для примера на рис. 1, 2 представлено ACM-изображение поверхности образца состава ZnO, легированного железом, отожженного при T = 600 °C. Изображения соответствуют различным размерам области сканирования.

С точки зрения морфологии поверхности все слои без добавок Си и Fe являются однородными вне зависимости от условий термообработки, на всех участках поверхности наблюдается одинаковый рельеф. Разброс высот на различных участках поверхности составляет 800...1200 нм. На рис. 3 приведено распределение высоты рельефа по сечению образца состава ZnO, отожженного при T = 600 °C (размеры области сканирования составляли 50 × 50 мкм).

В ряде случаев (образцы с добавками Си и Fe, прошедшие термообработку при невысоких температурах — до 150 °C) поверхность содержала включения, представляющие собой сердцевину с радиально расходящимися каналами. На рис. 4 приведено ACM-изображение участка поверхности образца состава ZnO (Fe) после термообработки при T = 150 °C.

При этом участки поверхности, свободные от включений, характеризовались типичным для исследуемых образцов рельефом (рис. 5—8).



Рис. 3. Распределение высоты рельефа по сечению образца состава ZnO, отожженного при T = 600 °C

Fig. 3. Distribution of the relief heights by section of the sample of ZnO composition, annealed at T = 600 °C



Рис. 4. ACM-изображение поверхности образца ZnO (Fe), отожженного при T = 150 °C, размер области сканирования 50 × 50 мкм

Fig. 4. AFM image of the surface of the sample of ZnO (Fe) composition, annealed at T = 150 °C, the size of the scanned area $-50 \times 50 \ \mu m$



Рис. 5. ACM-изображение поверхности образца ZnO (Fe), отожженного при T = 150 °C, размер области сканирования 100×100 мкм

Fig. 5. AFM image of the surface of ZnO (Fe) sample, annealed at T = 150 °C, the size of the scanned area $-100 \times 100 \ \mu m$



Рис. 7. ACM-изображение поверхности образца ZnO (Fe), отожженного при T = 150 °C, размер области сканирования 10×10 мкм

Fig. 7. AFM image of the surface of ZnO (Fe) sample, annealed at T = 150 °C, the size of the scanned area $-10 \times 10 \mu m$

Для всех исследованных образцов была проведена оценка значений фрактальной размерности с использованием программы *Gwyddion*. Для каждого образца оценку выполняли на основе анализа скана наибольшего размера (50 × 50 мкм). Результаты анализа приведены в таблице.



Рис. 6. ACM-изображение поверхности образца ZnO (Fe), отожженного при T = 150 °C, размер области сканирования 20×20 мкм

Fig. 6. AFM image of the surface of ZnO (Fe) sample, annealed at T = 150 °C, the size of the scanned area $-20 \times 20 \ \mu m$



Рис. 8. ACM-изображение поверхности образца ZnO (Cu), отожженного при T = 150 °C, размер области сканирования 20 × 20 мкм

Fig. 8. AFM image of the surface of ZnO (Cu) sample, annealed at T = 150 °C, the size of the scanned area $-20 \times 20 \ \mu m$

Приведенные на рис. 8 ACM-изображения характеризуют поверхность образца состава ZnO (Cu), прошедшего термообработку при T = 150 °C. Данная структура характеризовалась наименьшим значением фрактальной размерности из всей выборки.

Значения фрактальной раз Values of the fractal dima	змерности на	нокомпозиций	i <mark>Ha ochobe ol</mark> on the basis of	ксида цинка	
values of the fractal alme	la	2a	3a	lb	2b

Номер образца	1a	2a	3a	1b	2b	3b
Samples' numbers						
Состав образца	ZnO	ZnO (Fe)	ZnO (Cu)	ZnO	ZnO (Fe)	ZnO (Cu)
Samples' composition						
Температура отжига, °С	600	600	600	150	150	150
Temperature of annealing, °C						
Фрактальная размерность (метод триангуляции)	2,54	2,60	2,55	2,58	2,58	2,33
Fractal dimension (the method of triangulation)						
Фрактальная размерность (метод подсчета кубов)	2,47	2,52	2,46	2,47	2,48	2,36
Fractal dimension (the method of calculation of cubes)						

Заключение

Таким образом, анализ данных атомно-силовой микроскопии показал, что на характер распределения зерен на поверхности нанокомпозитов оксида цинка влияет в первую очередь наличие легирующих добавок (Fe, Cu). Варьирование режимов термообработки в диапазоне 150...600 °С незначительно сказывается на морфологии поверхности образцов. Наименьшим значением фрактальной размерности характеризуются нанокомпозиты состава ZnO (Cu), отожженные при T = 150 °С. Для остальных типов образцов фрактальная размерность в зависимости от условий синтеза меняется незначительно и зависит главным образом от выбранного метода расчета.

Работа выполнялась в рамках проектной части государственного задания № 16.897.2017/ПЧ и гранта Президента (проект МК-1882.2018.8).

Список литературы

1. **Pronin I. A., Donkova B. V., Dimitrov D. Tz.** et al. Relationship between the photocatalytic and photoluminescence properties of zinc oxide doped with copper and manganese // Semiconductors. 2014. Vol. 48, N. 7. P. 842–847.

2. Левицкий В. С., Леньшин А. С., Максимов А. И., Мараева Е. В., Мошников В. А. Особенности формирования металлооксидных пористых структур в золь-гель системах SiO₂—SnO₂ и SiO₂—CoO // Сорбционные и хроматографические процессы. 2012. Vol. 12, № 5. С. 725—733.

3. **Tarasov S. A., Gracheva I. E., Gareev K. G.** et al. Atomic force microscopy and photoluminescence analysis of porous metal oxide materials // Semiconductors. 2012. Vol. 46, N. 13. P. 1584—1588.

4. Abrashova E. V., Gracheva I. E., Moshnikov V. A. Functional nanomaterials based on metal oxides with hierarchical structure // Journal of Physics: Conference Series. 2013. Vol. 461, N. 1. P. 012019.

5. Пронин И. А. Физико-химические особенности формирования иерархических наноструктур для сенсорных элементов. Автореф. канд. техн. наук. Санкт-Петербург. 2015. 16 с.

6. **Налимова С. С.** Анализ газочувствительных наноструктур с варьируемым типом и концентрацией адсорбционных центров // Автореф. физ.-мат. техн. наук. Санкт-Петербург. 2013. 16 с.

7. Мошников В. А., Налимова С. С., Селезнев Б. И. Газочувствительные слои на основе фрактально-перколяционных структур // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48, № 11. С. 1535—1539.

8. **Пронин И. А.** Исследование потенциометрических газовых сенсоров на основе гомопереходов ZnO/ZnO—Me, Me—Cu, Fe // Нано- и микросистемная техника. 2015. № 8. С. 46—64.

E. V. Maraeva, Ph. D., Teaching Assistant, jenvmar@mail.ru,

V. A. Moshnikov, Professor, vamoshnikov@mail.ru,

Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI" named after V. I. Ulyanov (Lenin), Saint Petersburg,

I. A. Pronin, Ph. D., pronin_i90@mail.ru, N. D. Yakushova, Graduate Student, yand93@mail.ru,

I. A. Averin, Professor, nano-micro@mail.ru,

Penza State University, Penza, 440026, Russian Federation

Corresponding author:

Pronin Igor A., Ph. D., Penza State University, Penza, 440026, Russian Federation, e-mail: pronin_i90@mail.ru

The Definition of the Fractal Dimension Based on Image Analysis of Atomic Force Microscopy Data for Metal Oxide Nanocomposites

Received on February 26, 2018 Accepted on March 20, 2018

The nanocomposite layers based on zinc oxide with different additives (Fe, Cu) for gas sensors with percolation structure, allowing to achieve extremely high values of gas sensitivity, are investigated. All the layers were obtained by sol-gel technology with the use of dip-coating method and then were heat treated at different conditions. The nanocomposites are studied by atomic force microscopy using scanning probe microscope NTEGRA. It is found that for all the nanocomposites, regardless of the heat treatment conditions, the presence of a densely packed branched system of grains with a height spread in different areas of the surface up to 1200 nm is typical. Fractal dimension was used as a quantitative characteristic reflecting the surface roughness coefficient or the non-uniformity of the nanocomposite structure. The estimation of the fractal dimension of the nanocomposites is made in the graphic program for analysis of scanning microscopy data Gwyddion. A correlation between technological modes of production (composition, annealing temperature) and the values of the fractal dimension of the samples is identified. It is established that in the absence of dopants, the surface morphology depends on the conditions of heat treatment slightly. The introduction of alloying additions (Fe, Cu) results in changing in the surface topography and the formation are revealed.

Keywords: zinc oxide, fractal dimension, atomic force microscopy, gas sensors

For citation:

Maraeva E. V., Moshnikov V. A., Pronin I. A., Yakushova N. D., Averin I. A. The Definition of the Fractal Dimension Based on Image Analysis of Atomic Force Microscopy Data for Metal Oxide Nanocomposites, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 451–455.

DOI: 10.17587/nmst.20.451-455

Introduction

The nanocomposites based on metal oxides are widely used for development of the gas sensors with a percolation structure [1-4]. The devices on their basis allow us to reach extremely high values of the gas-sensitivity (more than 100 000) [5-7]. One of the efficient ways of research of the structures is the fractal analysis on the basis of the data of the atomic-force microscopy (AFM). There are various approaches to estimation of the fractal dimension of the nanostructures — the method for calculation of cubes, triangulations, and the power spectrum method. All these methods are realized in the graphic mapping program and analysis the data of *Gwyddion* scanning probe microscopy (SPM).

The aim of the present work is studying of the specific features of the surface relief of the nanocomposites based on zinc oxide and estimation of the influence of the composition and temperature of annealing of the investigated materials on their fractal dimension.

Experimental results and their discussion

For the research presented in the work a series of samples on the basis of zinc oxide with additives of copper and iron were prepared, which were subjected to heat treatment in various temperature modes ($150 \degree C$, $600 \degree C$). The specific features of the technology for obtaining of the samples are reflected in [8].

Research of the morphology of the surface of the nanocomposites on the basis of zinc oxide was done by the methods of the scanning probe microscopy by means of *NTEGRA* (NT-MDT, Russia) atomic-force microscope with the use of the silicon probes of *NSG* brand with the curvature radius of 10 nm in the semicontact mode. Estimation of the fractal dimension of the nanocomposites was carried out in the graphic program of mapping and analysis of the data obtained by *Gwyddion* scanning probe microscopy by the methods for calculation of cubes and triangulations on the basis of the analysis of AFM images.

During the research by the method of the atomic-force microscopy it was established, that all the samples were characterized by the presence of a close-packed ramified system of grains. For an example, fig. 1, 2 present AFM images of the surface of a sample of ZnO composition alloyed by iron, and annealed at T 600 °C. The images correspond to various dimensions of the area of scanning.

From the point of view of the surface morphology, all the layers without additives of Cu and Fe are homogeneous irrespective of the heat treatment conditions, and on all the sites of the surface an identical relief is observed. The spread of the heights on various sites of the surface is 800...1200 nm.

Fig. 3 presents distribution of the relief heights by section of the sample of ZnO composition annealed at T 600 °C (the dimensions of the scanning area were 50 × 50 µm).

In a number of cases (samples with additives of Cu and Fe, after a heat treatment at low temperatures — up to 150 °C) the surface contained inclusions, which looked like a core with radially radiating channels. Fig. 4 presents an AFM image of the surface site of a sample of ZnO (Fe) composition after a heat treatment at T 150 °C.

At that, the surface sites, free from inclusions, were characterized by the relief typical for the investigated samples (fig. 5-8).

For all the investigated samples an estimation was done of the values of the fractal dimension with the use of *Gwyddion* software. For each sample it was done on the basis of analysis of the scan of the biggest size ($50 \times 50 \ \mu m$). The results of the analysis are presented in the table.

The AFM images presented in fig.8 characterize the surface of a sample of ZnO (Cu) composition subjected to heat treatment at T 150 °C. The given structure was characterized by the lowest value of the fractal dimension of all the samples.

Conclusion

Thus, an analysis of the data of the atomic-force microscopy demonstrated that the character of distribution of grains on the surfaces of the nanocomposites of zinc oxide was influenced, first of all, by the presence of the alloying additives (Fe, Cu). Variation of the modes of heat treatment within the range of 150...600 °C only insignificantly affected the morphology of the samples' surfaces. The nanocomposites of ZnO (Cu) composition annealed at T 150 °C were characterized by the lowest value of the fractal dimensions. For the other types of samples the fractal dimension, depending on the conditions of synthesis, varies insignificantly and depended mainly on the chosen method of calculation.

The work was done within the framework of the design part of the state order N_{2} 16.897.2017/4.6 and President's Grant (project MK-1882.2018.8).

References

1. Pronin I. A., Donkova B. V., Dimitrov D. Tz. et al. Relationship between the photocatalytic and photoluminescence properties of zinc oxide doped with copper and manganese, *Semiconductors*, 2014, vol. 48, no. 7, pp. 842–847.

2. Levickij V. S., Len'shin A. S., Maksimov A. I., Maraeva E. V., Moshnikov V. A. Osobennosti formirovanija metallooksidnyh poristyh struktur v zol'-gel' sistemah SiO_2-SnO_2 i SiO_2-CoO , *Sorbcionnye i hromatograficheskie processy*, 2012, vol. 12, no. 5, pp. 725–733 (in Russian).

3. Tarasov S. A., Gracheva I. E., Gareev K. G. et al. Atomic force microscopy and photoluminescence analysis of porous metal oxide materials, *Semiconductors*, 2012, vol. 46, no. 13, pp. 1584–1588.

4. Abrashova E. V., Gracheva I. E., Moshnikov V. A. Functional nanomaterials based on metal oxides with hierarchical structure, *Journal of Physics: Conference Series*, 2013, vol. 461, no. 1, p. 012019.

5. **Pronin I. A.** Fiziko-himicheskie osobennosti formirovanija ierarhicheskih nanostruktur dlja sensornyh jelementov, Avtoref. kand. tehn. nauk, Saint-Petersburg, 2015, 16 p. (in Russian).

6. **Nalimova S. S.** Analiz gazochuvstvitel'nyh nanostruktur s var'iruemym tipom i koncentraciej adsorbcionnyh centrov, Avtoref. kand. fiz.-mat. nauk. Saint-Petersburg, 2013, 16 p. (in Russian).

7. **Moshnikov V. A., Nalimova S. S., Seleznev B. I.** Gazochuvstvitel'nye sloi na osnove fraktal'no-perkoljacionnyh struktur, *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2014, vol. 48, no. 11, p. 1535—1539 (in Russian).

8. **Pronin I. A.** Issledovanie potenciometricheskih gazovyh sensorov na osnove gomoperehodov ZnO/ZnO-Me, Me-Cu, Fe, *Nano- i mikrosistemnaja tehnika*, 2015, no. 8, pp. 46–64 (in Russian).

Материаловедческие и технологические основы MHCT Science of materials and technological basics of MNST

УДК 621.382

DOI: 10.17587/nmst.20.456-465

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

АНАЛИЗ ПРОБЛЕМ РАЗВИТИЯ ТЕХНОЛОГИИ СТРУКТУР ДЛЯ СОЗДАНИЯ РАДИАЦИОННО-СТОЙКИХ КМОП СБИС

Поступила в редакцию 07.03.2018

Рассмотрены основные свойства кремниевых структур для производства СБИС, стойких к воздействию дестабилизирующих факторов, вызванных радиационным воздействием. Выполнен анализ свойств материалов, выявлены существующие ограничения применения. Показана перспективность использования структур КНИ, создаваемых в рамках технологий прямого сращивания пластин кремния. Приведены приемы управления специфическими свойствами структуры "кремний на изоляторе".

Ключевые слова: КМОП, СБИС, кремний на диэлектрике, кремний на сапфире, кремний на изоляторе, Smart Cutтехнология, геттерирование, имплантация

Введение

Современные подходы к созданию специализированной аппаратуры космического и военного назначения, стойкой к дестабилизирующим факторам, вызванным воздействием радиации, можно разделить на следующие большие группы: конструктивные, схемотехнические и технологические методы повышения стойкости, для разработки которых применяют в числе прочего моделирование влияния дестабилизирующих факторов на этапе проектирования блоков, узлов и компонентов [1].

КМОП-технология, наиболее широко применяемая для изготовления цифровых интегральных схем и схем памяти, имеет важное преимущество по отношению к биполярным и комбинированным технологиям для использования в специальной аппаратуре, заключающееся в малом энергопотреблении и, как следствие, в отсутствии необходимости дополнительного охлаждения. В рамках конструктивно-технологического базиса КМОП существует ряд направлений, ориентированных на достижение различных целей и, соответственно, обладающих различными свойствами [2]:

 КМОП на объемном или эпитаксиальном кремнии для изделий силовой электроники или создания кремниевых излучающих структур, соответственно;

- КМОП на структурах "кремний на изоляторе" (КНИ) для создания высокопроизводительных интегральных схем с высоким быстродействием, сложным функционалом и повышенной стойкостью к специальным факторам;
- КМОП на структурах "кремний на сапфире" (КНС) для высокочастотных схем.

Применение различных модификаций стартовых структур для создания приборов микро- и наноэлектроники требует соответствующего анализа их выбора и приемов управления характеристиками.

Технологические направления создания СБИС на кремниевых структурах

По мнению специалистов НПП "Сапфир", технология КМОП КНС — это особенная технология, обладающая стойкостью к следующим радиационным эффектам: космического происхождения, возникающим вблизи ядерно-энергетических объектов; сопутствующих ядерному взрыву [3].

КМОП на структурах КНС обеспечивают создание интегральных микросхем с быстродействием, близким к быстродействию подобных микросхем на основе GaAs или GeSi; при этом мощность, потребляемая микросхемой КМОП-КНС, заметно меньше, иногда в разы [4]. В случае аналоговых микросхем КНС это достоинство выступает как повышенная высокочастотность, кроме того, отсутствие паразитных связей обусловливает низкий уровень помех, исключительную линейность в коммутаторах, аттенюаторах, смесителях и широкий динамический диапазон.

Методы получения гетероэпитаксиальных слоев кремния на сапфировой подложке, их электрофизические характеристики приведены в работах [5—15]. В последнее время осваиваются методы создания структур КНС, использующие технику водородного переноса, применяемую в создании структур КНИ [16].

Существенным ограничением применения структур КНС для производства СБИС являются их высокая стоимость и сложность обработки. Отечественная промышленность выпускает пластины со структурами КНС до 150 мм, современное оборудование для производства микросхем на кремниевых подложках рассчитано на пластины диаметром 200...300 мм. Возможным разрешением этой проблемы станет переход к новому формату компактных фабрик невысокой производительности для обработки пластин малого диаметра без классических чистых комнат и с безмасочной литографией, что позволяет на 2-3 порядка снизить их стоимость, уменьшить требуемые производственные площади и циклы, повысить темпы разработки, маневренность и эффективность малосерийного производства [17].

Транзисторы СБИС, изготовленные на структурах КНИ, имеют ряд важных преимуществ (увеличенное быстродействие вседствие уменьшения времени задержки, более низкое динамическое энергопотребление, отсутствие паразитного тиристорного эффекта и др.) над транзисторами объемных технологий с аналогичной проектной нормой [2, 18, 19].

В настоящее время существует ряд способов изготовления КНИ-пластин [20—22], из которых доминируют имплантация в глубину кристалла ионов кислорода с последующим синтезом скрытого слоя при отжиге (SIMOX-технология) [23, 24] и прямое сращивание донорной и опорной пластин кремния с последующим их отсечением по слою имплантированного в донорную пластину водорода (Smart Cut-технология, Dele Cut-технология) [25, 26].

Влияние радиации на структуры КНИ наиболее подробно исследовано для структур, создаваемых имплантацией кислорода (SIMOX) [27]. При облучении SIMOX-структур наблюдаются следующие особенности:

 в структурах, имеющих более совершенный скрытый диэлектрик, накапливается меньший заряд;

- в оксиде формируются как дырочные, так и электронные ловушки, соответственно, накапливаются и положительный, и отрицательный заряды, приводя к частичной взаимной компенсации;
- плотность поверхностных состояний в случае SIMOX-структур, созданных многократной имплантацией кислорода, практически не меняется при облучении, тогда как в SIMOX-структурах, созданных однократной имплантацией, имеет место генерация дополнительных состояний.

Результаты экспериментальных исследований по влиянию полной дозы облучения на стойкость микросхем на структурах КНИ, изготовленных по технологиям SIMOX, Smart Cut, Dele Cut и KHC, показывают перспективность технологии Smart Cut, которая, в отличие от технологии SIMOX, обеспечивает не только требуемый низкий уровень дефектности пленок кремния структур КНИ, но и более широкие возможности в управлении параметрами захороненного слоя диоксида кремния. Это преимущество носит принципиальный характер, поскольку свойства захороненного оксида во время облучения во многом определяют стойкость КМОП БИС к радиационному воздействию. Причины повышенной стойкости к импульсному воздействию БИС на структурах КНИ по сравнению со структурами КНС обусловлены возможностью подключения подложки структур КНИ к нулевому потенциалу [28, 29].

Практически все современные тенденции по применению функционально сложных изделий микроэлектроники приводят к увеличению чувствительности ИС к воздействию радиации. Уменьшение топологических размеров увеличивает вклад периферийных областей и снижает значение зарядов переключения. При этом также происходит уменьшение эффективной длины собирания заряда, что дает некоторую компенсацию эффекта уменьшения стойкости. Увеличение быстродействия приводит к тому, что при том же значении тока уменьшается заряд переключения. Использование пониженного напряжения или мощности потребления означает, что требуется меньший заряд, необходимый для запоминания информации, и более низкие изменения пороговых напряжений, приводящих к параметрическим отказам. Имеет место и положительная тенденция в связи с применением новых технологических операций (за счет уменьшения толщины структур, снижения уровня дефектности исходных материалов, повышения уровней легирования и т. д.), вследствие чего происходит некоторое снижение чувствительности характеристик ИС к радиационным эффектам [30]. Некоторые аспекты конструкторско-технологических методов повышения радиационной стойкости

микросхем, выполняемых по КМОП КНИ-технологии, приведены в работах [2, 31—37].

Аспекты повышения качества характеристик структур КНИ

Приборные слои структур КНИ, получаемые в рамках Smart Cut-технологии, отличаются от приборных слоев других составных структур КНИ наличием в них радиационных дефектов, вызванных имплантацией ионов водорода [38]. Наряду с дефектами, образованными имплантированными частицами, деформациями приборного слоя на выемках и выпуклостях реально неплоской поверхности опорной пластины, радиационные дефекты определяют общую плотность дислокаций в приборном слое, которая может быть снижена до $\sim 10^2$ см⁻² тщательной очисткой пластин перед сращиванием. Шероховатость внешней поверхности приборного слоя после его отщепления от приборной пластины достигает нескольких десятков (20...40) нм, она может быть доведена до $R_a = 0,15$ нм путем химико-механической полировки внешней поверхности приборного слоя, легким полирующим травлением, окислением, термообработкой в водороде.

Неоднородность толщины приборного слоя определяется, в основном, нестабильностью и неоднородностью энергии имплантируемых ионов водорода и изменениями угла их падения на поверхность приборной пластины при воздействии пучком. Современные имплантеры позволяют изготавливать структуры с неоднородностью толщины приборного слоя на уровне 2,5 %. Параметры изолирующего диэлектрического слоя: толщина ~0,1; 0,5 мкм; неоднородность толщины ±10 %; электрическая прочность >5 МВ/см; плотность распределения заряда в диэлектрике (определяется несколькими "дефектами" структуры диэлектрика — диоксида кремния) [39, 40]; общая плотность распределения дефектов составляет около $5 \cdot 10^{12}$ см⁻²; эти центры захватывают инжектируемые в диэлектрик дырки и образуют объемный положительный заряд. Водород из диоксида кремния удаляют обработкой структур в сухом кислороде, в вакууме или пропусканием через структуру электрического тока, а щелочные металлы — высокотемпературной (1000...1200 °C) термообработкой структур в хлорсодержащей среде (хлоре, хлористом водороде, смеси трихлорэтилена) и кислороде. Загрязняющие металлы в структуре образуют дефекты на границах диоксида кремния с диэлектриком, создавая в этих местах зарядовые состояния. В частности, такая ситуация наблюдается, если составную структуру КНИ получают, сращивая неокисленную кремниевую пластину с окисленной. В этом случае зарядовые состояния образуются на границе кремния с диоксидом кремния.

В структурах КНИ благодаря малой толщине рабочего слоя кремния и отсечению его диэлектриком от радиационных дефектов, генерируемых в подложке, наиболее важным с точки зрения изменения свойств КНИ при облучении являются введение заряда в скрытый диэлектрик и состояния на границе с оксидом [41, 42]. Заряд в скрытом диэлектрике и состояния на границе отсеченный слой кремния/ диэлектрик являются параметрами материала КНИ, непосредственно влияющими на работу приборов, создаваемых в отсеченном слое кремния, поскольку они приводят к созданию дополнительного канала проводимости вблизи границы раздела с полупроводником и смещению порогового напряжения транзистора.

Ввиду того что толщину приборного слоя можно делать практически сколь угодно малой (например, 50 нм), соответственно можно уменьшать и размеры полупроводниковых ИС; уменьшение объема элементов этих устройств приводит к соответствующему увеличению радиационной стойкости ИС. Например, удается более чем на порядок повысить радиационную стойкость к импульсному воздействию ИС на основе составных структур КНИ по сравнению с ИС на основе объемного кремния [36].

Для снижения влияния дислокаций и микродефектов на характеристики приборного слоя кремния разработаны приемы изготовления структур КНИ, использующие геттерирующую обработку поверхности пластины-донора перед термокомпрессионным соединением с пластиной-носителем [43—45].

В Институте физики полупроводников СО РАН разработан способ изготовления структур КНИ по технологии Dele Cut, в котором для улучшения свойств границы раздела Si/SiO₂ в структурах, а также снижения радиационно-термического воздействия имплантацию водорода в донорную пластину кремния проводят в интервале доз $2,5 \cdot 10^{16} \dots 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ через слой оксида толщиной 20...50 нм, который после облучения удаляется. Термообработку для сращивания пластин и расслоения композиции выполняют при температурах 150...250 °С в течение 1...2 ч и при 350...450 °С в течение 0,5...2 ч. Для отжига большей части дефектов, вносимых имплантацией, проводят затем высокотемпературную термообработку при 1100 °С в течение 0,5...1 ч [46].

В работе [47] рассматривается способ изготовления структур КНИ по технологии Smart Cut для радиочастотных применений в интегральных схемах с рабочей частотой порядка нескольких гигагерц, включающий нанесение разделительного слоя из поликремния между опорной пластиной и скрытым диэлектриком. Нанесение слоя из поликремния осуществляется химическим осаждением

из паровой фазы при атмосферном давлении и с температурой осаждения в интервале 800...1050 °С, предпочтительно 850 °С. Поликристаллический кремний разделительного слоя должен иметь полностью случайную ориентацию зерен хотя бы по некоторой части толщины разделительного слоя. После сборки донорной и опорной пластин через промежуточное звено из диэлектрического слоя и разделительного слоя проводят упрочняющий отжиг при температуре строго выше чем 950 °С и ниже чем 1200 °С длительностью не менее 10 мин. Опорная пластина имеет определенное значение удельного сопротивления, большее или равное 3000 Ом · см. Для БиКМОП КНИ СБИС необходим скрытый низкоомный слой в области коллектора биполярного транзистора. Поэтому соединение полупроводниковых пластин осуществляется через промежуточные слои металла и поликристаллического кремния, образующих в процессе сращивания при повышенной температуре силицид металла, и включает в технологический процесс формирование диэлектрического слоя, осаждение слоя поликристаллического кремния и металлического слоя на первой пластине кремния, соединение ее со второй пластиной кремния [48].

Ввиду того что одной из основных причин деградации структур КНИ и приборов на их основе при радиационном воздействии является накопление положительного заряда в захороненном диэлектрике, а также на границах раздела Si/SiO₂, для обеспечения условий устойчивого функционирования элементов интегральных схем при дозовых воздействиях в захороненном диэлектрике создают центры захвата электронов. Одним из способов формирования таких центров является имплантация ионов примесей, при встраивании которых в матрицу SiO₂ их образование является энергетически выгодным. Имплантацию ионов фтора с концентрацией 10^{19} ... 10^{22} см⁻³ используют для предотвращения появления токов утечки и подавления (drain-induced barrier lowering) DIBL-эффекта, однако при этом происходит повреждение верхнего активного слоя кремния, которое не восстанавливается после термических отжигов [49].

В работах [50, 51] показано, что при имплантации ионов фтора дозами более 10^{14} см⁻² атом фтора образует одну связь с атомом кремния, следствием чего является возникновение дефектов типа немостикового атома кислорода, являющихся центрами захвата отрицательного заряда. Кроме того, атомы фтора пассивируют связи Si—H и стимулируют образование моно- и дивакансий кислорода. Результаты измерений вольт-фарадных характеристик МОП-структур показали, что фторирование диэлектрика дозой 1 × 10¹⁵ см⁻² является оптимальным для снижения чувствительности к воздействию стационарного ионизирующего излучения. Характеристики структур, имплантированных дозой 3×10^{15} см⁻², менее стабильны при ионизирующих воздействиях, а структуры с диэлектриком, фторированным дозой менее 1×10^{15} см⁻², имеют более высокую скорость накопления заряда. Однако авторы работы [52] считают, что для образования компенсирующих центров (не создающих при этом сильных повреждений приборного кремния, через который проводится имплантация) достаточными являются дозы фтора $10^{12}...10^{14}$ ион/см².

В работах [49, 52, 53] показана эффективность имплантации ионов металлов (железа, хрома, алюминия) в захороненный диэлектрик для поддержания электронейтральности при стационарных дозовых воздействиях. Однако присутствие металлических примесей в диэлектриках может привести к ухудшению их изолирующих свойств, особенно при воздействиях высокой энергии и мощности. Эффективно захватывают отрицательный заряд нанокластеры, образующиеся при имплантации в диоксид кремния атомов германия или кремния и последующем отжиге при температуре 850 °C в течение 40 мин [54].

Повышение стойкости структуры КНИ может быть обеспечено ее обработкой γ -квантами в интервале доз $10^3...10^6$ рад в диапазоне температур 350...450 °C [55].

Заключение

Проведен анализ применения различных модификаций стартовых структур для создания КМОПприборов микро- и наноэлектроники. Установлено, что наиболее перспективным направлением развития структур КНИ является технология Smart Cut, которая обеспечивает не только требуемый низкий уровень дефектности пленок кремния, но и более широкие возможности в управлении параметрами захороненного слоя диоксида кремния. Блок технологических операций, использующий метод твердофазного сращивания пластин, является универсальным для изготовления многослойных композиций, содержащих не только кремний, но и другие полупроводниковые материалы.

Актуальным и требующим детальных исследований является создание методов оценки уровня устойчивости структур при действии дестабилизирующих факторов.

Список литературы

1. Стешенко В., Гаршин В. Перспективы развития электронных компонентов для бортовой аппаратуры космических систем // Электронные компоненты. 2012. № 3. С. 6—12.

2. Волков С. И., Глушко А. А., Морозов С. А. Исследование и моделирование факторов, ограничивающих радиационную стойкость КНИ СБИС // Труды НИИСИ РАН. 2011. Том 1, № 1. С. 51–56. 3. **Носов Ю. Р., Сметанов А. Ю.** КНС-технология — важнейший ресурс экстремальной электроники // Высшее образование сегодня. 2014. № 3. С. 30—36.

4. Микроэлектроника бортовых вычислительных комплексов. Стратегия успеха / Под ред. А. Ю. Сметанова. М.: Логос, 2006. 192 с.

5. Панков В. С., Цыбульников М. Б. Эпитаксиальные кремниевые слои на диэлектрических подложках и приборы на их основе. М.: Энергия, 1979. 88 с.

6. Filby J. D., Nielsen S. Single-crystal films of silicon jn insulators // J. Appl. Phys. 1967. Vol. 18, N. 10. P. 1357–1382.

7. Латышева Н. Д., Малков А. Ю., Николаев Д. А., Скупов В. Д., Смолин В. К. Новые возможности эллипсометрии в технологии производства полупроводниковых приборов // Конверсия в машиностроении. 2004. № 4. С. 51–56.

8. **Кривулин Н. О.** Ультратонкие слои кремния на сапфире: учебно-методическое пособие. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2011. 40 с.

9. **US Patent** 5.973.363. Oct. 26, 1999. CMOS circuit with shortened p-channel length on ultrathin silicon on insulator.

10. Александров П. А., Белова Н. Е., Демаков К. Д., Шемардов С. Г. Создание центров рекомбинации носителей зарядов в сапфировой подложке КНС-структур // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49, № 8. С. 1124.

11. Александров П. А., Демаков К. Д., Шемардов С. Г., Кузнецов Ю. Ю. Способ получения сверхтонких пленок кремния на сапфире / Патент РФ № 2427941, опубл. 27.08.2011.

12. Александров П. А., Демаков К. Д., Шемардов С. Г., Кузнецов Ю. Ю. Способ получения гетероэпитаксиальных структур кремния на сапфире/Патент РФ № 2 390 874, опубл. 27.05.2010.

13. Александров П. А., Демаков К. Д., Шемардов С. Г., Кузнецов Ю. Ю. Рекристаллизация с границы раздела кремний-сапфир как новый метод получения структурно совершенных пленок кремния на сапфировой подложке // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44, вып. 10. С. 1433—1435.

14. **Мустафаев А. Г.** Научные основы и практические аспекты разработки технологии создания тонких полупроводниковых слоев кремния на изолирующих подложках применением процессов ионной обработки. Дисс. на соискание ученой степени доктора технических наук. Махачкала, ДагГТУ. 2011. 284 с.

15. **Мустафаев А. Г., Мустафаев Г. А., Мустафаев А. Г.** Способ изготовления полупроводникового прибора: Патент РФ № 2 388 108, опубл. 27.04.2010.

16. Жанаев Э. Д., Дудченко Н. В., Антонов В. А., Попов А. И., Попов В. П. Способ изготовления структуры кремний-на-сапфире. Патент РФ № 2 538 352, опубл. 10.01.2015.

17. Боднарь Д. Новый формат компактных кремниевых фабрик — решение для микроэлектроники России // Электронные компоненты. 2015. № 3. С. 12—16.

18. Бумагин А. В., Воронков Д. И., Древаль Т. Н., Руткевич А. В., Шишкин О. Н. Выбор технологического процесса для производства специализированных радиационно-стойких СБИС типа "система в корпусе" // Сб. трудов МЭС-2012. Россия, Москва, ИППМ РАН, октябрь 2012.

19. Зебрев Г. И. Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах высокой степени интеграции. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. 148 с.

20. Суворов А. Л., Богданович Б. Ю., Залужный А. Г. и др. Технологии структур КНИ. М.: Изд. МИЭТ. 2004. 407 с.

21. Наумченко А. С. Структуры кремний-на-изоляторе в микро- и наноэлектронике: учеб. пособие по дисциплине "Технологические процессы микро- и наноэлектроники". Таганрог: Южный федеральный университет, 2010. 58 с.

22. **Мустафаев А. Г.** Технология формирования кремниевых пластин со скрытым слоем // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 10. С. 11—14. 23. Celler G. K., Cristoloveanu S. Frontiers of silicon-on-insulator // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 93, N. 9. P. 4955–4978.

24. **Cristoloveanu S.** Silicon on insulator technology and devices: from present to future // Solid state electronics. 2001. Vol. 45. P. 1403–1411.

25. **Bruel M., Aspar B., Maleville C., Moriceau H.** Unibond SOI wafers achieved by smart-cut process // J. Electrochem. Soc. proceedings. 1997. Vol. 23. P. 2–10.

26. Попов В. П., Антонова А. И., Французов А. А. и др. Свойства структур и приборов на кремний-на-изоляторе // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. № 9. С. 1075—1083.

27. Izumi K., Dokin M., Ariyoshi H. CMOS devices fabricated on buried SiO_2 layers formedbyoxygen implantation into silicon // Electron. Lett. 1978. 14 (18). P. 593.

28. Лабунов В. А., Бондаренко В. П., Долгий Л. Н., Белоус А. И., Малышев В. С., Комаров Ф. Ф., Мильчанин О. В. Состояние и перспективы развития КНИ-технологии в Республике Беларусь // Сборник докладов Международной научной конференции "Актуальные проблемы физики твердого тела". Т. 1. Минск: Издательский центр БГУ, 2005. С. 9–10.

29. Алиева Н. В., Белоус А. И., Бондаренко В. П., Долгий Л. Н., Малышев В. С., Сорока С. А., Сякерский В. С., Усов Г. И., Шведов С. В. Сравнительные исследования КМОП БИС, изготовленных в КНИ и КНС-структурах. URL: 5physics.bye107_files/mono/book2007_2pdf/20072st_...

30. Полесский С., Жаднов В., Артюхова М., Прохоров В. Обеспечение радиационной стойкости аппаратуры космических аппаратов при проектировании // Компоненты и технологии. 2010. № 9. С. 93—98.

31. Селецкий А. В. Исследование и разработка конструктивно-технологических методов повышения радиационной стойкости глубокосубмикронных СБИС с помощью средств приборно-технологического моделирования. Автореферат диссертации на соискание ученой степени канд. техн. наук. М.: МИЭТ, 2012 г. 27 с.

32. Петросян О. А. Анализ методов повышения радиационной стойкости КМОП интегральных схем и моделирование запоминающих элементов флэш-памяти // Изв. НАН РА и ГИУА. Сер. ТН. 2011 Т. LXIV, № 1. С. 57—65.

33. **Мустафаев А. Г.** Конструктивные и технологические способы улучшения параметров КНИ-МОП-транзисторов // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 6. С. 37—42.

34. Горбунов М. С. Моделирование и проектирование элементов КМОП интегральных микросхем технологии "кремний-на-изоляторе" с повышенной стойкостью к дозовым эффектам. Автореферат диссертации на соискание ученой степени канд. техн. наук. Москва, НИЯУ "МИФИ", 2010 г. 28 с.

35. **Таперо К. И., Улимов В. Н., Членов А. М.** Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах космического применения. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 304 с.

36. Белоус А. И., Солодуха В. А., Шведов С. В. Космическая электроника. В 2-х кн. Кн. 2. М.: Техносфера, 2015. 488 с.

37. **Горячев В. А.** Физические характеристики КНИтранзисторов для наноэлектроники // Успехи современной радиоэлектроники. 2008. № 7. С. 54—71.

38. Прокопьев Е. П., Тимошенков С. П. Определения энергии связи прямого соединения пластин кремния методом генерации (вскрытия) трещины между поверхностями сращивания (обзор) // Оборонный комплекс-научно-техническому прогрессу России. 1999. № 3. С. 45–49.

39. **Tong Q.-Y., Gösele U.** Semiconductor Wafer Bonding: Science, Technology. New York: Wiley, 1988. 326 p.

