

ISSN 1813-8586

НАНО-И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА



- Нанотехнологии
- Зондовая микроскопия
- Микромашины и наносистемы
- Молекулярная электроника
- Биоактивные нанотехнологии
- Элементы датчиков и биочипы
- Микроэлектромеханические системы
- Микрооптоэлектромеханические системы
- Биомикроэлектромеханические системы

Том 23, № 1, 2021

МИНПРОМТОРГ
РОССИИ

EPIC
European Photonics
Industry Consortium



ТПП РФ



Главное событие отрасли
в России и странах СНГ

ФОТОНИКА

МИР
ЛАЗЕРОВ
И ОПТИКИ

30 марта – 2 апреля 2021

При поддержке Министерства
промышленности и торговли РФ

Под патронатом ТПП РФ

15-я юбилейная международная
специализированная выставка
лазерной, оптической
и оптоэлектронной техники



Реклама 12+



Россия, Москва, ЦВК «ЭКСПОЦЕНТР»
www.photonics-expo.ru



ЛАЗЕРНАЯ АССОЦИАЦИЯ



ЭКСПОЦЕНТР

НАНО- и МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

Том 23. № 1 ✧ 2021

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

ISSN 1813-8586 DOI: 10.17587/issn1813-8586

Издается 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:

Асеев А. Л., д.ф.-м.н., проф., акад. РАН

Грибов Б. Г., д.х.н., чл.-кор. РАН

Квардаков В. В., д.ф.-м.н., проф., акад. 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)

Нарайкин О. С., д.т.н., проф., чл.-кор. РАН

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

Чапльгин 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.

Дайнеко А. В., к.х.н.

Кальнов В. А., к.т.н.

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.

Тимошенко С. П., д.т.н.

Хабибуллин Р. А., к.ф.-м.н., доц.

Шашкин В. И., д.ф.-м.н., проф.

Шубарев В. А., д.т.н., проф.

Редакция:

Антонов Б. И. (директор изд-ва)

Лысенко А. В. (отв. секретарь)

Чугунова А. В. (науч. ред.)

Шетинкин Д. А. (сайт)

СОДЕРЖАНИЕ

Лучинин В. В., Мальцев П. П. Нанотехнологии в новом технологическом укладе 3

НАНОТЕХНОЛОГИИ

Деспотуги А. Л., Андреева А. В. Наноионика — развивающаяся информационная система. Часть 3. Генерация прогностической информации и роль стратегического инновационного менеджмента в развитии наноионики 6

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

Обухов И. А. Многокомпонентная модель переноса заряда в квантовых полупроводниковых приборах 24

ЭЛЕМЕНТЫ МНСТ

Хмельницкий И. К., Айвазян В. М., Алексеев Н. И., Бройко А. П., Лучинин В. В., Тестов Д. О. Исследование ионных ЭАП-актюаторов с металлическими и полимерными электродами в водной среде 32

Kamaljeet Singh, Sharma S. V. Thin Film Based Micro-Machined Sensor Development and Mitigation of Process Challenges 43

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

Кульчицкий Н. А. Метод контроля атомных и молекулярных пучков в молекулярно-лучевой эпитаксии 47

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:

по каталогу "Пресса России" (индекс 27849)

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

Адрес для переписки:

107076, Москва,

Стромынский пер., д. 4

e-mail: nmst@novtex.ru

Учредитель:

Издательство "Новые технологии"

NANO- and MICROSYSTEMS TECHNOLOGY

(Title "NANO- I MIKROSISTEMNAYA TEKHNIKA")

ISSN 1813-8586 DOI: 10.17587/issn1813-8586

Vol. 23

No. 1

2021

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:

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
 Kvardakov V. V., Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Acad. RAS
 Labunov V. A. (Belorussia), Sci. (Tech.), Acad. NASB
 Narajkin O. S., Dr. Sci. (Tech.), Prof., Cor.-Mem. RAS
 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.)
 Dayneko A. V., Cand. Sci. (Tech.)
 Kalnov V. A., Cand. Sci. (Tech.)
 Karjakin A. A., Dr. Sci. (Chem.), Prof.
 Khabibullin R. A., Cand. Sci. (Phys.-Math.), Ass. Prof.
 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.
 Timoshenkov S. P., Dr. Sci. (Tech.)
 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. (Research Editor)
 Shchetinkin D. A. (site)

The Journal is included in the international databases of the chemical sciences — Chemical Abstracts Service (CAS) 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.

CONTENTS

Luchinin V. V., Maltsev P. P. Nanotechnologies in a new technological order 3

NANOTECHNOLOGY

Despotuli A. L., Andreeva A. V. Nanoionics — the Developing Informative System. Part 3. Generation of Prognostic Information and the Role of Strategic Innovation Management in the Development of Nanionics 6

MODELLING AND DESIGNING OF MNST

Obukhov I. A. Multicomponent Model of Charge Transport in Quantum Semiconductor Devices 24

MICRO- AND NANOSYSTEM TECHNIQUE ELEMENTS

Khmelniitskiy I. K., Aivazyan V. M., Alekseyev N. I., Broйко A. P., Luchinin V. V., Testov D. O. Investigation of Ionic EAP Actuators with Metal and Polymer Electrodes in Aqueous Medium 32

Kamaljeet Singh, Sharma S. V. Thin Film Based Micro-Machined Sensor Development and Mitigation of Process Challenges 43

MOLECULAR ELECTRONICS

Kulchitsky N. A. Atomic and Molecular Beams Control in Molecular Beam Epitaxy 47

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

НАНОТЕХНОЛОГИИ В НОВОМ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ УКЛАДЕ

Новый технологический уклад может быть определен как сфера разумной созидательной деятельности человека, основанной на гармонизированной интеграции естественного и искусственного интеллектов без потери культурной, социальной и личностной уникальности человека. В системе генерации и трансфера новых знаний для инновационного научно-технологического развития и кадрового обеспечения глобальной конкурентоспособности России в новом технологическом укладе, с учетом прогнозируемых мировых тенденций формирования гармонизированной с человеком ноосферы будущего, безусловно, доминирует нанотехнология как системное трансдисциплинарное направление.

Целью данной статьи является анализ направлений для концентрации интеллектуальных и инфраструктурных ресурсов, определяющий создание новых материалов и веществ с ранее неизвестными, но прогнозируемыми и востребованными свойствами.

Естественно-научный базис — нанотехнологии

Нанотехнология в современном понимании — это междисциплинарная "сквозная" технология, в основе которой лежит атомно-молекулярный дизайн надмолекулярных композиций в интеграции с физико-химическими процессами структуро- и формообразования, в том числе материалов и их композиций с ранее неизвестными, но прогнозируемыми и, безусловно, востребованными свойствами. Целью неоднозначно воспринимаемого понятия "нанонаука" является описание, обеспечение и предсказание свойств этих синтезируемых материальных объектов с проявлением наномасштабных факторов.

В рамках анализа базовых тенденций, характеризующих облик шестого технологического уклада, в качестве системообразующих доминирующих технологий следует выделить: атомно-молекулярную инженерию; биоинженерию и робототехнику; инфокогнитивные и геномные технологии; квантово-волновые технологии и биоэнергетику.

Основным системным стратегическим направлением исследований в области естественно-научного базиса шестого технологического уклада, безусловно, становится использование ранее неизвестных свойств материалов и композиций, возникающих при переходе к объектам:

- свойства которых зависят от размерного и конформационного факторов;
- представляющих собой интеграцию искусственно и естественно упорядоченных систем;
- интегрирующих материаловедческий базис неорганической и органической природы;
- в основе структурной организации которых лежат неравновесные процессы;
- в основе функционирования которых лежит комплекс кооперативно-синергетических процессов и явлений.

К наиболее характерным проявлениям "наномира" следует отнести:

- появление нетрадиционных видов симметрии и особых видов сопряжения границ раздела, конформаций (кластеров, частиц, комплексов) с динамически перестраиваемой структурой;
- доминирование над процессами искусственного упорядочения явлений самоупорядочения и самоорганизации, отражающих проявление эффектов матричного копирования и особенностей синтеза в условиях, далеких от равновесия;
- высокую "полевую" (электрическую, магнитную) активность и "каталитическую" (химическую) избирательность поверхностей ансамблей на основе наночастиц, включая интегрированные композиции неорганической и органической природы;
- особый характер протекания процессов передачи энергии, заряда и конформационных изменений, отличающихся низким энергопотреблением, высокой скоростью и носящих признаки кооперативного синергетического процесса.

В рамках решения задач по синтезу и практическому использованию объектов с указанными выше свойствами необходимо определить и возможные приоритетные направления **поисковых исследований** для обеспечения интеллектуально-

го базиса инноваций в новом технологическом укладе:

- зависимость свойств материалов и систем от характеристических размеров;

- нетрадиционные виды симметрии и конформации с динамически перестраиваемой структурой;

- передача энергии, заряда и информации на основе кооперативных синергетических процессов;

- молекулярное распознавание как базис селективности и избирательности процессов;

- процессы самоформирования, самоупорядочения и самоорганизации;

- конвергентные системы — интеграция создаваемых человеком искусственных неорганических систем и объектов биоорганической природы.

В качестве основных направлений **прикладных исследований**, определяющих продуктивную модель развития нанотехнологий, можно выделить:

- распределенные самоорганизующиеся рефлексивные информационные сети;

- полифункциональный адаптивный человеко-машинный интерфейс;

- искусственные органы и нефармакологическая коррекция состояния биообъектов;

- робототехнические биозамещающие системы;

- биомиметические функциональные аналоги и принципы конструирования;

- бионические, в том числе когнитивные, алгоритмы и принципы функционирования;

- искусственное модифицирование на генетическом, клеточном и органном уровнях;

- искусственное модифицирование на психофизиологическом уровне.

Бионанointерфейс

В практику создания наукоемких инновационных систем достаточно широко входит новый терминологический базис: конвергентные системы, бионические и когнитивные технологии.

Следует обратить внимание на тот факт, что, оценивая конструктивно-функциональные, энергетические и информационные достоинства объектов органической природы, разработчики пытаются наделить искусственно создаваемые технические системы отдельными свойствами биосистем.

Особую роль при этом приобретает именно "интерфейс" между живой и неживой природой. Современное состояние вопроса в области разработки и создания устройств на основе биосред и их аналогов характеризуется следующими направлениями:

- использование биосред в традиционных приборах, например, применение в качестве материалов затвора полевого транзистора или оптического волновода;

- использование биосред в реализации прецизионной технологической операции, например, биолитографии с наномолекулярным разрешением;

- создание биосенсоров и актюаторов инвазивного и неинвазивного типов для диагностики и биокоррекции состояния организма;

- создание функциональных биопротезов, обеспечивающих замещение утраченных органов или функций (слух, зрение и даже обоняние);

- попытка создания сверхмощных систем искусственного интеллекта на основе бионейро чипов и сред с нейроподобной структурой.

При рассмотрении биосред как одного из элементов базиса для создания конвергентных искусственных интеллектуальных и сенсорных наносистем будущего, в первую очередь, следует обращать внимание на функционально-технологические особенности, определяемые структурными конформационными свойствами биомолекул и композиций на их основе.

Однако следует отметить и ряд наиболее значимых факторов для появления **новых угроз в условиях "наномира"**:

- малые характеристические размеры частиц и особый характер их упорядочения, обеспечивающие энергетическую и пространственную доступность транспортного заряда, энергии и конформационных изменений;

- энергетическая, полевая и "вещественная" неравновесность поверхности, охватывающая значительные объемы наночастиц и наноконпозиций;

- усиление роли различных видов размерных эффектов вследствие значительной площади границ раздела в условиях наноконпозиций;

- проявление в условиях больших коллективов энергетически активных наночастиц и нетрадиционных механизмов упорядочения, переноса энергии и заряда.

При оценке безопасности наноматериалов, в первую очередь, следует учитывать их воздействие на такие важнейшие биологические харак-

теристики, как проницаемость биомембран, генотоксичность, активность окислительно-восстановительных процессов, включая перекисное окисление липидов, биотрансформацию и элиминацию.

Многие факторы свидетельствуют о том, что наноматериалы могут обладать совершенно иными физико-химическими свойствами и биологическим (в том числе токсическим) действием, чем вещества в обычном состоянии, в связи с чем они должны быть отнесены к новым видам материалов, а следовательно, и продукции, при этом **характеристика потенциального риска** для здоровья и состояния среды обитания становится обязательной.

Многообразие технологических траекторий в различных областях научных исследований и производства при сохранении единого системного естественно-научного подхода к процессам атомно-молекулярного дизайна структуро- и формообразования надмолекулярных композиций неорганической и органической природы, включая их гибридизацию, характеризуют современную нанотехнологию как сквозную технологию создания новых материалов и веществ с ранее неизвестными, но прогнозируемыми и востребованными свойствами.

В рамках формирования нового технологического уклада приоритетными инновационными направлениями развития нанотехнологии будут являться:

— дизайн и синтез искусственных природоподобных материалов неорганической и орга-

нической природы и их гибридных композиций для интеллектуальных, бионических систем и биозамещения;

— технологии атомно-молекулярной сборки и формирование органо-неорганического интерфейса для целей биосенсорики и нейроинтерфейсов;

— технологии аддитивного сверхпрецизионного 2D- и 3D-формообразования, включая органо-печать для биозамещения сенсорных и конструкционно-функциональных элементов биосред;

— атомно-молекулярный синтез искусственных композиционных материалов с критической миссией для экстремальных и специальных условий эксплуатации;

— квантово-волновые технологии взаимодействия с биообъектами на атомно-молекулярном и органо-физиологическом уровнях в целях неинвазивной диагностики нефармакологической коррекции и управления.

Указанная выше совокупность инновационных трансдисциплинарных направлений в нанотехнологической сфере позволяет констатировать тот факт, что целевые функции при формировании нового технологического уклада могут быть определены как достижение нового качества жизни в условиях цифровой трансформации общества с обеспечением коммуникабельности, кибер- и биобезопасности при сохранении социальной, культурной и личностной уникальности человека.