40. **Прокопьев Е. П., Тимошенков С. П.** Возможность прямого соединения пластин кремния с использованием химической сборки поверхности методом молекулярного наслаивания // Материаловедение. 1999. № 4. С. 49–51.

41. **Cristoloveanu S., Li S. S.** Electrical Characterization of Silicon-On-Insulator Materials and Devices. Kluwer Academic Publishers, 1995.

42. **Colinge J. P.** Silicon-On-Insulator Technology: Materials to VLSI. Kluwer Academic Publishers, 1997. 223 p.

43. Скупов В. Д., Смолин В. К. Способ изготовления структур "кремний на изоляторе". Патент РФ № 2193256, опубл. 20.11.2002.

44. Скупов В. Д. Способ изготовления структур "кремний на изоляторе". Патент РФ № 2137252, опубл. 10.09.1999.

45. Скупов В. Д., Кормишина Ж. А., Смолин В. К., Щербакова И. А. Способ формирования структур "кремний на изоляторе". Патент РФ № : 2139595, опубл. 10.10.1999.

46. Попов В. П., Антонова И. В., Стась В. Ф., Миронова Л. В. Способ изготовления структуры кремний-наизоляторе. Патент РФ № 2164719, опубл. 27.03.2001.

47. Шибко А., Бертранд И., Перу С., Ван С., Рено П. Способ изготовления структуры. Патент РФ № 2 607 336, опубл. 10.01.2017.

48. Горнев Е. С., Лукасевич М. И., Сулимин А. Д., Громов Д. Г., Мочалов А. И., Трайнис Т. П., Шишко В. А., Воробьева Н. К. Способ создания структуры — кремний на изоляторе для сбис (варианты) / Патент № 2149481, опубл. 20.05.2000.

49. Hughes H., McMarr P. Radiation-hardening of SOI by ion implantation into the buried oxide layer. Патент США N. 5795813, опубл. 31.05.1996.

50. Гуськова О. П., Воротынцев В. М., Абросимова Н. Д., Шоболов Е. Л., Минеев М. Н. Влияние имплантации ионов фтора на радиационно-индуцированные процессы в диэлектрических слоях композиций кремний/изолятор // Неорганические материалы. 2012. Т. 48, № 3. С. 272—276.

51. Гуськова О. П., Воротынцев В. М., Фаддеев М. А., Абросимова Н. Д. Расчеты электронной структуры диоксида кремния, модифицированного фтором // Вестник ННГУ. 2013. Вып. 1, Ч. 1. С. 43–47.

52. Кузнецов Е. В., Рыбачек Е. Н., Сауров А. Н. Способ увеличения радиационной стойкости элементов КМОП-схем на КНИ подложке. Патент РФ № 2320049, опубл. 20.03.2008.

53. **Патент** Японии № 6014524, опубл. 23.02.94. номер за-явки 59-39509.

54. Гуськова О. П., Воротынцев В. М., Шоболов Е. Л., Абросимова Н. Д. Влияние германия, имплантированного в структуру "диоксид кремния на кремнии", на процессы накопления заряда при воздействии низкоэнергетического стационарного ионизирующего излучения // Материалы электронной техники. 2012. № 4. С. 28—33.

55. Мустафаев А. Г., Шаваев Х. Н., Мустафаев А. Г., Мустафаев Г. А. Способ повышения радиационной стойкости полупроводниковых приборов. Патент РФ № 2308785, опубл. 20.10.2007.

N. D. Abrosimova, Engineer, **V. K. Smolin,** Ph. D., Senior Researcher, niiis@niiis.nnov.ru FSUE "FRPC Measuring Systems Research Institute named after Yu. Ye. Sedakov", Nizhniy Novgorod, 603951, Russian Federation

Corresponding author:

Smolin Valentin K., Ph. D. in Engineering Science, Senior Researcher, FSUE "FRPC Measuring Systems Research Institute named after Yu. Ye. Sedakov", Nizhniy Novgorod, 603951, Russian Federation, e-mail: niiis@niiis.nnov.ru

Analysis of the Problems of Structures Technology Development for Radiation-Hardness CMOS VLSIs Development

Received on March 07, 2018 Accepted on April 10, 2018

The main properties of silicon structures for VLSI production, resistant to destabilizing factors caused by radiation exposure, are described in the article. The analysis of material properties and current limitations of application is carried out. The perspective of using of SOI structures, created in the framework of silicon wafers direct bonding technology, is shown. The methods of control by specific properties of "silicon on insulator" structure are given: application of donor wafer getter surface before bonding for decrease dislocation density and microdefects, creation of additional separation layers for decrease mechanical stress, and creation of negative charge trapping center in buried dielectric for decrement of SOI radiation response.

Keywords: CMOS, VLSI, silicon on dielectric, silicon on sapphire, silicon on insulator, Smart Cut-technology, gettering, implantation

For citation:

Abrosimova N. D., Smolin V. K. Analysis of the Problems of Structures Technology Development for Radiation-Hardness CMOS VLSIs Development, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 456–465.

DOI: 10.17587/nmst.20.456-465

Introduction

The approaches to development of the special equipment for space and military purposes resistant to the destabilizing factors caused by radiation can be divided into the following big groups: the design, circuit and technological methods for improvement of the resistance, for development of which modeling of the influence of the destabilizing factors at the stage of designing of units and components, among other things, are applied [1].

The CMOS technology, most widely applied for manufacturing of the digital integrated circuits and memory circuits, has an advantage in comparison with the bipolar and combined technologies used in special equipment, consisting in a small energy consumption and, as a consequence, in absence of the necessity for additional cooling. Within the framework of the structurally — technological basis of CMOS there is a number of directions focused on achievement of various purposes and, accordingly, possessing various properties [2]:

- CMOS on the volume or epitaxial silicon for products of the power electronics or development of the silicon radiating structures, accordingly;
- CMOS on "silicon on insulator" (SOI) structures for highefficiency and high speed integrated circuits with a complex functional and higher resistance to special factors;
- CMOS on "the silicon on sapphire" (SOS) structures for high-frequency circuits.

Application of various modifications of the starting structures for development of the devices of micro- and nanoelectronics demands an analysis of their selection and methods for their characteristics' control.

Technological directions for development of VLSI on silicon structures

According to the Sapphire specialists, CMOS SOS is a special technology resistant to the radiation effects of the space origin, to the radiation effects appearing near the nuclear power objects and accompanying a nuclear explosion [3].

CMOS on SOS structures ensure development of the integrated microcircuits with a speed close to the speed of the similar microcircuits on the basis of GaAs or GeSi; at that, the power consumed by a CMOS-SOS microcircuit, is considerably, and even, many times, less [4]. In case of the analogue microcircuits of SOI this advantage means a raised high frequency, besides, absence of the parasitic bonds determines a low level of noises, an exclusive linearity in the switchboards, attenuators, mixing circuits, and a wide dynamic range.

The methods for obtaining of the heteroepitaxial silicon layers on a sapphire substrate, and their electrophysical characteristics are presented in [5-15]. The methods for development of SOS structures, employing the hydrogen transfer technics, applied in development of SOI structures [16], are being mastered.

An essential restriction for application of the SOS structures for manufacture of VLSI is their high cost and complexity of processing. The domestic industry produces wafers with SOS structures up to 150 mm, the modern equipment for manufacture of the microcircuits on the silicon substrates is intended for the plates with diameter of 200...300 mm. A possible solution to this problem is transition to a new format of compact factories of low productivity for processing of wafers of small diameter without classical clean rooms and no-mask lithography, which allows to lower their costs by 2 or 3 orders, reduce the required floor spaces and cycles, increase the development rates, manoeuvrability and efficiency of the smallbatch manufactures [17].

The VLSI transistors made on SOI structures have a number of advantages (higher speed owing to reduction of the time delay, lower dynamic energy consumption, absence of the parasitic tiristor effect, etc.) compared with the transistors of the volume technologies of a similar design standard [2, 18, 19].

There is a number of ways for manufacturing of SOI plates [20-22], out of which the dominant ones are implantation of the ions of oxygen into the depth of a crystal with the subsequent synthesis of the buried layer during annealing (SIMOX

technology) [23, 24] and a direct bonding of the donor and basic wafers of silicon with their subsequent cutting off by the layer of the hydrogen implanted in the donor wafers (Smart Cut technology, Dele Cut technology) [25, 26].

Influence of radiation on the SOI structures was investigated most thoroughly for the structures created by implantation of oxygen (SIMOX) [27]. During irradiation of the SIMOX structures the following features were observed:

- In the structures with a better buried dielectric, a smaller charge was accumulated;
- In the oxide the hole and electronic traps were formed, and, accordingly, the positive and negative charges were accumulated, leading to a partial mutual compensation;
- In case of SIMOX structures, created by a repeated implantation of oxygen, the density of the surface states practically did not vary during irradiation, whereas in the SIMOX structures, created by a one-time implantation, a generation of additional states was observed.

The results of the experimental research of the influence of a full dose of irradiation on the resistance of the microcircuits on silicon-on-insulator technology structures made by SIMOX, Smart Cut, Dele Cut and SOS technologies, demonstrate good prospects for the Smart Cut technology, which, unlike SIMOX, ensures not only the demanded low level of defects of the silicon films of SOI structures, but also provides more ample opportunities for control of the parameters of the buried layer of the silicon dioxide. This advantage is of a principle character, because during an irradiation the properties of the buried oxide to a great degree determine the resistance of CMOS LSI to the influence of radiation. The reasons for a higher resistance to the pulse influence of LSI on the SOI structures in comparison with the SOS structures are determined by a possibility to connect the substrates of the SOI structures to the zero potential [28, 29].

Practically all the trends concerning application of the functionally complex products of microelectronics lead to an increase of the sensitivity of IC to the radiation influence. Reduction of the topological sizes increases the contribution of the peripheral areas and reduces the values of the switching charges. At that, there is also a reduction of the effective length of the charge collection, which to a certain degree compensates for the effect of reduction of hardness. A speed increase leads to the fact that at the same value of a current the switching charge decreases. Use of a lowered voltage or consumption power means, that a smaller charge is necessary for memorizing of information, as well as lower changes of the threshold voltages leading to the parametrical failures. There is also a positive trend in connection with application of new technological operations (due to reduction of the thickness of the structures, lower level of defects in the initial materials, increase of the doping levels, etc.), owing to which there is a certain decrease of sensitivity of IC characteristics to the radiation effects [30]. Certain aspects of the design-technological methods for improvement of the radiation resistance of the microcircuits implemented by CMOS SOI technology are presented in the works [2, 31-37].

Aspects of improvement of the quality of the SOI structures' characteristics

The instrument layers of the SOI structures received within the framework of Smart Cut-technology differ from the instrument layers of the other compound structures of SOI by the presence in them of the radiation defects caused by implantation of the ions of hydrogen [38]. Alongside with the defects caused by the implanted particles, deformations of the instrument layer on the hollows and saliences of a really nonplanar surface of the basic plate, the radiation defects determine the total density of the dislocations in the instrument layer, which can be lowered down to ~ 10^2 cm⁻² due to a careful cleaning of the plates before merging. The roughness of the external surface of the instrument layer after its removal from the instrument plate reaches several tens (20...40) nm, and it can be lowered down to $R_a = 0.15$ nm by a chemical-mechanical polishing of the external surface of the instrument layer, by light polishing etching, oxidation, and heat treatment in hydrogen.

The variations of the thickness of the instrument layer is mainly determined by the instability and nonuniformity of the energy of the implanted ions of hydrogen and changes of their angle of incidence on the surface of the instrument plate under the influence of a beam. The modern implanters allow us to make structures with the variations of the thickness of the instrument layer at the level of 2.5 %. Parameters of the insulating dielectric layer: thickness ~0.1, 0.5 µm; variations of the thickness ± 10 %; electric strength > of 5 MV/cm; density of the charge distribution in the dielectric (determined by several "defects" of the dielectric structure - silicon dioxide) [39, 40]; total density of the defects distribution is about $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; these centers grasp the holes injected into the dielectric and form a volume positive charge. The hydrogen is removed from the silicon dioxide by processing of the structures in dry oxygen, in vacuum or passing through an electric current structure, and the alkaline metals – by hightemperature (1000... 1200 °C) heat treatment of the structures in chlorine, hydrogen chloride, a mix of trichloroethylene and oxygen. The polluting metals in the structure form defects on the boundaries of the silicon dioxide with dielectric, creating charging states in these places. In particular, such a situation is observed, if the compound structure of SOI is received by splicing of the unoxidized silicon plate with the oxidized one. In this case the charging states are formed on the boundary of the silicon with the silicon dioxide.

In the SOI structures due to a small thickness of the working layer of the silicon and its cutting off by the dielectric from the radiation defects generated in the substrate, from the point of view of variation of the SOI properties during an irradiation, the most important are the charge introduction into the hidden dielectric and the states on the boundary with the oxide [41, 42]. The charge in the hidden dielectric and the states on the boundary of the cut-off layer of silicon/dielectric are the SOI parameters directly influencing the work of the devices, created in the cut-off layer of the silicon, because they lead to development of an additional channel of conductivity near the boundary with the semiconductor and to displacement of the threshold voltage of the transistor.

Since it is possible to make the thickness of the instrument layer as small as necessary (for example, 50 nm), accordingly, it is possible to reduce also the sizes of the semi-conductor IC; a reduction of the volume of the elements of these devices leads to a corresponding increase of the radiation resistance of IC. For example, it is possible to raise more than 10 times the radiation resistance to the pulse influence of IC on the basis of the compound structures of SOI in comparison with IC on the basis of the volume silicon [36].

For a decrease of the influence of the dislocations and the microdefects on the characteristics of the instrument layer of the silicon, the methods for manufacturing of the SOI structures were developed employing the gettering processing of the surface of the donor plate before a thermal-compression bonding with the carrier plate [43–45].

The Institute of Physics of Semiconductors of SB of RAS developed a method for manufacturing of the SOI structures by Dele Cut technology, in which for improvement of the properties of Si/SiO₂ boundary in the structures and also for a decrease of the radiation-thermal influence, the hydrogen was implanted into the donor plate with the dose interval of $2.5 \cdot 10^{16}...5 \cdot 10^{16}$ cm⁻² through an oxide layer with thickness of 20...50 nm, which was removed after the irradiation. The thermal processing for merging of the plates and delamination of the composition was done at the temperatures of 150...250 °C during 1...2 h and at 350...450 °C during 0.5...2 h. For annealing of a major part of the defects introduced by implantation, then a high-temperature heat treatment was done at 1100 °C during 0.5...1 h [46].

In [47] a method is presented for manufacturing of the SOI structures by Smart Cut technology for the radio-frequency applications in the integrated circuits with the working frequency of about several gigahertz, including a deposition of a polysilicon dividing layer between the basic plate and the hidden dielectric. The deposition of a polysilicon layer is carried out by a chemical sedimentation from the vapor phase at the atmospheric pressure and the temperature of sedimentation within the range of 800...1050 °C, preferably, 850 °C. The polycrystalline silicon of the dividing layer should have a completely random orientation of its grains at least in a certain part of the thickness of the dividing layer. After the assemblage of the donor and basic wafers a strengthening annealing is done through the intermediate link from the dielectric layer and the dividing layer at the temperature strictly over 950 °C but below 1200 °C, lasting not less than 10 min. The basic plate has a certain value of the specific resistance, more than or equal to 3000 $\Omega \cdot cm$. For BiCMOS SOI VLSI a hidden low-ohm layer is necessary in the area of the collector of the bipolar transistor. Therefore, the junction of the semi-conductor plates is carried out through the intermediate layers of the metal and the polycrystalline silicon, forming in the course of merging at a raised temperature a metal silicide, and this includes in the technological process formation of a dielectric layer, deposition of the layer of the polycrystalline silicon and a metal layer on the first silicon wafer, and its junction with the second silicon wafer [48].

Since one of the principal causes of the degradation of the SOI structures and devices on their basis under the radiation influence is accumulation of the positive charge in the buried dielectric, and also on the boundaries of Si/SiO₂, in order to ensure conditions for a steady functioning of the elements of the integrated circuits at the dose influences in the buried dielectric, the centers for trapping of electrons are created. One of the ways to form such centers is implantation of the ions of the impurities, when during their embedding in the SiO₂ matrix their formation is energetically favorable. Implantation of the fluorine ions with concentration of $10^{19}...10^{22}$ cm⁻³ is used for prevention of the leakage currents and DIBL (drain-induced barrier lowering) effect. However, at that, the upper

active layer of the silicon is damaged and not restored after the thermal annealings [49].

In [50, 51] it is demonstrated, that during implantation of the fluorine ions by the doses over 10^{14} cm⁻² the atom of fluorine forms one bond with the atom of the silicon, a consequence of which is occurrence of the defects of a non-bridge type of the oxygen atom, the centers for trapping of the negative charge. Besides, the fluorine atoms passivate the Si-H bonds and encourage formation of the mono- and divacancies of oxygen. The results of measurements of the capacity-voltage characteristic of the MOS structures demonstrated that fluorination of the dielectric by a dose of 1×10^{15} cm⁻² is optimal for a decrease of the sensitivity to the influence of the stationary ionizing radiation. The characteristics of the structures implanted by the dose of $3 \cdot 10^{15}$ cm⁻², are less stable under the ionizing influences, while the structures with a dielectric, fluorinated by a dose less than $1 \cdot 10^{15}$ cm⁻², have a higher speed of a charge accumulation. However, the authors [52] believe that for formation of the compensating centers (which, at that, do not damage the instrument silicon, through which the implantation is done) the fluorine doses of 10^{12} ... 10^{14} ion/cm² are sufficient.

In [49, 52, 53] the efficiency is demonstrated of implantation of the ions of metals (iron, chrome, aluminum) into the buried dielectric in order to support the electroneutrality at the stationary dose influences. However, presence of the metal impurities in the dielectrics can lead to a deterioration of their insulating properties, especially under the influences of high energy and power. The nanoclusters formed during the implantation of the atoms of germanium or silicon into the silicon dioxide and the subsequent annealing at 850 °C during 40 min [54] trap the negative charge effectively.

An increase of the hardness of the SOI structure can be ensured by its processing by γ — quanta within the range of the doses of $10^3...10^6$ rad in the range of temperatures of 350...450 °C [55].

Conclusion

An analysis was done of application of various modifications of the starting structures for development of CMOS devices for the micro- and nanoelectronics. It was established, that the most promising direction for development of the SOI structures was Smart Cut technology, which ensured the required low level of the defects of the silicon films and more ample opportunities for control of the parameters of the buried layer of the silicon dioxide. The set of the technological operations, employing the method of the solid-phase merging of plates, is universal for manufacturing of the multilayered compositions containing not only silicon, but also other semiconductor materials.

An important question demanding a detailed research is development of the methods for estimation of the level of the stability of the structures under action of the destabilizing factors.

References

1. **Steshenko V., Garshin V.** Perspektivy razvitiya `elektronnyh komponentov dlya bortovoj apparatury kosmicheskih sistem, *Elektronnye komponenty*, 2012, no. 3, pp. 6–12 (in Russian).

2. Volkov S. I., Glushko A. A., Morozov S. A. Issledovanie i modelirovanie faktorov, ogranichivayuschih radiacionnuyu stojkost'

KNI SBIS, *Trudy NIISI RAN*, 2011, vol. 1, no. 1, pp. 51–56 (in Russian).

3. Nosov Yu. R., Smetanov A. Yu. KNS-tehnologiya vazhnejshij resurs ekstremal'noj elektroniki, *Vysshee obrazovanie segodnya*, 2014, no. 3, pp. 30–36 (in Russian).

4. **Mikro'elektronika** bortovyh vychislitel'nyh kompleksov. Strategiya uspeha. Ed. A. Yu. Smetanov, Moscow, Logos, 2006, 192 p. (in Russian).

5. **Pankov V. S., Cybul'nikov M. B.** `*Epitaksial'nye kremnievye sloi na di'elektricheskih podlozhkah i pribory na ih osnove.* Moscow, Energiya, 1979, 88 p. (in Russian).

6. Filby J. D., Nielsen S. Single-crystal films of silicon jn insulators. J. Appl. Phys., 1967, vol. 18, no. 10, pp. 1357–1382.

7. Latysheva N. D., Malkov A. Yu., Nikolaev D. A., Skupov V. D., Smolin V. K. Novye vozmozhnosti elli psometrii v tehnologii proizvodstva poluprovodnikovyh priborov, *Konversiya v mashinostroenii*, 2004, no. 4, pp. 51–56 (in Russian).

8. **Krivulin N. O.** *Ul'tratonkie sloi kremniya na sapfire*, Uchebno-metodicheskoe posobie. Nizhnij Novgorod, Nizhe-gorodskij gosuniversitet, 2011, 40 p. (in Russian).

9. US Patent 5.973.363. Oct. 26, 1999. CMOS circuit with shortened p-channel length on ultrathin silicon on insulator.

10. Aleksandrov P. A., Belova N. E., Demakov K. D., Shemardov S. G. Sozdanie centrov rekombinacii nositelej zaryadov v sapfirovoj podlozhke KNS-struktur, *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2015, vol. 49, no. 8, pp. 1124 (in Russian).

11. Aleksandrov P. A., Demakov K. D., Shemardov S. G., Kuznecov Yu. Yu. Sposob polucheniya sverhtonkih plenok kremniya na sapfire, Patent RF no. 2427941, opubl. 27.08.2011 (in Russian).

12. Aleksandrov P. A., Demakov K. D., Shemardov S. G., Kuznecov Yu. Yu. Sposob polucheniya geteroepitaksial'nyh struktur kremniya na sapfire, Patent RF no. 2 390 874, opubl. 27.05.2010 (in Russian).

13. Aleksandrov P. A., Demakov K. D., Shemardov S. G., Kuznecov Yu. Yu. Rekristallizaciya s granicy razdela kremnij-sapfir kak novyj metod polucheniya strukturno sovershennyh plenok kremniya na sapfirovoj podlozhke, *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2010, vol. 44, is. 10, pp. 1433–1435 (in Russian).

14. **Mustafaev A. G.** Nauchnye osnovy i prakticheskie aspekty razrabotki tehnologii sozdaniya tonkih poluprovodnikovyh sloev kremniya na izoliruyuschih podlozhkah primeneniem processov ionnoj obrabotki. Dissertaciya na soiskanie uchenoj stepeni doktora tehnicheskih nauk, Mahachkala, DagGTU, 2011, 284 p. (in Russian).

15. **Mustafaev A. G., Mustafaev G. A., Mustafaev A. G.** Sposob izgotovleniya poluprovodnikovogo pribora, Patent RF no. 2 388 108, opubl. 27.04.2010. (in Russian).

16. Zhanaev 'E. D., Dudchenko N. V., Antonov V. A., Popov A. I., Popov V. P. Sposob izgotovleniya struktury kremnij-na-sapfire, Patent RF \mathbb{N} 2 538 352, opubl. 10.01.2015. (in Russian).

17. **Bodnar' D.** Novyj format kompaktnyh kremnievyh fabrik – reshenie dlya mikro'elektroniki Rossii, *Elektronnye komponenty*, 2015, no. 3, pp. 12–16 (in Russian).

18. Bumagin A. V., Voronkov D. I., Dreval' T. N., Rutkevich A. V., Shishkin O. N. Vybor tehnologicheskogo processa dlya proizvodstva specializirovannyh radiacionno-stojkih SBIS tipa "sistema v korpuse". *Trud M'ES-2012*. Moscow, IPPM RAN, oktober 2012 (in Russian).

19. **Zebrev G. I.** *Radiacionnye effekty v kremnievyh integral'nyh shemah vysokoj stepeni integracii*, Moscow, NIYaU MIFI, 2010, 148 p. (in Russian).

20. **Suvorov A. L., Bogdanovich B. Yu., Zaluzhnyj A. G.** et al. *Tehnologii struktur KNI*, Moscow, MIET, 2004, 407 p. (in Russian).

21. **Naumchenko A. S.** *Struktury kremnij-na-izolyatore v mikro- i nanoelektronike*: uchebnoe posobie po discipline "Tehnologicheskie processy mikro- i nanoelektroniki". Taganrog, Yuzhnyj federal'nyj universitet, tehnologicheskij institut v g. Taganroge, 2010, 58 p. (in Russian).

22. **Mustafaev A. G.** Tehnologiya formirovaniya kremnievyh plastin so skrytym sloem, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2007, no. 10, pp. 11–14 (in Russian).

23. Celler G. K., Cristoloveanu S. Frontiers of silicon-on-insulator, *J. Appl. Phys.*, 2001, vol. 93, no. 9, pp. 4955–4978.

24. **Cristoloveanu S.** Silicon on insulator technology and devices: from present to future, *Solid state electronics*, 2001, vol. 45, pp. 1403–1411.

25. Bruel M., Aspar B., Maleville C., Moriceau H. Unibond SOI wafers achieved by smart-cut process, *J. Electrochem. Soc. proceedings*, 1997, vol. 23, pp. 2–10.

26. **Popov V. P., Antonova A. I., Francuzov A. A.** et al. Svojstva stpuktup i ppibopov na kpemnij-na-izolyatope, *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*, 2001, vol. 35, no. 9, pp. 1075–1083.

27. Izumi K., Dokin M., Ariyoshi H. CMOS devices fabricated on buried SiO_2 layers formedbyoxygen implantation into silicon, *Electron. Lett.*, 1978, 14 (18), p. 593.

28. Labunov V. A., Bondarenko V. P., Dolgij L. N., Belous A. I., Malyshev V. S., Komarov F. F., Mil'chanin O. V. Sostoyanie i perspektivy razvitiya KNI tehnologii v Respublike Belarus'. Sbornik dokladov mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii "Aktual'nye problemy fiziki tverdogo tela", vol. 1. Minsk, Izdatel'skij centr BGU, 2005, pp. 9–10 (in Russian).

29. Alieva N. V., Belous A. I., Bondarenko V. P., Dolgij L. N., Malyshev V. S., Soroka S. A., Syakerskij V. S., Usov G. I., Shvedov S. V. Sravnitel'nye issledovaniya KMOP BIS, izgotovlennyh v kni i kns strukturah, available at: http://www.physics.by/>e107 (in Russian).

30. **Polesskij S., Zhadnov V., Artyuhova M., Prohorov V.** Obespechenie radiacionnoj stojkosti apparatury kosmicheskih apparatov pri proektirovanii, *Komponenty i tehnologii*, 2010, no. 9, pp. 93–98 (in Russian).

31. **Seleckij A. V.** Issledovanie i razrabotka konstruktivno-tehnologicheskih metodov povysheniya radiacionnoj stojkosti gluboko-submikronnyh SBIS s pomosch'yu sredstv priborno-tehnologicheskogo modelirovaniya. Avtoreferat dissertacii na soiskanie uchenoj stepeni kandidata tehnicheskih nauk, Moscow, MI`ET, 2012 g. 27 p.

32. **Petrosyan O. A.** Analiz metodov povysheniya radiacionnoj stojkosti KMOP integral'nyh shem i modelirovanie zapominayuschih elementov flesh-pamyati, *Izv. NAN RA i GIUA, Ser. TN*, 2011, vol. LXIV, no. 1, pp. 57–65 (in Russian).

33. **Mustafaev A. G.** Konstpuktivnye i tehnologicheskie sposoby uluchsheniya papametpov KNI-MOP-tpanzistopov, *Nano- i mikposistemnaya tekhnika*, 2007, no. 6, pp. 37–42 (in Russian).

34. **Gorbunov M. S.** Modelirovanie i proektirovanie `elementov KMOP integral'nyh mikroshem tehnologii "kremnij-na-izolyatore" s povyshennoj stojkost'yu k dozovym `effektam. Avtoreferat dissertacii na soiskanie uchenoj stepeni kandidata tehnicheskih nauk, Moscow, NIYaU "MIFI", 2010, 28 p. (in Russian).

35. **Tapero K. I., Ulimov V. N., Chlenov A. M.** *Radiacionnye effekty v kremnievyh integral'nyh shemah kosmicheskogo primene-niya*, Moscow, BINOM. Laboratoriya znanij, 2012, 304 p. (in Russian).

36. Belous A. I., Soloduha V. A., Shvedov S. V. Kosmicheskaya elektronika. V 2-h knigah. Kniga 2, Moscow, Tehnosfera, 2015, 488 p. (in Russian). 37. **Goryachev V. A.** Fizicheskie harakteristiki KNI-tranzistorov dlya nanoelektroniki, *Uspehi sovremennoj radioelektroniki*, 2008, no. 7, pp. 54–71 (in Russian).

38. **Prokop'ev E. P., Timoshenkov S. P.** Opredeleniya energii svyazi pryamogo soedineniya plastin kremniya metodom generacii (vskrytiya) treschiny mezhdu poverhnostyami sraschivaniya (obzor), Sb. *Oboronnyj kompleks-nauchno-tehnicheskomu progressu Rossii*, 1999, no. 3, pp. 45–49 (in Russian).

39. **Tong Q.-Y., Gösele U.** Semiconductor Wafer Bonding: Science, Technology, New York, Wiley, 1988. 326 p.

40. **Prokop'ev E. P., Timoshenkov S. P.** Vozmozhnost' pryamogo soedineniya plastin kremniya s ispol'zovaniem himicheskoj sborki poverhnosti metodom molekulyarnogo naslaivaniya, *Materialovedenie*, 1999, no. 4, pp. 49–51 (in Russian).

41. Cristoloveanu S., Li S. S. Electrical Characterization of Silicon-On-Insulator Materials and Devices, Kluwer Academic Publishers, 1995.

42. **Colinge J. P.** Silicon-On-Insulator Technology: Materials to VLSI. Kluwer Academic Publishers, 1997. 223 p.

43. **Skupov V. D., Smolin V. K.** Sposob izgotovleniya struktur "kremnij na izolyatore". Patent RF no. 2193256, opubl. 20.11.2002 (in Russian).

44. **Skupov V. D.** Sposob izgotovleniya struktur "kremnij na izolyatore". Patent RF no. 2137252, opubl. 10.09.1999 (in Russian).

45. Skupov V. D., Kormishina Zh. A., Smolin V. K., Scherbakova I. A. Sposob formirovaniya struktur "kremnij na izolyatore". Patent RF no. 2139595, opubl. 10.10.1999 (in Russian).

46. **Popov V. P., Antonova I. V., Stas' V. F., Mironova L. V.** Sposob izgotovleniya struktury kremnij-na-izolyatore. Patent RF no. 2164719, opubl. 27.03.2001 (in Russian).

47. Shibko A., Bertrand I., Peru S., Van S., Reno P. Sposob izgotovleniya struktury. Patent RF no. 2 607 336, opubl. 10.01.2017 (in Russian).

48. Gornev E. S., Lukasevich M. I., Sulimin A. D., Gromov D. G., Mochalov A. I., Trajnis T. P., Shishko V. A., Vorob'eva N. K. Sposob sozdaniya struktury — kremnij na izolyatore dlya sbis (varianty). Patent no. 2149481, opubl. 20.05.2000 (in Russian).

49. Hughes H., McMarr P. Radiation-hardening of SOI by ion implantation into the buried oxide layer. Patent SShA no. 5795813, opubl. 31.05.1996.

50. Gus'kova O. P., Vorotyncev V. M., Abrosimova N. D., Shobolov E. L., Mineev M. N. Vliyanie implantacii ionov ftora na radiacionno-inducirovannye processy v di`elektricheskih sloyah kompozicij kremnij/izolyator, *Neorganicheskie materialy*, 2012, vol. 48, no. 3, pp. 272–276 (in Russian).

51. Gus'kova O. P., Vorotyncev V. M., Faddeev M. A., Abrosimova N. D. Raschety elektronnoj struktury dioksida kremniya, modificirovannogo ftorom, *Vestnik NNGU*, 2013, is. 1, Ch. 1, pp. 43–47 (in Russian).

52. **Kuznecov E. V., Rybachek E. N., Saurov A. N.** Sposob uvelicheniya radiacionnoj stojkosti 'elementov KMOP-shem na KNI podlozhke. Patent RF no. 2320049, opubl. 20.03.2008 (in Russian).

53. Patent Yaponii no. 6014524, opubl. 23.02.94. nomer zayavki 59-39509.

54. Gus'kova O. P., Vorotyncev V. M., Shobolov E. L., Abrosimova N. D. Vliyanie germaniya, implantirovannogo v strukturu "dioksid kremniya na kremnii", na processy nakopleniya zaryada pri vozdejstvii nizkoenergeticheskogo stacionarnogo ioniziruyuschego izlucheniya, *Materialy elektronnoj tehniki*, 2012, no. 4, pp. 28–33 (in Russian).

55. Mustafaev A. G., Shavaev H. N., Mustafaev A. G., Mustafaev G. A. Sposob povysheniya radiacionnoj stojkosti poluprovodnikovyh priborov. Patent RF no. 2308785, opubl. 20.10.2007 (in Russian). **Г. В. Козлов,** ст. науч. сотр., **И. В. Долбин,** канд. хим. наук, доц., e-mail: i_dolbin@mail.ru, ФГБОУ ВО "Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова", г. Нальчик

ПРИМЕНЕНИЕ ПРАВИЛА СМЕСЕЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Поступила в редакцию 20.02.2018

Правило смесей позволяет дать достаточно точную количественную оценку модуля упругости трех основных классов полимерных нанокомпозитов при использовании реальных, а не номинальных характеристик этих наноматериалов. Показано, что реальный модуль упругости нанонаполнителя в матрице нанокомпозита определяется ее жесткостью. Структура нанонаполнителя в этом случае служит решающим фактором повышения модуля упругости нанокомпозита.

Ключевые слова: нанокомпозит, модуль упругости, правило смесей, нанонаполнитель, структура

Введение

Правило смесей было первым теоретическим подходом, примененным для описания модуля упругости полимерных композитов [1]. Поскольку это правило далеко не всегда корректно описывает модуль упругости композитов при изменении содержания наполнителя, то оно подвергалось многочисленным модификациям и послужило основой для большого числа микромеханических моделей. Тем не менее и эти модели имеют ограниченное применение, а в случае полимерных нанокомпозитов расчеты согласно указанным моделям часто дают противоречивые результаты [2, 3]. Это обстоятельство имеет достаточно очевидные физические основания. И правило смесей, и микромеханические модели оперируют исходными характеристиками компонентов полимерных композитов модулями упругости нанонаполнителя и матричного полимера, степенью анизотропии частиц наполнителя и т. п. [1]. Однако указанные параметры являются виртуальными характеристиками, не имеющими ничего общего с аналогичными показателями реальных композитов и тем более нанокомпозитов. В реальных нанокомпозитах существуют два сильнодействующих эффекта, приводящих к расхождению номинальных и реальных характеристик, а именно агрегация исходных частиц нанонаполнителя в полимерной матрице и образование межфазных областей. Так, авторы работы [4] предложили методику расчета модулей упругости нанонаполнителя $E_{\rm hah}$ и межфазных областей Е_{мф} в полимерной матрице нанокомпозитов поливиниловый спирт/углеродные нанотрубки и обнаружили, что $E_{\rm HaH}=71\pm55$ ГПа при номинальном модуле отдельной углеродной нанотрубки $E_{\rm YHT} \approx 1000$ ГПа и $E_{\rm M\Phi} = 46 \pm 5,5$ ГПа при номинальном модуле упругости матричного поливинилового спирта $E_{\rm M} = 1,92 \pm 0,33$ ГПа. Поэтому следует ожидать, что использование реальных параметров компонентов полимерных нанокомпозитов позволит применять правило смесей в его первоначальном виде. Основной целью настоящей работы является проверка этого предположения для трех основных классов полимерных нанокомпозитов (дисперсно-наполненные нанокомпозиты, полимер/углеродные нанотрубки и полимер/2D-нанонаполнитель).

Эксперимент

Для дисперсно-наполненных нанокомпозитов в качестве матричного полимера использован полипропилен (ПП) промышленного производства марки Каплен 01030 со средневесовой молекулярной массой (2...3)10⁵ и индексом полидисперсности 4,5. В качестве нанонаполнителя применяли глобулярный наноуглерод (ГНУ) производства группы компаний "Объединенные системы" (г. Москва) с размером частиц 5...6 нм, удельной поверхностью 1400 м²/г и массовым содержанием 0,25...3,0 мас. %.

Нанокомпозиты ПП/ГНУ получены смешиванием компонентов в расплаве на двухшнековом экструдере Thermo Haake модели Reomex RTW 25/42 (ФРГ). Смешивание выполнено при температуре 463...503 К и скорости вращения шнека 50 об/мин в течение 5 мин. Образцы для испытаний получены методом литья под давлением на литьевой машине Test Sample Molding Apparate RR/TS MP фирмы Ray-Ran (Великобритания) при температуре 483 К и давлении 43 МПа.

Механические испытания на одноосное растяжение выполнены на образцах в форме двухсторонней лопатки с размерами согласно ГОСТ 112 62—80. Испытания проводили на универсальной испытательной машине Gotech Testing Machine CT-TCS 2000 (Тайвань) при температуре 293 К и скорости деформации ~ $2 \cdot 10^{-3}$ c⁻¹.

Для нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки в качестве матричного полимера использован термопластичный полиуретан (ПУ) на основе ароматического полиэфира марки Inorgan PS 455-203 (Morthane) производства фирмы Huntsman Polyurethanes (США). В качестве нанонаполнителя применяли углеродные нанотрубки (УНТ) марки PR-19HT производства фирмы Applied Science Inc. (США). Эти УНТ имели наружный диаметр 50...120 нм, толщину стенки 20 нм и исходное аспектное отношение 50...200.

Образцы нанокомпозитов ПУ/УНТ получены методом полива из растворов ПУ и УНТ в тетрахлорэтане. Они имели толщину примерно 0,3 мм, и содержание УНТ в них варьировалось в пределах 2...22 мас. % [5].

Испытания на растяжение выполнены на образцах прямоугольной формы с размерами 60 × 5 мм. Для испытаний на одноосное растяжение, проведенных при температуре 293 К и скорости ползуна 40 мм/мин, использован универсальный прибор для испытаний Instron (UTM, Model 4465) [5].

Для изготовления нанокомпозитов полимер/2Dнанонаполнитель использован оксид графена (OГ), полученный из порошка природного графита по методу Хаммерса [6]. Сначала порошок графита очищали диализом для удаления остаточных металлических примесей, затем фильтровали и сушили под вакуумом при температуре 333 К в течение суток. Полученный порошкообразный ОГ обрабатывали ультразвуком в деионизированной воде для получения гомогенной дисперсии [6].

В качестве матричного полимера был использован поливиниловый спирт (ПВС) с молекулярной массой повторяющегося звена 2400...2500 г/моль марки 122 со степенью гидролиза 98...99 % производства фирмы Beijing Chem. (Китай). Пленки нанокомпозитов ПВС/ОГ с содержанием ОГ 1...5 мас. % получены вакуумной фильтрацией дисперсий ПВС и ОГ в деионизированной воде через поликарбонатные мембраны с размером пор 0,2 мкм производства фирмы Nuclepore (Великобритания), пленки подвергали сушке при указанных выше условиях. Перед испытаниями пленки нанокомпозитов ПВС/ОГ дополнительно сушили при температуре 333 К в течение 1 ч [6].