А. Л. Деспотули, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., despot@iptm.ru,

А. В. Андреева, д-р физ.-мат. наук, проф., вед. науч. сотр.,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук (ИПТМ РАН), г. Черноголовка, МО, Россия

НАНОИОНИКА — РАЗВИВАЮЩАЯСЯ ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА. Часть 3. ГЕНЕРАЦИЯ ПРОГНОСТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ И РОЛЬ СТРАТЕГИЧЕСКОГО ИННОВАЦИОННОГО МЕНЕДЖМЕНТА В РАЗВИТИИ НАНОИОНИКИ

Поступила в редакцию 02.12.2020

Представлен критический обзор этапов становления, развития и современного состояния наноионики в России и в мире. Наноионика — наука, технология и применение явлений быстрого ионного транспорта в твердотельных приборах и наноструктурах. Наноионика рассматривается как развивающаяся информационная система, ее история впервые анализируется в терминах динамической теории информации Д. С. Чернавского и в контексте влияния стратегического инновационного менеджмента. В заключительной части обзора выполнен углубленный методологический анализ эволюции наноионики в окружении смежных дисциплин (наноархитектоника и ионитроника). Целью работы является развитие методологии научного знания и стратегического менеджмента. Анализ эволюции наноионики осуществлен в терминах конъюнктурной и прогностической информации, соотношений класс-подкласс между атрибутивными пространствами конкурирующих дисциплин. Показано, что наноархитектоника и ионитроника не могут выступать в качестве метадисциплин, так как не имеют эмерджентных атрибутов, несовместимых с атрибутами нанотехнологии, понимаемой в широком смысле. Также в настоящее время интерфейсная наноархитектоника не обобщает наноионику ввиду отсутствия в тезаурусе новых атрибутов. Полученные результаты выходят за рамки взаимоотношения нанодисциплин, поскольку используемая методология базируется на определении информации и обращается к проблеме механизма генерации прогностической информации.

Ключевые слова: наноионика, динамическая теория информации, стратегический инновационный менеджмент

Введение

Наноионика — наука, технология и применение явлений, материалов и приборов, отличающихся быстрым ионным транспортом (БИТ) на наномасштабе. Наноионика характеризуется специфическими атрибутами, является подклассом ионики твердого тела, где доминирует макроскопический подход, подклассом нанонауки/нанотехнологии, формирует пересечения с микроэлектроникой/микросистемной техникой. Термин и концепция "наноионика" впервые предложены в России в 1992—1993 гг. [1, 2].

Работа представляет заключительную часть проблемно-аналитического обзора по истории возникновения и развития прикладной и теоретической наноионики в мире. В литературе имеется множество отечественных/зарубежных статей и книг по отдельным направлениям наноионики, но проблемно-аналитический обзор, рассматривающий наноионику как развивающуюся информационную систему, ранее не публиковался.

В части 1 обзора [3] были описаны истоки наноионики, этапы ее становления и развития в нашей стране, в части 2 [4] был представлен па-

нормальный взгляд на развитие наноэлектроники за рубежом. Среди множества работ зарубежных авторов выделены те, которые отличаются *"thinking towards nanoionics"*, т. е. практическим применением теории БИТ на наномасштабе. Поскольку сознание не может адекватно отразить реальность, если в тезаурусе мышления нет нужных понятий и образов, то в работе [4] предлагается схема корректного введения новых научных терминов и критически анализируются новые направления зарубежных исследований, близкие к наноэлектронике, такие как наноархитектоника [5] и ионитроника [6].

Научные дисциплины развиваются, меняют свои границы, появляются пересечения и возникают новые дисциплины. Проблемы эволюции, дифференциации и конвергенции научных дисциплин [7–9] находятся в фокусе внимания ученых и стратегического инновационного менеджмента (СИМ), в задачи которого входит поиск точек зарождения знаний, технологий и областей массового спроса новой продукции [10].

Согласно ГОСТ [11] СИМ фокусируется на стратегиях "прорывных" продуктов, они обеспечивают исключительные конкурентные преимущества, так что у других организаций аналогичный продукт появится с запозданием. Если "прорывной" продукт создается в процессе последовательного развертывания ряда стадий (от создания условий для выполнения R & D по определенным направлениям до деятельности организаций, предлагающих продукт потребителю), то вероятность его появления определяется формулой

$$P = \prod_i^N P_i, \quad (1)$$

где P_i — вероятность успешного прохождения i -й стадии в заданный промежуток времени. Модель последовательных N стадий выявляет губительную роль слабого звена: единственное малое P_x делает инновационный проект провальным.

В части 3 обзора наноэлектроника впервые рассматривается как развивающаяся информационная система, т. е. система, которая способна воспринимать (рецептировать), запоминать, обрабатывать и генерировать информацию. Результаты развития наноэлектроники и перспективы R & D анализируются в ракурсе положений книги Д. С. Чернавского "Динамическая теория ин-

формации" (ДИ) [12, 13] и с точки зрения влияния, которое СИМ должен оказывать на успехи конкретной науки.

Завершающая часть обзора имеет целью показать фундаментальную роль информации и СИМ в развитии наноэлектроники. Другая задача — анализ эволюции, дифференциации и конвергенции наноэлектроники в среде смежных научных дисциплин. В настоящее время нам известна только одна теоретическая система — ДИ, которая использует корректное определение информации, связанное с механизмом ее генерации.

Анализ эволюции развивающихся информационных систем предложено выполнять в контексте институционального влияния СИМ, который впервые введен в теорию информации как дополнительный эндогенный фактор. Институциональность подразумевает уставную обязанность СИМ на конкурентной основе заниматься поиском областей зарождения знаний/технологий/массового спроса продукции и отвечать за вывод научно-технической сферы России на передовые позиции.

Факты и интерпретации, представленные в работе, должны учитываться при разработке новых научных дисциплин, междисциплинарном синтезе, а также как теоретическая основа деятельности СИМ. Предложенный подход позволяет приблизиться к выработке новой методологии и системному анализу развития науки.

Что такое информация?

Осуществление R & D и деятельность СИМ критически зависят от генерации информации. Методология науки также должна начинаться с ответов на два взаимосвязанных вопроса: 1. Что такое информация? 2. Как ее можно генерировать? Только после этого возникает третий вопрос о языках и аксиомах для количественного определения информации. Однако в большинстве учебников, научных работ и монографий по теории информации, методологии науки, инновационному менеджменту и менеджменту знаний [11, 14–24] тема методологии начинается с третьего вопроса, а определение информации часто отождествляется с количеством информации.

При выборе одного варианта из n возможных, реализующихся с априорной вероятностью

p_i ($i = 1, 2, \dots, n$), количество информации I по Шеннону [12, 13] определяется формулой

$$I = -\sum_i^n p_i \log_2 p_i; \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2)$$

Если варианты равновероятны ($p_i = 1/n_i$), то $I = \log_2 n$ (измеряется в битах).

Энциклопедии (Википедия, Кембриджский словарь, Стэнфордская философская энциклопедия), учебники/научные труды и ГОСТ [11, 14—24] не определяют корректно термин "информация". Как пример, в современном учебнике по методологии науки [19] термин информация в разных контекстах упоминается более 60 раз, но определение информации отсутствует. Определения информации в энциклопедиях и учебниках используют взаимосвязанные термины. Получаются тавтологии, например, "информация — это знания" или "информация означает порядок..." [12, 13]. В ГОСТ [24] находим: "...информация: данные в контексте, которому приписывается определенный смысл. Понятие "информация" согласуется с понятием "данные" в заданном контексте. Является источником знаний". Проблема подобных тавтологических определений заключается в том, что механизм генерации информации остается вне рассмотрения.

Философы для понимания места информации в системе познания выстраивают иерархические уровни [18]: "Обычно информация определяется с точки зрения данных, знания — с точки зрения информации, мудрость — с точки зрения знаний, однако при описании процессов, которые преобразуют элементы, находящиеся ниже в иерархии, в элементы, находящиеся выше, наблюдается меньший консенсус, что приводит к отсутствию дефиниционной ясности". Сказанное — правильно, но недостаточно, нужны новые характеристики-атрибуты.

Расширение категориального пространства — универсальный метод познания, который имеет параллели с теоремами Курта Геделя о неполноте: 1) всякая система аксиом, начиная с определенного уровня сложности, либо внутренне противоречива, либо неполна; 2) логическая полнота (или неполнота) любой системы аксиом не может быть доказана в рамках этой системы, для ее доказательства или опровержения требуются дополнительные аксиомы [25].

Наш поиск выявил следующие фундаментальные определения информации.

Норберт Винер в книге 1948 года "Кибернетика или управление и связь в животном и машине" [26] писал: "Одна из простейших, наиболее унитарных форм информации — запись выбора между двумя одинаково вероятными простыми альтернативами, одна или другая из которых обязательно произойдет, например, выбор между орлом и решкой при подбрасывании монеты".

В своей посмертно опубликованной книге "Возникновение биологической организации" (1964 г.) Генри Кастлер определяет информацию в биоконтексте метафорически и многословно [27]: "Запоминание случайного выбора — обычный способ возникновения информации". Подобно процессу подбора цифр для открытия секретного сейфа "... выбор какой-то определенной последовательности и закрепление этого выбора (введение цифр в механизм сейфа) создают информацию" [27]. Слова "запись выбора" [26] и "запоминание выбора" [27] можно считать эквивалентными. Концептуальное мышление преимущественно метафорично [28]. Н. Винер [26] и Г. Кастлер [27] использовали метафору, идентифицирующую выбор конкретных комбинаций с генерацией информации. Концептуальная метафора помогла классикам выйти за пределы стандартных подходов при определении информации.

В работах [12, 13] Д. С. Чернавский провел рецепцию — извлек ценную информацию из определения Г. Кастлера [27] и, ссылаясь только на слова Н. Винера "информация есть информация, а не материя и не энергия" [12], впервые дал обобщенное, четкое и лаконичное определение информации, признавая приоритет Г. Кастлера: "Информация есть случайный и запомненный выбор одного варианта из нескольких возможных и равноправных". Роль случая в генерации ценной информации подчеркнул А. Гейм в названии своей статьи "Nobel Lecture: Random Walk to Graphene" [29].

Таким образом, впервые корректное метафоричное определение информации было дано Н. Винером, а не Г. Кастлером. Этот факт удивляет, так как, если имя биофизика Г. Кастлера не очень широко известно в научном сообществе, то имя основателя кибернетики Н. Винера знакомо всем ученым. Непонятно также, почему определение информации, введенное Н. Винером, не обсуждается в энциклопедиях, словарях, учебниках и научных публикациях, например, в работах [11, 14—24], учитывая, что методология R & D и деятельность СИМ должны бази-

роваться на научном понимании механизма генерации "значимых данных" (идей инноваций).

Определение Винера—Кастлера—Чернавского не противоречит многим другим, но в отличие от них дает представление о механизме генерации информации [30]. Необходимо сделать выбор и запомнить его. Выбор может быть сделан в результате двух различных процессов — рецепции (приема) и генерации информации. Рецепция информации — выбор, предопределенный извне (т. е. путем наблюдения, предшествующими событиями, или прямым указанием). Генерация информации — свободный (не предопределенный), случайный выбор. В обоих случаях способность системы принимать или генерировать информацию зависит от информации, которую система уже содержала. Однако генерация новой информации возможна только в нестабильных системах, подверженных случайным воздействиям ("шумы") [30].

Основные понятия динамической теории информации Д. С. Чернавского

Для усиления положительной обратной связи между научными исследованиями, эффективностью СИМ и прогностической информацией необходима передовая методология, опирающаяся на корректное определение информации. По мнению авторов обзора, в книге Д. С. Чернавского [12] предложена и развита передовая методология науки. Книга не издана за рубежом, но основные положения ДТИ представлены в 2000 г. в обзорной статье [13], которая имеет и английскую версию. Поисковая система Google дает ~50 ссылок на [13], большинство из них даны в работах российских авторов. Таким образом, основные положения ДТИ до сих пор плохо известны и не используются мировым научным сообществом.

ДТИ оперирует в расширенном атрибутивном пространстве, что позволяет избежать тавтологий в определении информации. В этом разделе мы кратко остановимся на основных понятиях ДТИ.

Информация как понятие разделяется на несколько типов и характеризуется следующими прилагательными: условная/безусловная; семантическая/синтаксическая (кодовая); ценная; прогностическая/конъюнктивная и др. Условная информация определяется выбором, который сделан коллективом субъектов в результате их взаимо-

действия: общения, договоренности, условности и борьбы [30]. Символ рассматривается как первичный акт генерации условной информации. Соответствующие примеры: код (например, генетический), алфавит, язык и т. п. Условная информация подразделяется на кодовую и семантическую (смысловую). Кодовая информация обеспечивает соответствие между условными символами и реальными предметами (действиями). Антитеза условной информации — безусловная, т. е. объективная информация, она рецептируется из окружающей среды (непосредственно или с помощью приборов). Семантическая информация может быть как условной (например, сообщение о новом коде), так и безусловной (сообщение о новом результате измерения). Кодовая информация является носителем семантической и обеспечивает ее передачу.

Ценность информации субъективна, так как зависит от цели. Множество вариантов, из которых делается выбор, формируется в соответствии с целью. Количественная оценка ценности информации дана А. А. Харкевичем [31]:

$$W_i = \log_2(P_i^{fin} / P_i^{in}), \quad (3)$$

где W_i — ценность i -й информации (выбор i -го варианта); P_i^{fin} — апостериорная вероятность достижения цели после получения (рецепции или генерации) i -й информации; P_i^{in} — априорная вероятность достижения цели до получения информации. При этом $0 < P_i^{fin} < 1$ и $-\infty < W_i < W_{max}$. Если $P_i^{fin} > P_i^{in}$, то ценность положительна. Если $P_i^{fin} < P_i^{in}$, то ценность информации отрицательна и такая информация называется дезинформацией. Таким образом, понятие "цель" и "ценная информация" взаимосвязаны и в отсутствии цели любая информация имеет нулевую ценность. Поскольку ценность информации — субъективна, то новая информация может скорректировать цель, что ведет к эволюции ценности информации. В реальных задачах обычно фигурирует только ценная информация. Современные информационные системы способны использовать информацию для достижения цели и обрабатывать информацию, извлекая из нее ценную.