Механические испытания выполнены на машине для растяжения модели WDW 3020 Autograph производства фирмы Changchun Xinke Co. (Китай). В качестве образцов использованы пленки толщиной 78...120 мкм, шириной 2...3 мм и длиной 20...25 мм. Испытания выполнены при температуре 293 К, скорости ползуна 1 мм/мин и предварительной нагрузке 0,5 H [6].

Результаты и обсуждение

Как отмечалось выше, в работе [4] было получено следующее соотношение, позволяющее сделать расчет величин $E_{\text{нан}}$ и $E_{\text{мф}}$:

$$\frac{dE_{\rm H}}{d\phi_{\rm H}} = (E_{\rm M}\phi - E_{\rm M})\frac{d\phi_{\rm M}\phi}{d\phi_{\rm H}} + (\eta_0 E_{\rm HaH} - E_{\rm M}), \quad (1)$$

где $E_{\rm H}$ — модуль упругости нанокомпозита; $\varphi_{\rm H}$ и $\varphi_{\rm M}\phi$ — объемное содержание нанонаполнителя и межфазных областей соответственно; η_0 — фактор эффективности ориентации анизотропного нанонаполнителя, который равен 0,38 для УНТ и ОГ и 1,0 для ГНУ как изотропного нанонаполнителя [4].

Оценка значения $\phi_{\rm H}$ выполнена согласно хорошо известной формуле [7]

$$\varphi_{\rm H} = \frac{W_{\rm H}}{\rho_{\rm H}},\tag{2}$$

где $W_{\rm H}$ — массовое содержание нанонаполнителя; $\rho_{\rm H}$ — его плотность, определяемая следующим образом [7]:

$$\rho_{\rm H} = 188(D_{\rm q})^{1/3}, \, \text{Kr/M}^3, \tag{3}$$

где $D_{\rm q}$ — размер частицы нанонаполнителя, задаваемый в нанометрах.

В качестве $D_{\rm q}$ для дисперсного нанонаполнителя ГНУ принят диаметр $D_{\rm arp}$ формируемых этим нанонаполнителем агрегатов наночастиц ГНУ. Значение $D_{\rm arp}$ определено согласно методике, подробно изложенной в работе [8], и варьировалось в пределах 22...125 нм. Для УНТ в качестве $D_{\rm q}$ использовано значение наружного диаметра углеродной нанотрубки $D_{\rm VHT}$, равное 85 нм [5]. И, наконец, для ОГ значение $\rho_{\rm H}$ равно 1600 кг/м³ [6]. Это значение $\rho_{\rm H}$ хорошо согласуется с оценкой согласно уравнению (3), если в указанном уравнении в качестве $D_{\rm q}$ принять среднее арифметическое значение трех основных размеров пластины оксида графена: длины (~1400 нм), ширины (~800 нм) и толщины (~1 нм) [6].

Объемная доля межфазных областей $\phi_{M\phi}$ определена с помощью следующего перколяционного соотношения [7]:

$$\frac{E_{\rm H}}{E_{\rm M}} = 1 + 11(\varphi_{\rm H} + \varphi_{\rm M}\phi)^{1,7},\tag{4}$$

где отношение $E_{\rm H}/E_{\rm M}$ принято называть степенью усиления нанокомпозита.

На рис. 1 приведено соотношение производных $dE_{\rm H}/d\varphi_{\rm H}$ и $d\varphi_{\rm M}\phi/d\varphi_{\rm H}$, соответствующее уравнению (1), для нанокомпозитов ПП/ГНУ. Это соотношение оказалось линейным, что позволяет определить значения $E_{\rm HaH} = 18$ ГПа и $E_{\rm M}\phi = 2,6$ ГПа для указанных нанокомпозитов. Такие значения $E_{\rm HaH}$ и $E_{\rm M}\phi$ предполагают, что и нанонаполнитель, и



Рис. 1. Соотношение производных $dE_{\rm h}/d\varphi_{\rm H}$ и $d\varphi_{\rm M\phi}/d\varphi_{\rm h}$, соответствующее уравнению (1), для нанокомпозитов ПП/ГНУ Fig. 1. Correlation of derivatives $dE_n/d\varphi_n$ and $d\varphi_{if}/d\varphi_n$, corresponding to equation (1) for nanocomposites PP/GNC



Рис. 2. Сравнение полученной экспериментально (1) и рассчитанной согласно правилу смесей (уравнение (5)) (2) зависимостей модуля упругости $E_{\rm H}$ от объемного содержания нанонаполнителя $\varphi_{\rm H}$ для нанокомпозитов ПП/ГНУ

Fig. 2. Comparison of received experimentally (1) and calculated according to the rule of mixtures (equation (5)) (2) dependences of the modulus of elasticity E_n on the volume content of nanofiller φ_n for nanocomposites PP/GNC

межфазные области являются армирующим (усиливающим) элементом структуры нанокомпозитов ПП/ГНУ, в случае которых $E_{\rm M} = 0,98$ ГПа, но такое определение в большей степени относится к нанонаполнителю в силу условия $E_{\rm HaH} > E_{\rm M}\phi$. Это обстоятельство позволяет использовать для определения модуля упругости $E_{\rm H}$ нанокомпозитов ПП/ГНУ правило смесей в его первоначальном и наиболее простом виде [1]:

$$E_{\rm H} = E_{\rm HaH} \phi_{\rm H} + E_{\rm M} (1 - \phi_{\rm H}).$$
 (5)

На рис. 2 приведено сравнение полученной экспериментально и рассчитанной согласно правилу смесей (уравнению (5)) зависимостей $E_{\rm H}(\phi_{\rm H})$ для нанокомпозитов ПП/ГНУ. Как следует из этого сравнения, правило смесей в предложенном виде, т. е. при использовании не номинального, а реального модуля упругости нанонаполнителя $E_{\rm HaH}$, дает хорошее соответствие с экспериментальными данными (среднее расхождение теории и эксперимента составляет ~7 %, что сопоставимо с погрешностью эксперимента при определении $E_{\rm H}$).

На рис. 3 приведено аналогичное соотношение производных $dE_{\rm H}/d\varphi_{\rm H}$ и $d\varphi_{\rm M\Phi}/d\varphi_{\rm H}$, соответствующее уравнению (1), для нанокомпозитов ПУ/УНТ. Указанное соотношение вновь линейно, что дает возможность оценить параметры $E_{\text{нан}} = 0,64$ ГПа и $E_{\rm M}\phi = 0,097$ ГПа. Если учесть, что для ПУ $E_{\rm M} = 0,013$ ГПа, то эти значения дают основания считать и углеродные нанотрубки (или, точнее, их агрегаты в виде кольцеобразных формирований [5]), и межфазные области усиливающим (армирующим) элементом структуры рассматриваемых нанокомпозитов ПУ/УНТ при более сильном влиянии нанонаполнителя. Это обстоятельство вновь позволяет использовать правило смесей или уравнение (5) для теоретического описания модуля упругости нанокомпозитов ПУ/УНТ. Сравнение полученной экспериментально и рассчитанной согласно правилу смесей зависимостей $E_{\rm H}(\varphi_{\rm H})$ для указанных нанокомпозитов показано на рис. 4. Как следует из этого сравнения, между теорией и экспериментом получено достаточно хорошее соответствие (их среднее расхождение составляет ~10 %). Таким образом, правило смесей в его про-



Рис. 3. Соотношение производных $dE_{\rm H}/d\varphi_{\rm H}$ и $d\varphi_{\rm M\varphi}/d\varphi_{\rm H}$, соответствующее уравнению (1), для нанокомпозитов ПП/УНТ Fig. 3. Correlation of derivatives $dE_n/d\varphi_n$ and $d\varphi_{if}/d\varphi_n$ corresponding to equation (1) for nanocomposites PP/CNT



Рис. 4. Сравнение полученной экспериментально (1) и рассчитанной согласно правилу смесей (уравнение (5)) (2) зависимостей модуля упругости $E_{\rm H}$ от объемного содержания нанонаполнителя $\phi_{\rm H}$ для нанокомпозитов ПП/УНТ

Fig. 4. Comparison of the received experimentally (1) and calculated according to the rule of mixtures (equation (5)) (2) dependences of the modulus of elasticity E_n on the volume content of nanofiller φ_n for nanocomposites PP/CNT

стейшем виде хорошо описывает зависимость модуля упругости от содержания нанонаполнителя для полимерных нанокомпозитов, наполненных углеродными нанотрубками.

На рис. 5 приведено соотношение производных $dE_{\rm H}/d\varphi_{\rm H}$ и $d\varphi_{\rm Mb}/d\varphi_{\rm H}$, соответствующее уравнению (1), для последнего из рассматриваемых классов нанокомпозитов — нанокомпозитов полимер/2Dнанонаполнитель на примере нанокомпозитов поливиниловый спирт/оксид графена (ПВС/ОГ) [6]. Как и для других классов этих наноматериалов (см. рис. 1 и 3), получено линейное соотношение этих производных, позволяющее провести расчет модулей упругости $E_{\text{нан}} = 140$ ГПа и $E_{\text{мф}} = 9,7$ ГПа. Отметим важный аспект этой проблемы: номинальные значения модуля упругости УНТ и ОГ примерно равны и приближаются к 1000 ГПа [4, 6], но реальные значения модуля упругости Е_{нан} агрегатов этих нанонаполнителей в полимерной матрице нанокомпозитов различаются более чем в 200 раз — 0,64 и 140 ГПа соответственно. Значение $E_{\rm M}$ для ПВС равно 2,1 ГПа [6], и, следовательно, как и для других описанных выше классов полимерных нанокомпозитов, межфазные области являются армирующим (усиливающим) элементом структуры нанокомпозитов полимер/2D-нанонаполнитель, но менее эффективным, чем собственно нанонаполнитель (оксид графена). Это позволяет вновь использовать правило смесей для описания модуля упругости Е_н этого класса нанокомпозитов. На рис. 6 приведено сравнение полученной экспериментально и рассчитанной согласно уравнению (5) зависимостей $E_{\rm H}(\phi_{\rm H})$ для нанокомпозитов ПВС/ОГ. Как можно видеть, вновь получено хорошее соответствие теории и эксперимента (их среднее расхождение составляет ~5 %). Таким образом, изменение модуля упругости как функции содержания нанонаполнителя для трех основных классов существующих в настоящее время нанокомпозитов хорошо описывается простым правилом смесей при использовании реальных значений входящих в него параметров, а не номинальных. Отметим, что в предложенной трактовке, в отличие от микромеханических моделей, не применяют номинальные значения модуля упругости и степени анизотропии (для УНТ и ОГ) нанонаполнителя.



Рис. 5. Соотношение производных $dE_{\rm H}/d\varphi_{\rm H}$ и $d\varphi_{\rm M}\phi/d\varphi_{\rm H}$, соответствующее уравнению (1), для нанокомпозитов IBC/OF

Fig. 5. Correlation of derivatives $dE_n/d\varphi_n$ and $d\varphi_{if}/d\varphi_n$, corresponding to equation (1) for nanocomposites PVA/GO



Рис. 6. Сравнение полученной экспериментально (1) и рассчитанной согласно правилу смесей (уравнение (5)) (2) зависимостей модуля упругости $E_{\rm H}$ от объемного содержания нанонаполнителя $\varphi_{\rm H}$ для нанокомпозитов ПВС/ОГ

Fig. 6. Comparison of the received experimentally (1) and calculated according to the rule of mixtures (equation (5)) (2) dependences of the modulus of elasticity E_n on the volume content of nanofiller φ_n for nanocomposites PVA/GO



Рис. 7. Зависимость модуля упругости нанонаполнителя в полимерной матрице $E_{\rm Hah}$ от модуля упругости матричного полимера $E_{\rm M}$ для рассматриваемых нанокомпозитов

Fig. 7. Dependence of the module of elasticity of the nanofiller in the polymeric matrix E_{nan} on the modulus of elasticity of the matrix polymer E_m for the considered nanocomposites

Как известно [5, 9], анизотропные нанонаполнители (углеродные нанотрубки и волокна, 2D-нанонаполнители) дают гораздо более эффективное усиление (более высокую степень усиления $E_{\rm H}/E_{\rm M}$) в случае эластомерных матриц по сравнению со стеклообразными. В общем случае этот эффект объясняется гораздо меньшим модулем упругости эластомеров по сравнению со стеклообразными полимерами [5, 9]. Авторы работы [5] использовали формулу Виттена, Рубинштейна и Колби, полученную для агрегатов дисперсных частиц [10]:

$$E_{\rm arp} = E_{\rm yHT} \left(\frac{r_{\rm yHT}}{R_{\rm yHT}} \right)^4, \qquad (6)$$

где $E_{\rm arp}$ и $E_{\rm YHT}$ — модули упругости агрегатов УНТ в полимерной матрице и отдельной нанотрубки соответственно; $r_{\rm YHT}$ — радиус УНТ; $R_{\rm YHT}$ — радиус агрегата УНТ.

Авторы работы [5] для объяснения упомянутого выше эффекта предположили, что увеличение $R_{\rm YHT}$ в процессе агрегации УНТ приводит к существенному снижению $E_{\rm arp}$ согласно формуле (6) и соответствующему снижению армирующей способности агрегатов УНТ. В основу этого допущения положено два ложных посыла. Во-первых, усиление агрегации УНТ сопровождается не увеличением $R_{\rm YHT}$, а его уменьшением [11]. Во-вторых, агрегаты УНТ находятся в окружении полимерной матрицы и связаны с ней сильными адгезионными связями [12] и поэтому нельзя рассматривать деформацию этих компонентов нанокомпозита и, следовательно, их модуль упругости в отдельности.

Чем жестче окружающая агрегат УНТ полимерная матрица, тем меньше деформация совокупности матрица-агрегат УНТ и тем выше модель упругости последнего. На рис. 7 приведена зависимость модуля упругости нанонаполнителя Е_{нан}, определенного по данным рис. 1, 3 и 5 и уравнению (1), от квадрата модуля упругости матричного полимера $E_{\rm M}$ (такая форма зависимости $E_{\rm HaH}$ от $E_{\rm M}$ выбрана в целях ее линеаризации для представителей трех основных классов полимерных нанокомпозитов, рассмотренных в настоящей работе, и нанокомпозита поливиниловый спирт/углеродные нанотрубки по данным работы [4]). Как можно видеть, эта зависимость линейна и описывается простым эмпирическим уравнением (для стеклообразных матричных полимеров):

$$E_{\rm HaH} = 22 E_{\rm M}^2. \tag{7}$$

Для нанокомпозитов с эластомерной матрицей зависимость $E_{\text{нан}}(E_{\text{м}})$ оказалась слабее:

$$E_{\rm HaH} = 49,2E_{\rm M}.$$
 (8)

Таким образом, из уравнений (5), (7) и (8) следует, что модуль упругости нанокомпозитов всех рассматриваемых классов определяется только двумя параметрами: модулем упругости матричного полимера и содержанием нанонаполнителя. Тем не менее, как следует из уравнений (7) и (8), однозначной функциональной связи между параметрами $E_{\rm нан}$ и $E_{\rm M}$ не существует, что усложняет задачу описания величины $E_{\rm H}$ с использованием параметров $E_{\rm M}$ и $\phi_{\rm H}$.

Заключение

Результаты настоящей работы показали, что модуль упругости полимерных нанокомпозитов трех основных классов (дисперсно-наполненных нанокомпозитов, полимер/углеродных нанотрубок и полимер/2D-нанонаполнителя) может быть корректно описан в рамках правила смесей в его изначальном и наиболее простом виде. Такой результат достигается в том случае, если в этой трактовке используются не номинальные, а реальные характеристики структурных компонентов нанокомпозитов. Модуль упругости нанонаполнителя в полимерной матрице нанокомпозита является сильной (квадратичной) функцией модуля упругости матричного полимера для стеклообразных матриц и более слабой (линейной) — для эластомерных. Предложенная трактовка не принимает во внимание ни модуль упругости исходных частиц нанонаполнителя, ни их степень анизотропии. Правило смесей (уравнение (5)) дает верхний предел модуля упругости нанокомпозитов, определяемый последовательным переносом приложенного к образцу

механического напряжения от полимерной матрицы к нанонаполнителю. Достижение этого предела в случае рассматриваемых нанокомпозитов означает, что дальнейшее увеличение модуля упругости нанокомпозитов может быть реализовано за счет улучшения структуры нанонаполнителя в полимерной матрице и соответствующего увеличения его модуля упругости.

Список литературы

1. Ahmed S., Jones F. R. A review of particulate reinforcement theories for polymer composites // J. Mater. Sci. 1990. Vol. 25, N. 12. P. 4933–4942.

2. Moniruzzaman M., Winey K. I. Polymer nanocomposites containing carbon nanotubes // Macromolecules. 2006. Vol. 39, N. 16. P. 5194–5205.

3. Комаров Б. А., Джавадян Э. А., Иржак В. И., Рябенко А. Г., Лесничая В. А., Зверева Г. И., Крестинин А. В. Эпоксиаминные композиты со сверхмалыми концентрациями однослойных углеродных нанотрубок // Высокомолек. соед. А. 2011. Т. 53, № 6. С. 897—905.

4. Coleman N. J., Cadek M., Ryan K. P., Fonseca A., Nady J. B., Blau W. J., Ferreira M. S. Reinforcement of polymer with carbon nanotubes. The role of an ordered polymer interfacial region. Experiment and modeling // Polymer. 2006. Vol. 47, N. 23. P. 8556-8561.

5. Schaefer D. W., Zhao J., Dowty H., Alexander M., Orler E. B. Carbon nanofibre reinforcement of soft materials // Soft Mater. 2008. Vol. 4, N. 10. P. 2071–2079.

6. Xu Y., Hong W., Bai H., Li Ch., Shi G. Strong and ductile poly(vinyl alcohol)/graphene oxide composites films with a layered structure // Carbon. 2009. Vol. 45, N. 15. P. 3538–3543.

7. Микитаев А. К., Козлов Г. В., Заиков Г. Е. Полимерные нанокомпозиты: многообразие структурных форм и приложений. М.: Наука, 2009. 278 с.

8. **Козлов Г. В.** Структура и свойства дисперсно-наполненных полимерных нанокомпозитов // Успехи физических наук. 2015. Т. 185, № 1. С. 35–64.

9. Kim H., Abdala A. A., Macosko C. W. Graphene/polymer nanocomposites // Macromolecules. 2010. Vol. 43, N. 16. P. 6515-6530.

10. Witten T. A., Rubinstein M., Colby R. H. Reinforcement of rubbers by fractal aggregates // J. Phys. II France. 1993. Vol. 3, N. 3. P. 367–383.

11. Yanovsky Yu. G., Kozlov G. V., Zhirikova Z. M., Aloev V. Z., Karnet Yu. N. Special features of the structure of carbon nanotubes in polymer composite media // Nanomechanics Sci. Techn.: Inter. J. 2012. Vol. 3, N. 2. P. 99–124.

12. Aygubova A. Ch., Kozlov G. V., Magomedov G. M., Zaikov G. E. The elastic modulus of carbon nanotube aggregates in polymer nanocomposites // J. Characterization and Development of Novel Mater. 2016. Vol. 8, N. 3. P. 227–233.

G. V. Kozlov, Senior Researcher UNIID, i_dolbin@mail.ru,

I. V. Dolbin, Ph. D., Senior Research Associate in the Laboratory of Advanced Polymer,

Kh. M. Berbekov Kabardino-Balkarian State University, Nalchik, 360000, Russian Federation

Corresponding author:

Dolbin Igor V., Ph. D., Senior Research Associate in the Laboratory of Advanced Polymer, Kh. M. Berbekov Kabardino-Balkarian State University, Nalchik, 360000, Russian Federation, e-mail: i_dolbin@mail.ru

Application of the Mixtures Rule for Description of the Elastic Modulus of the Polymer Nanocomposites

Received on February 20, 2018 Accepted on March 13, 2018

The article presents a possibility of application of the mixtures rule for description of the elastic modulus for three main classes of the polymer nanocomposites (filled with disperse particles, carbon nanotubes and graphene oxide -0D, 1D and 2D, correspondingly). The authors demonstrated that this rule was correct only in the case, when real, but nominal, characteristics of the nanocomposite components were used in it. As a result of estimation of the real elastic modulus of the nanofiller in the polymer matrix of the nanocomposites it turned out that it was much lower than its nominal value. This effect was especially pronounced for the elastomeric matrix, where the real value of the elastic modulus could be smaller by three orders, than its nominal value. Thus, the real elastic modulus of the nanofiller in the polymer matrix was defined, as a minimum, by two parameters: aggregation level of the nanofiller and stiffness of the polymer matrix. An estimation of the real value of the elastic modulus revealed, that it was proportional to the second power of the elastic modulus of the matrix polymer for the glassy matrix and to the first one — for the elastomeric matrix. As is known, the mixtures rule gives an upper limit of the elastic modulus for a nanocomposite. Therefore, when this limit is achieved, the further improvement of the indicated parameter can be realized only at the expense of the nanofiller structure in the polymer matrix of a nanocomposite and corresponding increase of its elastic modulus. It is significant that the model proposed in present work does not take into consideration the elastic modulus and anisotropy degree of the particles of the initial nanofiller. A simulmaneous determination of the elastic modulus of the interfacial areas demonstrated, that this parameter was larger essentially then the corresponding characteristic of the matrix polymer and in virtue of this circumstance the indicated areas were the same reinforcing element of the nanocomposite structure, as, actually, the nanofiller. Consequently, the efficiency of any class of the nanofiller is defined not by its initial characteristics (elastic modulus and anisotropy degree), but its ability to generate high-modulus interfacial areas.

It was demonstrated that for such specific class of nanoparticles as the carbon nanotubes their aggregation was realized through formation of the ring-like structures, which were analogues of the macromolecular coils of the branded polymer chains, and the aggregation level grew in the area of those structures' radius. Thus, the general conclusion offered in this work concerns applicability of the mixtures rule for a quantitative definition of the elastic modulus of the polymer nanocomposites, which are two-component random blends.

Keywords: nanocomposite, elastic modulus, mixtures rule, nanofiller, structure

For citation:

Kozlov G. V., Dolbin I. V. Application of the Mixtures Rule for Description of the Elastic Modulus of the Polymer Nanocomposites, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 466–474.

DOI: 10.17587/nmst.20.466-474

Introduction

The rule of mixtures was the first theoretical approach applied for description of the modulus of elasticity of the polymer composites [1]. Since this rule far from always describes correctly the modulus of elasticity of the composites during a change of the content of the filler, it was modified many times and made a basis for a big number of micromechanical models. Nevertheless, these models have limited application, and in case of the polymer composites the calculations made in accordance with the above models often give contradicting results [2, 3]. Obviously enough, this circumstance has physical grounds. Both the rule of mixtures and the micromechanical models operate with the initial characteristics of the components of the polymer composites - elasticity modules of the nanofiller and the matrix polymer, the degree of anisotropy of the particles of the filler, etc. [1]. However, the specified parameters are virtual characteristics, which do not have anything in common with similar indicators of the real composites and the more so, of the nanocomposites. In real nanocomposites there are two strong effects, leading to a divergence of the nominal and real characteristics, namely, aggregation of the initial particles of the nanofiller in a polymer matrix and formation of interphase areas. Thus, in [4] a method was proposed for calculation of the elasticity modules of the nanofiller E_{nan} and interphase areas E_{if} in the polymer matrix of the nanofillers: polyvinyl alcohol/carbon nanotubes, and it was discovered that $E_{nan} = 71 \pm 55$ GPa at the nominal modulus of a separate carbon nanotube $E_{CNT} \approx 1000$ GPa and $E_{if} = 46 \pm 5.5$ GPa at the nominal modulus of elasticity of the matrix polyvinyl alcohol $E_m = 1.92 \pm 0.33$ GPa. Therefore, we should expect that the use of the real parameters of the components of the polymer nanocomposites will allow us to apply the rule of mixtures in its original form. The main aim of the present work is verification of this assumption for three basic classes of the polymer nanocomposites (particulate-filled nanocomposites, polymer/carbon nanotubes and polymer/2D nanofiller).

Experiment

For the dispersion-filled nanocomposites as a matrix polymer Caplen 01030 polypropylene (PP) was used, with the average weight molecular mass of $(2...3)10^5$ and polydispersion index of 4.5. As a nanofiller the globular nanocarbon (GNC) was applied manufactured by Incorporated Systems (Moscow) with the size of particles of 5...6 nm, specific surface of 1400 m²/g and mass content of 0.25...30 % mas.

PP/GNC nanocomposites were received by mixing of components in a melt in a twin-screw extruder from Thermo Haake, ReomexRTW 25/42 (Germany). Mixing was done at 463...503 K and the speed of rotation of the screw of 50 rpm during 5 min. The test samples were received by the method of moulding under pressure on Molding Apparate RR/TS MP from Ray-Ran Co. (Great Britain) at 483 K and pressure of 43 MPa.

The mechanical tests for monoaxial stretching were done on the samples in the form of a double-sided shovel in accordance with GOST 112 62–80. The tests were done on the universal Gotech Testing Machine CT-TCS 2000 (Taiwan) at 293 K and the speed of deformation $\sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

For the nanocomposites polymer/carbon nanotubes as the matrix polymer the thermoplastic polyurethane (PU) on the basis of an aromatic polyether, Inorgan PS 455-203 (Morthane), from Huntsman Polyurethanes Co. (USA) was used. As the nanofiller the carbon nanotubes (CNT) of PR-19HT from Applied Science Inc. (USA) were applied. Those CNT had the external diameter of 50...120 nm, wall thickness of 20 nm and the initial aspect relation of 50...200.

The samples of PU/CNT nanocomposites were received by the sprinkling method from solutions of PU and CNT in tetrachloroethane. They had thickness about 0.3 mm and the content of CNT varied within 2...22 % of mas. [5].

Tests for stretching were done on the samples of a rectangular form with dimensions of 60×5 mm. The tests for uniaxial stretching, at 293 K and the speed of the slider of 40 mm/min, were done on Instron (UTM, Model 4465) universal testing device [5].

For manufacturing of the nanocomposites polimer/2D nanofiller, the graphene oxide (GO) received from a natural graphite powder by Hammers method [6] was used. At first, the graphite powder was cleaned of the residual metal impurities by dialysis, then it was filtered and dried in vacuum at 333 K within 24 hours. The received powder-like GO was processed by ultrasound in the deionized water for obtaining of a homogeneous dispersion [6].

As the matrix polymer, the polyvinyl alcohol (PVA) was used with molecular weight of the repeating link of 2400...2500 g/mol, 122 with hydrolysis degree of 98...99 % from Beijing Chemis Co. (China). PVA/GO films of nanocomposites with content of GO of 1...5 % of mas. were received by a vacuum filtration of PVA and GO dispersions in the deinonized water through the polycarbone membranes with the size of pores of 0.2 μ m from Nuclepore Co. (Great Britain), and then the films were subjected to drying under the conditions specified above. Before testing the nanocomposite films of PVA/GO were additionly dried at 333 K during an hour [6].

The mechanical tests were done on WDW 3020 Autograph stretching machine from Changchun Xinke Co. China). As the samples, the films with thickness of 78...120 μ m, width of 2...3 mm and length of 20...25 mm were used. The tests were done at 293 K, the speed of the slider of 1 mm/min. and preliminary load of 0.5 N [6].

Results and discussion

As it was mentioned above, in [4] the correlation was received, allowing us to calculate E_{nan} and E_{if} :

$$\frac{dE_n}{d\varphi_n} = (E_{if} - E_m)\frac{d\varphi_{if}}{d\varphi_n} + (\eta_0 E_{nan} - E_m), \qquad (1)$$

where E_n – elasticity module of the nanocomposite, φ_n and φ_{if} – volume content of the nanofiller and the interphase areas, accordingly, η_0 – factor of efficiency of orientation of

the anisotropic nanofiller, which is equal to 0.38 for CNT and GO and 1.0 for the GNC as the isotropic nanofiller [4].

The value of φ_n was estimated according to the following formula [7]:

$$\varphi_n = \frac{W_n}{\rho_n},\tag{2}$$

where W_n – mass content of the nanofiller, ρ_n – its density defined in the following way [7]:

$$\rho_n = 188(D_p)^{1/3}, \, \text{kg/m}^3,$$
 (3)

where D_p — size of a particle of the nanofiller set in nanometers.

As D_p for the disperse nanofiller of GNC, the diameter of D_{agr} was accepted of the aggregates of GNC nanoparticles formed by this nanofiller. D_{agr} was defined according to the technique presented in [8] and varied within the limits of 22–125 nm. For CNT as D_p the value of the external diameter of the carbon nanotube D_{CNT} was used, equal to 85 nm [5]. And, at last, for GO the value of ρ_n is equal to 1600 kg/m³ [6]. This value of ρ_n agrees well with the estimation done according to the equation (3), if in the specified equation as D_p we accept the arithmetical mean value of three basic sizes of the graphene oxide plate — its length (~1400 nm), width (~800 nm) and thickness (~1 nm) [6].

The value of the volume fraction of the interphase areas φ_{if} was defined by means of percolation correlation [7]:

$$\frac{E_n}{E_m} = 1 + 11(\varphi_n + \varphi_{ij})^{1,7}, \tag{4}$$

where the relation of E_n/E_m is usually called the degree of strengthening of the nanocomposite.

Fig. 1 presents correlation of the derivatives $dE_n/d\varphi_n$ and $d\varphi_{if}/d\varphi_n$ corresponding to the equation (1) for the nanocomposites of PP/GNC. This correlation turned out to be a linear one, which maked it possible to find the values of $E_{nan} = 18$ GPa and $E_{if} = 2.6$ GPa for the specified nanocomposites. Such values of E_{nan} and E_{if} assume, that both the nanofiller and the interphase areas are a reinforcing (strengthening) element of the structure of PP/GNC nanocomposites, in case of which $E_m = 0.98$ GPa, but such a definition, to a greater degree, refers to the nanofiller because of condition $E_{nan} > E_{if}$. This circumstance allows us to use for definition of the module of elasticity E_n of the nanocomposites of PP/GNC the rule of mixtures in its initial and simplest form [1]:

$$E_n = E_{nan}\varphi_n + E_m(1 - \varphi_n).$$
(5)

Fig. 2 presents a comparison of the experimentally obtained and of the calculated in accordance with mixture rule (equation (5)) dependences of $E_n(\varphi_n)$ for PP/GNC nanocomposites. As it follows from the comparison, the mixture rule in the proposed form, that is, in case of the use of not the nominal, but the real modulus of elasticity of the nanofiller E_{nan} , ensures a good correlation with the experimental data (average divergence between the theory and the experiment is ~7 %, which is comparable with the experimental error during definition of E_n).

Fig. 3 presents a similar correlation of derivatives $dE_n/d\varphi_n$ and $d\varphi_{if}/d\varphi_n$ corresponding to the equation (1) for PU/CNT nanocomposites. The specified correlation is a linear one,

which gives us an opportunity to estimate parameters of $E_{nan} = 0.64$ GPa and $E_{if} = 0.097$ GPa. If we take into account that for PU $E_m = 0.013$ GPa, the values give us grounds to consider also the carbon nanotubes or, more precisely, their aggregates in the form of ring-like formations [5], and the interphase areas as a strengthening (reinforcing) element of the structure of the considered nanocomposites of PU/CNT at a stronger influence of the nanofiller. This circumstance again allows us to use the rule of mixtures or the equation (5)for a theoretical description of the modulus of elasticity of the nanocomposites of PU/CNT. Comparison of the received experimentally and of the calculated, according to the rule of mixtures, dependences of $E_n(\varphi_n)$ for the specified nanocomposites is presented in fig. 4. As it follows from the comparison, the conformity received between the theory and the experiment is good enough (their average divergence is ~ 10 %). Thus, the rule of mixtures in its simplest form describes well the dependence of the module of elasticity on the content of the nanofiller for the polymer nanocomposites filled with the carbon nanotubes.

Fig. 5 presents correlation of derivatives $dE_n/d\varphi_n$ and $d\varphi_{if}/d\varphi_n$ corresponding to the equation (1) for the last of the considered classes of the nanocomposites - nanocomposites polimere/2D nanofiller on the example of the nanocomposites polyvinyl alcohol/graphene oxide (PVA/GO) [6]. Just like for the other classes of the nanomaterials (see fig. 1 and 3), a linear correlation of these derivatives was received, allowing us to calculate the moduli of elasticity $E_{nan} = 140$ GPa and $E_{if} = 9.7$ GPa. We should point out an important aspect of the problem: the nominal values of the modulus of elasticity CNT and GO are approximately equal and come close to 1000 GPa [4, 6], but the real values of the modulus of elasticity E_{nan} of aggregates of these nanofillers in the polymer matrix of the nanocomposites differ more than in 200 times - 0.64 and 140 GPA, accordingly. Value E_m for PVA is equal to 2.1 GPa [6] and, hence, just like for the other classes of the polymer nanocomposites described above, the interphase areas are the reinforcing (strengthening) element of the structure of the nanocomposites polimere/2D nanofiller, but less effective, than actually the nanofiller (graphen oxide). This allows us to use again the rule of mixtures for description of the modulus of elasticity E_n of this class of the nanocomposites. Fig. 6 presents a comparison of the experimentally received and of the calculated according to equation (5) dependencies $E_n(\varphi_n)$ for nanocomposites PVA/GO. As one can see, a good conformity of the theory and experiment was achieved (their average divergence is ~ 5 %). Thus, a variation of the modulus of elasticity as the function of content of the nanofiller for three basic classes existing of the nanocomposites is well described now by a simple rule of mixtures in case of the use of its real parameters, instead of the nominal ones. We should point out, that the proposed interpretation, unlike the micromechanical models, does not apply the nominal values of the modulus of elasticity and the degree of anisotropy (for CNT and GO) of the nanofiller.

As is known [5, 9], the anisotropic nanofillers (carbon nanotubes and fibers, 2D nanofillers) ensure a much more effective reinforcement (higher degree of reinforcement of E_n/E_m) in case of the elastomeric matrixes in comparison with the glassy ones. Generally, the effect is explained by a much smaller modulus of elasticity of the elastomer in comparison with the glassy polymers [5, 9]. The authors [5] used the for-

mula of Witten, Rubinstein and Colby for the aggregates of the dispersed particles [10]:

$$E_{agr} = E_{CNT} \left(\frac{r_{CNT}}{R_{CNT}} \right)^4, \tag{6}$$

where E_{agr} and E_{CNT} — moduli of elasticity of CNT aggregates in a polymer matrix and separate nanotubes, accordingly, r_{CNT} — radius of CNT, R_{CNT} — radius of a CNT aggregate.

For explanation of the above mentioned effect the authors [5] assumed, that an increase of R_{CNT} in the course of aggregation of CNT leads to an essential decrease of E_{agr} according to formula (6) and to a corresponding decrease of the reinforcing ability of the CNT aggregates. This assumption is based on two false messages. First, reinforcement of aggregation of CNT is accompanied not by an increase of R_{CNT} , but by its reduction [11]. Secondly, CNT aggregates are surrounded by a polymer matrix and are connected with it by strong adhesive bonds [12], therefore, it is impossible to consider the deformation of these components of the nanocomposite and, hence, their moduli of elasticity, separately. The more rigid is the polymer matrix surrounding a CNT aggregate, the less is the deformation of the matrix-aggregate CNT set and the higher is the model of elasticity of the latter. Fig. 7 presents the dependence of the module of elasticity of the nanofiller E_{nan} , defined by the data of fig. 1, 3 and 5 and equation (1), on the square of the modulus of elasticity of the matrix polymer E_m (such a form of dependence of E_{nan} on E_m was chosen for the purpose of linearization for the representatives of three basic classes of the polymer nanocomposites, considered in the present work, and the nanocomposite polyvinyl alcohol/carbon nanotubes by data [4]). As it is possible to see, this dependence is linear and is described by a simple empirical equation (for the glassy matrix polymers):

$$E_{nan} = 22 E_m^2. \tag{7}$$

For the nanocomposites with the elastomeric matrix the dependence $E_{nan}(E_m)$ appeared to be less pronounced:

$$E_{nan} = 49.2E_m. \tag{8}$$

Thus, from the equations (5), (7) and (8) it follows, that the elasticity modulus of the nanocomposites of all the considered classes is defined only by two parameters: the modulus of elasticity of the matrix polymer and the content of the nanofiller. Nevertheless, as it follows from the equations (7) and (8), an unequivocal functional bond between E_{nan} and E_m does not exist, which complicates the problem of description of the value of E_n with the use of parameters of E_m and φ_n .

Conclusion

The results of the present work demonstrated, that the module of elasticity of the polymer nanocomposites of three basic classes (particulate-filled nanocomposites, polymer/carbon nanotubes and polymer/2D nanofiller) can be correctly described within the framework of the rule of mixtures in its initial and simplest form. Such a result is achieved, if in this interpretation not the nominal, but the real characteristics of the structural components of the nanocomposites are used. The elasticity modulus of the nanofiller in the polymer matrix of the nanocomposite is a strong (square-law) function of the modulus of elasticity of the matrix polymer for the glassy matrixes and weaker (linear) function - for the elastomeric ones. The proposed interpretation does not take into account neither the modulus of elasticity of the initial particles of the nanofiller, nor the degree of their anisotropy. The rule of mixtures (equation (5)) gives the top limit of the modulus of elasticity of the nanocomposites, determined by a series transfer of the mechanical pressure applied to the sample from the matrix to the nanofiller. In case of the considered nanocomposites, achievement of this limit means that the further increase of the module of elasticity of the nanocomposites can be realized due to improvement of the structure of the nanofiller in a polymer matrix and corresponding increase of its modulus of elasticity.

References

1. Ahmed S., Jones F. R. A review of particulate reinforcement theories for polymer composites, *J. Mater. Sci.*, 1990, vol. 25, no. 12, pp. 4933–4942.

2. Moniruzzaman M., Winey K. I. Polymer nanocomposites containing carbon nanotubes, *Macromolecules*, 2006, vol. 39, no. 16, pp. 5194–5205.

3. Komarov B. A., Dzhavadyan E. A., Irzhak V. I., Ryabenko A. G., Lesnichaya V. A., Zvereva G. I., Krestinin A. V. Epoksiaminnye kompozity so sverkhmalymi kontsentratsiyami odnosloinykh uglerodnykh nanotrubok, *Vysokomolekulyarnye soedineniya A*, 2011, vol. 53, no. 6, pp. 897–905 (in Russian).

4. Coleman N. J., Cadek M., Ryan K. P., Fonseca A., Nady J. B., Blau W. J., Ferreira M. S. Reinforcement of polymer with carbon nanotubes. The role of an ordered polymer interfacial region. Experiment and modeling, *Polymer*, 2006, vol. 47, no. 23, pp. 8556–8561.

5. Schaefer D. W., Zhao J., Dowty H., Alexander M., Orler E. B. Carbon nanofibre reinforcement of soft materials, *Soft Mater.*, 2008, vol. 4, no. 10, pp. 2071–2079.