Важно знать характерное время сохранения ценности информации. В работе [12] рассматриваются три основных временных варианта. Асимптотическая ценность: информация сохраняется на время (τ_s) много большее, чем время

эволюции (τ_{ev}) информационной системы, т. е. $\tau_s \gg \tau_{ev}$. Прогностическая ценность: информация сохраняется на время $\tau_s \approx \tau_{ev}$. Конъюнктивная ценность: информация сохраняется на время $\tau_s \ll \tau_{ev}$. Значение прогностической информации субъективно и зависит от мнения экспертов. Если эксперты придерживаются стандартных интерпретаций, противоречащих новым результатам, то прогностическая информация оценивается такими экспертами отрицательно. Однако со временем значение прогностической информации закономерно возрастает, а значение конъюнктивной информации меняется в обратную сторону.

Оценка научных результатов в области естественных наук опирается на рецепцию безусловной информации от природы и генерацию условной (теоретической) информации. Успешность исследователя в научном сообществе зависит от того, в какой степени алгоритм (язык) описания новых результатов является общепринятым.

Согласно [12] *тезаурус* — информация, содержащаяся в системе на данном уровне, необходимая для рецепции (или генерации) информации на следующем уровне. В развивающейся системе выбор варианта развития происходит в неустойчивом состоянии системы, которому соответствует точка бифуркации. После сделанного выбора (переход с 1-го на 2-й уровень) система развивается устойчиво вплоть до следующей бифуркации, где также делается выбор, но из другого множества вариантов (переход со 2-го уровня на 3-й и т. д.). Информация 1-го уровня является тезаурусом для 2-го и последующих уровней. Информация, поступающая со стороны, имеет отношение ко всем уровням, а не к данному. Тезаурус необходим для выделения ценной информации для данного уровня.

Поскольку информационная система способна воспринимать, запоминать, обрабатывать и генерировать информацию, то она должна удовлетворять следующим условиям [12]:

1. Мультистабильность системы: имеется $n \geq 2$ устойчивых состояний и может быть осуществлен выбор одного из них.

2. Выбранное состояние запоминается, т. е. сохраняется достаточно долго, при этом динамическая система устойчиво движется по определенной траектории в фазовом пространстве (действительные части всех чисел Ляпунова отрицательны).

3. Системы, способные генерировать информацию, должны содержать "перемешивающий

слой". Необходимо сочетание хаоса (он обеспечивает случайность выбора) и запоминания выбора.

Согласно [12] перемешивающий слой определяется как область фазового пространства мультистабильной динамической системы, обладающей следующими свойствами.

1. Все траектории, исходящие из определенной области начальных условий $\Delta x(t_0)$, в момент времени t_0 попадают в перемешивающий слой.

2. Все траектории в момент времени T выходят из перемешивающего слоя и переходят в область мультистабильного динамического (нехаотического, прогнозируемого) режима.

3. Внутри перемешивающего слоя система глобально неустойчива, ведет себя квазихаотично или подвергается случайному воздействию ("шум"). В стохастическом режиме произведение $C \cdot T$ удовлетворяет неравенству

$$C \cdot T = \lim_{\Delta x(t_0) \rightarrow 0} \ln \frac{\Delta x(T)}{\Delta x(t_0)} \gg 1, \quad (4)$$

где $\Delta x(t_0)$ и $\Delta x(T)$ — расхождения фазовых траекторий при входе и выходе из перемешивающего слоя. Величина C — аналог числа Ляпунова и переходит в него при $T \rightarrow \infty$.

4. Все фазовые траектории, попавшие в перемешивающий слой, выходят из него и попадают в динамический мультистабилизационный слой, в котором существуют, по крайней мере, два устойчивых стационарных состояния.

Генерация прогностической информации требует выхода за рамки задач, которые решаются в принципе, но требуют уточнения для конкретных условий. Такая генерация происходит в условиях неопределенности, поэтому центральным элементом информационных систем и фундаментальным понятием в теории динамических систем является перемешивающий слой [12, 13], когда небольшое расхождение входных данных (тезаурусные вариации) в точках бифуркации приводит к непредсказуемым научным результатам. В формировании перемешивающего слоя важную роль играет внешняя среда. Перемешивающий слой — атрибут, необходимый для развития живых систем, играет ключевую роль при генерации ценной информации, в биологической эволюции, в творчестве и мышлении.

Когнитивные системы выполняют обобщения для преодоления односторонних подходов. Во многих случаях центральным для обобщений

является метод распознавания образов. Каждая научная дисциплина имеет свой терминологический тезаурус и свой набор характеристик (атрибутов). В настоящей работе мы будем анализировать эволюцию, дифференциацию и конвергенцию конкретной науки — наноионики в среде смежных научных дисциплин на основе ДТИ, которая является современным методологическим инструментом для решения широкого круга задач. В более широком контексте Д. С. Чернавский внес вклад в применение "естественно-научного, физического подхода к изучению сложных систем и эволюционных процессов в живой природе и обществе" [32].

Роль информации и стратегического инновационного менеджмента в развитии наноионики

В терминах ДТИ [12] наноионика рассматривается авторами обзора как развивающаяся информационная система. Основные цели таких систем — сохранение и увеличение собственной ценной информации, прогнозирование собственного поведения в изменяющейся окружающей среде.

Для появления новой дисциплины роль информации и СИМ является определяющей. В книге нобелевского лауреата Ж.-М. Лена [33] находим: "...для возникновения и бурного развития новой научной дисциплины требуются сочетания, по крайней мере, трех условий: 1) необходимо признание новой парадигмы, показывающей значение разрозненных и, на первый взгляд, несвязанных наблюдений, данных, результатов и объединение их в единое целое; 2) нужны инструменты для изучения объектов данной области; 3) необходима готовность научного сообщества воспринять новую парадигму". Условие 3 соответствует восприятию новой условной информации (успешность учебного зависит от тезауруса традиционного научного сообщества).

Если перечисленные условия являются независимыми событиями, то формула (1) дает малую вероятность произведения $P_1 \times P_2 \times P_3$ (где $P_i < 1$) для результирующего события 1) — 3). Более того, нужно учитывать, по крайней мере, еще один малый сомножитель P_0 , связанный с обнаружением атрибутов новой научной дисциплины. Поэтому вероятность появления новой дисциплины $P_0 \times P_1 \times P_2 \times P_3$ (например, наноионики) мала.

В ДТИ [12] постепенное возрастание интереса к результатам научной работы анализируют в специальных терминах. Ценность новой информации может быть отрицательной [уравнение (3)], когда специалисты оценивают результат как ошибочный.

Рассмотрим конкретный пример изменения ценности информации на примере научной карьеры Курта Леговека (часть 1 обзора [3]). В приоритетной статье 1953 года [34] он впервые рассмотрел вопрос об ионной проводимости в слое поверхностного пространственного заряда ионного кристалла. Статья относится к истокам наноионики и содержит прогностическую информацию. В то время существование новой области еще не было осознано, а термин "наноионика" отсутствовал в научном тезаурусе. В мае 2007 г., почетный профессор University of Southern California (США) К. Леговек писал авторам обзора (перевод): «Хорошо, что вы вспомнили мою статью из 1950-х. Статья была почти отклонена рецензентом с комментарием: "Я никогда не слышал о чем-либо подобном, эффект не выглядит правильным, но мы пропустим статью". Причина, по которой на мою статью обращали мало внимания в прошлом, заключается в том, что она далеко опередила свое время. Кроме того, я не держался в этой научной области, но посвятил себя другим проблемам... Несмотря на то что некоторые авторы игнорируют мою статью по ионному поверхностному заряду, многие другие цитируют ее, и она остается моей наиболее цитируемой статьей, более 150 раз». В этом примере ценность новой прогностической информации изменяется от отрицательной до положительной. В 2020 г. статья К. Леговика [34] была процитирована уже более 440 раз. В противоположную сторону изменяется ценность конъюнктурной информации. К. Леговек сделал пионерский, нобелевского уровня вклад в физику и микроэлектронику (часть 1 обзора [3]), но не получил премию, хотя еще при его жизни премиями по полупроводниковой оптоэлектронике были отмечены несколько ученых.

Статья с приоритетной идеей, с предсказанием новой области науки и технологий (информация прогностического характера) уязвима по отношению к лаконичному отрицательному отзыву рецензента: "сначала сделайте, а потом предлагайте!". В решение проблемы легализации теоретической концепции наноионики вмешался случай [3], часто благоприятствующий поис-

кам нового. Это неудивительно, согласно ДТИ [12], генерация информации происходит только в перемешивающем слое — понятие, которое неразрывно связано со случайным выбором. Инициатива по исследованию воздействия электронного луча с твердым электролитом (ТЭ) [35], основанная на рецепции ранее полученной информации, и выбор нового направления исследований обеспечили получение приоритетных результатов. Во-первых, с помощью электронного микроскопа HB501 был исследован механизм радиационного воздействия электронного зонда на ряд твердотельных ионных проводников и обнаружена высокая чувствительность пленок $\text{CsAg}_4\text{Br}_{3-x}\text{I}_{2+x}$ и RbAg_4I_5 к воздействию электронов, т. е. была продемонстрирована возможность прямой электронно-лучевой литографии с нанометровым разрешением [35]. Во-вторых, фотоснимки позволили проиллюстрировать работу "A step towards nanoionics" [1], где под "защитой" оригинальных изображений матричных ТЭ-наноструктур (прототипы матриц электрохимических наноприборов) впервые были сформулированы термин, концепция и размерный параметр новой ветви науки — наноионики.

Результаты и новая условная информация [1] опередили время: некоторые "узкие" специалисты не сразу приняли предложенные термин и концепцию наноионики. У зарубежных авторов слово "nano-ionics" впервые появляется в 1996 г. в абстракте статьи [4, 36] немецкого ученого и руководителя СИМ. Лишь в 2000-х гг. термин "наноионика" наполняется содержанием, но область динамических явлений и высокочастотные приложения остаются вне атрибутов наноионики, введенных Й. Майером.

Прилагательное "nanoionic" широко используется в зарубежной литературе в сочетаниях с существительными (properties, devices, channels, memristors, systems). Косвенное цитирование статьи [1] демонстрирует повышение ценности информации прогностического характера. Работы с прогностической информацией цитируются в течение длительного времени, и далее начинает работать механизм косвенного цитирования, когда вместо ссылок указывается, например, термин. Популярные системы наукометрии Scopus и WoS не учитывают косвенное цитирование, поэтому они завышают значение конъюнктивной информации, что следует учитывать в деятельности СИМ.

Хотя термин и концепция "наноионика" был введен в 1992—1993 гг., но даже в 2002—2004 гг. авторам обзора пришлось отстаивать приоритет [3, 37] ввода новой научной дисциплины. Соответствующая терминология к этому времени получала все более широкое распространение за рубежом, а российское сообщество ионики твердого тела проявляло консерватизм. Профильный журнал "Электрохимия" отклонил статью авторов (2004 г.) с аргументацией, что термина "наноионика" не существует. Работа была расширена и в 2005 г. опубликована в виде двух статей в журнале "Ionics" [38, 39].

Одной из сторон деятельности СИМ является противодействие конкурентам, которое может выражаться в борьбе условных информаций [30]. Научно-технический журнал "Микросистемная техника", заинтересованный в поиске новых прорывных приборных решений, опубликовал статью авторов (часть 1 обзора [3]), посвященную созданию на основе идей наноионики и инженерии межкристаллитных границ высокоемких импульсных суперконденсаторов с когерентными гетеропереходами.

В электронной публикации [37] авторы указывают на замалчивание Й. Майером (директор института Макса Планка в Штутгарте, главный редактор журнала Solid State Ionics) приоритетной статьи [1]. Аналогичную политику проводит группа японских ученых, возглавляемых М. Аоно (Director General of International Center for Materials Nanoarchitectonics). Нарушение правил цитирования маститыми учеными, управляющими системой СИМ, можно объяснить их борьбой за приоритеты, оригинальный статус идей и гранты. В терминах работы [30] такое отношение можно объяснить борьбой условных информаций и реакцией зарубежных СИМ на прорыв [1]. Соискатели научных степеней в области твердотельной ионики практически всегда цитируют работу [1].

Эвристическое значение корректно введенного термина состоит в том, что он указывает на область R & D, где на объекты и явления нужно смотреть под новым ракурсом, а экспериментальные данные могут потребовать нестандартных интерпретаций. Большое значение для развития новой научной дисциплины имеет атрибутивное пространство специфических, присущих этой дисциплине терминов. Атрибутивное пространство информационных систем относится к безусловной информации. Новая дисциплина

должна иметь некоторые атрибуты, несовместимые с атрибутами смежных дисциплин. Такие атрибуты не могут быть найдены с помощью строгой логики, они становятся известны через эвристику [40], эмерджентные свойства [41] или метафорическое мышление [28]. Стабильность процесса генерации информации зависит от взаимного влияния тезауруса и цели, новой информации и эффективности СИМ.

По мере развития наноионики в ИПТМ РАН были введены новые понятия, термины, объекты и направления (часть 1 обзора [3]), такие как наноионика, наноионные приборы, классификация твердотельных ионных проводников, передовые суперионные проводники (ПСИП), наноионика передовых суперионных проводников, гипотетические передовые суперионные проводники, оптически активные наносистемы Ag(Cu)Hal-M, когерентный идеально поляризуемый гетеропереход, глубоко субвольтовая наноэлектроника, влияние квантовой емкости углеродных материалов на основные характеристики суперконденсаторов, ток обмена на потенциальном барьере, структурно-динамический подход (СДП) наноионики, скрытые переменные наноионики, ток смещения Максвелла на потенциальном барьере, эффективное однородное поле, r_i -размерный фактор, связь универсального динамического отклика с током смещения и прыжковым транспортом ионов в неоднородном на наномасштабе потенциальном рельефе, динамическая нелокальная нелинейная ионика.

ДТИ базируется на нелинейной динамике, которая утверждает, что система стабильно развивается в фазовом пространстве при наличии определенных аттракторов. Для информационных систем роль аттракторов выполняет набор "эмерджентных" атрибутов, характерных только для данной научной дисциплины. Наноионика изучает фундаментальные стационарные и неравновесные динамические свойства твердотельных наноматериалов, наногетероструктур и наноприборов, неотъемлемым атрибутом которых является быстрый ионный транспорт на наномасштабе. Поэтому наноионика описывает взаимосвязанные ионно-транспортные и диэлектрикополяризационные процессы в терминах, которые имеют смысл только в неоднородном потенциальном рельефе. Такой нанорельеф, в котором по прыжковому механизму передвигаются ионы, является неотъемлемым атрибутом наноионики, что отличает ее от твердотельной ионики, рабо-

тающей с макроскопически усредненными физическими величинами. Эмерджентными свойствами наноионики являются такие атрибуты, как передовые суперионные проводники (ПСИП), ток смещения Максвелла на потенциальном барьере, эффективное однородное поле, r_i -размерный фактор и др.

Например, ввод авторами обзора в тезаурус наноионики термина ПСИП (концентрация подвижных ионов $N_i \approx 10^{22} \text{ см}^{-3}$, структура близка к оптимальной для БИТ) привел к точке бифуркации и разделил наноионику на два принципиально разных направления развития (часть 1 обзора [3]). Объекты первого направления — наносистемы твердых ионных проводников, сформированные на основе веществ с малой ионной проводимостью $\sigma_i (N_i < \sim 10^{19} \text{ см}^{-3})$, объекты второго направления — ПСИП. Оба направления принципиально отличаются друг от друга дизайном структуры и свойствами ионного транспорта [3, 38, 39, 42].

Согласно [43] существуют четыре стадии развития научной дисциплины: 1 — введение в качестве предмета новых объектов и явлений; 2 — создание инструментария методов и методик; 3 — генерация большинства дисциплинарных знаний и публикация большинства оригинальных исследований; 4 — поддержание и передача научных знаний, полученных в ходе первых трех стадий, генерация новых способов представления информации и критический пересмотр роли научной дисциплины. По нашей оценке, в настоящее время наноионика проходит третью стадию развития и близка к четвертой стадии. Вывод подтверждается появлением в 2015 г. первого университетского учебника [44], где наноионика рассматривается как раздел ионики твердого тела.

Большая часть знаний генерируется на третьем этапе развития новой научной дисциплины [43], однако для методологии познания основной интерес представляет генерация прогностической информации (по своей природе непредсказуемой). Ввод в тезаурус наноионики таких новых атрибутов, как ток смещения Максвелла на потенциальном барьере, эффективное однородное поле и разработка теории ионного транспорта в неоднородном на наномасштабе потенциальном рельефе, названной авторами обзора — структурно-динамический подход (СДП) наноионики [2, 3], позволили объяснить универсальный динамический отклик, известный как закон Джоншера, у которого отсутствовало общепри-

нятое объяснение, и рассчитать для модельных структур многие ионно-транспортные характеристики. Закон Джоншера устанавливает взаимосвязь между реальной частью комплексной проводимости образца ($\text{Re}\sigma^*$) и частотой (ω) внешнего электрического воздействия для материалов с прыжковой проводимостью:

$$\text{Re}\sigma^*(\omega) \propto \omega^n. \quad (5)$$

Для большинства твердотельных ионных проводников $n < \approx 1$. СДП объясняет причину возникновения закона (5) нелокальной взаимосвязью токов ионной проводимости и токов смещения Максвелла в неоднородном потенциальном рельефе (часть 1 обзора [3]).

Благодаря современным технологиям и менеджменту инноваций/знаний [11, 24] интервал времени между предсказанием и обнаружением уникальных характеристик материалов сокращается. Нами была предсказана возможность обнаружения естественных и создания искусственных "гипотетических ПСИП", характеризующихся энергией активации ионного транспорта $\sim k_B T_{300}$ [45, 46]. Ионные проводники, близкие к предсказанным, были открыты в работе [47]. Например, на поверхности двумерного 2-*Pttn* борофена (аналог графена) ионы Li^+ находятся в уникальном состоянии, так как энергетический барьер для их диффузии в одном из кристаллографических направлений имеет порядок $k_B T_{300}$ [47–49]. Материалы на основе борофена и других 2D-соединений имеют большие перспективы для использования в области накопления и преобразования энергии [50].

Успехи конкретной науки как развивающейся информационной системы зависят от управляющего влияния системы СИМ. В условиях конкуренции запаздывание в сроках принятия решения о проведении R & D ведет к затратам ресурсов на получение информации конъюнктурного, а не прогностического характера. Подведение итогов развития наноионики за длительный период времени позволяет конкретизировать возможности повышения результативности системы СИМ. Как уже отмечали, главный атрибут развития и генератор информации — перемешивающий слой. Его роль может выполнять внешнее окружение. Оптимальные условия для генерации прогностической информации наступают, когда информационная система подошла достаточно близко к выходу из перемешива-

ющего слоя, но еще достаточно далека от стадии динамического, т. е. прогнозируемого, развития. Скорость выхода из перемешивающего слоя зависит от ресурсов, которые вовлечены в процесс. Управляющие системы СИМ должны своевременно: 1) выбрать оптимальные условия; 2) обосновать необходимость вложения ресурсов в конкретный проект; 3) курировать развитие нового направления до стадии производства и вывода на рынок новых продуктов.

Истории развития наноионики (часть 1 [3] и часть 2 обзора [4]) показывают, что в России поддержка инноваций отличается фрагментарностью по времени и источникам, а агенты СИМ не действуют по служебному регламенту (1)–(3). Таким образом, в национальной системе СИМ отсутствует необходимая подсистема — институт (в широком смысле) кураторов долгосрочных инновационных проектов, которые инициированы приоритетными результатами и прогностической информацией. Решение проблемы авторы видят в том, чтобы новые перспективные научно-технические направления с момента их выявления и до начала выпуска инновационной продукции развивались как долговременные проекты под патронажем центров СИМ, которые должны конкурировать за темы проектов, ответственных исполнителей, показатели эффективности и государственные/привлекаемые ресурсы.

Об агентах СИМ в научной сфере написано мало, роль СИМ в продвижении исследователей на выигранные стартовые позиции замалчивается. Академия наук России входит в систему СИМ. РАН формирует программы R & D и распределяет ресурсы на их выполнение. Однако ученые почти всегда относят положительный результат на свой счет, забывая оценить роль РАН. Значение СИМ в карьере ученого рассмотрим на примере Курта Леговека, о котором уже писали выше и в работе [3]. Агенты СИМ организовали переезд К. Леговека из Европы в США (1947 г.) [51]. На новом месте ему предоставили свободу выбора направлений R & D. Слово "выбор" — ключевое в определении информации. В новых условиях Леговек получил ряд приоритетных результатов, был на вершине своих творческих способностей, владел уникальным для того времени тезаурусом, который охватывал передовые достижения физики твердого тела и зарождающейся микроэлектроники ("*...I did not receive the Nobel Prize for my contribution to microchips...*" [51]). Обладая редкой способностью ге-

нерировать информацию прогностического характера (*"my two great discoveries, the explanation of the mechanisms of solar cells and of light emitting diodes"* [51]), он оказался, не осознавая этого, еще перед одним решающе-важным выбором. Вместо того чтобы преодолеть временные разногласия с системой СИМ, К. Леговек отплыл (1959 г.) из США в Европу в трехлетний семейный вояж. Отплыл, но оказался за бортом американской системы СИМ, которая развивалась в синергии с развитием микроэлектроники. Записки К. Леговека *"My professional history"* [51], распечаткой которых мы здесь пользуемся, стали недоступны в Интернете после смерти (2012 г.) этого выдающегося ученого. К. Леговеку было известно правило СИМ, нарушение которого подавляет генерацию информации прогностического характера: *"The function of a director of research is to protect those, who want to do research, from those, who want to direct it"* [51].

В идеале исследователи и система СИМ должны быть комплементарны, что создает "внутренний" перемешивающий слой. Для руководителей СИМ необходимо сочетание неординарных качеств: прогностическое мышление, распознавание прорывных направлений, ответственность за привлекаемые в проекты людей и ресурсы, интеллектуальная смелость для работы во "тьме" перемешивающего слоя. Такими свойствами обладал директор-основатель института проблем технологии микроэлектроники (ИПТМ АН СССР, позже РАН) — член-корреспондент АН СССР, профессор Чеслав Васильевич Копецкий. В далеких восьмидесятих годах прошлого столетия, ориентируясь на работы по микроионике, он предвидел перспективы использования ТЭ в микроэлектронике (часть 1 обзора [3]). Ч. В. Копецкий организовал в институте "Лабораторию нетрадиционных материалов микроэлектроники", где были синтезированы новые ТЭ с рекордно высокими ионно-транспортными свойствами и разрабатывались технологии создания на их основе приборов микро- и наноэлектроники.

Российский фонд фундаментальных исследований (РФФИ) входит в состав национальной системы СИМ. Фонд несколько раз поддерживал исследования ИПТМ РАН в области фундаментальной и прикладной наноионики. В период 2003—2006 гг. наноионика получила поддержку в Секции прикладных проблем Президиума РАН (куратор проф. П. П. Мальцев). В 2009—2010 гг. наноионика в ИПТМ РАН была поддержана в

программе Президиума РАН, которую курировал академик Ж. И. Алферов. Положительное отношение к проводимым в ИПТМ РАН исследованиям было у известного немецкого ученого W. Weppner, который координировал крупные европейские программы по развитию ионики твердого тела и основал профильный журнал *"Ionics"*. Научные журналы входят в состав национальных и глобальных систем СИМ. В условиях борьбы условных информации и противостояния национальных СИМ долговременная генерация прогностической информации авторами обзора была бы невозможна без поддержки наноионики со стороны журналов *"Нано- и микросистемная техника"* и *"Ionics"*. Критически заметим, в России у наноионики долгие годы не было масштабной поддержки, например, даже в 2020 г., в России нет лабораторий по наноионике (но в крошечной стране Литве, в Вильнюсском университете такая лаборатория действует).

Примером масштабной деятельности СИМ в области наноионики является долговременная государственная программа Японии «The Grant-in-Aids for Priority Area on "Nanoionics (439)» (часть 2 обзора [4]. Программа "439" осуществила поддержку 30 японских исследовательских групп и позволила создать в Японии мощные научное сообщество и инфраструктуру. Известное достижение японских ученых в рамках программы "439" — атомный переключатель [52] — наноионный прибор, на основе которого могут быть созданы высокоплотные матричные массивы перезаписываемой памяти. Изобретение атомного переключателя в 2005 г. [52] предшествовало буму в исследованиях, который начался через несколько лет. В 2008 г. в США было объявлено о создании мемристоров [53, 54] — приборов с функцией памяти. В настоящее время это направление активно развивается. Новая парадигма названа нейроморфным компьютерингом и имеет аналогом нейроморфные структуры мозга [55]. Ожидается, что произойдет переворот в повышении эффективности вычислений и создании искусственного интеллекта, способного распознавать сложные образы и смыслы.

В настоящее время во многих странах активно ведутся R & D по наноионным мемристорам. По нашему мнению, это продолжение на новом технологическом уровне R & D, выполнявшихся в 1960—1970 гг. Уже тогда обсуждалась возможность создания матричной памяти с плотностью элементов 10^6 см^{-2} в пленочных системах на ос-

нове TiO_2 [56, 57]. Результаты современных исследований показывают, что проблема ненадежного функционирования оксидных переключающих структур близка к разрешению [58].

В ИПТМ РАН эксперименты по резистивному переключению в структурах "металл/тонкая пленка ПСИП/металл" были начаты в 1990-е гг. Однако наш анализ литературы [56, 57] показал, что тематика по резистивному переключению не имеет признаков принципиальной новизны, а для развития тематики на высоком технологическом уровне требуются значительные ресурсы. Поэтому в ИПТМ РАН были выбраны другие направления развития наноионики, перспективные с точки зрения получения информации прогностического характера. Критерий выбора нового направления — минимум расхода ресурсов на получение приоритетного результата.

Резкое возрождение интереса к переключающим структурам с памятью произошло в 2000-е годы по двум конъюнктурным причинам: 1) для развития наноэлектроники и искусственного интеллекта стала необходимой высокоплотная энергонезависимая память; 2) предложена неожиданная аналогия [59] между резистивным переключателем с ионно-электронным переносом и функционированием гипотетического элемента — мемристора [60], в котором должны быть связаны электрический заряд и магнитный поток. Новая аналогия стимулировала теоретические исследования [61], а запросы наноэлектроники и возможная масштабная коммерциализация наноионных мемристоров привлекли организации и корпорации с высоким научно-технологическим уровнем. В разных странах на разработки различных типов мемристоров потрачены большие ресурсы, однако фундаментально новые механизмы резистивного переключения (уровня действительной связи заряда и магнитного потока) не обнаружены. Отсутствие фундаментальной новизны означает, что уже в далекие 1960—1970 гг. [56, 57] соответствующая информационная система выходила из перемешивающегося слоя. Поэтому информация по мемристорам, получаемая ныне в стадии динамического (прогнозируемого) развития, будет неизбежно иметь конъюнктурный характер. Генерацией такой информации, ценность которой быстро уменьшается со временем, должны заниматься высокотехнологические, конкурирующие за прибыль корпорации. Сказанное не относится к нейроморфному компьютерингу и искусственно-

му интеллекту, для которых мемристор является просто прибором с определенными характеристиками.