6. Xu Y., Hong W., Bai H., Li Ch., Shi G. Strong and ductile poly(vinyl alcohol)/graphene oxide composites films with a layered structure, *Carbon*, 2009, vol. 45, no. 15, pp. 3538–3543.

7. Mikitaev A. K., Kozlov G. V., Zaikov G. E. Polimernye nanokomposity: mnogoobrazie strukturnykh form i prilozhenii, Moscow, Nauka, 2009, 278 p. (in Russian).

8. **Kozlov G. V.** Struktura i svoistva dispersno-napolnennykh polimernykh nanokompozitov, *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2015, vol. 185, no. 1, pp. 35–64 (in Russian).

9. Kim H., Abdala A. A., Macosko C. W. Graphene/polymer nanocomposites, *Macromolecules*, 2010, vol. 43, no. 16, pp. 6515–6530.

10. Witten T. A., Rubinstein M., Colby R. H. Reinforcement of rubbers by fractal aggregates, *J. Phys. II France*, 1993, vol. 3, no. 3, pp. 367–383.

11. Yanovsky Yu. G., Kozlov G. V., Zhirikova Z. M., Aloev V. Z., Karnet Yu. N. Special features of the structure of carbon nanotubes in polymer composite media, *Nanomechanics Sci. Techn.: Inter. J.*, 2012, vol. 3, no. 2, pp. 99–124.

12. Aygubova A. Ch., Kozlov G. V., Magomedov G. M., Zaikov G. E. The elastic modulus of carbon nanotube aggregates in polymer nanocomposites, *J. Characterization and Development of Novel Mater.*, 2016, vol. 8, no. 3, pp. 227–233.

УДК 622.73

И. В. Синёв, доц. кафедры, e-mail: SinevIV@info.sgu.ru, **Д. А. Тимошенко,** магистрант, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского",

Н. Д. Жуков, директор, ООО "Реф-Свет", г. Саратов,

В. П. Севостьянов, зам. директора по научной работе,

ООО "Научно-исследовательский институт технологий органической и неорганической химии и биотехнологии", г. Саратов

СВОЙСТВА МЕХАНИЧЕСКИ ДИСПЕРГИРОВАННЫХ ДО НАНОРАЗМЕРНОГО СОСТОЯНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ А3В5

Поступила в редакцию 23.03.2018

Разработан метод механического субмикрометрового диспергирования монокристаллов полупроводников A_3B_5 (GaAs, InAs, InSb) в планетарной шаровой мельнице. Размеры полученных частиц определяли методом динамического рассеяния света, и после седиментационного разделения они имели разброс от долей микрометра до десяти нанометров. Инжекция электронов в частицах в сравнении с инжекцией в зернах поверхности монокристалла указывает на близость структурного совершенства частиц и исходных монокристаллов.

Ключевые слова: полупроводники A_3B_5 , монокристалл, диспергирование, мультизеренная структура, инжекция электронов

Введение

Научный и практический интерес к полупроводниковым порошковым субмикрометровым структурам постоянно возрастает [1—3]. Особенно важными при этом являются исследования соединений A_3B_5 , имеющих самый широкий диапазон физических свойств и позволяющих создавать практически все известные типы полупроводниковых приборов. Наличие в узкозонных полупроводниках A_3B_5 таких свойств, как экстремально высокие значения подвижности и малые значения эффективной массы электронов, делают их перспективными для квантоворазмерных структур, в частности, на основе квантоворазмерных частиц (квантовых точек).

Создание методов изготовления полупроводниковых субмикрометровых частиц — современная важная проблема, решение которой находится в начальной стадии [4]. Получение полупроводниковых соединений типа A_3B_5 прямым химическим синтезом чрезвычайно затруднено, а антимонидов, по-видимому, невозможно. Поэтому обычно их синтез осуществляется по методу Чохральского вытягиванием из расплава шихты со стехиометрическим содержанием компонентов A_3 и B_5 . Также возможно применение метода Бриджмена [5].

Наличие твердого слитка предполагает перевод его в порошки с дальнейшей их модификацией методами химического травления и последующих процессов наращивания, силанизации, стабилизации и т. д. [6]. При этом важнейшей стадией является механическое (механохимическое) диспергирование, определяющее такие свойства субмикрометровых частиц, как форма и размеры, структурное совершенство, активность поверхности, пространственные и энергетические свойства носителей заряда и др.

При этом надо отметить, что в настоящее время механохимия как процесс измельчения порошков в большей мере направлен на совершенствование оборудования в части повышения скоростей помола, уменьшения размера диспергированных образцов вплоть до наноразмеров [2, 7], а в сочетании с прецизионным анализом гранулометрического состава и поверхности порошков [8, 9] делает технологию помола чрезвычайно перспективной. Иными словами, развивается новое направление механохимии — химия высокоэнергетического помола [10, 11]. Все это расширяет спектр применяемых материалов, в том числе для нужд микроэлектроники, например для синтеза электрострикционной и пьезокерамики, модификации порошков нанометаллов и их оксидов. Обычно целью помола является достижение определенных физических характеристик порошка, а именно размера частицы и распределения частиц по размеру.

Исследования этих процессов и проявлений в диспергированных монокристаллических полупроводниках A_3B_5 — GaAs, InAs, InSb и явились задачей данной работы.

Измельчение в планетарной шаровой мельнице

Из общих положений механохимии [12—14] известно, что процесс механического измельчения зависит от частоты вращения размольных стаканов, природы, размеров размольных шаров и исходного обрабатываемого материала, от количественного соотношения измельчаемого материала, шаров, а при мокром помоле — жидкости, например воды.

В данной работе использовали планетарную шаровую мельницу Pulverisette 7 (Fritsch, Германия) [15], конструкция которой подразумевает высокоэнергетический метод измельчения.

Размольные стаканы с измельчаемым материалом и шарами в мельнице этого типа вращаются вокруг общей оси и в противоположную сторону вокруг собственных осей. При этом шары пересекают стакан по диагонали и измельчают материал как при столкновении измельчаемого материала со стенками размольных стаканов, так и в зазорах между соприкасающимися поверхностями размольных шаров. Частота вращения планетарного диска данной мельницы изменяется в диапазоне 100...1100 об/мин, при этом развивается центробежное ускорение от 9 до 95 g.

Измельчение осуществлялось в три этапа при частоте вращения размольных стаканов 450 об/мин. Продолжительность помола на каждом этапе составляла 10 ч. В качестве мелющих тел были использованы шары из карбида вольфрама с диаметрами 10, 5 и 1 мм на 1, 2 и 3-м этапах соответственно.

Исследование полученных порошков

Контроль гранулометрического состава проводили методом динамического рассеяния света на приборе Zetasizer Nano (Malvern, Великобритания). Результаты гранулометрического анализа полученных полидисперсных порошков материалов представлены графически в виде функций распределения (рис. 1) и таблицы. Частицы после седиментационного разделения имели размеры от десятых долей микрометра до 10 нм.

Параметры седиментированных частиц полупроводников A_3B_5 Parameters of the sediment particles of III—V semiconductors

Материал Material	Среднее зна- чение разме- ра частиц, мкм Average parti- cles size, µm	Отклонение от среднего размера, мкм Deviation from the average size, mm	Отношение пло- щади поверх- ности частиц к их объему, мкм ⁻¹ Surface/volume ratio, μm^{-1}
GaAs	0.22	0.14	27.3
InAs	0.23	0.10	26.1
InSb	0.37	0.26	8.20



Рис. 1. Распределение по размерам седиментированных частиц полупроводников ${\rm A}_3{\rm B}_5$

Fig. 1. Distribution of the sediment particles of III-V semiconductors by sizes

Структурно-физические свойства исследовали в мультизеренных слоях (M3C), полученных электрофоретическим осаждением частиц на изолирующие или проводящие подложки.

Форма, размеры, расположение частиц в МЗС контролировали методами сканирующей электронной (СЭМ), атомно-силовой и туннельной (СТМ) микроскопии.

На рис. 2 и 3 (см. третью сторону обложки) представлены типичные СЭМ- и СТМ-изображения поверхности МЗС, из которых можно определить форму и расположение частиц. Форма частиц носила полигональный и пирамидально-полигональный характер и зависела от типа обрабатываемого вещества. Фазовый и структурный состав исследовали по методикам рентгеновского фазового анализа на дифрактометре ДРОН-4 с использованием рентгеновской трубки с медным анодом (Cu-K_a). Для анализа дифрактограмм использовали базу данных PCPDFWIN Международного Центра по дифракционным данным (JCPDS, v. 2.02, 1999). В пределах погрешности измерений, составляющей менее 1 %, фазовый состав, кристаллическая структура и вычисленные межплоскостные расстояния порошковых образцов совпадают с данными картотеки для GaAs.

Механизм измельчения

В процессе механического измельчения в кристаллах могут образовываться микротрещины, различного рода стабильные и метастабильные дефекты, происходить процессы массопереноса и перераспределения избыточной поверхностной энергии. Процесс механического диспергирования кристаллов зависит от их свойств — твердости, упругости, текучести, прочности — и происходит по специфическим микроразмерным законам. Классический закон Холла — Петча (прямой — Hall—Petch effect и обратный — inverse Hall—Petch effect [14, 16]) с достаточной точностью описывает соотношение между пределом текучести и размером поликристаллического зерна в их микрометровом диапазоне. При уменьшении размеров зерен до >50 нм данный закон в большей степени неприемлем [16—18]. В основе объяснения данного эффекта лежит предположение о смене механизма пластической деформации. Следствием этого является существование некоторого минимального размера частиц, который может быть достигнут при механическом размоле [19, 20].

Практическое отношение указанных закономерностей для нашего случая заключается в том, что в частицах с предельно малыми для конкретных условий их получения размерами можно ожидать сохранения кристаллического совершенства исходного монокристалла.

Измерение ВАХ образцов

В качестве физического свойства контроля структурного совершенства частиц в работе был использован метод исследования инжекции электронов в зерна по вольт-амперной характеристике (BAX) [3]. ВАХ исследовали на туннельном микроскопе Nanoeducator-I на отдельных частицах M3C всех вариантов полупроводников. Для получения характеристик инжекции проводились измерения в автоматическом режиме (10...15) ВАХ на точку в нескольких точках-частицах поверхности M3C. По воспроизводимости результатов измерений отбирали точки устойчивой характеристики, после чего проводили усреднения воспроизводимых ВАХ.



Рис. 4. Типичные ВАХ инжекции электронов в зерна M3C: $l, l^* - InSb; 2, 2^* - GaAs; 3 - InAs$ Fig. 4. Typical VAC injections of electrons into MGL grains: $l, l^* - InSb; 2, 2^* - GaAs; 3 - InAs$

ВАХ инжекции имели вид степенной зависимости (рис. 4) $\lg I = m \lg V + \lg I_0$ с показателем степени *m*, равным от ~(0,8...1,5) для образцов самого узкозонного InSb (кривая *I*) до ~(4,0...5,5) — для самого широкозонного GaAs (кривая *2*). Физическая модель процесса исследована в работе [3] для зерен поверхности монокристалла полупроводников GaAs, InAs, InSb; в модели установлена зависимость BAX от ряда параметров, в том числе от подвижности и диффузионной длины электронов.

На рис. 4 для сравнения приведены ВАХ, измеренные на зернах поверхности монокристаллов, — кривые l^* и 2^* . Отмечая удовлетворительное совпадение поведения ВАХ инжекции для зерен поверхности монокристаллов и частиц МЗС, можно утверждать, что качественно являются близкими такие свойства, как подвижность и коэффициент диффузии электронов, зависящие в сильной степени от свойств структуры полупроводника. Из этого можно заключить, что полученные субмикронные седиментированные с минимальными размерами частицы полупроводников A_3B_5 близки по своему структурному совершенству к исходным монокристаллам [3].

Заключение

В работе исследованы ВАХ проводимости в мультизеренных слоях (M3C) субмикронных частиц полупроводников A_3B_5 . Наночастицы и M3C были изготовлены по рассмотренной выше методике. Детальный анализ ВАХ позволил установить, что их поведение определяется механизмом межзеренной туннельной эмиссии из приповерхностных электронных состояний субмикронных частиц. Установлено, что M3C, полученные данным методом, могут быть использованы в ИК-излучателях, газовых и оптических сенсорах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 17-07-00407-а.

Список литературы

1. Жуков Н. Д., Мосияш Д. С., Хазанов А. А., Смирнов А. В., Лапшин И. В., Синев И. В. Механизмы тока в слоях электроосажденных субмикронных полупроводниковых частиц // Письма в ЖТФ. 2017. Т. 43, № 24. С. 72—79.

2. Ковалевский А. А., Строгова А. С., Шевченок А. А. и др. Получение методом механохимии ультрадисперсных порошков кремния и исследование их физико-химических свойств // Нано-и микросистемная техника. 2017. Т. 19, № 11. С. 667—677.

3. Жуков Н. Д., Глуховской Е. Г., Хазанов А. А. Локально-эмиссионная инжекция электронов в микрозерна поверхности полупроводников А₃В₅ // Физика и техника полупроводников. 2016. Т. 50, № 6. С. 772—776.

4. Матюшкин Л. Б., Рыжов О. А., Александрова О. А. и др. Синтез наночастиц металлов и полупроводников в потоке несмешивающихся жидкостей // Физика и техника полупроводников. 2016. Т. 50, № 6. С. 859—862.

5. **Duffar T., Dusserre P., Picca F.** et al. Bridgman growth without crucible contact using the dewetting phenomenon // Journal of Crystal Growth. 2000. Vol. 211, N. 1–4. P. 434–440.

6. **Drobintseva A. O., Kvetnoy I. M., Krylova Y. S.** et al. A. Synthesis of colloidal quantum dots for medical and biological scientific research // Proc. of 2015 4th Forum Strategic Partnership of Universities and Enterprises of Hi-Tech Branches. 2015. P. 107–108.

7. **Еремкин В. В., Шах-Назарьян Н. А., Смотраков В. Г.** и др. Особенности получения электрострикционной керамики для нанопозиционеров // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 10. С. 23—27.

8. Ломаева С. Ф., Повстугар В. И., Быстров С. Г. и др. Возможности АСМ-исследований высокодисперсных нанокристаллических порошков железа // Нано-и микросистемная техника. 2001. № 3. С. 27–29.

9. Kudryakov O. V., Varavka V. N. Integrated Indentation Tests of Metal-Ceramic Nanocomposite Coatings // Inorganic Materials. 2015. Vol. 51, No. 15. P. 1508–1515.

10. **Еремкин В. В., Шилкина Л. А., Смотраков В. Г.** и др. Изучение влияния высокоэнергетического помола на технологию получения электрострикционной керамики для нанопозиционеров // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. 2009. № 3. С. 106—109.

11. Lin I. J., Nadiv S. Review of the phase transformation and synthesis of inorganic solids obtained by mechanical treatment (mechanochemical reactions) // Materials Science and Engineering. 1979. Vol. 39. N. 2. P. 193–209.

12. **Аввакумов Г. Е., Гусева А. А.** Механические методы активации в переработке природного и технического сырья. Новосибирск: Академическое изд-во Гео, 2009. 155 с.

13. **Baláž P., Choi W. S., Fabián M.** et al. Mechanochemistry in the Preparation of Advanced Materials // Acta Montanistica Slovaca. 2006. Vol. 11. P. 122–129.

14. **Boldyrev V. V.** Mechanochemistry of Solids: Past, Present, and Prospects // Journal of Materials Synthesis and Processing. 2000. Vol. 8. P. 121–132.

15. **Mio H., Kano J., Saito F.** et al. Optimum revolution and rotational directions and their speeds in planetary ball milling // International Journal of Mineral Processing. 2004. Vol. 74. P. S85–S92.

16. **Gao H., Ji B., Jäger I. L.** et al. Materials become insensitive to flaws at nanoscale: lessons from nature // Proceedings of the national Academy of Sciences. 2003. Vol. 100, N. 10. P. 5597–5600.

17. Carlton C. E., Ferreira P. J. What is behind the inverse Hall-Petch effect in nanocrystalline materials? // Acta Materialia. 2007. Vol. 55. P. 3749–3756.

18. **Poole Ch. P., Owens F. J.** Introduction in nanotechnology. New Jersey: John Wiley & Sons, 2003. 373 p.

19. **Малыгин Г. А.** Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов //Физика твердого тела. 2007. Т. 49, № 6. С. 961—982.

20. Курлов А. С. Модель размола порошков // Журнал технической физики. 2011. Т. 81. Вып. 7. С. 76-82.

I. V. Sinev, Associate Professor, SinevIV@info.sgu.ru, D. A. Timoshenko, Graduate Student, Saratov state University, N. D. Zhukov, Director of "Ref-Svet", Saratov, V. P. Sevostyanov, Vice Director of Science "Scientific Research Institute of Technologies of Organic and Inorganic Chemistry and Biotechnology", Saratov, 410012, Russian Federation

Corresponding author: **Sinev Ilya V.,** Associate Professor, Saratov state University, Saratov, 410012, Russian Federation, e-mail: SinevIV@info.sgu.ru

Properties of Mechanically Dispersed Nano-Sized Single Crystals of III—V Semiconductors

Received on March 23, 2018 Accepted on April 16, 2018

Dispersing of single crystals of III—V semiconductors (GaAs, InAs, InSb) to submicron size was carried out using a planetary ball mill. Sizes of the particles were measured by dynamic light scattering. After sedimentation size of the particles lay in range from fractions of a micrometer to ten nanometers. Using the tunneling microscope, the current-voltage characteristics of electron injection were investigated. It is shown that the characteristics for particles obtained by milling and for single crystal grains are identical. That indicating what the perfection of structure of the particles and of initial single crystals is close. Submicron semiconductor structures obtained by the developed method can be used in IR emitters, gas and optical sensors.

Keywords: III–V semiconductors, single crystal, mechanical dispersion, submicron particles, multigrain structure, scanning electron microscopy, injection of electrons, planetary ball mill

For citation:

Sinev I. V., Timoshenko D. A., Zhukov N. D., Sevostyanov V. P. Properties of Mechanically Dispersed Nano-Sized Single Crystals of III-V Semiconductors, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 475–480.

DOI: 10.17587/nmst.20.475-480

Introduction

Scientific and practical interest to the semi-conductor powder submicrometer structures is growing constantly [1-3]. At that, of special importance is the research of A_3B_5 compounds, which have a wide range of physical properties and

allow us to develop practically all the known types of the semi-conductor devices. Such properties of the narrow-band-gap III—V semiconductors (A_3B_5) , as extremely high mobility and small effective masses of the electrons, make them promising for the quantum-dimensional structures, on the basis of the quantum-dimensional particles (quantum points), in particular.

Development of the methods for manufacturing of the semi-conductor submicrometer particles is an important problem, a solution to which is still in its initial stage [4]. Obtaining of the semi-conductor compounds of A_3B_5 type by a direct chemical synthesis is extremely complicated, and of the antimonides, apparently, is impossible. Therefore, usually their synthesis is carried out by Chokhralsky method — by pulling-out from a melt of charge with a stoichiometric content of A_3 and B_5 components. Also application of the Bridgeman method [5] is possible.

Presence of a solid ingot assumes its transfer into the powders with their further modification by the methods of chemical etching and the subsequent processes of escalation, silanization, stabilization, etc. [6]. At that, the most important stage is mechanical (mechanical-chemical) dispersion, determining such properties of the submicrometer particles, as the forms and the sizes, structural perfection, surface activity, spatial and power properties of the charge carriers, etc.

At that, it is necessary to point out, that the mechanochemistry as a process of milling of the powders, to a great degree, is directed to improvement of the equipment regarding an increase of the speeds of milling, reduction of the size of the dispersed samples down to the nanosizes [2, 7], and in a combination with the precision analysis of the granulometric composition and the surface of powders [8, 9] it makes the grinding technology extremely promising. In other words, we witness development of a new direction in mechanochemistry – chemistry of a high-energy grinding [10, 11]. All this expands the spectrum of the applied materials, including for the needs of the microelectronics, for example, for synthesis of the electrostrictive and piezoceramics, modification of the powders of the nanometals and their oxides. Usually, the purpose of grinding is achievement of certain physical characteristics of a powder, namely, the size of a particle and distribution of the particles by size.

Research of these processes and phenomena in the dispersed monocrystal III—V semiconductors — GaAs, InAs, InSb is the task of the given work.

Grinding in a planetary ball mill

From general provisions of the mechanochemistry [12-14] it is known, that the process of the mechanical grinding depends on the frequency of rotation of the grinding bowl, the nature and sizes of the grinding balls and the charging feed, on the quantitative correlation of the sample material, grinding balls, and in case of a wet grinding — liquids, water, for example.

In this work Pulverisette 7 (Fritsch, Germany) planetary ball mill was used [15], the design of which envisages a highenergy method of grinding.

The grinding bowls with the sample material and balls in the mill of this type rotate round the common axis and in the opposite direction round its own axes. At that, the balls cross the bowl by a diagonal and grind the material as a result of impact of the sample material with the walls of the bowl, and also in the gaps between the contacting surfaces of the grinding balls. The rotational speed of the main disk of the mill varies within the range of 100...1100 rpm, at that, the centrifugal acceleration is reaches from 9 up to 95 g. Grinding was carried out in three stages with the rotational speed of the grinding bowls of 450 rpm. Duration of grinding at each stage was 10 h. The grinding bodies were tungsten carbide balls with diameters of 10, 5 and 1 mm at the 1st, 2d and 3d stages accordingly.

Investigation of the received powders

The control of the granulometric composition was done by the method of the dynamic light scattering on Zetasizer Nano device (Malvern, Great Britain). The results of the granulometric analysis of the received polydispersed powders of the materials are presented graphically in the form of the distribution functions (fig. 1) and tables. After the sedimentation-partition the particles had the sizes from the tenths of fractions of a micrometer down to 10 nm.

The structural-physical properties were investigated in the multigrain layers (MGL), received by the electrophoretic precipitation of the particles on the insulating or conducting substrates.

The forms, the sizes, the arrangement of the particles in MGL were controlled by the methods of the scanning electronic (SEM), atomic-force (AFM) and scanning tunnel (CTM) microscopies.

Fig. 2 and 3 (see the 3rd side of cover) present typical SEM and STM images of the MGL surface, from which it is possible to define the form and arrangement of the particles. The form of the particles had a polygonal and pyramidal-polygonal character and depended on the type of the processed substance. The phase and structural compositions were investigated by the techniques of the x-ray phase analysis on DRON-4 diffractometer with the use of an x-ray tube with a copper anode (Cu-K_{α}). For analysis of the diffraction patterns, PCPDFWIN data base of the International Center for Diffraction Data was used (JCPDS v. 2.02, 1999). Within the error of measurements constituting less than 1 %, the phase composition, the crystal structure and the calculated interplane distances of the powder samples coincide with the data of the card file for GaAs.

The grinding mechanism

In the course of the mechanical grinding in crystals, the microcracks can be formed, as well as various sorts of stable and metastable defects, and the mass-transfer and redistribution processes of the superfluous surface energy may occur. The process of the mechanical dispersion of crystals depends on their properties — hardness, elasticity, fluidity, strength, and it goes on in accordance with the specific micro-size laws.

The classical direct Hall—Petch effect and the inverse Hall-Petch effect [14, 16]) describe rather accurately the correlation between the yield strength and the size of a polycrystalline grain in their micrometer range. If the grain size is reduced down to >50 nm, the given effect, to a great degree, is inapplicable [16—18]. At the heart of the explanation of the given effect is an assumption of a variation of the mechanism of the plastic deformation. A consequence of it is the existence of a certain minimal size of particles, which can be reached due to a mechanical grinding [19, 20].

A practical relation of the above effect to our case is in the fact that in the particles with the sizes, extremely small for the concrete conditions of their obtaining, we can expect preservation of the crystalline perfection of the initial single crystal.

Measurement of samples voltage-ampere characteristics

For control of the physical properties of the structural perfection of the particles in this work the method of research of injection of the electrons into the grains by the volt-ampere characteristic (VAC) [3] was used. VAC was investigated on Nanoeducator-I tunnel microscope on single MGL particles of all variants of the semiconductors. For reception of the injection characteristics the measurements were done in an automatic mode (10...15) of VAC on a point in several pointsparticles of the MGL surface. By reproducibility of the results of the measurements the points of steady characteristics were selected, and then the averaging of the reproduced VAC was done.

VAC of injections looked like a power dependence (fig. 4) $\lg I = m \lg V + \lg I_0$ with an exponent *m*, from ~(0.8...1.5) for the samples of the most narrow-band-gap InSb (curve *I*) up to ~(4.0...5.5) — for most wide-band-gap GaAs (curve *2*). The physical model of the process was investigated in [3] for the grains of the surface of a single crystal of the semiconductors of GaAs, InAs, InSb, and in the model, the dependence of VAC on a number of parameters, including the mobility and the diffusion lengths of the electrons, was established.

For comparison reasons fig. 4 presents VAC measured on the surface of the single crystals — curve I^* and curve 2^* . Noting a satisfactory coincidence of the behavior of VAC of the injections for the grains of the surface of the single crystals and MGL particles, it is possible to assert that such properties as the mobility and diffusion coefficient of the electrons, which to a strong degree depend on the semiconductor structure, are qualitatively close. From this it is possible to conclude, that the received submicronic sediment particles of III-V semiconductors with the minimal sizes are close by their structural perfection to the initial single crystals [3].

Conclusion

In the work, VAC of conductivity in the multigrain layers (MGL) of the submicronic particles of III-V semiconductors were investigated. The nanoparticles and MGL were manufactured by the technique considered above. A detailed analysis of VAC allowed us to establish, that their behavior was determined by the mechanism of the intergranular tunnel emission from the near-surface electronic states of the submicronic particles. It was established, that MGL, received by the given method, could be used in IR emitters, gas and optical sensors.

The reported study was funded by RFBR according to the research project N° 17-07-00407-a.

References

1. Zhukov N. D., Mosijash D. S., Hazanov A. A., Smirnov A. V., Lapshin I. V., Sinev I. V. Mehanizmy toka v slojah elektroosazhdennyh submikronnyh poluprovodnikovyh chastic, *Pis'ma v ZhTF*, 2017, vol. 43, is. 24, pp. 72–79. (in Russian)

2. Kovalevskij A. A., Strogova A. S., Shevchenok A. A., Kotov D. A., Gran'ko S. V. Poluchenie metodom mehanohimii ul'tradispersnyh poroshkov kremnija i issledovanie ih fiziko-himicheskih svojstv, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2017, vol. 19, no. 11, pp. 667–677. (in Russian) 3. **Zhukov N. D., Gluhovskoj E. G., Hazanov A. A.** Lokal'nojemissionnaja inzhekcija jelektronov v mikrozjorna poverhnosti poluprovodnikov A3B5, *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2016, vol. 50, is. 6, pp. 772–776. (in Russian)

4. Matjushkin L. B., Ryzhov O. A., Aleksandrova O. A., Moshnikov V. A. Sintez nanochastic metallov i poluprovodnikov v potoke nesmeshivajushhihsja zhidkostej, *Fizika i tehnika poluprovodnikov*, 2016, vol. 50, is. 6, pp. 859–862. (in Russian)

5. **Duffar T., Dusserre P., Picca F., Lacroix S., Giacometti N.** Bridgman growth without crucible contact using the dewetting phenomenon, *Journal of Crystal Growth*, 2000, vol. 211, no. 1–4, pp. 434–440.

6. Drobintseva A. O., Kvetnoy I. M., Krylova Y. S., Polyakova V. O., Moshnikov V. A., Musikhin S. F., Aleksandrova O. A., Mazing D. S., Matyushkin L. B., Ryzhov O. A. A. Synthesis of colloidal quantum dots for medical and biological scientific research, *Proc. of 2015 4th Forum Strategic Partnership of Universities and Enterprises of Hi-Tech Branches*, 2015, pp. 107–108.

7. Eremkin V. V., Shah-Nazar'jan N. A., Smotrakov V. G., Panich A. A., Shevcova S. I. Osobennosti poluchenija jelektrostrikcionnoj keramiki dlja nanopozicionerov, *Nano-i mikrosistemnaya tekhnika*, 2009, no. 10, pp. 23–27. (in Russian)

8. Lomaeva S. F., Povstugar V. I., Bystrov S. G., Mihajlova S. S. Vozmozhnosti ASM-issledovanij vysokodispersnyh nanokristallicheskih poroshkov zheleza, *Nano-i mikrosistemnaya tekhnika*, 2001, no. 3, pp. 27–29. (in Russian)

9. Kudryakov O. V., Varavka V. N. Integrated Indentation Tests of Metal-Ceramic Nanocomposite Coatings, *Inorganic Materials*, 2015, vol. 51, no. 15, pp. 1508–1515.

10. Eremkin V. V., Shilkina L. A., Smotrakov V. G., Panich A. E., Shevcova S. I. Izuchenie vlijanija vysokojenergeticheskogo pomola na tehnologiju poluchenija jelektrostrikcionnoj keramiki dlja nanopozicionerov, *Izvestija vysshih uchebnyh zavedenij. Himija i himicheskaja tehnologija*, 2009, no. 3, pp. 106–109. (in Russian)

11. Lin I. J., Nadiv S. Review of the phase transformation and synthesis of inorganic solids obtained by mechanical treatment (mechanochemical reactions), *Materials Science and Engineering*, 1979, vol. 39, no. 2, pp. 193–209.

12. Avvakumov G. E., Guseva A. A. Mehanicheskie metody aktivacii v pererabotke prirodnogo i tehnicheskogo syr'ja, Novosibirsk, Akademicheskoe izd-vo Geo, 2009, 155 p. (in Russian)

13. Baláž P., Choi W. S., Fabián M., Godočíková E. Mechanochemistry in the Preparation of Advanced Materials, *Acta Montanistica Slovaca*, 2006, vol. 11, pp. 122–129.

14. Boldyrev V. V. Mechanochemistry of Solids: Past, Present, and Prospects, *Journal of Materials Synthesis and Processing*, 2000, vol. 8, pp. 121–132.

15. Mio H., Kano J., Saito F., Kaneko K. Optimum revolution and rotational directions and their speeds in planetary ball milling, *International Journal of Mineral Processing*, 2004, vol. 74, pp. 85–92.

16. Gao H., Ji B., Jäger I. L., Arzt E., Fratzl P. Materials become insensitive to flaws at nanoscale: lessons from nature, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2003, vol. 100, no. 10, pp. 5597–5600.

17. Carlton C. E., Ferreira P. J. What is behind the inverse Hall-Petch effect in nanocrystalline materials? *ActaMaterialia*, 2007, vol. 55, pp. 3749–3756.

18. **Poole Ch. P., Owens F. J.** *Introduction in nanotechnology*, New Jersey, John Wiley & Sons, 2003, 373 p.

19. **Malygin G. A.** Plastichnost' i prochnost' mikro-i nanokristallicheskih materialov, *Fizika tverdogo tela*, 2007, vol. 49, no. 6, pp. 961–982. (in Russian)

20. Kurlov A. S. Model' razmola poroshkov, *Zhurnal tehnicheskoj fiziki*, 2011, no. 81, vol. 7, pp. 76–82 (in Russian).

Элементы MHCT Micro-AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

УДК 621.382.323

DOI: 10.17587/nmst.20.481-490

Н. В. Масальский, канд. физ.-мат. наук, зав. сектором, e-mail: volkov@niisi.rar.ru, Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской Академии наук, Москва

ЛОГИЧЕСКИЕ ВЕНТИЛИ НА ДВУХЗАТВОРНЫХ КНИ КМОП-НАНОТРАНЗИСТОРАХ С НЕРАВНОМЕРНО ЛЕГИРОВАННЫМ КАНАЛОМ

Поступила в редакцию 06.02.2018

Обсуждаются вопросы синтеза характеристик логических вентилей, выполненных на симметричных двухзатворных КНИ КМОП-нанотранзисторах с неравномерно легированным каналом, в диапазоне напряжения питания менее 1 В. Используется ступенчатый вариант легирования канала (считая от истока) — высоколегированная и низколегированная области. На основе аналитической модели распределения потенциала в рабочей области транзистора вычисляются вольт-амперные характеристики транзисторов и динамические характеристики вентилей.

Ключевые слова: технология "кремний на изоляторе", симметричный двухзатворный КНИ КМОП-нанотранзистор, неравномерно легированный канал, логический вентиль, низкая потребляемая мощность

Введение

Двухзатворные КМОП-транзисторы со структурой КНИ ("кремний на изоляторе") по праву относят к перспективным представителям элементной базы цифровых микросхем [1-4]. Как известно, КНИ-транзисторные структуры характеризуются уникальными возможностями для масштабирования топологических параметров в наноразмерной области. При этом они предоставляют большую функциональную гибкость. Однако даже данная архитектура не способна решить одну из сдерживающих проблем современной микроэлектроники, связанную с тотальным масштабированием топологии, - снижение опережающими темпами концентрации носителей в канале транзистора. Такая тенденция крайне деструктивно влияет как на уровень токов отдельного транзистора, так и на быстродействие микросхемы в целом [3, 5, 6]. В общем случае апробированные методы преодоления данной проблемы наталкиваются на паразитные эффекты, которые особенно проявляются в немасштабируемых свойствах транзисторных структур, например в пороговом напряжении, подпороговом токе [4, 7].

В настоящей работе для решения представленной проблемы анализируется возможность использования двухзатворных КНИ КМОП-транзисторов с неравномерно легированной рабочей областью. Рассматривается асимметричный продольный профиль легирования канала (считая от истока): высоколегированная и низколегированная области. Преимуществом данной конструкции является то, что она позволяет компенсировать влияние эффекта горячих носителей, roll-off порогового напряжения и других паразитных механизмов, возникающих в однородно легированных транзисторах [8-10]. Электрофизические характеристики прототипов транзисторов вычисляются при помощи аналитического выражения для распределения потенциала, следующего из решения 2D-уравнения Пуассона. На основании данного распределения потенциала вычисляют вольт-амперные и вольтфарадные характеристики транзисторов и временные и мощностные характеристики логических вентилей. Особую важность имеет анализ оптимального выбора параметров транзисторов для синтеза характеристик логических схем, в частности задержки и связанной с нею мощности переключения, при условии пониженного напряжения питания.

1. Модель прототипа транзистора

В рассматриваемом случае рабочая область прототипа двухзатворного симметричного КНИ КМОП-нанотранзистора (рис. 1) состоит из двух частей (*1* и *2*) с разными концентрациями [11, 12].



Рис. 1. Структурная схема транзистора: U_g — напряжение на затворах; U_{ds} — напряжение сток/исток (или напряжение питания); t_S , t_g — толщина рабочей области и толщина подзатворного диэлектрика соответственно

Fig. 1. Transistor block diagram: U_g – gate voltage; U_{ds} – drain/source voltage (or supply voltage); t_S , t_g – thickness of the working area and thickness of the subgate dielectric, accordingly

При этом выполняются следующие условия по топологии

$$L = L_1 + L_2,$$
$$L_1 = L_2$$

и концентрации легирования

$$N_{A_i} = \begin{cases} N_1, 0 \le y \le L_1 \\ N_2, L_2 < y \le L \end{cases},$$

где N_1 — концентрация легирования области 1 с длиной L_1 ; N_2 — концентрация легирования области 2 с длиной L_2 ; L — длина рабочей области.

2. Минимизация короткоканальных эффектов

В планарных транзисторных структурах характеристическая длина *l* служит индикатором проявления короткоканальных эффектов (ККЭ) [13]. Данный параметр является функцией толщин пленок, формирующих рабочую область транзистора. В предельном случае для полного подавления ККЭ должно быть выполнено условие $L/l \gg 1$. Выражение для характеристической длины формируется при решении уравнения Пуассона для распределения потенциала в рабочей области конкретной конструкции транзистора. Наилучшим компромиссом для минимизации ККЭ в данной структуре при фиксированных значениях толщин пленок t_o и t_S является условие L/l > 2, которое вполне приемлемо для схемотехнических приложений [14-16]. Применительно к рассматриваемой модели транзистора уравнение Пуассона имеет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \varphi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{q N_{A_j}(y)}{\varepsilon_S}, \qquad (1)$$

где $\varphi(x, y)$ — потенциал в рабочей области транзистора; q — заряд электрона; ε_S — диэлектрическая проницаемость рабочей области.

Для аналитического решения 2D-уравнения Пуассона необходимо дополнить классические граничные условия соотношениями о непрерывности потенциального и электрического полей на границе областей 1 и 2, чтобы учесть свойство неоднородности легирования рабочей области. Для решения уравнения (1) используем следующие граничные условия:

$$\begin{split} \varphi(x, y)|_{x=0} &= \varphi_{f}(y); \quad \varphi(x, y)|_{x=t_{S}} = \varphi_{b}(y); \\ \frac{\varepsilon_{g}}{t_{g}}(U_{g} - U_{FB} - \varphi_{f}(y)) &= -\varepsilon_{S} \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial x}\Big|_{x=0}; \\ \frac{\varepsilon_{g}}{t_{g}}(U_{g} - U_{FB} - \varphi_{b}(y)) &= -\varepsilon_{S} \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial x}\Big|_{x=t_{S}}; \\ \varphi_{1}(x, 0) &= U_{bi}^{(S)}; \quad \varphi_{2}(x, L) = U_{bi}^{(D)} + U_{DS}; \\ \varphi_{1}(x, L) &= \varphi_{2}(x, L - L_{1}) = U_{bi}^{(C)}; \\ \frac{\partial \varphi_{f_{1}}(y)}{\partial y}\Big|_{y=L_{1}} &= \frac{\partial \varphi_{f_{2}}(y)}{\partial y}\Big|_{y=L-L_{2}}, \end{split}$$

где $\varphi_f(y)$ — фронтальный поверхностный потенциал; $\varphi_b(y)$ — поверхностный потенциал на нижней поверхности; ε_g — диэлектрическая проницаемость подзатворного оксида; U_g — напряжение на затворах; U_{FB} — напряжение плоских зон; $U_{bi}^{(S)}$ — встроенная разность потенциалов у истока; $U_{bi}^{(D)}$ встроенная разность потенциалов у стока; $U_{bi}^{(c)}$ встроенная разность потенциалов на границе разнородно легированных областей; U_{DS} — напряжение сток-исток.

Выражения для распределения потенциала на поверхностях Si—SiO₂ являются следствием решения уравнения Пуассона, которое получено в приближении разделения переменных [6]. В данном случае обобщенное выражение для поверхностных потенциалов можно представить в виде:

$$\varphi_j(y) = U_{1j} \exp\left(\frac{y}{l}\right) + U_{2j} \exp\left(-\frac{y}{l}\right) - U_{0j}l^2, \qquad (2)$$

где
$$j = f$$
, b ; $l = t_S \sqrt{\frac{1 + C_0}{2k_S C_0 (2 + C_0)}}$; $C_0 = \frac{\varepsilon_S t_g}{\varepsilon_g t_S}$; коэф-

фициенты U_{1j} , U_{2j} , и U_{0j} определяются из граничных условий; k_S — параметр, который связывает производную продольного электрического поля по глубине рабочей области с производной продоль-

ного электрического поля на фронтальной поверхности.