Анализ эволюции наноионики в среде смежных дисциплин

В части 2 обзора [4] критически анализировалось введение в научный тезаурус новых терминов (и дисциплин), таких как наноархитектоника и ионтроника. Предложенная в работе [4] схема корректного введения нового научного термина требует от научной дисциплины предъявления специфических атрибутов, которые выделяют ее в тезаурусе смежных научных дисциплин. Расширенное определение наноионики кратко суммируют следующие пункты. Область "наноионика" определяют: 1) объекты с БИТ на наномасштабе; 2) предмет, т. е. специфические законы, явления, эффекты, свойства и механизмы процессов; 3) масштабные критерии; 4) методы; 5) нанотехнологии; 6) перспективные применения; 7) исследования, расширяющие границы наноионики в новых направлениях.

Анализ эволюции, дифференциации и конвергенции наноионики в среде смежных научных дисциплин, таких как наноархитектоника и ионтроника, рассмотрим на основе ДТИ, соотношений типа класс/подкласс в атрибутивном пространстве и в контексте влияния СИМ.

В тезаурусе каждой научной дисциплины содержится ценная информация, включающая основные наборы атрибутов, принадлежащие классам и подклассам различных дисциплин. Некоторые признаки класса не имеют аналогов в родственном подклассе, но не наоборот, т. е. атрибутивные пространства класса и подкласса несовместимы или равны (случай перекодирования информации, когда когнитивная система имитирует появление новой системы).

Хотя в работе [4] подробно представлены основные положения наноархитектоники и ионтроники, кратко резюмируем, что обе дисциплины претендуют на широкие обобщения и выступают в роли "метанаук". Однако все положения этих дисциплин и их комбинации известны для нанотехнологии, понимаемой в широком смысле. *Наноархитектоника* пытается обобщить нанобио-технологии, а *ионтроника* соединяет твердотельную электронику с биосистемами и позиционируется как зарождающаяся технология сложного контроля ионов как переносчиков сигнала.

В настоящее время интерфейсная наноархитектоника также не может обобщить наноионику в связи с отсутствием в тезаурусе специфичных, несовместимых с наноионикой, атрибутов. Для реальной замены, если это вообще возможно, необходимы существенные категориальные разработки и возникновение эмерджентных атрибутов в тезаурусе наноархитектоники.

Попытки наноархитектоники обобщить бионанотехнологию слабо обоснованы, так как с помощью технологий ДНК-оригами уже давно разрабатывают и целенаправленно создают замысловатые атомно-молекулярные конструкции с заданной функциональностью. Как утверждается, концепция ионтроники "устраняет разрыв между электроникой и биологическими системами" [6], однако в энциклопедиях уже существуют термины биоэлектроника, молетроника, биомолекулярная электроника и нанобиоэлектроника. Декларируемая наноархитектоникой новизна — замена подхода микроэлектроники "сверху-вниз" на подход "снизу-вверх" является, на самом деле, идеей Ричарда Фейнмана о наномире, которая получила разработку в диссертации К. Э. Дрекслера (Doctor of Philosophy in the field of Molecular Nanotechnology, 1991, тема — "Molecular Machinery and Manufacturing with Applications to Computation" [62]).

Наноионика имеет свои специфические атрибуты, законы, методы, дескрипторы, но для наноархитектоники и ионтроники такая информация не представлена, а выбранные термины являются не только малоинформативными, но, по нашему мнению, вводят в заблуждение [4]. Например, "концепция ионтроники учитывает свойства как подвижных ионов, так и электронов" [6], но при таком определении логично было бы назвать ее "наноэлионика". Это слово связано как с миром нано-, так и с областями электроники и ионики. Под названием "Наноэлионика" в 1996 г. была подана заявка на проект РФФИ [63], но отечественный СИМ в научной сфере не смог оценить информацию прогностического характера о необходимости электронно-ионного синергизма в области нано.

Пример четкого подхода к определению новых сложных объектов дает книга [64]. В ней сделаны оценки допустимых предельных параметров миниатюризации для компонентов, образующих в совокупности объект нового класса (*nanomorphic cells*) микронных размеров. Наноморфные ячейки должны автономно функцио-

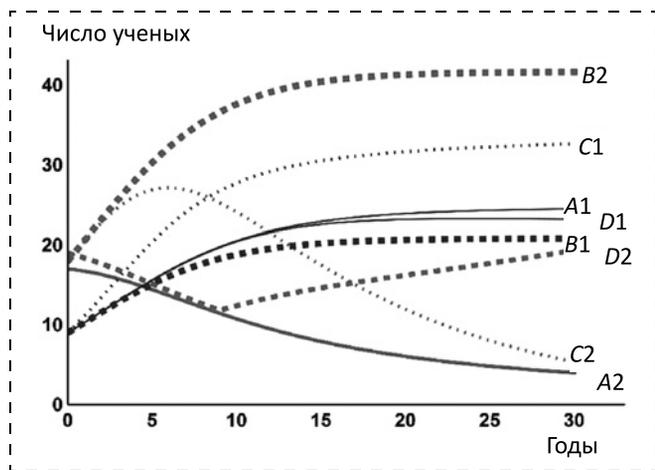
нировать в живых организмах, выполняя диагностику/терапию/механические воздействия на клеточном уровне, осуществляя вычисления и коммуникации. По нашему мнению, в настоящее время вместо замены понятия "нанотехнология" на "наноархитектоника" [65], более правильно было бы обсуждать введение в область нанотехнологии новых идей, например, связанных с топологией и геометрией тел, находящихся в состоянии превращения [66], и делать оценки предельных параметров миниатюризации сложных функциональных систем, образуемых взаимодействующими разнородными по природе нано-(микро)-подсистемами.

Если две научные дисциплины (две информационные системы) имеют несовместимые друг с другом атрибуты, они содержат безусловную информацию и сосуществуют без конфронтации. Напротив, системы с различной условной информацией в одной и той же области деятельности (идентичные атрибуты) конфликтуют друг с другом.

ДТИ описывает в первом приближении эти и многие другие информационные процессы дифференциальными уравнениями следующего типа [12, 13]:

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{u_i}{\tau_i} - \sum_{j \neq i} b_{ij} u_i u_j - a_i u_i^2, \quad a_i < b_{i,j}. \quad (6)$$

Число уравнений в (6) равно числу взаимодействующих информационных систем (sys1, sys2, ...), которые, как было показано выше, в современном мире нельзя рассматривать вне связи с деятельностью соответствующих национальных СИМ (СИМ1, СИМ2, ...). Пусть u_i означает зависящее от времени условное число ученых, поддерживающих i -научную парадигму, например, парадигму наноионики (или парадигму интерфейсной наноархитектоники). Величина u_i/τ_i описывает автокаталитическое воспроизводство ученых i -типа (аспиранты, молодые специалисты и инженеры дают основной вклад в эту величину). Величина τ_i — характерное время воспроизводства (мы покажем насколько важна быстрая и качественная подготовка научных кадров). Произведение $b_{ij} u_i u_j$ описывает конкурентное взаимодействие между системами i - и j -типа. Произведение $(-a_i u_i^2)$ описывает конкурентное взаимодействие внутри информационной системы i -типа. Величина $a_i u_i^2$ становится существенной, если число ученых i -типа становит-



Изменение числа ученых в информационной системе sys1 (графики, помеченные символами A1, B1, C1 и D1) и системе sys2 (графики, помеченные символами A2, B2, C2 и D2) для четырех разных взаимовлияний sys1 и sys2 и оперативном стимулирующем влиянии системы стратегического инновационного менеджмента sys2

ся большим, а возможности для карьерного роста малы. Когда параметры τ_i , b_{ij} и a_i в обеих системах приблизительно равны, то системы могут длительно сосуществовать, однако, как следует из решений (6), без поддержки со стороны соответствующей СИМ происходит деградация информационной системы.

Каждая СИМ воздействует (прямо или косвенно) на все информационные системы, стимулируя свою информационную систему и подавляя конкурирующие. Воздействие СИМ на эволюцию информационных систем (через параметры τ_i , b_{ij} и a_i) может быть значительным. Рисунок показывает поведение решений (6) для двух взаимодействующих систем sys1 и sys2. Рассматриваются четыре разных случая взаимодействия, обозначенных символами A, B, C и D. Начальное число ученых в sys1 и sys2 было установлено как 5 (sys1 — графики, обозначенные как A1, B1, C1 и D1) и 20 (sys2 — графики, обозначенные как A2, B2, C2 и D2) условных единиц численности.

Решения показывают, что исходно меньшая по численности система sys1 может подавить большую систему sys2, т. е. эволюция зависит от параметров τ_i , b_{ij} и a_i . Резкое стимулирующее воздействие СИМ2 на sys2 было промоделировано включением в систему уравнений (6) дополнительного третьего уравнения в виде ступеньки функции Хэвисайда, что уменьшило на порядок коэффициент a_2 в заданный момент времени (решение D2) и оперативно исправило

бедственное состояние системы sys2. Важно отметить, что подавление sys2 вследствие воздействия со стороны sys1 может быть незаметным для sys2 на протяжении промежутков времени порядка нескольких τ_i (случай C2).

Для случая A: характеристическое время воспроизводства ученых в системах $\tau_{\text{sys1}} = \tau_{\text{sys2}} = 4$ года; фактор подавления первой системы sys1 со стороны sys2 $b_{1,2} = 0,001$, фактор подавления второй системы sys2 со стороны sys1 $b_{2,1} = 0,01$; фактор внутренней конкуренции в sys1 $a_1 = 0,01$, фактор внутренней конкуренции в sys2 $a_2 = 0,01$.

Для случая B: $\tau_1 = \tau_2 = 4$ года; $b_{1,2} = 0,001$, $b_{2,1} = 0,01$; $a_1 = 0,01$, $a_2 = 0,001$.

Для случая C: $\tau_1 = 3$ года, $\tau_2 = 4$ года; $b_{1,2} = 0,001$, $b_{2,1} = 0,01$; $a_1 = 0,01$, $a_2 = 0,001$.

Для случая D, когда происходит оперативное вмешательство СИМ2 в ход эволюции sys2: влияние СИМ2 моделируется в форме ступеньки Хэвисайда, что уменьшает a_2 от значения 0,01 до 0,001 в момент $t = 15$ лет (при $t = 0$ начальные значения параметров составляют $\tau_1 = \tau_2 = 4$ года, $b_{1,2} = 0,001$, $b_{2,1} = 0,01$, $a_1 = 0,01$, $a_2 = 0,01$).

В случае C2 система sys2 подавляется системой sys1 даже при условии, что sys2 предоставляет больше карьерных возможностей, чем sys1. Так сказывается уменьшение времени воспроизводства ученых с 4 до 3 лет в системе sys1.

Полученные результаты могут быть обобщены на эволюцию любых научных дисциплин.

Таким образом, интерфейсная наноархитектоники не имеет атрибутов, несовместимых с атрибутами наноионики (т. е. интерфейсная наноархитектоника не является новой дисциплиной, а лишь симулирует ее появление). Имеет место перекодировка информации. Одна условная информация заменяется другой.

На основе расчетов по (6) можно сделать прогноз для эволюции наноионики в России. При отсутствии поддержки со стороны отечественной системы СИМ наноионика в России будет подавлена интерфейсной наноархитектоникой, которая имеет мощную поддержку со стороны японской системы СИМ и пользуется поддержкой в международном масштабе. Например, для решения новых задач в Японии в 2007 г. в Национальном институте материаловедения (NIMS) в рамках инициативы Японского общества развития науки (JSPS) создан Международный центр наноархитектоники материалов (MANA) [67]. Область деятельности центра находится на пересечении материаловедения, наноионики и нано-

технологий [5]. Эта область характеризуется как *"Nanoarchitectonics from atom to life"* [67]. MANA названа одним из лучших научно-исследовательских центров Японии не только за результаты своих исследований, но и за усилия по интернационализации и созданию эффективных программ подготовки молодых исследователей. Аналогичный вывод справедлив в отношении ионтроники, у которой поддержка национальной системы СИМ пока еще не столь заметна. Специальные научные журналы, издания и сайты, результат деятельности СИМ поддерживают развитие наноархитектоники [68] и ионтроники [69].

Таким образом, с помощью СИМ создана мощная структура, которая должна обеспечить прогресс в области нанонауки/нанотехнологии. По нашему мнению, одной из целей подмены нанонауки/нанотехнологии (переобозначение условной информации) является сокрытие за термином "наноархитектоника" новой нанотехнологической инициативы, которая через технологическое превосходство может оказать со временем влияние на геополитику.

Заключение

По мнению авторов обзора, лучший метод предвидения будущего наноионики — изучение ее истории и нынешнего состояния в контексте динамической теории информации и влияния стратегического инновационного менеджмента. Именно с таких позиций критически анализируются результаты развития фундаментальной и прикладной наноионики в России и мире.

Наноионика раскрывает основы быстрого ионного транспорта (БИТ) на наномасштабе и перспективы применения твердотельных материалов и приборов с БИТ. Концепция наноионики впервые сформулирована и выдвинута в России в начале 1990-х гг. [1]. У иностранных авторов слово "nano-ionics" без какого-либо определения впервые появляется в 1996 г. [36] и лишь с начала 2000-х гг. термин "наноионика" наполняется конкретным содержанием и широко распространяется за рубежом. В настоящее время наноионика включена в учебные планы и программы университетов, в 2015 г. появился первый учебник для студентов по ионике твердого тела [44] с отдельной главой — "Nanoionics", где отмечен приоритет ИПТМ РАН на приборы с БИТ на наномасштабе ("nanoionic devices"). Таким образом, в настоящее время с термином "наноиони-

ка" ассоциируется все более широкий круг новых понятий, тем, задач, приборов, методов, технологий и приложений.

В обзоре дано расширенное определение наноионики, которое включает: 1) объекты с БИТ на наномасштабе; 2) предмет, т. е. специфические законы, явления, эффекты, свойства и механизмы процессов; 3) масштабные критерии; 4) методы; 5) нанотехнологии; 6) перспективные применения; 7) исследования, расширяющие границы наноионики в новых направлениях.