Следует отметить, что полученное выражение (2) позволяет вычислить распределение потенциала и электрического поля в рабочей области транзистора, пороговое напряжение, вольт-амперные характеристики.

Для определения области допустимых значений характеристической длины рассмотрим ограничения на параметры t_S и t_g . Как известно, толщина рабочей области влияет на основные характеристики транзистора. Ввиду необходимости учитывать проявление деградационных эффектов, квантовых эффектов, рассеяние на поверхности раздела кремний-оксид, влияние случайной дискретной примеси в канале транзистора, увеличение сопротивления рабочей области, технологические ограничения при создании пленок без дефектов [15, 16] область значений параметра $t_{\rm S}$ следует ограничить диапазоном 6...10 нм. Толщина подзатворного диэлектрика из оксида кремния для контроля ККЭ не может превышать 2 нм, а квантовые эффекты, в частности туннельный ток через затвор, ограничивают минимальную толщину значением 1 нм [1]. Значения характеристической длины в диапазоне указанных ограничений по параметрам t_S и t_o подчиняются характеристическим кривым, которые приведены на рис. 2.

Аналогичным образом можно представить зависимости $l(t_g)$ для выбранного диапазона толщин t_S . Таким образом, можно вычислить значение l для любого набора t_S , t_g из области допустимых значений.

Для иллюстрации приведенных выше рассуждений был выбран прототип двухзатворного симметричного КНИ-транзистора с параметрами $L_g =$ = 22 нм, $t_S =$ 7 нм, $t_{ox} =$ 1,3 нм, $N_1 =$ 1,0 × 10¹⁷ см⁻³,



Рис. 2. Зависимость характеристической длины от толщины рабочей области для разных толщин подзатворного оксида: $1 - t_g = 1,9$ нм; $2 - t_g = 1,6$ нм; $3 - t_g = 1,3$ нм; $4 - t_g = 1,1$ нм Fig. 2. Dependence of characteristic length on thickness of the working area for different thicknesses of the subgate oxide: $1 - t_g = 1.9$ nm; $2 - t_g = 1.6$ nm; $3 - t_g = 1.3$ nm; $4 - t_g = 1.1$ nm



Рис. 3. Распределение поверхностного потенциала от нормированной координаты у при $U_{ds} = 0,1$ В (звездочкой обозначены данные моделирования, полученные с помощью программы ATLAS) Fig. 3. Distribution of the surface potential from normalized co-ordinate y at $U_{ds} = 0.1$ V (the asterisk designates the data of modeling received by means of ATLAS software)

 $N_2 = 1,0 \times 10^{15}$ см⁻³. Максимальный уровень легирования стока/истока 5×10^{20} см⁻³. На рис. 3 приведено рассчитанное распределение поверхностного потенциала в рабочей области транзистора, которое сопоставлялось с данными моделирования, полученными с помощью коммерчески доступного программного пакета ATLASTM для 2D-моделирования транзисторных структур [17]. Результаты расчетов и данные моделирования находятся в хорошем соответствии.

Из полученных результатов следует, что минимум поверхностного потенциала расположен в высоколегированной области. Примерно посередине между центром рабочей области и центром высоколегированной области. Пологий участок частично захватывает низколегированную область. В общем случае вид распределения потенциала определяется отношением концентраций N₁ и N₂. При снижении N₂ минимум потенциала сдвигается влево к нулю (к истоку). Разница между минимальным значением потенциала и потенциалом, соответствующим пологой части, возрастает. При возрастании N_2 пологая часть в распределении потенциала постепенно исчезает и минимум потенциала сдвигается вправо (к стоку). При выравнивании концентраций распределение потенциала в точности соответствует распределению потенциала для однородно легированного случая.

3. Алгоритм моделирования характеристик транзистора

Моделирование характеристик симметричного двухзатворного КНИ КМОП-транзистора с продольно легированной рабочей областью осуществляли в два этапа. Первоначально на основании аналитического решения 2D-уравнения Пуассона с расширенными граничными условиями вычисляли распределение потенциала в рабочей области, поверхностный потенциал, электрическое поле, пороговое напряжение, подпороговый наклон, которые сопоставляли с данными моделирования программы ATLASTM [17].

Для моделирования вольт-амперных характеристик (ВАХ) использовали сформулированную в рамках приближения зарядового разделения модель [16], с учетом модифицированного выражения для скорости насыщения и высокой полевой деградации. Выражение для тока двухзатворного КНИ-транзистора следует из интегрирования уравнения общего вида по всей рабочей области [16]. Следует отметить, что концентрация и подвижность носителей существенным образом зависят от распределения потенциала в рабочей области. При этом пренебрегаем влиянием фиксированного оксидного заряда в режиме сильной инверсии.

В исследуемой архитектуре в общем случае ключевые токи транзистора (I_{on} и I_{OFF}) при прочих одинаковых технологических параметрах зависят от концентрации легирования каждой части рабочей области и от их отношения. На рис. 4 в качестве иллюстрации приведены ВАХ выбранного прототипа транзистора.

По сравнению с аналогичным симметричным двухзатворным КНИ КМОП-нанотранзистором, но однородно легированным, значение тока *I*_{on} бо-



Рис. 4. ВАХ $I_{ds}(U_{ds})$ для различных U_g Fig. 4. VAC of $I_{ds}(U_{ds})$ for various U_g

лее чем в 2 раза выше. Уровень тока I_{OFF} примерно в 5 раз меньше. Это является предпосылкой для повышения производительности электронных устройств, в частности логических вентилей, по сравнению с аналогичными, но выполненными на однороднолегированных транзисторах. Высокий ток *I*_{оп} напрямую приводит к уменьшению времени переключения вентиля. Для достижения максимальных значений тока Ion следует повышать концентрацию N₁ до максимально возможной, а концентрацию N₂ снижать до минимально возможной. В области высоких концентраций значение тока І_{оп} будет пропорционально увеличиваться: $I_{on} \cong \beta I_{on}^{(0)}$, где $I_{on}^{(0)}$ — ток насыщения транзистора с равномерно легированной рабочей областью; $\beta = \log(N_1/N_2)$. Ток I_{OFF} возрастает несоизмеримо больше, в предельном случае примерно на два порядка, поэтому можно достичь некоего оптимального соотношения концентраций N₁ и N₂. Однако разумнее при выборе этих параметров руководствоваться проектами микросхем, где планируется применять данные транзисторы. Для высокоскоростных приложений (НР-схем) можно использовать соотношение $I_{ON} > I_{ON HP}$, где $I_{ON HP}$ — параметр из ITRS (International technology roadmap for semiconductor [18]) для данного технологического поколения. Для схем с низким уровнем статической мощности (LSTP-схем) важным требованием является уровень тока *I*_{OFF}. Поэтому оптимизацию можно проводить, отталкиваясь от минимального значения N_2 , которое определяется требованиями выбранной технологии. Далее можно увеличить N₁, чтобы повысить ток Ion и, следовательно, увеличить быстродействие, а для снижения влияния на ток I_{OFF} на несколько процентов повысить концентрацию N₂. Такие итерации следует проводить, контролируя ток I_{OFF} так, чтобы $I_{OFF} < I_{OFF \ LSTP}$, где $I_{OFF LSTP}$ — параметр из ITRS. Поэтому рассматриваемая транзисторная архитектура позволяет получать технологически транзисторы с разными пороговыми напряжениями.

4. Временные задержки при переключениях

Проанализируем влияние на задержку вентилей, в частности инвертора, изменения концентраций легирования рабочей области. Для идеального симметричного инвертора приемлемой оценкой

его задержки является величина [6]
$$\tau = \frac{CU_{ds}}{I_{on}}$$
, где

C — полная эквивалентная емкость, заряжаемая и разряжаемая в тактовом цикле. Тогда с учетом оценочного соотношения для тока насыщения тран-

зистора выражение для задержки перепишем, например, в следующем виде:

$$\tau = \beta^{-1} \tau_0, \tag{3}$$

где $\tau_0 = \frac{CU_{ds}}{I_{on}^{(0)}W}, W$ — ширина затвора.

Из выражения (3) видно, что задержка инвертора обратно пропорционально зависит от отношения концентраций легирования. В данном случае коэффициент β — это крутизна регулировочной характеристики задержки, от значения которой зависит эффективность регулировки.

Исходя из изложенной методики определим два набора параметров прототипа двухзатворного КНИ КМОП-транзистора с длиной канала 22 нм для различных схемотехнических приложений. Тип 1 предназначен для НР-приложений, тип 2 — для LSTP-приложений. Их основные параметры при-

нараматры и и и пранзисторов, где через / приведены	
OCHORNER HOROMOTOLI TROUDERTOROR FIL HOROZ "/" HRUBATALLI	
Table	1
Таблица	1

Key parameters of the transistors, where through "/" the parameters of n- and p-transistors, accordingly, are presented

Параметры Parameters	Тип 1 <i>Туре 1</i>	Тип 2 <i>Туре 2</i>
Толщина подзатворного оксида, нм	1.3	1.3
Thickness of the subgate oxide, nm Толицина рабочей области, нм	7	7
Thickness of the working area, nm	,	,
Концентрация легирования N_1 , см ⁻³	$5.0 \cdot 10^{17}$	$1.1 \cdot 10^{17}$
Сопсенитаной оf anoying N_1 , ст ⁻³ Концентрация легирования N_2 , см ⁻³	$1.0 \cdot 10^{15}$	$2.5 \cdot 10^{15}$
Concentration of alloying N_2 , cm ⁻³	10.9	10.1
Characteristic length, nm	10.9	10.1
Пороговое напряжение, мВ	176/-205	265/-280
Threshold voltage, mV Ток I _{on,} мкА/мкм	1480/815	620/345
Current I_{on} , mkA/µm Tox, $L_{a} = \pi A/MKM$	86/46	61/34
Current I_{OFF} , $pA/\mu m$	80/40	0.1/3.4

Таблица	2
Tahle	1

Динамические характеристики вентилей Dynamic characteristics of the gates

	Параметры Parameters						
Вентиль Gate	τ, пс τ, <i>ps</i>		τ, пс $P, MKBTτ, ps P, mkW $		Р _{ст} , пВт <i>Ps, pW</i>		
	Тип 1 <i>Туре 1</i>	Тип 2 <i>Туре 2</i>	Тип 1 <i>Туре 1</i>	Тип 2 <i>Туре 2</i>	Тип 1 <i>Туре 1</i>	Тип 2 <i>Туре 2</i>	
Инвертор Inverter	0.8	1.6	2.5	2.1	5.8	0.4	
2И-НЕ 2NAND	1.9	3.3	8.1	6.8	12.7	1.0	
2ИЛИ-НЕ 2NOR	1.2	2.2	5.5	4.6	8.2	0.6	



Рис. 5. Статические характеристики инверторов: 1 — тип 1; 2 — тип 2; 3 — Uin

Fig. 5. Static characteristics of invertors: 1 – type 1; 2 – type 2; 3 – Uin

ведены в табл. 1. Остальные технологические параметры выбраны в соответствии с рекомендациями, сформулированными в [6, 16, 19].

Математическое ядро программы HSPICE [20] было использовано для моделирования характеристик вентилей на выбранных прототипах транзисторов. На рис. 5 приведены статические характеристики инверторов.

В табл. 2 приведены основные характеристики вентилей: временная задержка переключения τ ; мощность одного переключения P при частоте 0,1 ТГц; уровень статической мощности $P_{\rm ct}$ при напряжении питания 0,9 В.

На рис. 6 приведены рассчитанные зависимости задержки переключения вентилей различных ти-пов от напряжения питания.

Из представленных данных видно, что в диапазоне напряжений питания $0,8 \le U_{ds} \le 0,9$ В задержка каждого вентиля практически не зависит от значения питания. Уровень U_{ds} , при котором начинает возрастать задержка для каждого вентиля, свой. При этом значения существенно различаются. Оба типа инверторов характеризуются $U_{ds} = 0,65$ В, которое является наименьшим из всех рассматриваемых. Наибольшее значение $U_{ds} = 0,8$ В получено для вентиля 2И-НЕ, выполненного на транзисторах типа 2.

Представленные результаты могут быть использованы для разработки эффективной разнопороговой схемотехники при создании низковольтных



Рис. 6. Зависимость задержки вентилей от напряжения питания U_{ds} : a — HP-вентили; b — LSTP-вентили; 1 — инвертор; 2 — 2ИЛИ-HE; 3 — 2И-HE

Fig. 6. Dependence of the delay of the gates on the supply voltage U_{ds} : a — HP-gates; b — LSTP-gates; 1 — inverter; 2 — 20R-NOT; 3 — 2AND-NOT

СБИС с малой потребляемой мощностью. Необходимо оценить на первоначальном этапе возможности технологии с учетом возможных разбросов по оптимизации основных электрофизических характеристик транзисторов.

Заключение

С помощью численного моделирования проанализирована возможность синтеза логических вентилей на двухзатворных симметричных КНИ КМОП-нанотранзисторах со ступенчатым профилем легирования канала (считая от истока) — высоколегированная и низколегированная области. Исходя из полученного аналитического решения 2D-уравнения Пуассона численно рассчитаны электрофизические характеристики транзисторов. Результаты расчетов распределения потенциала находятся в хорошем соответствии с данными моделирования, полученными с помощью коммерчески доступного программного пакета ATLAS^{тм} для 2D-моделирования транзисторных структур.

Применительно к суб-25-нанометровым двухзатворным КНИ КМОП-транзисторам рассмотрен один из возможных подходов разработки маломощ-

ной электроники. Обоснован способ выбора технологических параметров транзисторов с учетом их применения для разных схемотехнических приложений. С помощью программы HSPICE численно исследованы динамические характеристики вентилей инвертора, 2И-НЕ, 2ИЛИ-НЕ на двух прототипах транзисторов. При напряжении питания 0,9 В минимальная задержка переключения из всех вентилей соответствует инвертору на транзисторах с низкими порогами, максимальная задержка характерна для вентиля 2И-НЕ на транзисторах с высокими порогами, которая более чем в 4 раза выше минимальной. Данный вентиль характеризуется наибольшей активной мощностью, которая на частоте 0,1 ТГц превышает 8 мкВт. Минимальная статическая мощность составляет 0,4 пВт для инвертора на высокопороговых транзисторах.

При снижении напряжения питания задержка вентилей ведет себя по-разному. Для обоих типов инверторов до напряжения 0,65 В она практически не возрастает. При этом потребляемые мощности вентилей снижаются примерно в 2,5 раза. Задержка других вентилей более чувствительна к уровню напряжения питания. При этом тенденция снижения потребляемой мощности сохраняется. В совокупности это является предпосылкой для создания маломощной схемотехники, функционирующей в субтерагерцовом диапазоне.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований РАН № 43.35 НИР № 0065-2018-0006.

Список литературы

1. **Colinge J. P.** Multiple-gate SOI MOSFETs. Solid-State Electronics. 2004. Vol. 48, N. 3. P. 897–909.

2. Widiez J., Lolivier J., Vinet M., Poiroux T., Previtali B., Dauge F., Moui M., Deleonibus S. Experimental evaluation of gate architecture influence on DG SOI MOSFET's performance // IEEE Trans. Electron Devices. 2005. Vol. 52, N. 5. P. 1772–1781.

3. Martin J. S., Bournel A., Dollfus P. Comparison of multiple-gate MOSFET architectures using Monte Carlo simulation // Solid-State Electronics. 2006. Vol. 50, N. 1. P. 94—101.

4. Reyboz M., Rozeau O., Poiroux T., Martin P., Jomaah P. J. An explicit analytical charge based model of undoped independent Double-Gate MOSFET // Solid-State Electronics. 2006. Vol. 50, N. 5. P. 1276–1285.

5. Chung T. M., Olbrechts B., Sodervall U., Bengtsson S., Flandre D., Raskin J.-P. Planar double-gate SOI MOS devices: fabrication by wafer bonding pre-patterned cavities and electrical characterization // Solid-State Electronics. 2007. Vol. 51, N. 1. P. 231–239.

6. Масальский Н. В. Синтез характеристик логических вентилей на двухзатворных суб-25 нм КНИ КМОП-транзисторах для маломощных применений // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 5. С. 41—46.

7. **Yin C., Chan C. H. P.** Investigation of the source/drain asymmetric effects due to gate misalignment in planar double-gate MOSFETs // IEEE Trans. Electron Devices. 2005. Vol. 52, N. 1. P. 85–90.

8. Cerdeira A., Alemán M. A., Pavanello M. A., Martino J. A., Vancaillie L., Flandre D. Advantages of the graded-channel SOI FD MOSFET for application as a quasi-linear resistor // IEEE Trans Electron Devices. 2005. Vol. 52, N. 5. P. 967–972.

9. **Tsai C.** High-performance top and bottom double-gate low-temperature poly-silicon thin film transistors fabricated by excimer laser crystallization // Solid-State Electronics. 2008. Vol. 52, N. 2. P. 365–371.

10. **Kaur H., Kabra S., Bindra S., Haldar S., Gupta R. S.** Impact of graded channel (GC) design in fully depleted cylindrical/surrounding gate MOSFET (FD CGT/SGT) for improved short channel immunity and hot carrier reliability // Solid State Electronics. 2007. Vol. 51, N. 3. P. 398–404.

11. Sharma R. K., Gupta R., Gupta M., Gupta R. S. Graded channel architecture: the solution for misaligned DG FD SOI n-MOSFETs // Semiconductors Science Technology. 2008. Vol. 23, N. 11. P. 75041–75051.

12. Васильев В. А., Орехов Д. О., Чернов П. С. Современные методы моделирования нано- и микроразмерных систем // Нано- и микросистемная техника. 2013. № 11. С. 10–14

13. Kranti A., Armstrong G. A. Engineering source/drain extension regions in nanoscale double gate (DG) SOI MOSFETs: Analytical model and design considerations // Solid State Electronics. 2006. Vol. 50, N. 4. P. 437–447.

14. **Масальский Н. В.** Полностью обедненные КМОП КНИ логические элементы для низковольтных применений // Микроэлектроника. 2008. Т. 37, № 6. С. 470—480.

15. **Kranti A., Hao Y., Armstrong G. A.** Performance projections and design optimization of planar double gate SOI MOSFETs for logic technology applications // Semiconductor Science and Technology. 2008. Vol. 23, N. 2. P. 45001–45011.

16. **Масальский Н. В.** Характеристики двухзатворных КНИ КМОП-нанотранзисторов для перспективных технологий с низким уровнем потребляемой мощности // Микроэлектроника. 2012. Т. 41, № 6. С. 436—444.

17. **Silvaco** Int. 2004: ATLAS User's Manual A 2D numerical device simulator. URL: http://www.silvaco.com/

18. **International** technology roadmap for semiconductor 2015 edition. URL: Режим доступа: http://public.itrs.net.

19. **Зи С.** Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984.

20. **Simulation** Program with Integrated Circuit Emphasis. URL: https://www.stanford.edu/class/ee101b/hspice.html/.

N. V. Masalsky, Ph. D., Chef Chair, volkov@niisi.ras.ru,

Federal State institution "Federal Scientific Center Research Institute of System Researches of the Russian Academy of Sciences", Moscow, 117218, Russian Federation

Corresponding author:

Masalsky Nikolay V., Ph. D., Chef Chair, Federal State institution "Federal Scientific Center Research Institute of System Researches of the Russian Academy of Sciences", Moscow, 117218, Russian Federation, E-mail: volkov@niisi.ras.ru

Logical Gates on Double-Gate SOI CMOS Nanotransistors with a Non-Uniformly Alloyed Channel

Received on February 06, 2018 Accepted on March 07, 2018

The article presents the questions of synthesis of characteristics of the logical gates made on the symmetric double gate SOI CMOS nanotransistors with a non-uniformly doped channel for the supply voltage range less than 1 V. The step doping profile of the channel — high-doping and low-doping areas are discussed. Based on the received analytical solution of 2D Poisson equation the potential distribution in the working area of the transistor was numerically calculated: electric field, threshold voltage and sub-threshold characteristics. The results of the calculations of the potential distribution are in full compliance with the simulation results received by means of ATLASTM, commercially available software package.

An approach was developed for designing of multi threshold low-power electronics in relation to sub 25 nanometer double-gate SOI CMOS transistors. On the basis of the initial analytical model for the potential distribution of transistor the volt ampere characteristics for two prototypes of transistors and response characteristics of the logical elements — the inverter, 2NAND, 2NOR on two prototypes of the transistors were calculated.

Keywords: "silicon on insulator" technology, symmetric double gate SOI CMOS nanotransistor, non-uniformly longitudinally doped channel, logical gate, low power consumption

For citation:

Masalsky N. V. Logical Gates on Double-Gate SOI CMOS Nanotransistors with a Non-Uniformly Alloyed Channel, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 481–490.

DOI: 10.17587/nmst.20.481-490

Introduction

Double-gate CMOS transistors with SOI ("silicon on insulator") structure belong to promising representatives of the element base of the digital microcircuits [1-4]. SOI transistor structures provide unique opportunities for scaling of the topological parameters in the nano-sized area. At that, they ensure a high functional flexibility. However, even the given architecture cannot solve one of the constraining problems of the microelectronics connected with a total scaling of the topology — a decrease by the advancing rates of the carriers concentration in the transistor channel. Such a trend has a destructive influence on both the level of the currents of a separate transistor, and on the speed of a microcircuit as a whole [3, 5, 6]. Generally, the approved methods for overcoming of the given problem encounter the parasitic effects, which are visible in the nonscalable properties of the transistor structures, for example, in the threshold voltage and subthreshold current [4, 7].

In the work, as a solution to the presented problem, the use of the double-gate SOI CMOS transistors with a non-uniformly alloyed working area is analyzed. The asymmetric longitudinal profile of doping of the channel is considered (counting from the source): high-alloy and low-alloy areas. An advantage of the design is that it allows us to compensate for the influence of the effect of hot carriers, roll-off of the threshold voltage and other parasitic mechanisms arising in the homogeneously alloyed transistors [8-10]. The electrophysical characteristics of the prototypes of transistors are calculated by means of an analytical expression for distribution of the potential following from the solution of 2D Poisson equation. On the basis of the given distribution of the potential, the volt-ampere and capacity-voltage characteristic of the transistors and the time and power characteristics of the logic gates are calculated. Of special importance is the analysis of the optimal selection of the parameters of the transistors for a synthesis of the characteristics of the logic circuits, in particular, of a delay and the switching power connected with it, under condition of a lowered supply voltage.

1. Model of the transistor prototype

In the considered case the working area of the prototype of a double-gate symmetric SOI CMOS nanotransistor (fig. 1) consists of two parts (1 and 2) with different concentrations [11, 12].

At that, the following conditions concerning the topology are satisfied

$$L = L_1 + L_2$$
$$L_1 = L_2$$

and concentrations of alloying

$$N_{A_i} = \begin{cases} N_1, \, 0 \leq y \leq L_1 \\ N_2, \, L_2 < y \leq L \end{cases},$$

where N_1 — concentration of alloying of area I with length L_1 , N_2 — concentration of alloying of area 2 with length L_2 , L — length of the working area.

2. Minimization of the short-channel effects

In the planar transistor structures the characteristic length *l* serves as an indicator of the short-channel effects (SCE) [13]. The given parameter is a function of the thickness of the films forming the working area of a transistor. In a limiting case for a full suppression of SCE the condition of $L/l \gg 1$ should be implemented. An expression for the characteristic length is formed during solving of Poisson equation for the potential distribution in the working area of a concrete design of the transistor. The best compromise for minimization of SCE in the structure at the fixed values of the thickness of films t_g and t_s is the condition of L/l > 2, which is acceptable for the circuitry applications [14–16]. With reference to the considered model of the transistor the Poisson equation looks like the following:

$$\frac{\partial^2 \varphi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{q N_{A_j}(y)}{\varepsilon_S}, \qquad (1)$$

where $\varphi(x, y)$ — potential in the working area of the transistor; q — electron charge; ε_S — dielectric permeability of the working area

For an analytical solution of 2D Poisson equation it is necessary to complement the classical boundary conditions with the correlations of continuity of the potential and the electric fields on the boundary areas 1 and 2, in order to take into account the property of heterogeneity of alloying of the working area. For solving of the equation (1) we will use the boundary conditions:

$$\begin{split} \varphi(x, y)|_{x = 0} &= \varphi_f(y); \quad \varphi(x, y)|_{x = t_S} = \varphi_b(y); \\ \frac{\varepsilon_g}{t_g} \left(U_g - U_{FB} - \varphi_f(y) \right) &= -\varepsilon_S \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial x} \Big|_{x = 0}; \\ \frac{\varepsilon_g}{t_g} \left(U_g - U_{FB} - \varphi_b(y) \right) &= -\varepsilon_S \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial x} \Big|_{x = t_S}; \\ \varphi_1(x, 0) &= U_{bi}^{(S)}; \quad \varphi_2(x, L) = U_{bi}^{(D)} + U_{DS}; \\ \varphi_1(x, L) &= \varphi_2(x, L - L_1) = U_{bi}^{(c)}; \\ \frac{\partial \varphi_{f_1}(y)}{\partial y} \Big|_{y = L_1} &= \frac{\partial \varphi_{f_2}(y)}{\partial y} \Big|_{y = L - L_2}, \end{split}$$

where $\varphi_f(y)$ — frontal surface potential, $\varphi_b(y)$ — surface potential on the bottom surface; ε_g — dielectric permeability of the subgate oxide; U_g — gate voltage; U_{FB} — flat zone voltage; $U_{bi}^{(S)}$ — embedded potential difference at the source; $U_{bi}^{(D)}$ — embedded potential difference at the drain; $U_{bi}^{(c)}$ — embedded potential difference at the boundary of the nonuniformly alloyed areas; U_{DS} — drain-source voltage.

The expressions for the potential distribution on the $Si-SiO_2$ surfaces are a consequence of solving of the Poisson equation, which was received in approximation of separation of the variables [6]. In this case, the generalized expressions for the surface potentials can be presented in the following form:

$$\varphi_j(y) = U_{1j} \exp\left(\frac{y}{l}\right) + U_{2j} \exp\left(-\frac{y}{l}\right) - U_{0j}l^2, \qquad (2)$$

where
$$j = f$$
, b ; $l = t_S \sqrt{\frac{1 + C_0}{2k_S C_0 (2 + C_0)}}$; $C_0 = \frac{\varepsilon_S t_g}{\varepsilon_g t_S}$;

coefficients U_{1j} , U_{2j} , and U_{0j} are defined from the boundary conditions, k_S — parameter, which connects the derivative of the longitudinal electric field by the depth of the working area with the derivative of the longitudinal electric field on the frontal surface.

The received expression (2) allows us to calculate the distribution of the potential and of the electric field in the working area of the transistor, the threshold voltage, and the voltampere characteristics.

For definition of the area of the admissible values of the characteristic length we will consider restrictions on parameters t_S and t_g . As is known, the thickness of the working area influences the basic characteristics of a transistor. In view of the necessity to take into account the degradation effects, the quantum effects, scattering on the surface of the silicon-oxide boundary, influence of a random discrete impurity in the transistor channel, increase of resistance of the working area, the technological restrictions concerning creation of films

without defects [15, 16], the area of the values of t_s parameter should be limited by the range from 6 up to 10 nm. Thickness of the subgate dielectric from silicon oxide intended for control of SCE may not exceed 2 nm, while the quantum effects, in particular, the tunnel current through the gate, limit the minimal thickness by the value of 1 nm [1]. The values of the characteristic length within the range of the specified restrictions by parameters t_s and t_g are subjugated to the characteristic curves, which are presented in fig. 2.

Similarly, it is possible to present the dependences of $l(t_g)$ for the selected range of thicknesses of t_S . Thus, it is possible to calculate value *l* for any set of t_S , t_g from the area of the admissible values.

For illustration of the arguments presented above, the prototype of a double-gate symmetric SOI transistor was selected with parameters $L_g = 22 \text{ nm}$, $t_S = 7 \text{ nm}$, $t_{ox} = 1.3 \text{ nm}$, $N_1 = 1.0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_2 = 1.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. The maximal level of alloying of the drain/source was $5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Fig. 3 presents the calculated distribution of the surface potential in the working area of the transistor, which was compared with the data of modeling received by means of ATLASTM software package for 2D modeling of the transistor structures [17]. The results of the calculations and the modeling data are in good conformity.

From the results it follows, that the minimum of the surface potential is located in the high-alloyed area, approximately in the middle of the distance between the centre of the working area and the centre of the high-alloved area. A flat site partially occupies the low-alloved area. Generally, the kind of distribution of the potential is determined by the correlation of concentrations N_1 and N_2 . In case of a decrease of N_2 the potential minimum moves to the left, to zero (to the source). The difference between the minimal value of the potential and the potential corresponding to the flat part increases. In case of an increase of N_2 the flat part in the potential distribution disappears gradually, and the potential minimum moves to the right (to the drain). During alignment of the concentrations, the potential distribution corresponds accurately to the distribution of the potential for a uniformly alloyed case.

3. Algorithm for modeling of the transistor characteristics

Modeling of the characteristics of a symmetric doublegate SOI CMOS transistor with a longitudinal alloyed working area was carried out in two stages. Originally, on the basis of the analytical solution to Poisson 2D equation with the expanded boundary conditions, the potential distribution in the working area, surface potential, electric field, threshold voltage and subthreshold inclination were calculated and compared with the data of modeling of ATLASTM software [17].

For modeling of the volt-ampere characteristics (VAC) the model was used formulated within the framework of approximation of charge division [16], taking into account the modified expression for the speed of saturation and high field degradation. An expression for the current of a dual-gate SOI transistor follows from integration of the general kind equation on all the working area [16]. It is necessary to point out, that the concentration of the carriers and mobility of the carriers depend essentially on the potential distribution in the working area. At that, we neglect the influence of a fixed oxide charge in the mode of a strong inversion.

In the investigated architecture, in a general case, the key currents of the transistor (I_{on} and I_{OFF}), at the other identical technological parameters, depend on the concentration of alloying of each part of the working area and on their correlation. As an illustration, fig. 4 presents VAC of the selected transistor prototype.

In comparison with a similar symmetric double-gate SOI CMOS nanotransistor, but uniformly alloyed, current I_{on} is more than twice as high. The level of current I_{OFF} is approximately 5 times less. This is a precondition for an increase of the productivity of the electronic devices, the logic gates, in particular, in comparison with similar ones, but made on uniformly-alloyed transistors. High current I_{on} leads directly to a reduction of time for the gate switching. In order to achieve the maximal values of current I_{on} we should increase the concentration of N_1 up to the maximal possible level, and to lower the concentration of N_2 down to the minimal possible level. In the area of high concentrations the value of current I_{on} will increase proportionally: $I_{on} \cong \beta I_{on}^{(0)}$, where $I_{on}^{(0)}$ — current of saturation of the transistor with a uniformly alloyed working area, $\beta = \log(N_1/N_2)$. Current I_{OFF} increases incommensurably more, in a limiting case, approximately by two orders, therefore, it is possible to reach a certain optimal correlation of concentrations N_1 and N_2 . However, in selection of these parameters it is more reasonable to be guided by projects of microcircuits, where it is planned to apply the given transistors. For high-speed applications (HP circuits) it is possible to use correlation $I_{ON} > I_{ON HP}$, where $I_{ON HP}$ – parameter from ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductor [18]) for the given technological generation. For the circuits with a low level of static power (LSTP circuits) an important requirement is the level of current I_{OFF} . Therefore, an optimization can be done proceeding from the minimal value of N_2 , which is determined by the requirements of the selected technology. Further, it is possible to increase N_1 in order to raise current I_{on} and, hence, to increase the speed, and for a decrease of the influence on current I_{OFF} to raise the concentration of N_2 by several percent. Such iterations should be done controlling current I_{OFF} , so that $I_{OFF} < I_{OFF_LSTP}$, where I_{OFF_LSTP} — parameter from ITRS. Therefore, the considered transistor architecture allows us to receive technologically the transistors with different threshold voltages.

4. Switching time-delays

Let us analyze the influence on the delay of the gates, the inverter, in particular, and change of the alloy concentrations in the working area. For an ideal symmetric inverter an ac-

ceptable estimation of a delay will be [6]
$$\tau = \frac{CU_{ds}}{I_{on}}$$
, where

C — full equivalent capacity charged and discharged in a clock cycle. Then, taking into account the estimated correlation for the current of the transistor saturation, the expression for the delay we will, for example, be the following:

$$\tau = \beta^{-1} \tau_0, \tag{3}$$

where $\tau_0 = \frac{CU_{ds}}{I_{on}^{(0)}W}$, W – gate width.

From expression (3) it is visible, that the inverter delay depends in the inverse proportion on the correlation of the alloy concentrations. In this case coefficient β — is the steepness of

the control characteristic of the delay, on which the efficiency of the control depends.

Proceeding from the above stated technique, we will define two sets of parameters of the prototype of a dual-gate SOI CMOS transistor with the length of channel of 22 nm for various circuit applications. Type 1 is intended for HP applications, type 2 — for LSTP applications. Their key parameters are presented in table 1. The other technological parameters were selected in conformity with the recommendations formulated in [6, 16, 19].

The mathematical nucleus of HSPICE program [20] was used for modeling of the characteristics of the gates on the selected prototypes of transistors. Fig. 5 presents the static characteristics of the inverters.

Table 2 presents basic characteristics of the gates; switching time-delay τ ; power of one switching *P* at the frequency of 0.1 THz; level of the static power (*P_s*) at the supply voltage of 0.9 V.

Fig. 6 presents the calculated dependences of the switching delay of the gates of various types on the supply voltage.

From the presented data it is obvious that within the range of the supply voltages $0.8 \le U_{ds} \le 0.9$ V the time-delay of each gate practically does not depend on the value of the power supply. The level of U_{ds} , at which the time-delay begins to grow, for each gate is individual. At that, the values differ considerably. Both types of the inverters are characterized by $U_{ds} = 0.65$ V, which is the lowest of all the considered ones. The highest value of $U_{ds} = 0.8$ V was obtained for 2NAND gate made on transistors of type 2.

The presented results can be used for development of effective multi threshold circuitry during creation of low-voltage VLSI with a small power consumption. At the initial stage it is necessary to estimate the potential of the technology taking into account the possible spread of optimizations of the basic electrophysical characteristics of the transistors.

Conclusion

The numerical modeling allowed us to analyze the feasibility of the synthesis of the logic gates on the double-gate symmetric SOI CMOS nanotransistors with a step profile of alloying of the channel (considering from the source) — highalloy and low-alloy areas. Proceeding from the received analytical solution to 2D Poisson equation, the electrophysical characteristics of the transistors were numerically calculated. The results of the calculations of the potential distribution are in good conformity with the data of modeling received by means of commercially available ATLASTM software package for 2D modeling of the transistor structures.

With reference to the sub-25-nanometer double-gate SOI CMOS transistors, one of the possible approaches to development of the low-power electronics was considered. A method for selection of the technological parameters of the transistors was substantiated with account of their use for different circuit applications. By means of HSPICE program the dynamic characteristics of the gates of the inverter, 2NAND, 2NOR on two transistor prototypes were numerically investigated. At the supply voltage of 0.9 V the minimal delay of switching from all the gates corresponded to the inverter on transistors with low thresholds, the maximal delay was characteristic for the gate 2NAND on high threshold transistors, and it was more than 4 times higher than the minimal one. The given gate is characterized by the greatest active power, which on frequency of 0.1 THz exceeds 8 μ W. The minimal static power is 0.4 pW for the inverter on the high-threshold transistors.

In case of reduction of the supply voltage the delay of the gates behaves differently. For both types of the inverters up to voltage of 0.65 V it practically does not increase. At that, the power consumptions of the gates decrease approximately 2.5 times. The delay of the other gates is more sensitive to the supply voltage level. At that, the trend for a decrease of the power consumption remains. In aggregate this is a precondition for creation of a low-power circuitry functioning in the subterahertz range.

The work was done with support of the Basic Research Program of RAS N_{2} 43.35 NIR N_{2} 0065-2018-0006.

References

1. Colinge J. P. Solid-State Electronics, 2004, vol. 48, no. 3, pp. 897-909.

2. Widiez J., Lolivier J., Vinet M., Poiroux T., Previtali B., Dauge F., Moui M., Deleonibus S. *IEEE Trans. Electron Devices*, 2005, vol. 52, no. 5, pp. 1772–1781.

3. Martin J. S., Bournel A., Dollfus P. Solid-State Electronics, 2006, vol. 50, no. 1, pp. 94–101.

4. Reyboz M., Rozeau O., Poiroux T., Martin P., Jomaah P. J. Solid-State Electronics, 2006, vol. 50, no. 5, pp. 1276–1285.

5. Chung T. M., Olbrechts B., Sodervall U., Bengtsson S., Flandre D., Raskin J.-P., *Solid-State Electronics*, 2007, vol. 51, no. 1, pp. 231–239.

6. **Masal'sky N. V.** *Nano- i Microsystemnaya Technika*, 2010, vol. 18, no. 5, pp. 41–46 (in Russian).

7. Yin C., Chan C. H. P. *IEEE Trans. Electron Devices*, 2005, vol. 52, no. 1, pp. 85–90.

8. Cerdeira A., Alemán M. A., Pavanello M. A., Martino J. A., Vancaillie L., Flandre D. *IEEE Trans Electron Devices*, 2005, vol. 52, no. 5, pp. 967–972.

9. Tsai C. Solid-State Electronics, 2008, vol. 52, no. 2, pp. 365-371.

10. Kaur H., Kabra S., Bindra S., Haldar S., Gupta R. S. Solid State Electronics, 2007, vol. 51, no. 3, pp. 398–404.

11. Sharma R. K., Gupta R., Gupta M., Gupta R. S. Semiconductors Science Technology, 2008, vol. 23, no. 11, pp. 75041-75051.

12. Vasil'ev B. A., Orexov D. O., Chernov P. C. Nano- i Microsystemnaya Tekhnika, 2013, no. 11, pp. 10–14 (in Russian).

13. **Kranti A., Armstrong G. A.** *Solid-State Electronics*, 2006, vol. 50, no. 4, pp. 437–447.

14. **Masal'sky N. V.** *Mikroelektronika*, 2008, vol. 37, no. 6, pp. 470–480 (in Russian).

15. Kranti A., Hao Y., Armstrong G. A. Semiconductor Science and Technology, 2008, vol. 23, no. 2, pp. 45001-45011.

16. **Masal'sky N. V.** *Mikroelektronika*, 2012, vol. 41, no. 6, pp. 436–444 (in Russian).

17. **Silvaco Int.** 2004: ATLAS User's Manual A 2D numerical device simulator, available at: http://www.silvaco.com/.

18. **International** technology roadmap for semiconductor 2015 edition, available at: http://public.itrs.net.

19. Sze S. M. New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, A Wiley-Interscience Publication. 1981.

20. **Simulation** Program with Integrated Circuit Emphasis, available at: https://www.stanford.edu/class/ee101b/hspice.html/.