Наноионика впервые рассматривается как развивающаяся информационная система, т. е. система, которая способна воспринимать (рецептировать), запоминать, обрабатывать и генерировать информацию. Долговременная стабильность генерации информации в развитии наноионики обеспечивается взаимовлиянием "тезаурус — цель — новая информация — стратегический инновационный менеджмент". Расширение категориального пространства — универсальный метод познания. Большое значение для развития наноионики имело обогащение ее тезауруса такими новыми терминами и понятиями, как *переходовые и гипотетические суперионные проводники, когерентный идеально поляризуемый гетеропереход, глубоко субвольтовая наноэлектроника, скрытые переменные, структурно-динамический подход наноионики, ток смещения Максвелла на потенциальном барьере, эффективное однородное поле, связь универсального динамического отклика с током смещения и прыжковым транспортом ионов в неоднородном на наномасштабе потенциальном рельефе, динамическая нелокальная нелинейная ионика* и др.

Впервые выполнен углубленный методологический анализ эволюции наноионики в окружении смежных научных дисциплин (наноархитектоника и ионтроника). Анализ осуществлен в терминах конъюнктурной и прогностической информации, соотношений класс-подкласс между атрибутивными пространствами конкурирующих дисциплин.

В обзоре представлена схема корректного введения нового научного термина, которая включает: 1) осознание, что известный категориальный аппарат не позволяет распознать новую область деятельности; 2) обозначение новой области знаком, термином; знак должен быть лаконичным и информативным для быстрой ассоциации с предметом; 3) формулировка дескрипторов термина и исключение тавтологий;

4) ассоциация с другими, исторически и по смыслу близкими терминами (должен быть интуитивно ясен генезис термина).

Показано, что, термин *наноионика* введен по схеме 1—4, а термин *ионтроника* не удовлетворяет требованиям 3 и 4, ввиду большой неопределенности корня *троника*, нет также соответствия требованию 2. У ионтроники отсутствует ассоциативность с миром нано (микро), без которого в настоящее время трудно представить любые приборы.

Анализ развивающихся информационных систем выполнен в контексте институционального влияния стратегического инновационного менеджмента (СИМ). В успешном развитии наноионики в ИПТМ РАН кураторскую помощь, как представители СИМ, оказали профессора Е. А. Укше, П. П. Мальцев и В. Вепнер. СИМ введен в теорию как важный, эндогенный фактор развития информационных систем. Значительная часть бюджетов развитых стран направляется на получение научных результатов, подготовку научных кадров, создание научных коллективов. Однако продукция НИОКР представляет собой в основном конъюнктурную информацию, ценность которой быстро уменьшается. Для повышения эффективности стратегического управления необходимо опираться на передовую научную методологию, такую как динамическая теория информации Д. С. Чернавского, в основе которой лежит корректное определение информации, связанное с механизмом ее генерации.

На примере эволюции наноионики делается вывод, что отечественный СИМ функционирует неэффективно. Решение проблемы авторы видят в том, что перспективные направления с момента их идентификации и до начала опытного выпуска новой продукции должны развиваться как долговременные проекты под патронажем центров СИМ, конкурирующих за темы проектов, ответственных исполнителей, показатели эффективности и государственные/привлекаемые ресурсы. В СССР аналогичные патронажные функции выполнял Государственный комитет по науке и технике (ГКНТ СССР).

По мнению авторов, в настоящее время информационная система наноионики выходит из "перемешивающего слоя", где небольшие расхождения в начальных данных превращаются в непредсказуемый результат, и переходит в стадию динамического, т. е. хорошо прогнозируемого развития.

Работа выполнена по госзаданию № 075-00920-20-00.

Список литературы

1. **Despotuli A. L., Nikolaichik V. I.** A step towards nanoionics // *Solid State Ionics*. 1993. Vol. 60. P. 275—278.
2. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** Structure-dynamic approach of nanoionics // *21st Century Nanoscience. A Handbook. Exotic Nanostructures and Quantum Systems* / Ed. K. D. Sattler. Boca Raton, CRC Press, 2020.
3. **Деспотули А. Л., Андреева А. В.** Наноионика — развивающаяся информационная система. Часть 1. Этапы становления и современное состояние наноионики в России // *Нано- и микросистемная техника*. 2020. Т. 22, № 8. С. 403—414.
4. **Деспотули А. Л., Андреева А. В.** Наноионика — развивающаяся информационная система. Часть 2. От первых работ к современному состоянию наноионики за рубежом // *Нано- и микросистемная техника*. 2020. Т. 22, № 9. С. 463—484.
5. **Tsuchiya T., Terabe K., Yang R., Aono M.** Nanoionic devices: Interface nanoarchitectonics for physical property tuning and enhancement // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2016. Vol. 55. P. 1102A4.
6. **Wan C., Xiao K., Angelin A., Antonietti M., Chen X.** The rise of bioinspired ionotronics // *Adv. Intell. Syst.* 2019. Vol. 1. P. 1900073.
7. **Coccia M.** The evolution of scientific disciplines in applied sciences: dynamics and empirical properties of experimental physics // *Scientometrics*. 2020. Vol. 124. P. 451—487.
8. **Battard N.** Convergence and multidisciplinary in nanotechnology: Laboratories as technological hubs // *Technovation*. 2012. Vol. 32. P. 234—244.
9. **Zhou Y., Dong F., Kong D., Liu Y.** Unfolding the convergence process of scientific knowledge for the early identification of emerging technologies // *Technol. Forecast. Soc. Change* 2019. Vol. 144. P. 205—220.
10. **Гольдштейн Г. Я.** Стратегический инновационный менеджмент. Таганрог: Изд. ТРТУ, 2004. 267 с.
11. **ГОСТ Р 54147—2010.** Стратегический и инновационный менеджмент. Термины и определения. М.: Стандартинформ, 2011. 28 с.
12. **Чернавский Д. С.** Синергетика и информация. Динамическая теория информации. М.: Либроком, 2004. 300 с.
13. **Chernavskii D. S.** The origin of life and thinking from the viewpoint of modern physics // *Phys. Usp.* 2000. Vol. 43. P. 151—176.
14. **Morowitz H. J.** The emergence of everything: how the world became complex. Oxford, USA: Oxford Univ. Press, 2004. 209 p.
15. **Floridi L.** Information: a very short introduction. Oxford, USA: Oxford Univ. Press, 2010. 130 p.
16. **Floridi L.** Open problems in the philosophy of information // *Metaphilosophy*. 2004. Vol. 35. P. 554—582.
17. **Wu K., Brenner J.** Philosophy of Information: Revolution in Philosophy. Towards an Informational Metaphilosophy of Science // *Philosophies*. 2017. Vol. 22. P. 2—30.
18. **Rowley J.** The wisdom hierarchy: representations of the DIKW hierarchy // *J. Inf. Sci.* 2007. Vol. 33. P. 163—180.
19. **Bielik L.** Methodology of science. Bratislava: Comenius university in Bratislava, 2019. 227 p.
20. **Fanelli D.** A theory and methodology to quantify knowledge // *R. Soc. Open Sci.* 2019. Vol. 6. P. 181055.

21. **Dretske F.** Knowledge & the flow of information. Cambridge Mass., USA: M. I. T. Press, 1981. 273 p.
22. **Жданкин Н. А.** Инновационный менеджмент. М.: КноРус, 2017. 316 с.
23. **Tidd J., Bessant J.** Strategic innovation management. Wiley, 2014. 436 p.
24. **ГОСТ Р 57127—2016 / PAS 2001:2001** Менеджмент знаний. М.: Стандартинформ, 2016. 70 с.
25. **Беклемишев Л. Д.** Теоремы Геделя о неполноте и границы их применимости // УМН. 2010. Т. 65, Вып. 5 (395). С. 61—106. (**Beklemishev L. D.** Gödel incompleteness theorems and the limits of their applicability. Russian Mathematical Surveys. Vol 65, N 5. P. 857—900.)
26. **Wiener N.** Cybernetics, or, control and communication in the animal and the machine. Cambridge, Massachusetts, USA: M. I. T. Press, 1948. 212 p.
27. **Quastler H.** The Emergence of Biological Organization. USA: Yale Univ. Press, 1964. 83 p.
28. **Lakoff G., Johnsen M.** Metaphors we live by. The University of Chicago Press: Chicago, USA, 2003.
29. **Geim A. K.** Nobel Lecture: Random Walk to Graphene // Rev. Mod. Phys. 2011. Vol. 83. P. 851—862.
30. **Чернавский Д. С., Чернавская Н. М., Малков С. Ю., Малинецкий Г. Г., Малков А. С.** Борьба условных информационных // Информационные войны. 2007. № 1. Вып. 1. С. 3—14.
31. **Харкевич А. А.** О ценности информации // Проблемы кибернетики. 1960. Вып. 4. С. 53—57.
32. **Ризниченко Г. Ю.** Базовые модели Дмитрия Сергеевича Чернавского // Компьютерные исследования и моделирование. 2017. Т. 9, № 3. С. 389—395.
33. **Лен Ж.-М.** Супрамолекулярная химия: Концепции и перспективы. Новосибирск: Наука, 1998. 334 с.
34. **Lehovec K.** Space charge layer and distribution of lattice defects at the surface of ionic crystals // J. Chem. Phys. 1953. Vol. 21. P. 1123—1128.
35. **Nikolaichik V. I., Despotuli A. L.** Electron beam writing in thin films of highly conducting solid electrolytes RbAg_4I_5 and $\text{CsAg}_4\text{Br}_{3-x}\text{I}_{2+x}$ // Phil. Mag. Lett. 1993. Vol. 67. P. 4—8.
36. **Maier J.** Crystalline solid electrolytes and defect chemistry: Some novel thermodynamic and kinetic results // Solid State Ionics. 1996. Vol. 86—88. Part 1. P. 55—67.
37. **Despotuli A., Andreeva A.** Nanoionics as a way towards new discoveries and applications. (2003) (<https://ssrn.com/abstract=2981163>)
38. **Despotuli A. L., Andreeva A. V., Rambabu B.** Nanoionics of advanced superionic conductors // Ionics. 2005. Vol. 11. P. 306—314.
39. **Andreeva A. V., Despotuli A. L.** Interface design in nanosystems of advanced superionic conductors // Ionics. 2005. Vol. 11. P. 152—160.
40. **Korteling J. E., Brouwer A.-M., Toet A.** A neural network framework for cognitive bias // Front. Psychol. 2018. Vol. 9. P. 1561.
41. **Kivelson S., Kivelson S. A.** Defining emergence in physics // npj Quantum. Mater. 2016 Vol. 1. P. 16024.
42. **Andreeva A. V., Despotuli A. L.** Universal dynamic response in polycrystals of advanced superionic conductors // J. Mat. Sci. 2020. Vol. 55. P. 10375.
43. **Shneider A. M.** Four stages of a scientific discipline; four types of scientist // Trends Biochem. Sci. 2009. Vol. 34. P. 217—223.
44. **Sunandana C. S.** Introduction to solid state ionics: Phenomenology and applications. USA, Boca Raton, FL: Taylor & Francis, 2015. 517 p.
45. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** A short review on deep-sub-voltage nanoelectronics and related technologies // Int. J. Nanosci. 2009. Vol. 8. P. 389—402.
46. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** Nanoionics: new materials and supercapacitors // Nanotechnol. Russ. 2010. Vol. 5. P. 506—520.
47. **Zhang Y., Wu Z.-F., Gao P.-F., Zhang S.-L., Wen Y.-H.** Could borophene be used as a promising anode material for high-performance lithium ion battery? // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2016. Vol. 8. P. 22175—22181.
48. **Wang Z.-Q., Lu T.-Y., Wang H.-Q., Feng Y. P., Zheng J.-C.** Review of borophene and its potential applications // Front. Phys. 2019. Vol. 14. P. 33403.
49. **Ayodhya D., Veerabhadram G.** A brief review on synthesis, properties and lithium-ion battery applications of borophene // FlatChem. 2020. Vol. 19. P. 100150.
50. **Zheng Y., Li X., Pi C., Song H., Gao B., Chu P. K., Huo K.** Recent advances of two-dimensional transition metal nitrides for energy storage and conversion applications // FlatChem. 2020. Vol. 19. P. 100149.
51. <http://kurtlehovec.com//professionalhistory.html> (В настоящее время доступ к этой публикации отсутствует).
52. **Terabe K., Hasegawa T., Nakayama T., Aono M.** Quantized conductance atomic switch // Nature. 2005. Vol. 433. P. 47—50.
53. **Williams R.** How we found the missing memristor // IEEE Spectrum. 2008. Vol. 45. P. 28—35.
54. **Zhirnov V. V., Cavin R. K.** Charge of the heavy brigade // Nat. Nanotechnol. 2008. Vol. 3. P. 377—378.
55. **Thomas A.** Memristor-based neural networks // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. Vol. 46. P. 093001.
56. **Дирнлей Дж., Стоунхэм А., Морган Д.** Электрические явления в аморфных пленках окислов // УФН. 1974. Т. 112, № 1. С. 83—127.
57. **Pearsall T. P.** Electrical conduction in TiO_2 // J. Phys. D: Appl. Phys. 1970. Vol. 3. P. 1837—1848.
58. **Guo J., Wang L., Liu Y., Zhao Z., Zhu E., Lin Z., Wang P., Jia C., Yang S., Lee S.-J., Huang W., Huang Y., Duan X.** Highly reliable low-voltage memristive switching and artificial synapse enabled by van der Waals integration // Matter. 2020. Vol. 2. P. 965—976.
59. **Strukov D. B., Snider G. S., Steward D. R., Williams S.** The missing memristor found // Nature. 2008. Vol. 453. P. 80—83.
60. **Chua L. O.** Memristor — the missing circuit element // IEEE Trans. On Circuits Theory. 1971. Vol. 18. 507—519.
61. **Panda D., Sahu P. P., Tseng T. Y.** Collective Study on Modeling and Simulation of Resistive Random Access Memory // Nanoscale Res. Lett. 2018. Vol. 13. P. 8.
62. <https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/27999>
63. **Деспотули А. Л.** Наноионика (Наноэлионика)-02. Заявка на выполнение проекта РФФИ № 96-02-17334-а.
64. **Zhirnov V. V., Cavin R. K.** Microsystems for Bioelectronics. Scaling and Performance Limits. William Andrew Publishing, 2015. 300 p.
65. **Ariga K., Aono M.** Nanoarchitectonics // Jpn. J. Appl. Phys. 2016. Vol. 55. P. 1102A6.
66. **Klyucharev V. V., Klyuchareva S. V.** The geometry of closed sets in the state of chemical transformation // J. Therm. Anal. Calorim. 2015. Vol. 119. P. 1633—1651.
67. **Ariga K., Yamauchi Y.** Nanoarchitectonics from Atom to Life // Chem. Asian. J. 2020. Vol. 15. P. 718—728.
68. <http://ojs.wiserpub.com/index.php/NAT/>
69. <https://www.taylorfrancis.com/books/9780429149054>

A. L. Despotuli, Ph. D., Senior Scientist, e-mail: despot@ipmt-hpm.ac.ru,
A. V. Andreeva, Dr. Sci., Prof., Leading Scientist,
Institution of Russian Academy of Sciences,
Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials RAS,
Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia

Corresponding author:

Despotuli Alexandr L., Senior Scientist, Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials RAS,
Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia
e-mail: despot@ipmt-hpm.ac.ru

Nanoionics — the Developing Informative System. Part 3. Generation of Prognostic Information and the Role of Strategic Innovation Management in the Development of Nanionics

Received on December 02, 2020

Accepted on December 12, 2020

A critical review of the stages of formation, development, and current state of nanoionics in Russia and in the world is presented. Nanoionics is the science, technology, and application of fast ion transport phenomena in solid-state devices and nanostructures. Nanoionics is considered to be a developing information system, its history is first analyzed in terms of D. S. Chernavskii's dynamic information theory and in the context of the influence of strategic innovation management. In the final part of the review, an in-depth methodological analysis of the evolution of nanoionics in the environment of adjacent disciplines (nanoarchitectonics and iontronics) is performed. The aim of the work is to develop a methodology of scientific knowledge and strategic management. The analysis of nanoionics evolution is carried out in terms of conjuncture and prognostic information, class-subclass relations between attributive spaces of the competing disciplines. It is shown that nanoarchitectonics and iontronics cannot serve as meta-disciplines, because they do not have emergent attributes that are incompatible with the attributes of the discipline "nanotechnology", understood in the broad sense. Also, at present, interface nanoarchitectonics does not generalize nanoionics due to the lack of new attributes in the thesaurus. The results obtained go beyond the relationship of nano-disciplines, as the methodology used is based on the definition of information and addresses the problem of the mechanism of generation of prognostic information.

Keywords: nanoionics, dynamic information theory, strategic innovation management

For citation:

Despotuli A. L., Andreeva A. V. Nanoionics — the Developing Informative System. Part 3. Generation of Prognostic Information and the Role of Strategic Innovation Management in the Development of Nanionics, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2021, vol. 23, no. 1, pp. 6–23.

DOI: 10.17587/nmst.23.6-23

References

1. **Despotuli A. L., Nikolaichik V. I.** A step towards nanoionics, *Solid State Ionics*, 1993, vol. 60, pp. 275–278.
2. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** Structure-dynamic approach of nanoionics, *21st Century Nanoscience. A Handbook. Exotic Nanostructures and Quantum Systems*, ed. K. D. Sattler. Boca Raton, CRC Press, 2020.
3. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** Nanoionika — razvivayushchayasya informacionnaya sistema. CHast' 1. Etapy stanovleniya i sovremennoe sostoyanie nanoioniki v Rossii, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2020, vol. 22, no. 8, pp. 403–414 (in Russian).
4. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** Nanoionika — razvivayushchayasya informacionnaya sistema. CHast' 2. Ot pervyh rabot k sovremennomu sostoyaniyu nanoioniki za rubezhom, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2020, vol. 22, no. 9, pp. 463–484 (in Russian).
5. **Tsuchiya T., Terabe K., Yang R., Aono M.** Nanoionic devices: Interface nanoarchitectonics for physical property tuning and enhancement, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2016, vol. 55, pp. 1102A4.
6. **Wan C., Xiao K., Angelin A., Antonietti M., Chen X.** The rise of bioinspired iontronics, *Adv. Intell. Syst.*, 2019, vol. 1, p. 1900073.
7. **Coccia M.** The evolution of scientific disciplines in applied sciences: dynamics and empirical properties of experimental physics, *Scientometrics*, 2020, vol. 124, pp. 451–487.
8. **Battard N.** Convergence and multidisciplinary in nanotechnology: Laboratories as technological hubs, *Technovation*, 2012, vol. 32, pp. 234–244.
9. **Zhou Y., Dong F., Kong D., Liu Y.** Unfolding the convergence process of scientific knowledge for the early identification of emerging technologies, *Technol. Forecast. Soc. Change*, 2019, vol. 144, pp. 205–220.
10. **Gol'dshtejn G. YA.** Strategicheskij innovacionnyj menedzhment, Taganrog, TRTU, 2004, 267 p. (in Russian).
11. **GOST R 54147—2010.** Strategicheskij i innovacionnyj menedzhment. Terminy i opredeleniya. Moscow, Standartinform, 2011, 28 p. (in Russian)
12. **Chernavskij D. S.** Sinergetika i informaciya. Dinamicheskaya teoriya informacii. Moscow: Librokom, 2004, 300 p. (in Russian).
13. **Chernavskij D. S.** The origin of life and thinking from the viewpoint of modern physics, *Phys. Usp.*, 2000, vol. 43, pp. 151–176.

14. **Morowitz H. J.** The emergence of everything: how the world became complex. Oxford, USA: Oxford Univ. Press, 2004. 209 p.
15. **Floridi L.** Information: a very short introduction. Oxford, USA: Oxford Univ. Press, 2010. 130 p.
16. **Floridi L.** Open problems in the philosophy of information, *Metaphilosophy*, 2004, vol. 35, pp. 554–582.
17. **Wu K., Brenner J.** Philosophy of Information: Revolution in Philosophy. Towards an Informational Metaphilosophy of Science, *Philosophies*, 2017, vol. 22, pp. 2–30.
18. **Rowley J.** The wisdom hierarchy: representations of the DIKW hierarchy, *J. Inf. Sci.*, 2007, vol. 33, pp. 163–180.
19. **Bielik L.** Methodology of science. Bratislava, Comenius university in Bratislava, 2019. 227 p.
20. **Fanelli D.** A theory and methodology to quantify knowledge, *R. Soc. Open Sci.*, 2019, vol. 6, p. 181055.
21. **Dretske F.** Knowledge & the flow of information. Cambridge Mass., USA: M.I.T. Press, 1981, 273 p.
22. **Zhdankin N. A.** Innovacionnyj menedzhment. Moscow, KnoRus, 2017, 316 p. (in Russian).
23. **Tidd J., Bessant J.** Strategic innovation management. Wiley, 2014, 436 p.
24. **GOST R 57127–2016 / PAS 2001:2001** Menedzhment znaniy. Moscow, Standartinform, 2016. 70 p.
25. **Beklemishev L. D.** Teoremy Gyodelya o nepolnote i granicy ih primenimosti, *UMN*, 2010, vol. 65, is. 5 (395), pp. 61–106. (**Beklemishev L. D.** Gödel incompleteness theorems and the limits of their applicability, *Russian Mathematical Surveys*, vol. 65, no. 5, pp. 857–900.)
26. **Wiener N.** Cybernetics, or, control and communication in the animal and the machine. Cambridge, Massachusetts, USA: M. I. T. Press, 1948. 212 p.
27. **Quastler H.** The Emergence of Biological Organization. USA: Yale Univ. Press, 1964, 83 p.
28. **Lakoff G., Johnsen M.** Metaphors we live by. The University of Chicago Press: Chicago, USA, 2003.
29. **Geim A. K.** Nobel Lecture: Random Walk to Graphene, *Rev. Mod. Phys.*, 2011, vol. 83, pp. 851–862.
30. **Chernavskii D. S., Chernavskaya N. M., Malkov S. Yu., Malineckii G. G., Malkov A. S.** Bor'ba uslovyh informacij, *Informacionnye vojny*, 2007, no. 1, is. 1, pp. 3–14 (in Russian).
31. **Harkevich A. A.** O cennosti informacii, *Problemy kibernetiki*, 1960, no. 4, pp. 53–57 (in Russian).
32. **Riznichenko G. Yu.** Bazovye modeli Dmitriya Sergeevicha Chernavskogo, *Kompyuternye issledovaniya i modelirovanie*, 2017, vol. 9, no. 3, pp. 389–395 (in Russian).
33. **Lehn J.-M.** Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives, Wiley, 1995, 271 p. (in Russian).
34. **Lehovec K.** Space-charge layer and distribution of lattice defects at the surface of ionic crystals, *J. Chem. Phys.*, 1953, vol. 21, pp. 1123–1128.
35. **Nikolaichik V. I., Despotuli A. L.** Electron beam writing in thin films of highly conducting solid electrolytes RbAg_4I_5 and $\text{CsAg}_4\text{Br}_{3-x}\text{I}_{2+x}$, *Phil. Mag. Lett.*, 1993, vol. 67, pp. 4–8.
36. **Maier J.** Crystalline solid electrolytes and defect chemistry: Some novel thermodynamic and kinetic results, *Solid State Ionics*, 1996, vol. 86–88, part 1, pp. 55–67.
37. **Despotuli A., Andreeva A.** Nanoionics as a way towards new discoveries and applications. 2003. <https://ssrn.com/abstract=2981163>.
38. **Despotuli A. L., Andreeva A. V., Rambabu B.** Nanoionics of advanced superionic conductors, *Ionics*, 2005, vol. 11, pp. 306–314.
39. **Andreeva A. V., Despotuli A. L.** Interface design in nano-systems of advanced superionic conductors, *Ionics*, 2005, vol. 11, pp. 152–160.
40. **Korteling J. E., Brouwer A.-M., Toet A.** A neural network framework for cognitive bias, *Front. Psychol.*, 2018, vol. 9, p. 1561.
41. **Kivelson S., Kivelson S. A.** Defining emergence in physics, *npj Quantum Mater.*, 2016, vol. 1, p. 16024.
42. **Andreeva A. V., Despotuli A. L.** Universal dynamic response in polycrystals of advanced superionic conductors, *J. Mat. Sci.*, 2020, vol. 55, p. 10375.
43. **Shneider A. M.** Four stages of a scientific discipline; four types of scientist, *Trends Biochem. Sci.*, 2009, vol. 34, pp. 217–223.
44. **Sunandana C. S.** Introduction to solid state ionics: Phenomenology and applications. USA, Boca Raton, FL: Taylor & Francis, 2015, 517 p.
45. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** A short review on deep-sub-voltage nanoelectronics and related technologies, *Int. J. Nanosci.*, 2009, vol. 8, pp. 389–402.
46. **Despotuli A. L., Andreeva A. V.** Nanoionics: new materials and supercapacitors, *Nanotechnol. Russ.*, 2010, vol. 5, pp. 506–520.
47. **Zhang Y., Wu Z.-F., Gao P.-F., Zhang S.-L., Wen Y.-H.** Could borophene be used as a promising anode material for high-performance lithium ion battery? *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016, vol. 8, pp. 22175–22181.
48. **Wang Z.-Q., Lu T.-Y., Wang H.-Q., Feng Y. P., Zheng J.-C.** Review of borophene and its potential applications, *Front. Phys.*, 2019, vol. 14, p. 33403.
49. **Ayodhya D., Veerabhadram G.** A brief review on synthesis, properties and lithium-ion battery applications of borophene, *FlatChem.*, 2020, vol. 19, p. 100150.
50. **Zheng Y., Li X., Pi C., Song H., Gao B., Chu P. K., Huo K.** Recent advances of two-dimensional transition metal nitrides for energy storage and conversion applications, *FlatChem.*, 2020, vol. 19, p. 100149.
51. <http://kurtlehovec.com//professionalhistory.html> (В настоящее время доступ к этой публикации отсутствует).
52. **Terabe K., Hasegawa T., Nakayama T., Aono M.** Quantized conductance atomic switch, *Nature*, 2005, vol. 433, pp. 47–50.
53. **Williams R.** How we found the missing memristor, *IEEE Spectrum*, 2008, vol. 45, pp. 28–35.
54. **Zhirnov V. V., Cavin R. K.** Charge of the heavy brigade, *Nat. Nanotechnol.*, 2008, vol. 3, pp. 377–378.
55. **Thomas A.** Memristor-based neural networks, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2013, vol. 46, p. 093001.
56. **Dirnlej Dzh., Stounhem A., Morgan D.** Elektricheskie yavleniya v amorfnih plenkah oksidov, *UFN*, 1974, vol. 112, no. 1, pp. 83–127 (in Russian).
57. **Pearsall T. P.** Electrical conduction in TiO_2 , *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1970, vol. 3, pp. 1837–1848.
58. **Guo J., Wang L., Liu Y., Zhao Z., Zhu E., Lin Z., Wang P., Jia C., Yang S., Lee S.-J., Huang W., Huang Y., Duan X.** Highly reliable low-voltage memristive switching and artificial synapse enabled by van der Waals integration, *Matter.*, 2020, vol. 2, pp. 965–976.
59. **Strukov D. B., Snider G. S., Steward D. R., Williams S.** The missing memristor found, *Nature*, 2008, vol. 453, pp. 80–83.
60. **Chua L. O.** Memristor — the missing circuit element, *IEEE Trans. on Circuits Theory*, 1971, vol. 18, pp. 507–519.
61. **Panda D., Sahu P. P., Tseng T. Y.** Collective Study on Modeling and Simulation of Resistive Random Access Memory, *Nanoscale Res. Lett.*, 2018, vol. 13, p. 8.
62. <https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/27999>
63. **Despotuli A. L.** Nanoionika (Nanoelionika)-02. Zayavka na vypolnenie proekta RFFI № 96-02-17334-a (in Russian).
64. **Zhirnov V. V., Cavin R. K.** Microsystems for Bioelectronics. Scaling and Performance Limits. William Andrew Publishing, 2015, 300 p.
65. **Ariga K., Aono M.** Nanoarchitectonics, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2016, vol. 55, p. 1102A6.
66. **Klyucharev V. V., Klyuchareva S. V.** The geometry of closed sets in the state of chemical transformation, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2015, vol. 119, pp. 1633–1651.
67. **Ariga K., Yamauchi Y.** Nanoarchitectonics from Atom to Life, *Chem. Asian J.*, 2020, vol. 15, pp. 718–728.
68. <http://ojs.wiserpub.com/index.php/NAT/>
69. <https://www.taylorfrancis.com/books/9780429149054>

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ MODELLING AND DESIGNING OF MNST

УДК 621.382

DOI: 10.17587/nmst.23.24-31

И. А. Обухов, д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., iao001@mail.ru,
Акционерное общество "Научно-производственное предприятие "Радиотехника", Москва

МНОГОКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В КВАНТОВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ

Поступила в редакцию 20.10.2020

Представлена модель, позволяющая учитывать влияние квантовых и неравновесных эффектов на характеристики полупроводниковых приборов. Модель успешно применялась для расчета характеристик резонансно-туннельных диодов, а также электронных, термоэлектронных и оптоэлектронных приборов на основе нанопроводов. В квазиклассическом приближении она переходит в дрейфово-диффузионную модель.