Д. М. Григорьев, мл. науч. сотр., e-mail: D.Grigorev@tcen.ru, **И. В. Годовицын,** канд. техн. наук, ст. науч. сотр., **В. В. Амеличев,** канд. техн. наук, нач. отдела, **А. В. Ильков,** канд. техн. наук, ст. науч. сотр., Федеральное государственное бюджетное научное учреждение "Научно-производственный комплекс "Технологический центр", Москва

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ АКУСТИЧЕСКОГО ОТВЕРСТИЯ НА АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНУЮ ХАРАКТЕРИСТИКУ МЭМС-МИКРОФОНА

Поступила в редакцию 07.03.2018

Параметры акустического отверстия существенно влияют на характеристики МЭМС-микрофона, в частности на амплитудно-частотную характеристику (АЧХ). Ввиду сложности конструкции корпуса для расчета АЧХ МЭМС-микрофона необходимо использовать конечно-элементное моделирование. В работе представлены результаты моделирования АЧХ МЭМС-микрофона с помощью структурно-акустического гармонического анализа в программе ANSYS. Исследовано влияние положения и формы акустических отверстий на АЧХ МЭМС-микрофона. Представлен анализ полученных результатов.

Ключевые слова: МЭМС, микрофон, амплитудно-частотная характеристика, конечно-элементное моделирование, акустическое отверстие, трехмерная модель, ANSYS, надмембранный объем, подмембранный объем, резонансная частота

Введение

Размер и положение акустического отверстия в корпусе существенно влияют на характеристики МЭМС-микрофона. Существуют два основных типа корпуса МЭМС-микрофона: с отверстием в основании и с отверстием в крышке [1]. В данной статье рассмотрена конструкция корпуса МЭМСмикрофона с отверстием в крышке.

Наибольшее влияние на АЧХ МЭМС-микрофона оказывают размеры подмембранного и надмембранного объемов [2]. Надмембранным объемом называется объем между акустическим отверстием и мембраной, подмембранным — объем за мембраной [3]. Акустическое отверстие и надмембранный объем образуют акустический резонатор.

Для достижения высоких характеристик МЭМСмикрофона необходимо, чтобы резонансная частота надмембранного объема была выше рабочего диапазона частот микрофона, так как резонансный пик в рабочем диапазоне увеличивает неравномерность АЧХ МЭМС-микрофона. Также увеличить резонансную частоту можно с помощью увеличения диаметра акустического отверстия. При уменьшении подмембранного объема уменьшается чувствительность. Влияние этих параметров хорошо описывается аналитическими формулами и приближенными моделями [4, 5].

В данной работе исследовано влияние положения и формы акустического отверстия на АЧХ МЭМС-микрофона. Ввиду сложности применения аналитического подхода для расчета влияния этих параметров на АЧХ МЭМС-микрофона использовано конечно-элементное моделирование.

1. Модель МЭМС-микрофона

Трехмерная модель МЭМС-микрофона (рис. 1) состоит из мембраны, закрепленной на упругих подвесах, неподвижного перфорированного электрода над ней и акустической среды в корпусе МЭМС-микрофона. Модель содержит несколько акустических отверстий, которые использовались поочередно.



Рис. 1. Модель МЭМС-микрофона: 1— отверстие рядом с капсюлем; 2— отверстие рядом с предусилителем; 3— отверстие сверху над МЭМС-капсюлем; 4— отверстие сверху над предусилителем; 5— отверстие над капсюлем вблизи края; 6— отверстие над предусилителем вблизи края; 7— отверстие сверху, в центре; 8— отверстие сверху, в углу; 9— отверстие рядом с предусилителем, у грани; 10— отверстие сверху, в центре, у грани

Fig. 1. MEMS microphone model: 1 - the port is near the capsule; 2 - the port is near the preamplifier; 3 - the port is above the MEMS capsule; 4 - the port is above the preamplifier; 5 - the port is above the capsule near the edge; 6 - the port is above the preamplifier near the edge; 7 - the port is above, in the center; 8 - the port is above in the corner; 9 - the port is near the preamplifier at a side; 10 - the port is above, in the centre, at a side



Рис. 2. Акустико-механическая модель МЭМС-капсюля Fig. 2. Acoustic-mechanical model of the MEMS capsule

Расчет проведен с помощью программного комплекса ANSYS. Для моделирования выбран связанный структурно-акустический гармонический анализ. Предполагается, что среда сжимаема и отсутствует перенос вещества [6].

В расчете использованы элементы SOLID187 для механической модели мембраны и FLUID221 для модели акустической среды в корпусе. Материал мембраны — поликремний; среда — воздух. Предполагается, что кристалл предусилителя, кристалл капсюля, стенки крышки и печатная плата недеформируемые и для экономии вычислительных ресурсов заданы граничными условиями. Также для экономии вычислительных ресурсов использовано условие симметрии (кроме моделей с отверстиями 8 и 10, для них рассчитывалась полная модель).

Для моделирования распространения акустических волн в воздушном зазоре между мембраной и электродом применяется приближение Low Reduced Frequency Model [7]. Для экономии ресурсов функция взаимодействия акустической среды и твердого тела включена только для воздушного зазора и воздушного слоя, контактирующего с мембраной (рис. 2).

Для описания условий отражения и преломления звука на границе воздушной среды ко всем внешним граням приложено граничное условие удельного акустического сопротивления:

$$Z = \rho c, \tag{1}$$

где Z— удельное акустическое сопротивление; ρ — плотность среды; c — скорость звука в среде.

2. Результаты моделирования МЭМС-микрофона

В результате моделирования получены распределения акустического давления в корпусе и деформация мембраны.

На рис. 3 представлено распределение давления в сечении корпуса с отверстием в центре на частоте 8 кГц.

На основе деформации мембраны построены АЧХ микрофона (рис. 4). Номера отверстий указаны в соответствии с рис. 1.

Как видно из полученных характеристик, резонансные частоты для моделей с акустическим отверстием сбоку, рядом с капсюлем 1, и сбоку, рядом с предусилителем 2, отличаются незначительно (4071 и 4077 Гц). Также это наблюдается для отверстий 5 и 6 (3892 и 3908 Гц), 3 и 4 (4140 и 4163 Гц). Максимальная резонансная частота наблюдается у модели с отверстием в центре 7 (4192 Гц). Резонансные частоты модели с отверстием рядом с предусилителем и модели с отверстием рядом с капсюлем совпадают. Резонансная частота уменьшается при приближении отверстия к граням крышки (характеристики 5, 6, 9 и 10). Минимальная резонансная частота у модели 8 с отверстием в углу (3625 Гц), т. е. резонансная частота уменьшается при приближении акустического отверстия к стенкам корпуса.

Также рассмотрено влияние формы акустического отверстия на АЧХ МЭМС-микрофона. Вы-



Рис. 3. Распределение давления в надмембранном объеме на частоте 8 кГц

Fig. 3. Pressure distribution in the front chamber at the frequency of 8 kHz



Рис. 4. Результаты моделирования Fig. 4. Simulation results



Рис. 5. Акустические отверстия различной формы Fig. 5. Shapes of the acoustic ports



Рис. 6. АЧХ МЭМС-микрофонов с отверстиями различной формы

Fig. 6. Frequency response of the MEMS microphones with various shapes of the acoustic ports

полнен расчет трех акустических отверстий с одинаковой площадью сечения и разной формой. Формы отверстий представлены на рис. 5.

На рис. 6 представлены результата расчета макетов с различной формой отверстия в центре корпуса.

Минимальная резонансная частота соответствует отверстию с круглым сечением. Для отверстия прямоугольного сечения резонансная частота увеличилась на 300 Гц. При уменьшении ширины отверстия резонансная частота возрастает (рис. 6). Максимальная резонансная частота наблюдается у модели с отверстием в виде узкой щели.

3. Анализ полученных результатов

В результате проведенного моделирования выявлено, что резонансная частота слабо зависит от положения акустического отверстия. Разница между вариантом δ с минимальной резонансной частотой и вариантом 7 с максимальной частотой составляет 567 Гц. Изменение резонансной частоты объясняется изменением присоединенной длины горла резонатора [8]. Присоединенная длина — это расчетный термин, выражающий влияние на резонансную частоту дополнительных инерционных сил, вызванных наличием в окрестности горла резонатора быстро затухающих неоднородных волн [9]. Резонансную частоту резонатора можно определить по формуле

$$f_0 = \frac{c}{2\pi} \sqrt{\frac{S_0}{l_e V}},\tag{2}$$

где *с* — скорость звука в среде; *V* — объем резонатора; S_0 — площадь поперечного сечения горла резонатора; $l_e = l + l_{np}$ — эффективная длина горла резонатора; *l* — действительная длина горла; l_{np} — присоединенная длина горла, которая состоит из присоединенной длины горла с внутренней l_i и внешней l_e сторон горла резонатора [8].

В работе [10] использован этот эффект для акустической системы с перемещаемым отверстием (фазоинвертором) для увеличения и уменьшения резонансной частоты корпуса громкоговорителя. Также в работе [10] представлены результаты измерений резонаторов с различным расположением входного акустического отверстия, подтверждающие этот эффект. Таким образом, зависимость резонансной частоты от положения отверстия можно использовать для точной подстройки резонансной частоты корпуса.

В данной работе рассмотрен корпус с одним отверстием, так как обычно в МЭМС-микрофонах используется именно одно отверстие диаметром 200...400 мкм. Увеличение размера отверстия позволяет увеличить резонансную частоту корпуса, однако повышает вероятность попадания пыли в надмембранный объем.

Увеличение резонансной частоты при узком входном отверстии объясняется тем, что воздух течет через отверстие в виде ламинарной жидкости, и скорость потока в центре круглого акустического отверстия значительно меньше, чем по краям [11]. Для узкой щели уменьшение скорости потока незначительно. Таким образом, у узкой щели возрастает эффективная площадь акустического отверстия, а при увеличении площади возрастает резонансная частота. В работе [12] представлено



Рис. 7. Различные варианты акустического отверстия [13] Fig. 7. Various shapes of the acoustics ports [13]

теоретическое обоснование влияния формы отверстия на проводимость.

В работе [13] предложены различные формы акустических отверстий для МЭМС-микрофонов, в том числе корпус с пятью узкими щелями (рис. 7). Главная цель авторов изобретения — защита капсюля от пыли и внешних воздействий.

Эффект влияния формы отверстия на резонансную частоту использовали известные скрипичные мастера [11]. Если в X веке скрипка имела в деке простое круглое акустическое отверстие (рис. 8, a, см. третью сторону обложки), то по мере эволюции и увеличения резонансной частоты оно становилось все более вытянутым и узким (рис. 8, b-e) и в XVI-XVIII веке приняло сложную f-образную форму (рис. 8, f). На рис. 8 (см. третью сторону обложки) скорость потока нормализована средней скоростью потока воздуха через круглое резонаторное отверстие.

Заключение

В работе представлен способ связанного структурно-акустического гармонического расчета характеристик МЭМС-микрофона. Рассмотрено влияние положения акустического отверстия на АЧХ. Установлено, что при приближении отверстия к граням корпуса уменьшается значение резонансной частоты, и это отрицательно влияет на характеристику микрофона. Максимальное значение резонансной частоты наблюдается у модели с акустическим отверстием в центре верхней поверхности корпуса.

Также выполнен расчет влияния формы отверстия на АЧХ. Установлено, что при одинаковой площади сечения модель с отверстием в форме щели имеет более высокое значение резонансной частоты, чем модель с отверстием круглой или прямоугольной формы. Таким образом, при разработке МЭМС-микрофона с помощью выбора параметров корпуса возможна корректировка АЧХ. Изменяя размер надмембранного объема, формы и положения акустических отверстий, возможно изменить резонансную частоту корпуса МЭМС-микрофона в широком диапазоне частот. Конечно-элементное моделирование позволяет провести точный расчет и достичь требуемых характеристик изделия на этапе проектирования.

Список литературы

1. Feiertag G., Pahl W., Winter M., Leidl A., Seitz S., Siegel C., Beer A. Flip chip MEMS microphone package with large acoustic reference volume // Procedia Engineering. 2010. Vol. 5. P. 355–358.

2. Widder J., Morcelli A. Basic principles of MEMS microphones. URL: http://www.edn.com/Pdf/ViewPdf?contentItem-Id=4430264

3. Амеличев В. В., Ильков А. В. Конструктивно-технологический базис создания электроакустических преобразователей. М.: Техносфера, 2012. 104 с.

4. Winter M., Feiertag G., Leidl A., Seidel H. Influence of a chip scale package on the frequency response of a MEMS microphone // Microsystem Technologies. 2010. Vol. 16, N. 5. P. 809–815.

5. Годовицын И. В., Генералов С. С., Поломошнов С. А., Сывороткин П. А., Амеличев В. В. Интегральный конденсаторный преобразователь акустического давления для миниатюрного МЭМС-микрофона // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 4. С. 43—50.

6. **ANSYS** Parametric Design Language Guide. Canonsburg: ANSYS Inc., 2013. 110 p.

7. **Beltman M.** Visco-Thermal Wave Propagating Including Acousto-Elastic Interaction. Ph. D. Thesis. University of Twente, Mechanical Engineering Department. 1998. 202 p.

8. Федотов Е. С., Пальчиковский В. В. Исследование работы резонатора Гельмгольца в волноводе прямоугольного сечения // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Аэрокосмическая техника. 2014. № 38. С. 107—126.

9. Аграфонова А. А., Комкин А. И. Анализ факторов, определяющих собственную частоту резонатора Гельмгольца // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2014. № 12. С. 220—231.

10. Shiozawa Y., Onitsuka H. Acoustic structure including helmholtz resonator: пат. 8731224 США. 2014.

11. Nia H. T., Jain A. D., Liu Y., Alam M. R., Barnas R., Makris N. C. The evolution of air resonance power efficiency in the violin and its ancestors // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2015. Vol. 471. N. 2175.

12. Noh S., Lee H., Choi B. A study on the acoustic energy harvesting with Helmholtz resonator and piezoelectric cantilevers // International Journal of Precision Engineering and Manufacturing. 2013. Vol. 14, N. 9. P. 1629–1635.

13. Watson J., Grosse D. T., Jacobs M. R., Schimpf W. F., Figueroa I. D. V. Ingress protection for reducing particle infiltration into acoustic chamber of a MEMS microphone package: пат. 9794661 США. 2017. D. M. Grigor'ev, Junior Researcher, D.Grigorev@tcen.ru, I. V. Godovitsyn, Ph. D., Senior Researcher,
V. V. Amelichev, Ph. D., Head of Department, A. V. Il'kov, Ph. D., Senior Researcher,
Scientific-Manufacturing Complex "Technological Centre" MIET, Moscow, 124498, Russian Federation

Corresponding author:

Grigor'ev Dmitriy M., Junior Researcher, Scientific-Manufacturing Complex "Technological Centre" MIET, Moscow, 124498, Russian Federation, e-mail: D.Grigorev@tcen.ru

The Influence of Acoustic Port Parameters on Frequency Response of MEMS-Microphone

Received on March 07, 2018 Accepted on April 02, 2018

The acoustic port parameters significantly influence on the MEMS-microphone characteristics in particular on its frequency response. It is necessary to use finite element modeling for calculating the frequency response of a MEMS microphone due to the complexity of its body design.

In this paper we have considered the influence of the acoustic port position on the frequency response of MEMS microphone by means of structural-acoustic harmonic analysis in ANSYS. It is shown that the front chamber resonant frequency decreases when acoustic holes are approaching to the walls of the package. We have also investigated the influence of the acoustic ports shape on the MEMS microphone frequency response. Three variants of the acoustic port shape are considered and it is shown that the resonant frequency is increasing while the hole width decreases. It is shown that the optimal shape of the acoustic inlet is a long narrow slit.

The dependence of the resonant frequency on the hole position and shape can be used for fine-tuning of the front chamber resonant frequency. Thus, by selecting the certain parameters of the MEMS-microphone body during its designing, it is possible to adjust the frequency response. Finite element modeling allows us to calculate accurately and achieve the required characteristics of the product at the design stage.

Keywords: MEMS, microphone, frequency response, finite element modeling, acoustic port, three-dimensional model, ANSYS, front chamber, back chamber, resonant frequency

For citation:

Grigor'ev D. M., Godovitsyn I. V., Amelichev V. V., Il'kov A. V. The Influence of Acoustic Port Parameters on Frequency Response of MEMS-Microphone, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 491–497.

DOI: 10.17587/nmst.20.491-497

Introduction

The size and position of the acoustic port in the body influence the characteristics of the MEMS microphone. There are two main kinds of bodies for a MEMS microphone: with a port in the base and with a port in the lid [1]. This article is devoted to the MEMS microphone design with a port in the lid.

The greatest influence on the frequency response of a MEMS microphone is rendered by the sizes of the front chamber and the back chamber [2]. The front chamber is the volume between the acoustic port and the diaphragm, and the back chamber is the volume behind the diaphragm [3]. The acoustic port and the front chamber form an acoustic resonator.

For achievement of high characteristics of the MEMS microphone, the resonant frequency of the front chamber should be higher than the working range of the microphone frequencies, because the resonant peak in the working range increases the non-uniformity of the frequency response of the MEMS microphone. The resonant frequency can also be increased due to a bigger diameter of the acoustic port. A reduction of the back chamber lowers the sensitivity. Influence of these parameters is described well by the analytical formulas and the approximated models [4, 5].

The work presents a study of the influence of the position and the form of an acoustic port on the frequency response of the MEMS microphone. In view of the complexity of the analytical approach, for calculation of the influence of these parameters on the frequency response of the MEMS microphone, the finite-element modeling was used.

1. MEMS microphone model

A three-dimensional model of the MEMS microphone (fig. 1) consists of a diaphragm fixed on elastic suspensions, a motionless perforated electrode over it, and an acoustic environment in the body of the MEMS microphone. The model contains several acoustic ports, which were used in turn.

Calculation was done by means of ANSYS software complex. For modeling the linked structural-acoustic harmonious analysis was chosen. It was assumed, that the environment could be compressed and there was no mass transfer [6].

The calculation used elements of SOLID187 for the mechanical model of the diaphragm and of FLUID221 for the model of the acoustic environment in the body. The material of the diaphragm was polysilicon; the environment was air. It was assumed, that the preamplifier crystal, the capsule crystal, the walls of the lid and the printed-circuit board were warpfree and for economy of the computing resources were set by the boundary conditions. Also for the purpose of saving of the computing resources the symmetry condition was used (except for the models with the ports of 8 and 10, for them a full model was calculated).

Low Reduced Frequency approximation was applied for modeling of the propagation of the acoustic waves in the air gap between the diaphragm and the electrode [7]. For the purpose of saving of the resources, the function of interaction of the acoustic environment and solid body was used only for the air gap and the air layer contacting with the diaphragm (fig. 2).

For description of the conditions of reflection and refraction of sound, on the boundary of the air environment, the boundary condition of the acoustic resistance was applied to all the external sides:

$$Z = \rho c, \tag{1}$$

where Z – acoustic resistance; ρ – density of the environment, c – speed of sound in the environment.

2. The simulation results of MEMS-microphone

As a result of modeling the distributions of the acoustic pressure in the body and deformation of the diaphragm were received.

Fig. 3 presents the pressure distribution in section of the body with a port in the centre on the frequency of 8 kHz.

On the basis of deformation of the diaphragm the frequency response of the microphone was constructed (fig. 4). The numbers of ports are specified in conformity with fig. 1.

As one can see from the received characteristics, the resonant frequencies for the models with an acoustic port on the side, next to capsule I and on the side, next to preamplifier 2, differ insignificantly (4071 and 4077 Hz). The same is observed for ports 5 and 6 (3892 and 3908 Hz), 3 and 4 (4140 and 4163 Hz). The maximal resonant frequency is observed in the model with a port in the centre 7 (4192 Hz). The resonant frequencies of the model with a port next to the preamplifier and of the model with a port next to the capsule coincide. The resonant frequency decreases, when the port approaches the facets of the lid (characteristics 5, 6, 9 and 10). Model 8 with a port in the corner (3625 Hz) has the minimal resonant frequency i.e. the resonant frequency decreases, when the acoustic port approaches to the body's walls.

The influence of the form of an acoustic port on the frequency response of the MEMS microphone was also considered. Calculations of three acoustic ports with the identical areas of section and different forms were done. The forms of the ports are presented in fig. 5.

Fig. 6 presents the results of calculation of the breadboard models with various forms of a port in the centre of their bodies.

The minimal resonant frequency corresponds to the port with a round section. For the port of a rectangular section the resonant frequency increased by 300 Hz. With a reduction of the width of the port, the resonant frequency increased (fig. 6). The maximal resonant frequency was observed in the model with the port in the form of a narrow slit.

3. Analysis of the results

As a result of modeling it was revealed, that the resonant frequency depends little on the position of an acoustic port. The difference between version ϑ with the minimal resonant frequency and version 7 with the maximal frequency equals to 567 Hz. Variation of the resonant frequency is explained by a change in the attached length of the resonator throat [8]. The attached length is a calculation term expressing the influence on the resonant frequency of the additional inertial forces caused by presence of the quickly fading non-uniform waves in the vicinity of the resonator throat [9]. The resonant frequency of the resonator can be calculated under the following formula:

$$f_0 = \frac{c}{2\pi} \sqrt{\frac{S_0}{l_e V}},\tag{2}$$

where c — speed of sound in the environment; V — resonator volume; S_0 — area of the cross-section of the resonator throat; $l_e = l + l_{np}$ — effective length of the resonator throat; l — actual length of the throat; l_{np} — attached length of the throat, which consists of the attached length of the throat from the internal l_i and external l_e sides of the resonator throat [8]. In [10] this effect was used for the acoustic system with a relocatable port (phase inverter) for an increase and reduction of the resonant frequency of the body of the loudspeaker. The results of measurements of the resonators with different positions of the input ports, confirming this effect, are also presented in [10]. Thus, the dependence of the resonant frequency on the position of the port can be used for a fine tuning of the resonant frequency of the body.

The given work presents a body with one port, because usually one port with diameter of $200...400 \ \mu m$ is used in the MEMS microphones. A bigger size of the port allows us to increase the resonant frequency of the body, however, it raises the possible appearance of dust in the front chamber.

The increase of the resonant frequency at a narrow entrance port is explained by the fact that the air flows through the port in the form of a laminar liquid and the speed of the flow in the centre of the acoustic port is considerably less, than in the area along the edges [11]. For a narrow slit a reduction of the speed of the flow is insignificant. Thus, at an narrow slit the effective area of the acoustic port increases, and with the area increase the resonant frequency grows. In [12] a theoretical substantiation of the influence of the form of a port on the conductivity is presented.

In [13] various forms of acoustic ports for the MEMS microphones, including a body with five narrow slits (fig. 7), are offered. The main objective of the holders of the inventors is protection of the capsule against the dust and the external influences.

The effect of influence of the form of a port on the resonant frequency was used by the known violin masters [11]. If in the 10th century a violin had a simple round acoustic port in its deck (fig. 8, *a*, see the 3rd side of cover), in the process of evolution and increase of the resonant frequency it became more and more extended and narrow (fig. 8, *b*—*e*, see the 3rd side of cov-er), and in 16—18th centuries it acquired a complex *f*-shaped form (fig. 8, *f*, see the 3rd side of cover). Fig. 8 (see the 3rd side of cover) presents the speed of a flow normalized by the average speed of the air flow through a round resonant port.

Conclusion

The work presents a method of the linked structurallyacoustic harmonious calculation of characteristics of a MEMS microphone. The influence of the position of an acoustic port on the frequency response is also considered. It was established, that the port's approach to the body sides decreased the value of the resonant frequency and influenced negatively the microphone's characteristics. The maximal value of the resonant frequency was observed in the model with an acoustic port in the centre of the top surface of the body.

Also a calculation was done of the influence of the form of a port on the frequency response. It was established, that at the identical section areas the model with a port in the form of a slit had a higher value of the resonant frequency, than the model with the port of a round or rectangular form.

Thus, during development of a MEMS microphone it is possible to adjust the frequency response by means of selection of the parameters of its body. Variation of the size of the front chamber, of the forms and positions of the acoustic ports, allows us to change the resonant frequency of the body of the MEMS microphone in a wide range of frequencies. The finite-element modeling allows us to implement an accurate calculation and reach the demanded characteristics of a product at the stage of its designing.

References

1. Feiertag G., Pahl W., Winter M., Leidl A., Seitz S., Siegel C., Beer A. Flip chip MEMS microphone package with large acoustic reference volume, *Procedia Engineering*, 2010, no. 5, pp. 355–358.

2. **Widder J., Morcelli A.** Basic principles of MEMS microphones, available at: http://www.edn.com/Pdf/ViewPdf?contentItemId=4430264

3. Amelichev V. V., Il'kov A. V. Konstruktivno-tehnologicheskij bazis sozdanija jelektroakusticheskih preobrazovatelej (Constructive-technological basis of creation of electroacoustic transducers), Moscow, Tehnosfera, 2012, 104 p. (in Russian).

4. Winter M., Feiertag G., Leidl A., Seidel H. Influence of a chip scale package on the frequency response of a MEMS microphone, *Microsystem Technologies*, 2010. vol. 16. no. 5. pp. 809–815.

5. Godovicyn I. V., Generalov S. S., Polomoshnov S. A., Syvorotkin P. A., Amelichev V. V. *Nano- i mikrosistemnaja tehnika*. 2014, no. 4, pp. 43–50 (in Russian).

6. **ANSYS** Parametric Design Language Guide. Canonsburg: ANSYS Inc., 2013. 110 p.

7. **Beltman W. M.** Viscothermal wave propagation including acousto-elastic interaction, Ph. D. Thesis, University of Twente, Enschede, 1998, 202 p.

8. Fedotov E. S., Pal'chikovskii V. V. Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Aerokosmicheskaya tekhnika, 2014, vol. 38, no. 3, pp. 107–126 (in Russian).

9. Agrafonova A. A., Komkin A. I. Nauka i obrazovanie: nauchnoe izdanie MGTU im. NE Baumana, 2014, no. 12, pp. 220–231 (in Russian).

10. Shiozawa Y., Onitsuka H. Acoustic structure including helmholtz resonator: Patent USA 8731224. 2014.

11. Nia H. T., Jain A. D., Liu Y., Alam M. R., Barnas R., Makris N. C. The evolution of air resonance power efficiency in the violin and its ancestors, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2015, vol. 471. no. 2175.

12. Noh S., Lee H., Choi B. A study on the acoustic energy harvesting with Helmholtz resonator and piezoelectric cantilevers, *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 2013. vol. 14. no. 9. pp. 1629–1635.

13. Watson J., Grosse D. T., Jacobs M. R., Schimpf W. F., Figuero, I. D. V. Ingress protection for reducing particle infiltration into acoustic chamber of a MEMS microphone package. U. S. Patent No. 9794661. 17 Oct. 2017.

УДК 536.8

DOI: 10.17587/nmst.20.497-504

В. В. Аристов, д-р физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. РАН, гл. науч. сотр., e-mail: aristov@iptm.ru, **А. В. Никулов,** канд. физ. мат. наук, ст. науч. сотр., e-mail: nikulov@iptm.ru,

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, 142432, г. Черноголовка, Московская обл.,

А. П. Перминов, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., e-mail: perminov@binep.ac.ru, Филиал Института Энергетических Проблем Химической Физики РАН, 142432, г. Черноголовка, Московская обл.

ВОЗМОЖНЫЙ СПОСОБ УВЕЛИЧЕНИЯ РАБОЧЕГО НАПРЯЖЕНИЯ ТЕРМОЭМИССИОННЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ЭНЕРГИИ

Поступила в редакцию 16.02.2018

Рассмотрена возможность повышения рабочего напряжения термоэмиссионных преобразователей энергии с помощью магнитного поля, "прижимающего" электроны к поверхности диэлектрика. Вычислено напряжение между коллектором и эмиттером, создаваемое тепловым движением электронов, при данных значениях тока эмиссии, сопротивления нагрузки, магнитного поля и расстояния между эмиттером и коллектором. Предложен способ увеличения этого напряжения. При вычислениях использованы стандартное распределение частиц по скоростям и углам вылета после десорбции и известные формулы, описывающие траектории движения электронов в скрещенных магнитном и электрическом полях.

Ключевые слова: термоэмиссионный преобразователь энергии, термоэлектронная эмиссия, тепловое движение электронов в вакууме при наличии магнитного поля, адсорбции и десорбции с поверхности диэлектрика

Введение

Термоэмиссионные преобразователи энергии (ТЭП) используют для непосредственного преобразования тепловой энергии в электрическую энергию на основе явления термоэлектронной эмиссии [1—3]. По роду источника теплоты различают ядерные (реакторные и радиоизотопные), солнечные и газопламенные ТЭП. В ядерных ТЭП [4] используется теплота, выделяющаяся в результате реакции ядерного деления (в реакторных ТЭП) или распада радиоактивного изотопа (в радиоизотопных). В 1970 г. в СССР создан первый в мире термоэмиссионный преобразователь-реактор "Топаз" электрической мощностью около 10 кВт [5]. В электрическую энергию с помощью ТЭП может также преобразовываться энергия излучения солнечного (с применением Гелиоконцентраторов) или лазерного [6]. Газопламенные ТЭП работают на теплоте, выделяющейся при сжигании органического топлива. По сравнению с традиционными электромашинными преобразователями важным преимуществом ТЭП являются отсутствие в них движущихся частей, компактность, высокая надежность, возможность эксплуатации без систематического обслуживания. Их более широкому применению препятствует относительно малое значение электрического напряжения. ТЭП, у которых будет устранен этот недостаток, могут найти более широкое применение, включая микросистемную технику. В данной работе рассматривается возможный способ увеличения рабочего напряжения ТЭП.

Принцип работы ТЭП

Как известно, работа ТЭП основана на явлении термоэлектронной эмиссии (эффекте Эдисона) испускании электронов нагретым металлическим эмиттером (катодом). Плотность тока эмиссии определяется формулой Ричардсона — Дешмана:

$$j_{tem} = AT^2 \exp\left(-\frac{e\varphi}{k_B T}\right),\tag{1}$$

где $e\phi$ — работа выхода; $A \approx A_0(1 - R_e)$; R_e — коэффициент отражения электрона от потенциаль-



Рис. 1. Электроны, вылетающие из эмиттера, которым является катод (cathode), в большем количестве, чем из коллектора, являющемся анодом (anode), когда температура катода больше, чем у анода ($T_k > T_a$) и работы выхода равны $e\phi_k = e\phi_a$, не могут подняться в потенциальном электрическом поле на высоту, большую их кинетической энергии $E_k = m v_k^2 / 2$. Поэтому разность потенциалов Vka между анодом и катодом не может существенно превысить $k_B T_k / e$ даже при небольшом токе I_{load} нагрузки (load), так как кинетическая энергия теплового движения большей части электронов не превышает $\kappa_B T_k$, а электроны с $E_k \leq eV_{ka}$ не могут долететь до анода. Поэтому мощность нагрузки $W_{load} \leq I_{k,a} V_{ka}$ не может превысить $I_k k_B T_k / e$, где $I_k = S j_k$ — ток эмиссии катода Fig. 1. The electrons, which depart from the emitter (cathode), in a bigger quantity than from the collector (anode), when the temperature of the cathode is higher than that of anode $T_k > T_a$ and the work functions are equal to $e\varphi_k = e\varphi_a$, cannot elevate in the potential electric field to a height exceeding their kinetic energy $E_k = mv_k^2/2$. Therefore, the potential difference V_{ka} between the anode and the cathode cannot exceed considerably $k_B T_k/e$, even at a small load current I_{load} , because the kinetic energy of the thermal movement of most of the electrons does not exceed $\kappa_B T_k$, while the electrons of $E_k \leq eV_{ka}$ cannot reach the anode. Therefore, the load power $W_{load} \leq I_{k,a}V_{ka}$ cannot exceed $I_kk_BT_k/e$, where $I_k = Sj_k - emission$ current of the cathode

ного барьера; $A_0 = 4\pi mek_B^2/h^3 \approx 1.2 \cdot 10^6 \text{ A/m}^2\text{K}^2$ константа Ричардсона; k_B — константа Больцмана; *h* — константа Планка [7]. При одинаковой работе выхода катода и анода $e\phi_k = e\phi_a = e\phi$ ток из эмит-тера много больше тока из коллектора $j_{tem, k} =$ = $A T_k^2 \exp(-e\varphi/k_B T_k) \gg j_{tem, a} = A T_a^2 \exp(-e\varphi/k_B T_a)$, при относительно небольшой разности температур между ними: $T_k > T_a$. Например, при температуре эмиттера (катода) $T_k^{"} = 2000$ К и $e\varphi = 3$ эВ $\approx 3 k_B$ 11 605 K = k_B 34 815 K токи различаются в 100 раз при температуре коллектора (анода) $T_a \approx 1620$ К. Но разность потенциалов в этом случае не может существенно превысить $V_{ka} \approx k_B T_k / e$ даже при небольшом токе нагрузки (рис. 1), так как у большей части электронов кинетическая энергия у катода не превышает $k_B T_k$ и они не могут подняться в потенциальном поле на высоту, большую $k_B T_k / e$, которая мала при реальных температурах, например $k_B T_k / e \approx 0,17$ В при $T_k = 2000$ К.

Поэтому в ТЭП, используемых в настоящее время, рабочее напряжение увеличивается за счет контактной разности потенциалов $V_{con} = \varphi_k - \varphi_a$ [1]. Для этого эмиттер изготовляют из металла с большей работой выхода, чем у металла коллектора $e\phi_k > e\phi_a$. При этом в отличие от случая, когда $e\varphi_k = e\varphi_a$, эмиттер заряжается отрицательно, а коллектор положительно за счет контактной разности потенциалов V_{соп} между металлами с разной работой выхода в месте их непосредственного электрического контакта, замыкающего электрическую цепь на нагрузку. Кинетическая энергия электронов в этом случае не уменьшается, а увеличивается при движении в вакууме от эмиттера к коллектору. При отсутствии разности температур между эмиттером и коллектором напряжение на нагрузке и ток отсутствуют. Для работы ТЭП эмиттер нагревается, а коллектор охлаждается. Максимально возможное напряжение на нагрузке равно контактной разности потенциалов $V_{con} = \varphi_k - \varphi_a$ [1]. Напряжение на нагрузки реальных ТЭП обычно не превышает 1 В. Мощность, представляющая практический интерес, получается за счет большой плотности тока с единицы поверхности эмиттера, порядка десятков ампер на квадратный сантиметр.

"Лесенка" для электронов

В известных ТЭП используется контактная разность потенциалов, так как электроны с энергией $k_B T_k \approx 0,17$ эВ не могут подпрыгнуть в потенциальном поле на высоту даже в 1 В (рис. 1), так же как человек не может подпрыгнуть на высоту 5 м. Но человек может подняться на 5 м и выше по лестнице. В данной работе мы фактически рассматриваем "лесенку" для электронов (рис. 2). Тепловое движение электронов, в отличие от движения человека, целеустремленно поднимающего-

ся по лестнице, является хаотичным. Но в магнитном поле это движение не является совсем хаотичным. Когда длина свободного пробега электронов больше ларморовского радиуса $l_{mfp} \gg r_g = mv_{\perp}/eB$, все они движутся по кругу, лежащему в плоскости, перпендикулярной магнитному полю В, в одном направлении (рис. 2); *т* и *е* — масса и заряд электрона; v₁ — проекция тепловой скорости электрона на плоскость, перпендикулярную В. При реальных значениях магнитного поля B ≥ 0,01 Т и скорости теплового движения электронов $v_p \approx (2k_BT/m)^{1/2} \le 2,5 \cdot 10^5$ м/с при $T \le 2000$ К ларморовский радиус не превышает значения $r_g \leq mv_p/eB \approx 150$ мкм. Поэтому для выполнения условия $l_{mfp} \gg r_g$ не требуется создания сверхвысокого вакуума. Движение в магнитном поле не изменяет энергии, так как сила Лоренца $F_L = vB$ перпендикулярна скорости электрона. Но сила Лоренца может "прижимать" электроны к диэлектрической поверхности и таким образом создать для них "лесенку" (рис. 2).

Движение электронов в скрещенных магнитном и электрическом полях

При отсутствии разности потенциалов между эмиттером и коллектором электроны, вылетевшие из эмиттера, должны двигаться в вакууме по кругу (рис. 2). Их траектория в плоскости ху, перпендикулярной **B** = $(0i_x, 0i_v, Bi_z)$, после вылета при t = 0с плоской поверхности уг под углом θ_v к направлению х в плоскости ху описывается выражениями $x = \sin(\theta_v + t) - \sin\theta_v$ и $y = \cos\theta_v - \cos(\theta_v + t)$. В данных выражениях в качестве единицы длины использован ларморовский радиус $r_g = mv_{\perp}/eB$, а единица времени — величина $1/\omega = m/eB = r_g/v_{\perp}$, обратная ларморовской частоте $\omega = eB/m$. Положение центра круга $x = -\sin\theta_v$, по которому движутся электроны относительно поверхности диэлектрика x = 0, определяется углом вылета θ_v . Проекция скорости v₇, направленная вдоль магнитного поля, остается неизменной после десорбции и $z = v_z t$. Электроны могут вылететь под любым углом θ относительно направления x, перпендикулярного поверхности диэлектрика. Вероятность Р распределения электронов по скоростям v и углам вылета в после десорбции может быть описана стандартной формулой

$$P = P_0 v^2 \cos\theta \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right).$$
(2)

Углы θ , θ_y связаны соотношением $\sin\theta_y = \sin\theta\cos\theta_z$, где угол $\theta_z = \arctan(v_z/v_y)$ определяет направление проекции скорости на плоскость *уг.* Пока отсутствует разность потенциалов, $V_{ka} = 0$, все электроны, вылетевшие с плоской поверхности диэлектрика под углами $0.5\pi > \theta_y > -0.5\pi$, должны



Рис. 2. Слева показан случай теплового движения электронов от эмиттера 1 к коллектору 2 в магнитном поле, направленном вдоль z, перпендикулярно плоскости рисунка, вдоль поверхности диэлектрика 3 в случае отсутствия разности потенциалов Vka. В этом случае электроны, двигаясь по кругу, должны вернуться на поверхность при любом угле вылета θ_v . Справа показано, что электроны, вылетевшие из эмиттера 1, попадают на поверхность диэлектрика под действием прижимающего поля E_{x1}, создаваемого небольшой разностью потенциалов V1. После каждого последующего акта десорбции они должны подниматься к коллектору 2, двигаясь в магнитном и электрическом полях по траекториям, описываемым формулами (3), в системе координат x' - y', повернутой на угол $\varphi = -\arctan(E_{x2}/E_v)$, где E_{x2} — прижимающее электрическое поле, созданное разностью потенциалов V_2 ; $E_y \approx V_{ka}/l_{ka}$ — электрическое поле, созданное электронами, поднявшимися от эмиттера 1 к коллектору 2, вдоль поверхности диэлектрика 3

Fig. 2. To the left the case is presented of the thermal movement of the electrons from the emitter 1 to collector 2 in the magnetic field along *z*, perpendicularly to the plane of the figure, along the surface of dielectric 3 in absence of the potential difference V_{ka} . In this case the electrons moving in circle must come back to the surface at any angle of departure θ_y . To the right the case is presented when the electrons, which departed from emitter 1 come to the surface of the dielectric under the influence of the pressing field E_{x1} , created by the potential difference V_1 . After each subsequent act of desorption they have to rise to collector 2, moving in the magnetic and electric fields by the trajectories described by formulas (3) in system of co-ordinates x' - y' turned by the angle of $\varphi = -\arctan(g(E_{x2}/E_y))$, where E_{x2} — the pressing electric field, created by the potential difference V_2 . $E_y \approx V_{ka}/l_{ka}$ — the electror 2 along the surface of dielectric 3

вернуться на поверхность (рис. 2 слева) и таким образом подняться по "лесенке" от эмиттера к коллектору. Перемещение электронов создаст разность потенциалов V_{ka} и электрическое поле $E_y \approx V_{ka}/l_{ka}$ между эмиттером и коллектором. Движение заряженных частиц в скрещенных полях подробно описано, например, в § 22 работы [8]. Следуя данному описанию, получаем выражения

 $x = (\cos\theta_v + \varepsilon)\sin t - \sin\theta_v (1 - \cos t) - \varepsilon t; \quad (3a)$

$$y = \sin\theta_v \sin t + (\cos\theta_v + \varepsilon)(1 - \cos t),$$
 (3b)

в которых появился новый член $\varepsilon = E_v / v_\perp B$, описывающий влияние электрического поля на траекторию электрона после десорбции при t = 0 под углом θ_{v} . Траектории, описываемые выражениями (3), таковы, что при ε ≥ 0 все электроны, вылетевшие под любыми углами $0,5\pi > \theta_v > -0,5\pi$ с плоской поверхности, должны вернуться на эту поверхность. Электроны, поднявшиеся от эмиттера к коллектору, создают электрическое поле $E_v \approx V_{ka}/l_{ka}$, соответствующее ε < 0. Используя выражения (3), можно вычислить углы вылета θ_v , при которых электрон вернется на поверхность, для каждого значения $\varepsilon < 0$. Например, если $\varepsilon \approx -0,01$, электрон вернется на поверхность при $0.5\pi > \theta_v > -0.39\pi$; если $\varepsilon \approx -0.05$ — при $0.5\pi > \theta_v > -0.26\pi$; если $\varepsilon \approx -0,1$ — при 0,5 $\pi > \theta_{v} > -0,14\pi$; если $\varepsilon \approx -0,18$ при $0.5\pi > \theta_v > 0$. Используя эти значения и стандартное распределение по углам вылета в (2), вычисляем вероятность $P_1(\varepsilon)$ возвращения электрона на поверхность в одном цикле: $P_1 \approx 0,9955$ при $\varepsilon \approx -0.01; P_1 \approx 0.954$ при $\varepsilon \approx -0.05; P_1 \approx 0.843$ при $\varepsilon \approx -0,1; P_1 \approx 0,5$ при $\varepsilon \approx -0,18$. Часть электронов $(1 - P_1)$ не вернутся на поверхность и улетят от нее прочь, двигаясь по трохоиде вдоль x [8] согласно (3). Это означает, что после N циклов адсорбции — десорбции у поверхности останется только $P_N = P_1^N$ часть электронов, вылетевших из эмиттера.

Увеличение потенциальной энергии электронов в циклах десорбция — свободное движения адсорбция

При каждом из циклов адсорбции — десорбции электрон поднимается на высоту *h* и его потенциальная энергия возрастет на величину $eV_r \approx eh|E_y|$. Так как высота подъема равна в среднем ларморовскому радиусу $r_g = mv_{\perp}/eB$, потенциальная энергия между десорбцией и последующей адсорбцией увеличится в среднем на $eV_r \approx eh|E_y| \approx mv_{\perp}^2|E_y|/v_{\perp}B = |\varepsilon|mv_{\perp}^2$. Величина $mv_{\perp}^2/2$ равна 2/3 средней кинетической энергии теплового движения $3k_BT/2$. Следовательно, потенциальная энергия в среднем увеличивается на $eV_r \approx |\varepsilon|2k_BT$ за цикл десорбции — свободного движения T = 2000 К это соответствует уве-

личению потенциала электронов на $V_r \approx |\varepsilon|0,34$ В за цикл. Двигаясь от эмиттера к коллектору, электроны создадут разность потенциалов V_{ka} и электрическое поле E_y , равное $\approx V_{ka}/l_{ka}$, при равномерном изменении разности потенциалов на расстоянии l_{ka} от эмиттера до коллектора. С увеличением V_{ka} доля электронов $P_N = P_1^N \approx P_1^{Vka/Vr}$, достигающих коллектор, будет уменьшаться, но останется не нулевой. При сопротивлении нагрузки R_l и токе эмиссии катода I_k напряжение стабилизируется при $V_{ka} = R_l I_a \approx R_l I_k P_1^{Vka/Vr}$.

Для экспериментальной проверки принципиальной возможности получить разность потенциалов больше 1 В (но не для применения) сопротивление нагрузки R₁ может быть большим. Вероятность $P_N \approx P_1^{Vka/Vr}$ того, что электрон долетит от эмиттера к коллектору при $V_{ka} = 1$ В и $V_r \approx |\varepsilon|0,34$ B, равна, согласно приведенным выше результатам, $P_N \approx P_1^N \approx 0.9955^{294} \approx 0.26$ при $\varepsilon \approx -0.01$; $P_N \approx 0.954^{58,8} \approx 0.063$ при
є $\approx -0.05; \ P_N \approx 0.843^{29,4} \approx$ ≈ 0,0066 при є ≈ $-0,1; P_N \approx 0,5^{16} \approx 0,000015$ при ε ≈ -0,18. Таким образом, отношение тока коллектора к току эмиттера I_a/I_k должно увеличиваться с уменьшением |ɛ|, т. е. с увеличением числа циклов $N \approx V_{ka}/V_r$ при заданном значении V_{ka} . Величина є определяется расстоянием между эмиттером и коллектором l_{ka} , ларморовским радиусом r_g , током эмиссии I_k и сопротивлением нагрузки R_l . Чтобы наблюдать напряжение $V_{ka} > 1$ В при T = 2000 К и B = 0.01 T, произведение тока эмиттера на сопротивление нагрузки $R_l I_k$ и число циклов N должны быть равны: $R_l I_k > 3,8$ В, $N \approx 294$ при $\varepsilon \approx -0,01$; $R_l I_k > 16$ В, $N \approx 59$ при
є $\approx -0,05;~R_l I_k > 151$ В, $N \approx 30$ при $\varepsilon \approx -0,1$; $R_l I_k > 66667$ В, $N \approx 16$ при $\varepsilon \approx -0,18$. Эти оценки свидетельствуют о реальной возможности наблюдения напряжения V_{ka} > 1 В. Число циклов $N \approx 294$ соответствует расстоянию между эмиттером и коллектором $l_{ka} \approx 44$ мм при ларморовском радиусе $r_g \approx 150$ мкм. Значение $R_l I_k > 3,8$ В можно обеспечить даже при очень небольшом токе эмиссии $I_k \approx 3,8$ мкА, используя сопротивление нагрузки $R_l > 1$ МОм.

Способ увеличения доли электронов, достигающих коллектора

Для увеличения доли электронов, достигающих коллектора, т. е. отношения I_k/I_a при увеличении рабочего напряжения V_{ka} , можно использовать постоянное электрическое поле E_{x2} , прижимающее электроны к поверхности диэлектрика (рис. 2). Чтобы оценить действие прижимающего поля E_{x2} ,

следует принять во внимание, что движение электронов после десорбции будет по-прежнему описываться уравнениями (3), если повернуть систему координат на угол $\varphi = -\arctan(E_{x2}/E_y)$. В новой систе-ме координат суммарное поле $E_2 = -(E_{x2}^2 + E_y^2)^{1/2}$ будет направлено вдоль координаты y' (рис. 2). В старых координатах электроны вылетают с поверхности под углами $0.5\pi > \theta_v > -0.5\pi$, а в новых координатах под углами $0,5\pi - \phi > \theta_{v'} > -0,5\pi - \phi$. Электроны, вылетевшие под углами $\dot{\theta}_{v} > -0.5\pi$, будут двигаться по траекториям, соответствующим углам вылета $\theta_{\nu'} > -0,5\pi - \phi$ (рис. 2). Это означает, что на поверхность вернется больше электронов при том же значении разности потенциалов V_{ka} между эмиттером и коллектором, когда есть прижимающее поле. Например, при значениях электрических полей $E_y \approx V_{ka}/l_{ka}$ и E_{x2} , соответствующих углу $\varphi = -\arctan(E_{x2}/E_y) = -0.36\pi$ и $\varepsilon = E_2/v_{\perp}B \approx -0.1$, на поверхность вернется не $P_1 \approx 0,843$ часть электронов, как это было посчитано для углов вылета $\theta_v > -0,14\pi$, а большая часть электронов. Потенциальная энергия электронов увеличивается в сред-нем за цикл на величину $eV_r \approx |\varepsilon| 2k_B T/(tg^2 \varphi + 1)^{1/2}$, в $(tg^2 \varphi + 1)^{1/2} \approx 2,3$ раз меньшую (при $\varphi = -0,36\pi$), чем при том же значении є, в отсутствие прижимающего напряжения. Но при использовании прижимающего напряжения E_{x2} величина $|\varepsilon|$ может быть увеличена существенно больше, без уменьшения доли электронов, достигающих коллектор I_a/I_k . Это обеспечивает принципиальную возможность увеличить не только рабочее напряжение V_{ka} ТЭП, но и его мощность $V_{ka}I_a$.

Потенциальная энергия электронов увеличивается благодаря процессам десорбция — свободное движение — адсорбция, происходящим на разном масштабе длин. Электрические E_v, E_{x2} и магнитные поля В малого значения, влияющие на движение электронов в масштабах ларморовского радиуса $r_{o} \approx 100$ мкм, не могут повлиять на процессы адсорбции — десорбции, происходящие в масштабе атомных размеров. При свободном движении в вакууме, описываемом формулами (3), часть кинетической энергии теплового движения превращается в потенциальную энергию. После контакта с поверхностью диэлектрика электроны вновь приобретают скорость, определяемую распределением (2). С числом циклов N увеличивается не только разность потенциалов $V_{ka} \approx NV_r$, но и доля электронов, достигающих коллектор $P_N(\varepsilon)$. При движении снизу вверх под влиянием магнитного поля электроны диффундируют также поперек этого направленного движения вследствие наличия проекции скорости v_{z} . Длина этой диффузии $\approx N^{1/2} r_g$ меньше расстояния между эмиттером и коллектором $l_{ka} \approx Nr_g$ при большом числе циклов N. Чтобы как можно больше электронов достигало коллектор при наличии поперечной диффузии, диэлектрик и коллектор должны быть шире эмиттера на $\approx 2N^{1/2}r_g$. Можно также использовать электрическое поле E_z , отталкивающее электроны от краев диэлектрика.

Мощность $V_{ka}I_a \approx V_{ka}I_k P_1^{Vka/Vr}$ определяется не только разностью потенциалов V_{ka} и долей электронов $P_1^{Vka/Vr}$, достигающих коллектор, но и током эмиттера, точнее числом электронов, достигающих поверхность диэлектрика в единицу времени I_k . Для того чтобы это число могло быть большим, эмиттер можно поместить на расстояние порядка r_g над поверхностью диэлектрика и приложить прижимающее поле E_{x1} (см. рис. 2).

Максимальное расстояние, на которое электрон может удалиться от поверхности при начальной скорости v_x , перпендикулярной к ней, равно $r_g\{[1 + (E_{x1}/v_\perp B)^2]^{1/2} \pm E_{x1}/v_\perp B\}$. Знак "+" соответствует случаю, когда электрическое поле увеличивает v_x , и знак "-", когда уменьшает. Из этого следует, что при расстоянии между поверхностями эмиттера и диэлектрика r_g достаточно значения $E_x \approx v_\perp B$, соответствующего разности потенциалов порядка $r_g E_x \approx r_g v_\perp B = m v_\perp^2 / e \approx k_B T_k / e$, чтобы большая часть электронов эмиссии достигала поверхности диэлектрика и не возвращалась в эмиттер.

Заключение

Проведенные вычисления доли электронов, достигающих коллектор, свидетельствуют, прежде всего, о реальности экспериментальной проверки возможности увеличения рабочего напряжения ТЭП. Предлагаемый в работе способ уменьшения числа электронов, улетающих от поверхности диэлектрика, может позволить увеличить рабочее напряжение без уменьшения или при незначительном уменьшении тока коллектора.

Список литературы

1. Ушаков Б. А., Никитин В. Д., Емельянов И. Я. Основы термоэмиссионного преобразования энергии. М.: Атомиздат, 1974. 288 с.

2. Стаханов И. П., Черковец В. Е. Физика термоэмиссионного преобразователя. М.: Энергоатомиздат, 1985. 207 с.

3. **Ярыгин В. И.** Физические основы термоэмиссионного преобразования энергии. Обнинск: Изд. ГНЦ РФ-ФЭИ, 2006. 104 с.

4. Квасников Л. А., Кайбышев В. З., Каландаришвили А. Г. Рабочие процессы в термоэмиссионных преобразователях ядерных энергетических установок. М.: Изд. МАИ, 2001.

5. **Грязнов Г. М., Пупко В. Я.** "Топаз-1". Советская космическая ядерно-энергетическая установка // Природа. 1991. В. 10. С. 29—36.

6. Жеребцов В. А. Приэлектродные области термоэмиссионного преобразователя энергии лазерного излучения в электрическую энергию с легко ионизируемой добавкой // ЖТФ, 2006. Т. 76, Вып. 7. С. 15.

7. Добрецов Л. Н., Гомоюнова М. В. Эмиссионная электроника. М.: Наука, 1966.

8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1973. 504 с.

V. A. Aristov, D. Sc., Professor, Corresponding Member of RAS, Principle Researcher, aristov@iptm.ru, A. V. Nikulov, Ph. D., Senior Researcher, nikulov@iptm.ru,

Institute of Microelectronics Technology Problems and High Purity Materials, RAS, 142432, Chernogolovka, Moscow Region, Russian Federation,

A. P. Perminov, Ph. D., Senior Researcher, perminov@binep.ac.ru,

Institute of Energy Problems for Chemical Physics, RAS, 142432, Chernogolovka, Moscow Region, Russian Federation

Corresponding author:

Nikulov Aleksey V., Senior Researcher, Institute of Microelectronics Technology Problems and High Purity Materials, RAS, Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russian Federation, e-mail: nikulov@iptm.ru

A Method to Increase the Working Voltage of a Thermionic Converter

Received on February 16, 2018 Accepted on Mach 15, 2018

The authors consider a possibility of increasing the working voltage of the thermionic converters by means of the magnetic field, which are "pressing" the electrons to the dielectric surface. The voltage between the collector and the emitter generated by the thermal motion of electrons was calculated for the given values of the emission current, load resistance, magnetic field and the distance between the emitter and the collector. A method to increase this voltage is proposed. The calculations used the standard distribution of the electrons by velocity and departure angles after desorption, and the known formulas describing the electron trajectories in the crossed magnetic and electric fields.

Keywords: thermionic converter of energy, thermoelectronic emission, thermal motion of electrons in vacuum in the presence of a magnetic field, adsorption and desorption from the dielectric surface

For citation:

Aristov V. A., Nikulov A. V., Perminov A. P. A Method to Increase the Working Voltage of a Thermionic Converter, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 497–504.

DOI: 10.17587/nmst.20.497-504

Introduction

The thermionic converters of energy (TCE) are used for transformation of the thermal energy into the electric energy on the basis of the phenomenon of the thermionic emission [1-3]. By the sources of warmth, TCE can be nuclear (reactor and radioisotopic), solar and gas-flame ones. Nuclear TCE [4] employ the warmth emitted as a result of the reaction of nuclear fission (reactor TCE) or decay of a radioactive isotope (radioisotopic TCE). In 1970 in the USSR, Topaz, the first-ever thermionic converter-reactor with the electric power about 10 kW [5] was created. By means of TCE the energy of the solar radiation (with application of the solar-heat collectors) or laser radiation [6] can also be transformed into the electric energy. The gas-flame TCE work on the warmth emitted during burning of the organic fuels. In comparison with the traditional electric-machine converters, the thermionic converters of energy (TCE) have an important advantage — absence of the moving parts in them, compactness, high reliability, possibility of operation without a regular service. Their wider application is constrained by a relatively small value of the electric voltage. The TCE, in which this drawback is eliminated, will find wider applications, including the microsystem technologies. In the given work the authors consider a possible way to increase the working voltage of TCE.

Principle of operation of TCE

As is known, operation of TCE is based on the principle of the thermionic emission (Edison's effect) — emission of electrons by a heated metal emitter (cathode). The density of the emission current is defined by Richardson — Dushman equation:

$$j_{tem} = AT^2 \exp\left(-\frac{e\phi}{k_B T}\right), \qquad (1)$$

where $e\varphi$ — work function; $A \approx A_0(1 - R_e)$; R_e — coefficient of reflection of an electron from a potential barrier; $A_0 = 4\pi mek_B^2/h^3 \approx 1.2 \cdot 10^6 \text{ A/m}^2\text{K}^2$ — Richardson constant; k_B — Boltzmann constant; h — Planck's constant [7]. At an identical work function of the cathode and the anode $e\varphi_k = e\varphi_a = e\varphi$, the current from the emitter is much bigger than the current from the collector $j_{tem, k} =$ $= AT_k^2 \exp(-e\varphi/k_BT_k) \gg j_{tem, a} = AT_a^2 \exp(-e\varphi/k_BT_a)$, at a rather small difference of temperatures between them: $T_k > T_a$. For example, at the temperature of the emitter (cathode) $T_k = 2000 \text{ K}$ and $e\varphi = 3 \text{ eV} \approx 3k_B 11 605 \text{ K} = k_B 34 815 \text{ K}$ the currents differ in 100 times at the temperature of the collector (anode) $T_a \approx 1620 \text{ K}$. But in this case the potential difference cannot exceed essentially $V_{ka} \approx k_B T_k/e$ even at a small load current (fig. 1), because the kinetic energy of most electrons at the cathode does not exceed $k_B T_k$, and they cannot rise in the potential field to the height bigger than $k_B T_k/e$ which is small at real temperatures, for example, $k_B T_k/e \approx 0.17 \text{ V}$ at $T_k = 2000 \text{ K}$.

Therefore, in the employed TCE the working voltage increases due to the contact potential difference $V_{con} = \varphi_k - \varphi_a$ [1]. For this purpose the emitter is made from a metal with a bigger work function than that of the collector metal $e\varphi_k > e\varphi_a$. At that, unlike in the case when $e\varphi_k = e\varphi_a$, the emitter is charged negatively, while the collector — positively due to the contact potential difference V_{con} between the metals with different work functions in the place of their direct electric contact, closing the electric circuit on load. In this case the kinetic energy of the electrons does not decrease, but it increases during the movement in vacuum from the emitter to the collector. In absence of a difference in temperatures between the emitter and the collector the voltage on load and the current are absent. For operation of TCE the emitter is heated up,

while the collector is cooled. The greatest possible load voltage equals to the contact potential difference $V_{con} = \varphi_k - \varphi_a$ [1]. The load voltages of real TCE usually does not exceeded 1 V. The power, which is of practical interest, is obtained due to a big current density from a unit of the surface of the emitter — roughly tens of amperes per a square centimeter.

Ladder for the electrons

The known TCE use the contact potential difference, because the electrons with energy of $k_B T_k \approx 0.17$ eV cannot jump in the potential field up to the height even of 1 V (fig. 1) just as like a man cannot jump up to the height of 5 m. But a man can rise up to 5 meters and over by using a ladder. In the given work we actually consider "a little ladder" for the electrons (fig. 2). Unlike movement of a man walking up the ladder, the thermal movement of the electrons is chaotic. However, in a magnetic field this movement is not absolutely chaotic. When the length of a free run of the electrons is more than the Larmor radius $l_{mfp} \gg r_g = mv_{\perp}/eB$, all of them move via a circle laying in the plane, perpendicular to the magnetic field **B**, in one direction (fig. 2); m and e — mass and charge of the electron; v_{\perp} – projection of the thermal speed of an electron on the plane, perpendicular to B. At the real values of the magnetic field of $B \ge 0.01$ T and the speed of the thermal movement of the electrons $v_p \approx (2k_BT/m)^{1/2} \le 2.5 \cdot 10^5$ m/s $T \le 2000$ K, the Larmor radius does not exceed $r_g \le mv_p/eB \approx \approx 150 \ \mu\text{m}$. Therefore, for meeting the condition of $l_{mfp} \gg r_g$ no ultrahigh vacuum is required. Movement in the magnetic field does not change the energy, because the Lorentz force $F_L = vB$ is perpendicular to the speed of the electrons. But the Lorentz force can "press" the electrons to the dielectric surface and, thus, create "a little ladder " for them (fig. 2).

Movement of the electrons in the crossed magnetic and electric fields

In absence of the potential difference between the emitter and the collector, the electrons, which departed from the emitter, have to move in vacuum via a circle (fig. 2). Their trajectory in the plane of xy, perpendicular to $\mathbf{B} = (0i_x, 0i_y, Bi_z)$, after their departure at t = 0 from the flat surface of yz at the angle of θ_v to x in the plane xy, is described by expressions $x = \sin(\theta_y + t) - \sin\theta_y$ and $y = \cos\theta_y - \cos(\theta_y + t)$. As a unit of length the given expressions use the Larmor radius $r_g =$ $= mv_{\perp}/eB$, and a unit of time — value of $1/\omega = m/eB = r_g/v_{\perp}$, inverse to the Larmor frequency $\omega = eB/m$. The position of the centre of circle $x = -\sin\theta_{y}$ via which the electrons move in relation to the surface of dielectric x = 0 is defined by the departure angle of θ_v . The projection of speed v_z , directed along the magnetic field, remains invariable after desorption and $z = v_z t$. The electrons can depart at any angle θ in relation to direction x, perpendicular to the surface of the dielectric. Probability Pof distribution of the electrons by speeds v and departure angles θ after desorption can be described by the standard formula:

$$P = P_0 v^2 \cos\theta \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right).$$
(2)

Angles of θ , θ_y are connected by relation $\sin\theta_y = \sin\theta\cos\theta_z$, where angle $\theta_z = \arctan(v_z/v_y)$ defines the direction of projection of the speed on plane *yz*. While there is no potential difference $V_{ka} = 0$, all the electrons, which departed from the flat surface of the dielectric at angles $0.5\pi > \theta_y > -0.5\pi$ have to return to the surface (fig. 2 at the left), and rise by the ladder from the emitter to the collector. Movement of the electrons will create potential difference V_{ka} and electric field $E_y \approx V_{ka}/l_{ka}$ between the emitter and the collector. Movement of the charged particles in the crossed fields is described in detail, for example, in § 22 in [8]. According to the description, we receive the following expressions:

 $x = (\cos\theta_v + \varepsilon)\sin t - \sin\theta_v (1 - \cos t) - \varepsilon t; \qquad (3a)$

$$y = \sin\theta_v \sin t + (\cos\theta_v + \varepsilon)(1 - \cos t), \tag{3b}$$

in which a new member appeared $\varepsilon = E_v / v_\perp B$, describing the influence of the electric field on the trajectory of the electrons after desorption at t = 0 and angle θ_v . The trajectories described by the expressions (3) are such, that at $\varepsilon \ge 0$ all the electrons, which departed from the flat surface at any angles $0.5\pi > \theta_{\nu} > -0.5\pi$, have to return to this surface. The electrons, which raised from the emitter to the collector, create electric field $E_v \approx V_{ka}/l_{ka}$ corresponding to $\varepsilon < 0$. Using expressions (3), it is possible to calculate the departure angles of θ_v at which an electron will return to the surface for each value of $\varepsilon < 0$. For example, if $\varepsilon \approx -0.01$ an electron will return to the surface at $0.5\pi > \theta_y > -0.39\pi$; if $\varepsilon \approx -0.05$ at $0.5\pi > \theta_y > -0.26\pi$; if $\varepsilon \approx -0.1$ at $0.5\pi > \theta_y > -0.14\pi$; if $\varepsilon \approx -0.18$, at $0.5\pi > \theta_v > 0$. Using these values and standard distribution by the departure angles θ (2), we calculate probability $P_1(\varepsilon)$ of a return of the electron to the surface in one cycle: $P_1 \approx 0.9955$ at $\varepsilon \approx -0.01$; $P_1 \approx 0.954$ at $\varepsilon \approx -0.05$; $P_1 \approx 0.843$ at $\varepsilon \approx -0.1$; $P_1 \approx 0.5$ at $\varepsilon \approx -0.18$. A part of the electrons $(1 - P_1)$ will not return to the surface and will fly away from it, moving by a trochoid along x [8], according to (3). This means, that after N cycles of adsorption – desorption only $P_N = P_1^N$ part of the electrons, which departed from the emitter, will remain at the surface.

Increase of the potential energy of the electrons in the desorption — free movements — adsorption cycles

At each adsorption - desorption cycle an electron ascends to the height of h, and its potential energy grows by $eV_r \approx eh|E_v|$. Since, on average, the height of the rise is equal to the Larmor radius $r_g = mv_{\perp}/eB$, the potential energy between the desorption and the subsequent adsorption will increase on average by $eV_r \approx eh|E_y| \approx mv_{\perp}^2 |E_y|/v_{\perp}B = |\varepsilon|mv_{\perp}^2$. The value of $mv_{\perp}^2/2$ is equal to 2/3 of the average kinetic energy of the thermal movement of $3k_BT/2$. Hence, the potential energy on average increases by $eV_r \approx |\varepsilon| 2k_B T$ per one desorption - free movement - adsorption cycle. At the temperature of dielectric of T = 2000 K this corresponds to the increase of the electrons' potential by $V_r \approx |\varepsilon| 0.34$ V per a cycle. Due to their movement from the emitter to the collector the electrons create potential difference of V_{ka} and electric field E_y , equal to $\approx V_{ka}/l_{ka}$ at an even variation of the potential difference at the distance of l_{ka} from the emitter to the collector. With an increase of V_{ka} the fraction of the electrons $P_N = P_1^N \approx P_1^{Vka/Vr}$, which reach the collector, will be less, but remain more than zero. At the load resistance of R_l and the emission current of the cathode of I_k the voltage will stabilize at $V_{ka} = R_l I_a \approx R_l I_k P_1^{Vka/Vr}$.

For an experimental verification of the basic possibility to receive a potential difference more than 1 V (but not for application), the load resistance R_l can be big. The probability $P_N \approx P_1^{Vka/Vr}$ that an electron will reach the collector from the emitter at $V_{ka} = 1$ V and $V_r \approx |\varepsilon| 0.34$ V is equal, according to the results presented above, to $P_N \approx P_1^N \approx 0.9955^{294} \approx 0.26$ at $\varepsilon \approx -0.01$; $P_N \approx 0.954^{58.8} \approx 0.063$ at $\varepsilon \approx -0.05$; $P_N \approx \approx 0.843^{29.4} \approx 0.0066$ at $\varepsilon \approx -0.1$; $P_N \approx 0.5^{16} \approx 0.000015$ at

ε ≈ -0.18. Thus, the ratio of the collector current to the emitter current I_a/I_k should increase with a reduction of |ε|, i.e. with an increase of the number of cycles $N ≈ V_{ka}/V_r$ at the preset value of V_{ka} . The value of ε is determined by the distance between the emitter and the collector l_{ka} , Larmor radius r_g , emission current I_k and load resistance R_l . In order to observe voltage $V_{ka} > 1$ V at T = 2000 K and B = 0.01 T the product of the emitter current on the load resistance $R_l I_k$ and number of cycles N should be equal to: $R_l I_k > 3.8$ V, N ≈ 294 at ε ≈ -0.01; $R_l I_k > 16$ V, N ≈ 59 at ε ≈ -0.05; $R_l I_k > 151$ V, N ≈ 30 at ε ≈ -0.1; $R_l I_k > 66$ 667 V, N ≈ 16 at ε ≈ -0.18. These estimates testify to real a possibility to observe voltage $V_{ka} > 1$ V. The number of cycles N ≈ 294 corresponds to the distance between the emitter and the collector $l_{ka} ≈ 44$ mm at the Larmor radius $r_g ≈ 150$ µm. Value of $R_l I_k > 3.8$ V can be ensured even at a very small emission current $I_k ≈ 3.8$ µA by using the load resistance $R_l > 1$ MΩ.

A way to increase the fraction of the electrons which reach the collector

In order to increase the fraction of the electrons reaching the collector, i. e. relation I_k/I_a , at an increase of the working voltage V_{ka} , it is possible to use the constant electric field E_{x2} pressing the electrons to the surface of the dielectric (fig. 2). In order to estimate the action of the pressing field E_{x2} it is necessary to take into consideration, that the movement of the electrons after the desorption will be still described by the equations (3), if we turn the system of co-ordinates by $\varphi =$ arctg (E_{x2}/E_y) . In the new system of co-ordinates the total field of $E_2 = -(E_{x2}^2 + E_y^2)^{1/2}$ is directed along the co-ordinate y' (fig. 2). In the old co-ordinates the electrons depart from the surface at the angles of $0.5\pi > \theta_v > -0.5\pi$, and in the new co-ordinates the angles will be $0.5\pi - \phi > \theta_{\nu'} > -0.5\pi - \phi$. The electrons, which departed at the angles of $\theta_v > -0.5\pi$, will move by the trajectories corresponding to the departure angles $\theta_{\nu'} > -0.5\pi - \phi$ (fig. 2). This means, that at the same value of the potential difference of V_{ka} between the emitter and the collector more electrons will return to the surface, if there is a pressing field. For example, at the values of the electric fields of $E_y \approx V_{ka}/l_{ka}$ and E_{x2} , corresponding to the angle $\varphi = -\arctan(E_{x2}/E_y) = -0.36\pi$ and $\varepsilon = E_2/v_{\perp}B \approx -0.1$, most of the electrons will return to the surface, and not just $P_1 \approx 0.843$ part of them, as it was calculated for the departure angles $\theta_v > -0.14\pi$. On average the potential energy of the electrons increases per a cycle by the value of $eV_r \approx |\varepsilon| 2k_B T/(tg^2 \phi + 1)^{1/2}$, which is $(tg^2 \phi + 1)^{1/2} \approx 2.3$ times smaller (at $\phi = -0.36\pi$), than at same value of ε , in absence of the of pressing voltage. But, if the pressing voltage E_{x2} is used, the value of $|\varepsilon|$ can be increased considerably more, without a reduction of the fraction of the electrons, reaching collector I_a/I_k . This ensures a basic possibility to increase not only the working voltage V_{ka} of TCE, but also its power $V_{ka}I_{a}$.

The potential energy of the electrons increases due to the processes of desorption — free movement — adsorption, occurring at different scales of the lengths. The electric fields E_y , E_{x2} and magnetic field B of small value, influencing the movement of the electrons in the scales of Larmor radius $r_g \approx$ of 100 µm, cannot affect the processes of adsorption desorption, occurring at the scale of the atomic sizes. During a free movement in vacuum described by formulas (3), a part of the kinetic energy of the thermal movement turns into a potential energy. After a contact with the surface of the dielectric the electrons again get the speed defined by the distribution (2). With a growing number of cycles N, not only the potential difference of $V_{ka} \approx NV_r$ is increased, but also the fraction of the electrons, which reach the collector $P_N(\varepsilon)$. During movement from below upwards under the influence of the magnetic field, the electrons also diffuse across this directed movement, owing to the presence of projection of speed v_z . The length of this diffusion $\approx N^{1/2}r_g$ is less than the distance between the emitter and the collector $I_{ka} \approx Nr_g$ at a big number of cycles N. In order to make more electrons reach the collector in the presence of a cross-section diffusion, the dielectric and the collector should be wider than the emitter by $\approx 2N^{1/2}r_g$. It is also possible to use the electric field E_z which is pushing the electrons away from the edges of the dielectric.

is pushing the electrons away from the edges of the dielectric. The power of $V_{ka}I_a \approx V_{ka}I_k P_1^{Vka/Vr}$ is determined not only by the potential difference V_{ka} and the fractions of the electrons $P_1^{Vka/Vr}$, which reach the collector, but also by the emitter current, to be more exact, by the number of the electrons, reaching the surface of the dielectric in a unit of time I_k . In order to make this number bigger, the emitter can be placed at the distance r_g over the surface of the dielectric and the pressing field E_{x1} can be applied (fig. 2).

The maximal distance, to which an electron can go from the surface at the initial speed of v_x perpendicular to it, is equal to $r_g\{[1 + (E_{x1}/v_{\perp}B)^2]^{1/2} \pm E_{x1}/v_{\perp}B\}$. The sign + corresponds to the case, when the electric field increases v_x , and sign -, when the electric field reduces it. From this it follows, that at the distance between the surfaces of the emitter and of dielectric r_g it is enough to have the value of $E_x \approx v_{\perp}B$, corresponding to the potential difference of about $r_g E_x \approx r_g v_{\perp}B =$ $= mv_{\perp}^2/e \approx k_B T_k/e$ to make most of the emission electrons reach the surface of the dielectric and not return to the emitter.

Conclusion

The calculations of the fraction of the electrons, reaching the collector, testify, first of all, to the reality of an experimental verification of a possibility to increase the working voltage of TCE. The proposed method for reduction of the number of the electrons, flying from the surface of the dielectric, can make it possible to increase the working voltage without a reduction or with an insignificant reduction of the value of the collector current.

References

1. Ushakov B. A., Nikitin V. D., Emel'yanov I. Ya. Osnovy termoemissionnogo preobrazovaniya energii, Moscow, Atomizdat, 1974, 288 p. (in Russian).

2. Staxanov I. P., Cherkovez V. E. Fisika termoemissionnykh preobrazovatelei, Moscow, Energoizdat, 1985, 207 p. (in Russian).

3. Yarygin V. I. Fisicheskie osnovy termoemissionnogo preobrazovaniya energii, Obninsk, Izd. RF-FEI, 2006, 104 p. (in Russian).

4. Kvasnikov L. A., Kaibyshev V. S., Kalandarishvili A. G. Rabochii prozessy v termoemissionnyx preobrazovatelyax yadernyx energeticheskix ustanovok, Moscow, MAI, 2001 (in Russian).

5. **Gryaznov G. M., Pupko V. Ya.** "Topaz-1". Sovetskaya kosmicheskaya yaderno-energeticheskaya ustanovka, *Priroda*, 1991, no. 10, pp. 29–36 (in Russian).

6. **Zherebtsov V. A.** Near-electrode regions of a thermoelectronic laser energy converter with an easily ionized additive, *Tech. Phys.*, 2006, vol. 51, pp. 834–840.

7. Dobrezov L. N., Gomoyunova M. V. Emissionnaya electronika, Moscow, Nauka, 1966, 564 p. (in Russian).

8. Landau L. D., Lifshitz E. M. Course of Theoretical Physics. The Classical Theory of Fields, vol. 2, Butterworth-Heinenann, Oxford, 1985.

Молекулярная электроника и биоэлектроника Molecular electronics and bioelectronics

УДК 616-073.75

DOI: 10.17857/nmst.20.505-512

А. Н. Волобуев, д-р техн. наук, проф., e-mail: volobuev47@yandex.ru, Самарский государственный медицинский университет

ПРИМЕНЕНИЕ ЛИНЕЙНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОШЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ В ВЕШЕСТВЕ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ТОМОГРАФЕ

Поступила в редакцию 24.03.2018

Рассмотрен принцип рентгеновской томографии. Представлены некоторые законы взаимодействия рентгеновского излучения с тканями организма. Показано, каким образом на основе преобразования Радона формируются проективные данные для реконструкции изображения в компьютерном рентгеновском томографе. Даны теоретические основы получения проекций и реконструкции патологического очага осесимметричной формы.

Ключевые слова: рентгеновская томография, линейный коэффициент поглощения, преобразование Радона, восстановление изображения

Введение

Визуализация внутренних органов представляет собой важнейшую цель многих методов диагностики. Визуализация с помощью рентгеновской томографии явилась существенным прорывом в диагностике, использующей рентгеновское излучение. Рентгеновскую томографию предложили английские физики А. Кормак и Г. Хаунсфилд, за что в 1979 г. им была присуждена Нобелевская премия.

Принцип линейной рентгеновской томографии в его первоначальном виде показан на рис. 1. Источник рентгеновских веерообразных лучей 1 (веер перпендикулярен плоскости рисунка) совершает качания, так что лучи проходят через центр качания 3, находящийся в теле пациента 2. В дальнейшем лучи попадают на фотопластинку 4, которая также совершает качания в такт источнику излучения 1. На пластинке получается изображение небольшой области вблизи центра качания 3, а более удаленные области оказываются на пластинке смазанными, так как через них лучи проходят периодически. По этой же причине окружающие центр качания небольшие непрозрачные включения не мешают получению изображения. Если изменять положение центра качания, например послойно, то можно получить хорошее изображение патологического очага.

В настоящее время наиболее распространенным вариантом рентгеновской томографии является компьютерная рентгеновская томография (КРТ или КТ) [1, 2]. В компьютерном рентгеновском томографе (рис. 2) пациент *1* помещается в сканирующее устройство *2*, вращающееся вокруг исследуемого объекта. Рентгеновские лучи от излучателя *3* расходящимся тонким (1...10 мм) веерным пучком проходят через пациента, лежащего на кушетке, и попадают на детектор *4*, представляющий собой матрицу из 500...1000 фотоэлементов или ионизационных камер.

В случае, показанном на рис. 2, в процессе вращения сканирующего устройства 2 компьютер 5 анализирует прохождение лучей в сечении по разным направлениям и на основе этого строит изображение всего сечения. Возможность и способ такого построения показал немецкий математик И. Радон в 1917 г. [3, 4]. Затем пациент перемещается вдоль оси томографа, и процедура получения изображения повторяется снова для следующего слоя исследуемого органа. Предел разрешения компьютерного томографа до 2 мм при различии в коэффициенте поглощения рентгеновского излучения для веществ ~0,1 %. Например, с помощью



ray tomography



Рис. 2. Принцип современной рентгеновской компьютерной томографии

Fig. 2. Principle of modern X-ray computer tomography

компьютерного томографа можно различить серое и белое вещество мозга.

Процессы в рентгеновских компьютерных томографах совершенствуются и оптимизируются в различных направлениях достаточно интенсивно [5—8]. Совершенствуется конструкция томографов, вычислительные алгоритмы и т. д.

Закон ослабления рентгеновского излучения при прохождении через вещество

Рентгеновское излучение, как и любое электромагнитное излучение, ослабляется (поглощается и рассеивается) в веществе по закону Бугера [9]: если интенсивность излучения, падающего на вещество, равна I_0 , то интенсивность излучения, вышедшего из слоя толщиной d, равна

$$I = I_0 \mathbf{e}^{-\mu d},\tag{1}$$

где µ — линейный коэффициент ослабления излучения, который с физической точки зрения состоит из трех слагаемых:

$$\mu = \mu_{\mathrm{K}} + \mu_{\mathrm{\Phi}} + \mu_{\mathrm{K/3}},\tag{2}$$

где величина μ_{K} соответствует когерентному рассеянию; $\mu_{\Phi}-$ фотоэффекту; $\mu_{K/\Im}-$ комптон-эффекту.

Центральную роль в наблюдении органов и тканей с помощью рентгеновских лучей играет различие в поглощении этих лучей разными участками тела, органами и тканями.

Линейный коэффициент ослабления рентгеновского излучения в веществе µ в медицине часто представляют в виде двух слагаемых [10]:

$$\mu = \tau + \delta, \tag{3}$$

где τ — слагаемое, обусловленное истинным поглощением электромагнитного рентгеновского излучения (поглощение наблюдается в явлениях фотоэффекта и частично комптон-эффекта); δ — слагаемое, обусловленное рассеянием рентгеновского излучения (это явления когерентного рассеяния и частично комптон-эффекта).

Опыт показывает, что спектральную зависимость т в области рентгеновского диапазона длин волн для тканей организма можно представить в виде [10]:

$$\tau = k\rho\lambda^4 Z^3, \tag{4}$$

где k — коэффициент пропорциональности; λ — длина волны рентгеновского излучения; ρ — плотность вещества, подвергаемого рентгеновскому облучению; Z — его атомный номер.

Из формулы следует, что мягкое рентгеновское излучение $\lambda > 0,01$ нм, имеющее более длинные волны, поглощается сильнее, чем жесткое $\lambda < 0,01$ нм. Оно более опасно для организма.

Для костей, существенную составляющую которых представляет фосфорнокислый кальций, Z = 15...20. В кости входят такие элементы, как фосфор P_{15}^{31} , кальций Ca_{20}^{40} . Для мягких тканей Zобычно — до 8. В основном это такие атомы мягких тканей, как H_1^1 , C_6^{12} , N_7^{14} , O_8^{16} . Если проанализировать различие линейных коэффициентов ослабления рентгеновского излучения μ для костей и для мягких тканей, то можно заметить, что слагаемое τ для костей много больше τ для мягких тканей, так как ρZ^3 для костей много больше ρZ^3 для мягких тканей. При этом основную роль в разнице τ , а следовательно, и μ играет различие атомных номеров элементов Z. Значит, кости поглощают рентгеновское излучение значительно сильнее, чем мягкие ткани, поэтому получение контрастного рентгеновского изображения костной ткани не является сложной задачей.

Различие в ослаблении рентгеновского излучения мягкими тканями обусловлено небольшим различием их плотностей р, поэтому контрастность органов из мягких тканей значительно хуже, чем костей.

Математические основы компьютерной рентгеновской томографии. Преобразование Радона

Запишем Фурье-образ для некоторой замкнутой функции на плоскости от радиус-вектора $f(\mathbf{r})$ (рис. 3):

$$F(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-ikr\cos\theta} d\mathbf{r}, \quad (5)$$

где **k** — векторный аргумент Фурье-образа или вектор волнового числа; угол θ — это угол между векторным аргументом Фурье-образа **k** и радиус-вектором **r**.

Используя формулу (5), запишем двумерное преобразование Фурье для области, ограниченной функцией $f(\mathbf{r})$, т. е. для области f(X, Y) (рис. 3):

$$F(k_X, k_Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(X, Y) \mathbf{e}^{-i(k_X X + k_Y Y)} dX dY, \quad (6)$$

где k_X, k_Y — проекции вектора **k** на оси координат *X* и *Y*.

Выполним поворот осей координат на угол α . При этом угол α между прежней координатой X и новой координатой *s* выберем таким, что координата *s* параллельна вектору **k**. Соотношение прежних координат *X*, *Y* и новых координат *s*, *z* имеет следующий вид (рис. 3):

 $s = X\cos\alpha + Y\sin\alpha;$

(7)





506 —

Обратное соотношение следует из (7) и (8):

$$X = s\cos\alpha - z\sin\alpha; \qquad (9)$$

$$Y = s\sin\alpha + z\cos\alpha. \qquad (10)$$

Перейдем в (6) к координатам $Y = ssin\alpha + zcos\alpha$. Учитывая $k_X = kcos\alpha$ и $k_Y = ksin\alpha$, а также равенство элементов площади в координатах X, Yu s, z (площадь при повороте осей на любой угол не меняется), т. е. dXdY = dsdz, имеем

$$F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha) e^{-ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} dsdz$$
(11)

Формулу (11) можно переписать в виде:

 $F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) =$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\pi}f(s\cos\alpha-z\sin\alpha, s\sin\alpha+z\cos\alpha)dz\right)\mathbf{e}^{-iks}ds.(12)$$

Обозначая

 $R(s, \alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} f(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha) dz, (13)$

получаем

$$F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(s, \alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds.$$
(14)

Формула (13) называется преобразованием Радона от функции f(X, Y). Равенство (14) представляет собой Фурье-образ функции $R(s, \alpha)$ в системе координат s, z.

Таким образом, вводя преобразование Радона (13), мы переходим от двумерного преобразования Фурье (6) функции f(X, Y) к одномерному преобразованию Фурье (14) функции $R(s, \alpha)$, т. е. фактически находим одномерную проекцию двумерного преобразования Фурье. Проектирование, согласно (14), осуществляется на координатную ось s, т. е. в направлении оси z.

Для практического применения преобразования Радона надо знать его обратное преобразование. Для нахождения обратного преобразования Радона будем исходить из обратного двумерного преобразования Фурье, соответствующего прямому преобразованию Фурье (6):

$$f(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(k_X, k_Y) \mathbf{e}^{i(k_X X + k_Y Y)} dk_X dk_Y.$$
(15)

Учитывая, что прямое преобразование Радона $R(s, \alpha)$ зависит не только от линейной координаты s, но и от угловой координаты α , в обратном преобразовании Радона должны также использоваться только эти две координаты. Таким образом, нужно перейти к полярным координатам. В полярных координатах $dk_X dk_Y = k dk d\alpha$.

Следовательно, обратное преобразование Фурье (15) имеет вид:

$$f(X, Y) =$$

 $\infty 2\pi$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha.$$
(16)

Обозначим Фурье-образ преобразования (14) в виде:

$$\widetilde{R}(k, \alpha) = F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(s, \alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds.$$
(17)

Следовательно, формулу (16) можно представить в виде:

$$f(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \tilde{R}(k, \alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha.$$
(18)

Формулу (18) можно рассматривать как обратное преобразование Радона и использовать ее для восстановления функции f(X, Y) по Фурье-образу $\tilde{R}(k, \alpha)$.

Восстановление изображения с использованием преобразования Радона

Рассмотрим следующую модельную задачу. В организме, который помещен в компьютерный рентгеновский томограф (см. рис. 2), имеется патологический очаг — область с повышенным поглощением рентгеновского излучения. Рассеянием рентгеновского излучения пренебрегаем. В этом случае линейный коэффициент ослабления рентгеновского излучения $\mu = \tau$ (см. формулу (3)). Очевидно, при решении практических задач данное приближение неприемлемо.

Патологический очаг облучается рентгеновским излучением с начальной интенсивностью I_0 в направлении оси *z* (рис. 4).

Так как линейный коэффициент поглощения может иметь различное значение в различных частях патологического очага, закон Бугера (1) нужно записать в виде:

$$V = I_0 \mathbf{e}^{-\sum_{z_0}^{+z_0} \mu(X, Y) dz}$$
(19)

Поглощение вне патологического очага используем в качестве базы отсчета и не рассматриваем.



Рис. 4. Схема облучения патологического очага рентгеновским излучением

Fig. 4. Diagram of irradiation of the pathological focus by X-ray radiation

– НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 20, № 8, 2018 —

Показатель в законе Бугера (без знака минус) будем называть рентгено-оптической плотностью патологического очага:

$$D = \int_{-z_0}^{+z_0} \mu(X, Y) dz.$$
 (20)

Формулу (20) можно рассматривать как преобразование Радона от функции $\mu(X, Y)$. Преобразование Радона представляет собой проектирование линейного коэффициента поглощения $\mu(X, Y)$ как функции двух переменных на ось *s* (рис. 4).

Рассмотрим важный с практической точки зрения случай зависимости линейного коэффициента поглощения от координат в виде гауссовской кривой:

$$\mu(X, Y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{X^2 + Y^2}{2\sigma^2}},$$
 (21)

где
 σ — постоянная величина с размерностью длины.

Подставим (21) в формулу (20) и перейдем к системе координат *s*, *z* по выражениям (9) и (10). В результате получим

$$D(s, \alpha) = \int_{-z_0}^{+z_0} \mu(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha)dz =$$

= $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-z_0}^{+z_0} e^{-\frac{X^2 + Y^2}{2\sigma^2}} dz = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-z_0}^{+z_0} e^{-\frac{s^2 + z^2}{2\sigma^2}} dz.$ (22)

B (22) учтено $X^2 + Y^2 = s^2 + z^2$.

Заменяя в (22) пределы интегрирования на бесконечности, так как интегрирование идет по всему патологическому очагу, имеем

$$D(s, \alpha) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{s^2 + z^2}{2\sigma^2}} dz = e^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}}.$$
 (23)

На рис. 4 показан график рентгено-оптической плотности как проекция линейного коэффициента поглощения на ось *s*.

Далее поставим задачу восстановления линейного коэффициента поглощения на основе его проекции.

Найдем Фурье-образ линейного коэффициента поглощения [11]:

$$\widetilde{\mu}(k,\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s,\alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{e}^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}} \mathbf{e}^{-iks} ds =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{e}^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}} \cos(ks) ds = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}}.$$
(24)

При нахождении (24) воспользовались четностью функции *D*(*s*, α) [12]. Полученный Фурье-образ одномерный, так как не зависит от угла α . Поэтому, используя одномерное обратное преобразование Фурье [13], найдем:

$$D(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{e}^{iks} dk = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{e}^{-\frac{k^2 \sigma^2}{2}} \mathbf{e}^{iks} dk = \mathbf{e}^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}}, (25)$$

что совпадает с выражением (23).

Для полного восстановления линейного коэффициента поглощения $\mu(X, Y)$ нужно использовать обратное преобразование Радона (18) и формулу (24):

$$\mu(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \tilde{\mu}(k, \alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha =$$

$$= \frac{\sigma}{(2\pi)^{3/2}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \mathbf{e}^{-\frac{k^{2}\sigma^{2}}{2}} \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha =$$

$$= \frac{\sigma}{(2\pi)^{3/2}} \int_{0}^{\infty} \mathbf{e}^{-\frac{k^{2}\sigma^{2}}{2}} \left(\int_{0}^{2\pi} \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} d\alpha \right) k dk =$$

$$= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{X^{2}+Y^{2}}{2\sigma^{2}}}.$$
(26)

К сожалению, найти аналитически интеграл $\int_{0}^{2\pi} e^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} d\alpha$ не представляется возможным.

о Результат интегрирования лежит в области обобщенных функций [14], поэтому последовательно вычислить все интегралы в (26) нельзя. Однако это не является существенным, так как общий результат интегрирования мы знаем.

Возможно иное представление формулы (26). Записывая Фурье-образ линейного коэффициента поглощения для определенной линии проектирования с уравнением $s - s_0 = 0$, найдем

$$\widetilde{\mu}(k,\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s,\alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s-s_0,\alpha) \times \mathbf{e}^{-ik(s-s_0)} ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s-s_0,\alpha) ds.$$
(27)

Подставляя (27) в (26), получим

$$\mu(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \tilde{\mu}(k, \alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\infty} \tilde{\mu}(k, \alpha) \mathbf{e}^{iks} k dk d\alpha =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s - s_0, \alpha) h(s) ds d\alpha, \qquad (28)$$

где $h(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} e^{iks} k dk$ — так называемая функция фильтра, которая также может быть определена через обобщенные функции.

При осесимметричной функции линейного коэффициента поглощения от координат восстановление ее по одной проекции, в принципе, возможно. Эта возможность связана с независимостью рентгено-оптической плотности $D(s, \alpha)$ от угла α (25).

Если же функция $\mu(X, Y)$ не симметричная, то для восстановления ее необходимо знать и другие проекции. Причем чем более несимметрична функция, тем больше проекций нужно знать.

На практике реконструкция функции $\mu(X, Y)$ осуществляется двумя способами: алгоритмом с использованием преобразований и алгоритмом с использованием разложения в ряд [3].

В первом случае реконструкция изображения осуществляется по принципу графического построения фигур Лиссажу на основе проекций $D(s, \alpha)$ [9]. Преобразования удобно выполнять в полярной системе координат. Громоздкие формулы, пригодные для использования на ЭВМ, представлены, например, в работе [3].

Чаще применяют численную реализацию формулы обратного преобразования (28), разлагая подынтегральное выражение в ряд.

Заключение

Рентгеновская компьютерная томография является современным и эффективным методом диагностики заболеваний внутренних органов, в частности выявления новообразований.

С математической точки зрения метод основан на преобразовании Радона, позволяющем осуществить проектирование двумерной функции линейного коэффициента поглощения на линию, перпендикулярную направлению рентгеновских лучей. Это позволяет найти необходимое число проекций патологического очага в организме, направляя рентгеновские лучи под разными углами в исследуемом сечении. В дальнейшем, используя одну из возможных методик, осуществляется реконструкция патологического очага в исследуемом сечении.

Список литературы

1. **Buzug T. M.** Computed Tomography: From Photon Statistics to Modern Cone-Beam CT. Berlin: Springer, 2008. 526 p.

Hsieh J. Computed Tomography: Principles, Design, Artifacts, and Recent Advances. 2nd ed. New Jersy: Wiley, 2009. 562 р.
 Хермен Г. Восстановление изображений по проекциям.

Основы реконструктивной томографии / Пер. с англ. М.: Мир. 1983. 352 с.

4. **Deans S. R.** The Radon Transform and Some of its Applications / Malabar Florida: Krieger Publishing Company, 1993. 289 p.

5. Mao Y., Fahimian B. P., Osher S. J., Miao J. Development and Optimization of Regularized Tomographic Reconstruction Algorithms // IEEE Trans. Image Proc. 2010. Vol. 19. P. 1259–1268.

6. **Thibault J. B., Sauer K., Bouman C., Hsieh J.** A Three-dimensional Statistical Approach to Improved Image Quality for Multislice helical CT // Med. Phys. 2007. Vol. 34, N. 2. P. 4526–4544.

7. **Elbakri I. A., Fessler J. A.** Statistical X-ray Computed Tomography Image Reconstruction with Beam Hardening Correction // Proc. of SPIE Conf. on Medical Imaging: Image Processing. 2001. Vol. 322. P. 1–13.

8. Quinto T. E. Singularities of the X-ray transform and limited data tomography in R^2 and R^3 // SIAM J. Math. Anal., 1993. Vol. 24, N. 5. P. 1215–1225.

9. Волобуев А. Н. Основы медицинской и биологической физики. Самара: Самарский дом печати, 2011. 672 с.

 Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей. М.: Гос. Издво Тех.-теор. Лит. 1957. С. 151, 154.

11. Двайт Г. Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы / Пер. с англ. М.: Наука, 1969. 207 с.

12. **Мышкис А. Д.** Лекции по высшей математике. М.: Наука, 1969. 575 с.

13. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Пер. с англ. М.: Наука, 1968. 151 с.

14. **Терещенко С. А.** Эмиссионная томография радиально симметричных объектов и экспоненциальное преобразование Абеля // ЖТФ. 2005. Т. 75. Вып. 2. С. 13–18.

A. N. Volobuev, Ph. D., Professor, volobuev47@yandex.ru, Samara State Medical University, Samara, 443099, Russian Federation

Corresponding author:

Volobuev Andrey N., Ph. D., Professor, Samara State Medical University, Samara, 443099, Russian Federation, E-mail: volobuev47@yandex.ru

Application of Linear Absorption Factor of Radiation in Substance for Reconstruction of the Image in a Computer X-Ray Tomograph

Received on March 24, 2018 Accessed on April 18, 2018

The principle of an X-ray tomography is considered. It is shown, as the X-ray tomography from its invention up to modern computer tomographs developed. Some laws of interaction of X-ray radiation with tissues of an organism are submitted depending on a tissues density and of X-ray radiation wave length. It is shown how on the basis of Radon's transformation the transition from two-dimensional Fourier's transformation to the one-dimensional projection of this transformation is carried out. Using this transformation the one-dimensional projective data of two-dimensional linear absorption factor of X-ray radiation are formed. Then on the basis of two-dimensional factor of absorption restoration the image of the pathological focus in X-ray computer tomograph is reconstructed. Theoretical bases of the projections forms finding and reconstruction of the image by the example of axial-symmetrical pathological focus are presented.

Keywords: X-ray tomography, linear factor of absorption, Radon transform, image reconstruction

For citation:

Volobuev A. N. Application of Linear Absorption Factor of Radiation in Substance for Reconstruction of the Image in a Computer X-Ray Tomograph, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 8, pp. 505–512. DOI: 10.17587/nmst.20.505-512

Introduction

Visualization of internal organs is an important goal of many diagnostic methods. Visualization with X-ray tomography was a significant breakthrough in diagnostics using X-rays. X-ray tomography was offered by British physicists Cormac A. and G. Hounsfield, for which in 1979 they were awarded the Nobel Prize.

The principle of linear X-ray tomography in its original form is shown in fig. 1. The source of the X-ray fan-shaped rays I (the fan is perpendicular to the plane of the fig. 1) oscillates, so that the rays pass through the center of oscillation 3, which is in the body of the patient 2. In the following, the rays fall on the photographic plate 4, which also swings to the source of the radiation 1. A small area near the center of oscillation 3 is obtained on the plate, and the more distant regions appear to be smeared on the plate, since the rays pass through them periodically. For the same reason, the small opaque inclusions surrounding the swing center do not interfere with image acquisition. If you change the position of the center of the swing, for example, layerwise, you can get a good image of the abnormal focus.

Currently, the most common version of X-ray tomography is computer X-ray tomography (CXT or CT) [1, 2]. In a computer X-ray tomograph (fig. 2), a patient I is placed in a scanning device 2 rotating around the object under study. The X-rays from the radiator 3 by divergent thin (1...10 mm) fan beam pass through the patient lying on the couch and reach the detector 4, which is a matrix of 500...1000 photocells or ionization chambers.

In the case shown in fig. 2, during the rotation of the scanning device 2, the computer 5 analyzes the passage of rays in a cross-section in different directions and constructs an image of the entire section based on this. The possibility and method of such construction was shown by the German mathematician I. Radon in 1917 [3, 4]. Then the patient moves along the axis of the tomograph, and the procedure for obtaining the image is repeated again for the next layer of the organ being examined. The resolution limit of a computer tomograph is up to 2 mm with a difference in the absorption coefficient of X-rays for substances of ~0.1 %. For example, using a computer tomograph, you can distinguish between gray and white substance in the brain.

The processes in computed tomography are being perfected and optimized in different directions quite intensively [5–8]. The design of tomographs, computational algorithms, etc. are being improved.

The law of X-ray radiation attenuation when passing through a substance

The X-ray radiation, like any electromagnetic radiation, is weakened (absorbed and scattered) in a substance according to Bouguer's law [9]: if the intensity of radiation falling on a substance is equal to I_0 , then the intensity of radiation emerging from a layer of thickness *d* is

$$I = I_0 \mathbf{e}^{-\mu d},\tag{1}$$

where μ is the linear coefficient of radiation attenuation, which from the physical point of view consists of three components:

$$\mu = \mu_{\rm K} + \mu_{\rm \Phi} + \mu_{\rm K/9},\tag{2}$$

where μ_{K} corresponds to coherent scattering; μ_{Φ} – photoeffect; $\mu_{K/9}$ – Compton effect.

The central role in the observation of organs and tissues with the aid of X-rays is played by the difference in the absorption of these rays by different parts of the body, organs and tissues. The linear attenuation coefficient of X-ray radiation in the substance μ in medicine are often represented as two terms [10]:

$$\mu = \tau + \delta, \tag{3}$$

where τ — the term due to the true absorption of electromagnetic X-ray radiation (absorption is observed in the phenomena of the photoelectric effect and in part the Compton effect); δ — the term due to scattering of X-ray radiation (these are the phenomena of coherent scattering and partially the Compton effect).

The experience shows that the spectral dependence τ in the region of the x-ray wavelength range for body tissues can be represented in the form [10]:

$$\tau = k\rho\lambda^4 Z^3,\tag{4}$$

where k — the coefficient of proportionality; λ — the wavelength of X-ray radiation; ρ — the density of the substance, exposed to X-rays; Z — its atomic number.

It follows from the formula that the soft x-ray emission $\lambda > 0,01$ nm, having longer wavelengths, is absorbed more strongly than hard $\lambda < 0,01$ nm. It is more dangerous for the body.

For bones, an essential component of which is calcium phosphate, Z = 15...20. The bone contains elements such as phosphorus P_{15}^{31} , calcium Ca_{20}^{40} . For soft tissues, Z is usually up to 8. Basically, these are soft tissue atoms, such as H_1^1 , C_6^{12} , N_7^{14} , O_8^{16} .

If we analyze the difference in the linear coefficients of xray attenuation μ for bones and for soft tissues, it can be seen that the term τ for bones is much more than τ for soft tissues, since ρZ^3 for bones is much more than ρZ^3 for soft tissues. In this case, the distinction of the atomic numbers of the elements Z plays the main role in the difference of τ , and therefore of μ . Hence, the bones absorb X-rays much more strongly than soft tissues, so obtaining of a contrast x-ray image of a bone it is not a difficult task.

The difference in the attenuation of x-ray radiation by the soft tissues is due to a slight difference in their densities ρ , so the contrast of the soft tissue organs are significantly worse than the bones.

The mathematical fundamentals of computer X-ray tomography. Radon transformation

Let's write the Fourier transform for some closed function on the plane of the radius vector $f(\mathbf{r})$ (fig. 3):

$$F(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-ikr\cos\theta} d\mathbf{r}, \qquad (5)$$

where **k** is the vector argument of the Fourier transform or the wave number vector; angle θ is the angle between the vector arguments of the Fourier transform **k** and the radius vector **r**.

Using formula (5), we write the two-dimensional Fourier transform for the domain bounded by the function $f(\mathbf{r})$, i. e. for the region f(X, Y) (fig. 3):

$$F(k_X, k_Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(X, Y) \mathbf{e}^{-i(k_X X + k_Y Y)} \, dX dY, \tag{6}$$

where k_X , k_Y — the projections of the vector **k** on the X and Y coordinate axe.

Perform the rotation of the coordinate axes by the angle α . In this case, choose the angle α between the old coordinate *X* and the new coordinate *s*, so that the coordinate *s* is parallel to the vector **k**. The correlation of former coordinates *X*, *Y* and new coordinates *s*, *z* has the following form (fig. 3):

$$s = X\cos\alpha + Y\sin\alpha; \qquad (7)$$

$$z = -X\sin\alpha + Y\cos\alpha. \qquad (8)$$

The inverse relation follows from (7) and (8):

$$X = s\cos\alpha - z\sin\alpha; \qquad (9)$$

$$Y = s\sin\alpha + z\cos\alpha. \qquad (10)$$

We pass to (6) to the coordinates $Y = s\sin\alpha + z\cos\alpha$. Considering $k_X = k\cos\alpha$ and $k_X = k\sin\alpha$, and also the equality of the elements of the area in coordinates *X*, *Y* and *s*, *z* (the area when the axes are rotated to any angle does not change), i.e. dXdY = dsdz, we have

$$F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha) e^{-ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} ds dz.$$
(11)

The formula (11) can be rewritten in the form:

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha) dz \right) \mathbf{e}^{-iks} ds. (12)$$

 $F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) =$

Denoting

 $R(s, \alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} f(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha) dz, \quad (13)$ we obtain:

$$F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(s, \alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds.$$
(14)

The formula (13) is called the Radon transform of the function f(X, Y). Equation (14) is the Fourier transform of the function $R(s, \alpha)$ in the coordinate system s, z.

Thus, introducing the Radon transform (13), we pass from the two-dimensional Fourier transform (6) of the function $R(s, \alpha)$ to the one-dimensional Fourier transform (14) of the function $R(s, \alpha)$ i.e. in fact, we find a one-dimensional projection of the two-dimensional Fourier transform. Design, according to (14), is carried out on the coordinate axis *s*, i. e. in the *z* direction.

For the practical application of the Radon transform, one must know its inverse transformation. To find the inverse Radon transform, we start from the inverse two-dimensional Fourier transform corresponding to the direct Fourier transform (6):

$$f(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(k_X, k_Y) \mathbf{e}^{i(k_X X + k_Y Y)} dk_X dk_Y.$$
(15)

Taking into account that the direct Radon transform $R(s, \alpha)$ depends not only on the linear coordinate *s*, but also on the angular coordinate α , in the inverse Radon transform, only these two coordinates should be used. So, you need to go to the polar coordinates. In the polar coordinates is $dk_X dk_Y = k dk d\alpha$.

Consequently, the inverse Fourier transform (15) has the form:

$$f(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha.$$
(16)

We denote the Fourier transform (14) in the form:

$$\widetilde{R}(k, \alpha) = F(k\cos\alpha, k\sin\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(s, \alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds.$$
(17)

Consequently, the formula (16) can be represented in the form:

$$f(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \tilde{R}(k, \alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha.$$
(18)

The formula (18) can be considered as the inverse Radon transform and used to restore the function f(X, Y) by the Fourier transform $\tilde{R}(k, \alpha)$.

Recovery of an image using the Radon transform

Consider the following model problem. In an organism that is placed in a computer X-ray tomograph (see fig. 2), there is a pathological focus — an area with increased absorption of X-rays. The X-rays scattering is neglected. In this case, the linear coefficient of X-ray attenuation $\mu = \tau$ (see the formula (3)). Obviously, in solving of practical problems this approximation is unacceptable.

The pathological focus is irradiated with x-ray radiation with an initial intensity I_0 in z direction (fig. 4).

Since the linear absorption coefficient can have different values in different parts of the pathological focus, the Bouguer's law (1) should be written in the form:

$$I = I_0 \mathbf{e}^{-\sum_{z_0}^{+z_0} \mu(X, Y) dz}$$
(19)

Absorption outside the pathological focus is used as a reference frame and is not considered.

The indicator in the Bouguer's law (without the minus sign) will be called the x-ray optical density of the pathological focus:

$$D = \int_{-z_0}^{+z_0} \mu(X, Y) dz.$$
 (20)

The formula (20) can be considered as the Radon transform of the function $\mu(X, Y)$. The Radon transform is the projection of a linear absorption coefficient $\mu(X, Y)$ as functions of two variables on the *s* axis (fig. 4).

Let us consider an important case from the practical point of view of the dependence of the linear absorption coefficient on the coordinates in the form of the Gaussian curve:

$$\mu(X, Y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{X^2 + Y^2}{2\sigma^2}},$$
 (21)

where σ is a constant with length dimension.

We substitute (21) into the formula (20) and move to the coordinate system s, z by the expressions (9) and (10). As a result, we get:

$$D(s, \alpha) = \int_{-z_0}^{+z_0} \mu(s\cos\alpha - z\sin\alpha, s\sin\alpha + z\cos\alpha)dz =$$

= $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-z_0}^{+z_0} e^{-\frac{X^2 + Y^2}{2\sigma^2}} dz = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-z_0}^{+z_0} e^{-\frac{s^2 + z^2}{2\sigma^2}} dz.$ (22)

In (22) we have taken into account $X^2 + Y^2 = s^2 + z^2$. Replacing the limits of integration at infinity in (22), since integration proceeds throughout the pathological focus, we have:

$$D(s, \alpha) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{s^2 + z^2}{2\sigma^2}} dz = e^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}}.$$
 (23)

Fig. 4 shows a graph of the X-ray optical density as a projection of linear absorption coefficient at *s* axis.

Next, we postulate the problem of restoring the linear absorption coefficient on the basis of its projection.

We find the Fourier image of the linear absorption coefficient [11]:

$$\tilde{\mu}(k,\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s,\alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{e}^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}} \mathbf{e}^{-iks} ds =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{e}^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}} \cos(ks) ds = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}}.$$
(24)

– НАНО- И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА, Том 20, № 8, 2018 —

- 511

In finding (24) we used the parity of the function $D(s, \alpha)$ [12]

The resulting Fourier image is one-dimensional, since it does not depend on the angle α . Therefore, using the one-dimensional inverse Fourier transform [13], we find:

$$D(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{e}^{iks} dk = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{e}^{-\frac{k^2 \sigma^2}{2}} \mathbf{e}^{iks} dk = \mathbf{e}^{-\frac{s^2}{2\sigma^2}}, \quad (25)$$

which coincides with the expression (23).

To fully recover the linear absorption coefficient $\mu(X, Y)$ it is necessary to use the inverse Radon transform (18) and the formula (24):

$$\mu(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \tilde{\mu}(k, \alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha =$$

$$= \frac{\sigma}{(2\pi)^{3/2}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \mathbf{e}^{-\frac{k^{2}\sigma^{2}}{2}} \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha =$$

$$= \frac{\sigma}{(2\pi)^{3/2}} \int_{0}^{\infty} \mathbf{e}^{-\frac{k^{2}\sigma^{2}}{2}} \left(\int_{0}^{2\pi} \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} d\alpha \right) k dk =$$

$$= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \mathbf{e}^{-\frac{X^{2}+Y^{2}}{2\sigma^{2}}}.$$
(26)

Unfortunately, to analytically find the integral

 $\int_{0}^{2\pi} e^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} d\alpha$ it is not possible. The result of integration lies in the domain of generalized functions [14], therefore

it is impossible to successively calculate all the integrals in (26). However, this is not essential, because we know the general result of integration.

A different representation of formula (26) is possible. Writing the Fourier transform of the linear absorption coefficient for a particular design line with the equation $s - s_0 = 0$, we find

$$\widetilde{\mu}(k, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s, \alpha) \mathbf{e}^{-iks} ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s - s_0, \alpha) \times \mathbf{e}^{-ik(s - s_0)} ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s - s_0, \alpha) ds.$$
(27)

Substituting (27) into (26), we obtain

$$\mu(X, Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \tilde{\mu}(k, \alpha) \mathbf{e}^{ik(X\cos\alpha + Y\sin\alpha)} k dk d\alpha =$$

= $\frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\infty} \tilde{\mu}(k, \alpha) \mathbf{e}^{iks} k dk d\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(s - s_0, \alpha) \times h(s) ds d\alpha,$ (28)

where $h(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} e^{iks} k dk$ is the so-called filter function,

which can also be determined through generalized functions.

For an axisymmetric function of the linear absorption coefficient of the coordinates, its restore in one projection, at least in principle, is possible. This possibility is related to the independence of the X-ray optical density $D(s, \alpha)$ from the angle α (25).

If the function $\mu(X, Y)$ is not symmetric, then to restore it you need to know and other projections. Moreover, the more asymmetric the function, the more projections you need to know.

In practice, reconstruction of the function $\mu(X, Y)$ is performed in two ways: using the transformation algorithm and the expansion into series algorithm [3].

In the first case, the reconstruction of the image is carried out according to the Lissajous principle of graphical images construction of on the basis of the projections $D(s, \alpha)$ [9]. The transformations are conveniently carried out in the polar coordinate system. Bulky formulas suitable for use with a computer are represented, for example, in [3].

More often, the numerical realization of the inverse transformation formula (28) is applied, expanding the integrand into a series.

Conclusion

The X-ray computer tomography is a modern and effective method for diagnosing of diseases of the internal organs, in particular, detection of neoplasms.

From a mathematical point of view, the method is based on the Radon transform, which allows the design of a two-dimensional function of the linear absorption coefficient per line perpendicular to the X-ray direction. This allows us to find the necessary number of projections of the pathological focus in the body, directing X-rays at different angles in the section under investigation. In the following, using one of the possible methods, the pathological focus is reconstructed in the section under investigation.

References

1. Buzug T. M. Computed Tomography: From Photon Statistics to

M. Computed Tomography: From Photon Statistics to Modern Cone-Beam CT, Berlin, Springer, 2008, 526 p.
 2. Hsieh J. Computed Tomography: Principles, Design, Artifacts, and Recent Advances, 2nd ed., New Jersy, Wiley, 2009, 562 p.
 3. Herman G. T. Image Reconstruction from Projections. The Fun-damentals of Computerized Tomography, NY, Academic Press. A Sub-sidiary of Harcourt Brace Jovanovich, Publishers, 1980, 302 p.

4. Deans S. R. The Radon Transform and Some of its Applications, Malabar Florida, Krieger Publishing Company, 1993, 289 p.

 Mao Y., Fahimian B. P., Osher S. J., Miao J. Development and Optimization of Regularized Tomographic Reconstruction Algorithms, *IEEE Trans. Image Proc.*, 2010, vol. 19, pp. 1259–1268. 6. **Thibault J. B., Sauer K., Bouman C., Hsieh J.** A Three-dimen-

sional Statistical Approach to Improved Image Quality for Multislice helical CT, *Med. Phys.*, 2007, vol. 34, no. 2, pp. 4526–4544. 7. Elbakri I. A., Fessler J. A. Statistical X-ray Computed Tom-

ography Image Reconstruction with Beam Hardening Correction, Proc. of SPIE Conf. on Medical Imaging: Image Processing, 2001, vol. 4322, pp. 1–13.

8. **Quinto T. E.** Singularities of the X-ray transform and limited data tomography in R² and R³, *SIAM J. Math. Anal.*, 1993, vol. 24, no. 5, pp. 1215–1225. 9. Volobuev A. N. Osnovy meditsinckoi i biologicheskoi fiziki, Sa-

mara, Samarski dom pechati, 2011, 672 p. (in Russian).

Blokhin M. A. Fizika rentgenovskikh luchei, Moscow, Gos.
 Izd-vo Tekh.-teor. Lit., 1957, pp. 151, 154. (in Russian).
 Dwight H. B. Tables of Integrals and Other Mathematical Data,

NY, The MacMillan Company, 1961, 228 p.

12. Mishkis A. D. Lektsii po vysshei matematike, Moscow, Nauka, 1969. 575 p. (in Russian).

13. Korn G. A., Korn T. M. Mathematical Handbook for Scientists and Engineering, NY, MGraw Hill Book Company. Inc., 1961. 720 p.

14. Tereshchenko S. A. Emission Tomography of Radially Symmetric Objects and Exponential Abelian Transform, Tech. Phys., 2005, vol. 50, iss. 2, pp. 152-157.

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 З. В. Наумова.

Сдано в набор 21.06.2018. Подписано в печать 23.07.2018. Формат 60×88 1/8. Заказ MC0818. 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

Рисунки к статье И. В. Синёва, Д. А. Тимошенко, Н. Д. Жукова, В. П. Севостьянова

«СВОЙСТВА МЕХАНИЧЕСКИ **ДИСПЕРГИРОВАННЫХ ДО НАНОРАЗМЕРНОГО** состояния монокристаллов ПОЛУПРОВОДНИКОВ А₃В₅»

I.V. Sinev, D. A. Timoshenko, N. D. Zhukov, V. P. Sevostyanov

«PROPERTIES OF MECHANICALLY DISPERSED NANO-SIZED SINGLE CRYSTALS **OF III-V SEMICONDUCTORS»**

Рис. 2. Типичное СЭМ-изображение поверхности слоя субмикрометровых частиц полупроводников АзВ5

Fig. 2. Typical SEM image of the surface layer of the submicrometer particles of III-V semiconductors



Det: SE View field: 6.613 µm SM: RESOLUTION WD: 8 246 mm

2 µm



Рис. 3. Типичные СТМ-изображения поверхности МЗС с несидементированными (а) и сидементированными (b) частицами полупроводников А₃В₅

Fig. 3. Typical STM images of the MGL surface with non-sediment (a) and sediment (b) particles of III-V semiconductors

Рисунок к статье Д. М. Григорьева, И. В. Годовицына, В. В. Амеличева, А. В. Илькова «ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ АКУСТИЧЕСКОГО ОТВЕРСТИЯ НА АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНУЮ ХАРАКТЕРИСТИКУ МЭМС-МИКРОФОНА»

D. M. Grigor'ev, I. V. Godovitsyn, V. V. Amelichev, A. V. Il'kov

«THE INFLUENCE OF ACOUSTIC PORT PARAMETERS ON FREQUENCY RESPONSE OF MEMS-MICROPHONE»



Рис. 8. Эволюция акустических отверстий в корпусе скрипки [12]

Vormalized Flow Velocity Fig. 8. Evolution of the acoustic ports in violins [12]

Издательство «НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ» выпускает научно-технические журналы



Ежемесячный междисциплинарный теоретический и прикладной научно-технический журнал

НАНО-и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

В журнале освещаются современное состояние, тенденции и перспективы развития нано- и микросистемной техники, рассматриваются вопрос разботки и внедрения нанои микросистем в различные области науки, технологии и производства.

> Подписной индекс по каталогу «Пресса России» – 27849



Подписной индекс «Пресса России» – 94032

Научно-практический и учебно-методический журнал

БЕЗОПАСНОСТЬ жизнедеятельности

В журнале освещаются достижения и перспективы в области исследований, обеспечения и совершенствования защиты человека от всех видов опасностей производственной и природной среды, их контроля, мониторинга, предотвращения, ликвидации последствий аварий и катастроф, образования в сфере безопасности жизнедеятельности. Ежемесячный теоретический и прикладной научнотехнический журнал ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В журнале освещаются современное состояние, тенденции и перспективы развития основных направлений в области разработки, производства и применения информационных технологий.



Подписной индекс «Пресса России» – 94033



Подписной индекс «Пресса России» – 27848

Ежемесячный теоретический и прикладной научно-технический журнал

МЕХАТРОНИКА, АВТОМАТИЗАЦИЯ, УПРАВЛЕНИЕ

В журнале освещаются достижения в области мехатроники, интегрирующей механику, электронику, автоматику и информатику в целях совершенствования технологий производства и создания техники новых поколений. Рассматриваются актуальные проблемы теории и практики автомати ческого и автоматизированного управления техническими объектами и технологическими процессами в промышленности, энергетике и на транспорте.

Теоретический и прикладной научно-технический журнал ПРОГРАММНАЯ

инженерия В журнале освещаются состояние и тенденции развития основных направлений индустрии программного обеспечения, связанных с проектированием, конструированием, архитектурой, обеспечением качества и сопровождением жизненного цикла программного обеспечения, а также рассматриваются достижения в области создания и эксплуатации прикладных программно-информационных систем во всех областях челове

ческой деятельности.



Подписной индекс «Пресса России» – 39795

Адрес редакции журналов для авторов и подписчиков: 107076, Москва, Стромынский пер., 4. Издательство "НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ". Тел.: (499) 269-55-10, 269-53-97. Факс: (499) 269-55-10. E-mail: antonov@novtex.ru