Ключевые слова: моделирование, перенос заряда, полупроводники, квантовые приборы, неравновесные явления

Введение

Моделям переноса заряда в структурах с квантовыми свойствами посвящено множество публикаций. Описания основных используемых подходов и ссылки на оригинальные исследования можно найти в сборниках статей и книгах [1–3].

Актуальность темы обусловлена успехами в технологиях формирования структур нанометровых размеров [4, 5], которые открывают новые возможности использования квантовых явлений для создания электронных приборов с желаемыми характеристиками [6–10]. Моделирование является эффективным инструментом, позволяющим определить функциональную пригодность той или иной конструкции.

Уже в конце прошлого столетия, когда создавались первые резонансно-туннельные диоды [11], стало ясно, что применение наивных квантовомеханических моделей [3, 12] может задать правильное направление исследований, но не дает удовлетворительного соответствия между рассчитанными и измеренными характеристиками квантового прибора [13, 14]. Правдоподобные результаты получаются только, если правильным

образом учесть стохастическое рассеяние носителей заряда [13, 15] и влияние их переноса в классических областях структуры на характеристики прибора [14, 15].

Наиболее распространенный в настоящее время подход к моделированию квантовых приборов основывается на уравнении для матрицы плотности [13] и его приближенном решении в формализме неравновесных функций Грина [16, 17]. Такие модели позволяют исследовать перенос заряда и энергии в активных областях структур с квантовыми свойствами. Подробный анализ достоинств и недостатков формализма в применении к различным типам квантовых приборов дан в книге [3]. Здесь отметим только, что для учета влияния классических областей на характеристики квантовых приборов приходится строить сложные гибридные модели [18]. Формализм основан на теории возмущений [16], следствием чего является нарушение закона сохранения для плотности тока [3, 18].

В этой работе представлено последовательное описание многокомпонентной модели переноса заряда в мезоскопических структурах. Модель успешно применялась для решения задач опти-

мизации конструкций резонансно-туннельных диодов [15] и расчета характеристик приборов на основе нанопроводов [7, 19].

Модель

Рассмотрим два массивных волновых поля $\Psi_c(t, \mathbf{r})$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r})$, для которых справедливы уравнения типа Шредингера:

$$i\hbar\partial\Psi_c(t, \mathbf{r})/\partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m_c^{-1}\nabla\Psi_c(t, \mathbf{r})) - U_c(t, \mathbf{r})\Psi_c(t, \mathbf{r}) - U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}) = 0; \quad (1)$$

$$i\hbar\partial\Psi_v(t, \mathbf{r})/\partial t - (\hbar^2/2)(\nabla, m_v^{-1}\nabla\Psi_v(t, \mathbf{r})) - U_v(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}) - U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_c(t, \mathbf{r}) = 0, \quad (2)$$

где \hbar — приведенная постоянная Планка; t и \mathbf{r} — время и пространственный радиус-вектор; $m_c > 0$ и $m_v > 0$ — массы полей $\Psi_c(t, \mathbf{r})$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r})$; а потенциалы $U_c(t, \mathbf{r})$, $U_v(t, \mathbf{r})$ и $U_{cv}(t, \mathbf{r})$ — действительны.

Из уравнений (1) и (2) следуют уравнения баланса:

$$\partial\rho(\Psi_c(t, \mathbf{r}))/\partial t + (\nabla, \mathbf{i}(\Psi_c(t, \mathbf{r}))) = (2/\hbar)\text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r})U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r})\}; \quad (3)$$

$$\partial\rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}))/\partial t - (\nabla, \mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r}))) = (2/\hbar)\text{Im}\{\Psi_v^*(t, \mathbf{r})U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_c(t, \mathbf{r})\}, \quad (4)$$

и закон сохранения

$$\partial(\rho(\Psi_c(t, \mathbf{r})) + \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r})))/\partial t + (\nabla, (\mathbf{i}(\Psi_c(t, \mathbf{r}))\mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r})))) = 0. \quad (5)$$

Здесь

$$\rho(\Psi_a(t, \mathbf{r})) = \Psi_a^*(t, \mathbf{r})\Psi_a(t, \mathbf{r}), \quad \mathbf{i}(\Psi_a(t, \mathbf{r})) = (\hbar/m_a)\text{Im}\{\Psi_a^*(t, \mathbf{r})\nabla\Psi_a(t, \mathbf{r})\}, \quad (6)$$

а индекс a может быть либо c , либо v . Согласно (3) и (4) взаимодействие с потенциалом U_{cv} делает возможными переходы между полями $\Psi_c(t, \mathbf{r})$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r})$.

Представим поля $\Psi_c(t, \mathbf{r})$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r})$ в виде сумм полей $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$:

$$\Psi_c(t, \mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda); \quad \Psi_v(t, \mathbf{r}) = \sum_{\xi} \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi), \quad (7)$$

удовлетворяющих уравнениям

$$i\hbar\partial\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)/\partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m_c^{-1}\nabla\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) - U_{cd}(t, \mathbf{r})\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda) = (K_c - 1)^{-1} \sum_{\lambda \neq \lambda'} U_{cst}(t, \mathbf{r}) \times \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda') + K_c^{-1} \sum_{\xi} U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi); \quad (8)$$

$$i\hbar\partial\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)/\partial t - (\hbar^2/2)(\nabla, m_v^{-1}\nabla\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)) - U_{vd}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi) = (K_v - 1)^{-1} \sum_{\xi' \neq \xi} U_{vsf}(t, \mathbf{r}) \times \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi') + K_v^{-1} \sum_{\lambda} U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda), \quad (9)$$

где K_c и K_v — число полей $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$, а λ и ξ — обобщенные индексы, характеризующие эти поля. Потенциалы $U_{cd}(t, \mathbf{r})$, $U_{cst}(t, \mathbf{r})$, $U_{vd}(t, \mathbf{r})$ и $U_{vsf}(t, \mathbf{r})$ действительны и связаны с потенциалами $U_c(t, \mathbf{r})$ и $U_v(t, \mathbf{r})$ соотношениями

$$U_{cd}(t, \mathbf{r}) + U_{cst}(t, \mathbf{r}) = U_c(t, \mathbf{r}), \quad U_{vd}(t, \mathbf{r}) + U_{vsf}(t, \mathbf{r}) = U_v(t, \mathbf{r}). \quad (10)$$

Суммирование уравнения (8) по всем λ , а (9) по всем ξ с учетом соотношения (10) приводит к исходным уравнениям (1) и (2).

Положим, что

$$U_{cd} = U_c^{\text{ext}} - e\varphi; \quad U_{vd} = U_v^{\text{ext}} - e\varphi. \quad (11)$$

Здесь U_c^{ext} и U_v^{ext} — известные внешние потенциалы; e — элементарный электрический заряд; $\varphi(t, \mathbf{r})$ — электростатический потенциал, удовлетворяющий уравнению Пуассона

$$(\nabla, \varepsilon\nabla\varphi(t, \mathbf{r})) = e(\rho(\Psi_c(t, \mathbf{r})) + \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r})) - N_0(t, \mathbf{r})), \quad (12)$$

где ε — диэлектрическая проницаемость среды; N_0 — некоторая концентрация, а волновые функции здесь и далее имеют размерность обратной длины в степени три вторых.

Из (8) и (9) следуют уравнения баланса

$$\frac{\partial\rho(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda))}{\partial t} + (\nabla, \mathbf{i}(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda))) = \left(\frac{2}{\hbar(K_c - 1)}\right) \sum_{\lambda'} \text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r}; \lambda)U_{cst}(t, \mathbf{r})\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda')\} + \left(\frac{2}{\hbar K_c}\right) \sum_{\xi} \text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r}; \lambda)U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)\}; \quad (13)$$

$$\frac{\partial\rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi))}{\partial t} - (\nabla, \mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi))) = \left(\frac{2}{\hbar(K_v - 1)}\right) \sum_{\xi'} \text{Im}\{\Psi_v^*(t, \mathbf{r}; \xi)U_{vsf}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi')\} - \left(\frac{2}{\hbar K_v}\right) \sum_{\lambda} \text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r}; \lambda)U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)\}. \quad (14)$$

Суммирование соотношения (13) по λ , а (14) по ξ приводит к уравнениям

$$\partial\rho_c(t, \mathbf{r})/\partial t + (\nabla, \mathbf{i}_c(t, \mathbf{r})) = (2/\hbar K_c)\text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r})U_{cv}(t, \mathbf{r})\Psi_v(t, \mathbf{r})\}; \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & \partial \rho_v(t, \mathbf{r}) / \partial t - (\nabla, \mathbf{i}_v(t, \mathbf{r})) = \\ & = -(2/\hbar K_v) \text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r}) U_{cv}(t, \mathbf{r}) \Psi_v(t, \mathbf{r})\} \end{aligned} \quad (16)$$

для суммарных плотностей вероятностей $\rho_{c,v}(t, \mathbf{r})$ и потоков вероятностей $\mathbf{i}_{c,v}(t, \mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \rho_c(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\lambda} \rho(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)), \\ \mathbf{i}_c(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\lambda} \mathbf{i}(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \rho_v(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\xi} \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)), \\ \mathbf{i}_v(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\xi} \mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)). \end{aligned} \quad (18)$$

Из соотношений (15) и (16) получим

$$\begin{aligned} & \partial(\rho_c(t, \mathbf{r}) + \rho_v(t, \mathbf{r})) / \partial t + (\nabla, \mathbf{i}_c(t, \mathbf{r}) - \mathbf{i}_v(t, \mathbf{r})) = \\ & = (2/\hbar)(K_c^{-1} - K_v^{-1}) \text{Im}\{\Psi_c^*(t, \mathbf{r}) U_{cv}(t, \mathbf{r}) \Psi_v(t, \mathbf{r})\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Таким образом, для точного сохранения суммы плотностей суммарных потоков полей $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$ необходимо точное совпадение их количества

$$K_c = K_v = K, \quad (20)$$

что и будем требовать.

Будем считать потенциалы $U_{cst}(t, \mathbf{r})$, $U_{vst}(t, \mathbf{r})$ и $U_{cv}(t, \mathbf{r})$ случайными величинами, для которых неизвестна точная локализация в пространстве и/или во времени. Тогда случайными будут поля $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$, $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$, $\Psi_c(t, \mathbf{r})$, $\Psi_v(t, \mathbf{r})$ и потенциал $\varphi(t, \mathbf{r})$.

Усреднение по процессам случайного рассеяния на потенциалах $U_{cst}(t, \mathbf{r})$, $U_{vst}(t, \mathbf{r})$ и $U_{cv}(t, \mathbf{r})$ будем обозначать скобками $\langle \dots \rangle$. Примем по определению

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_c^*(t, \mathbf{r}; \lambda) \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda') \rangle_{\lambda \neq \lambda'} = 0; \\ & \langle \Psi_v^*(t, \mathbf{r}; \xi) \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi') \rangle_{\xi \neq \xi'} = 0; \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_c^*(t, \mathbf{r}; \lambda) \nabla \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda') \rangle_{\lambda \neq \lambda'} = 0; \\ & \langle \Psi_v^*(t, \mathbf{r}; \xi) \nabla \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi') \rangle_{\xi \neq \xi'} = 0; \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} n_c(t, \mathbf{r}; \lambda) &= \langle \rho(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) \rangle = \\ &= \rho(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) f(s_c(t, \mathbf{r}; \lambda)); \\ \mathbf{n}_c(t, \mathbf{r}; \lambda) &= \langle \mathbf{i}(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) \rangle = \\ &= \mathbf{i}(\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) f(s_c(t, \mathbf{r}; \lambda)); \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} n_v(t, \mathbf{r}; \xi) &= \langle \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)) \rangle = \\ &= \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)) f(s_v(t, \mathbf{r}; \xi)); \\ \mathbf{n}_v(t, \mathbf{r}; \xi) &= \langle \mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)) \rangle = \\ &= \mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)) f(s_v(t, \mathbf{r}; \xi)), \end{aligned} \quad (24)$$

где $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$ — детерминированные волновые функции, удовлетворяющие однородным уравнениям Шредингера

$$\begin{aligned} & i\hbar \partial \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda) / \partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m_c^{-1} \nabla \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) - \\ & - U_{cd}(t, \mathbf{r}) \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda) = 0; \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} & i\hbar \partial \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi) / \partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m_v^{-1} \nabla \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)) - \\ & - U_{vd}(t, \mathbf{r}) \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi) = 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Потенциалы $U_{cd}(t, \mathbf{r})$ и $U_{vd}(t, \mathbf{r})$ представляют собой средние от случайных потенциалов $U_{cd}(t, \mathbf{r})$ и $U_{vd}(t, \mathbf{r})$:

$$U_{cd} = \langle U_{cd} \rangle = U_c^{\text{ext}} - e\varphi;$$

$$U_{vd} = \langle U_{vd} \rangle = U_v^{\text{ext}} - e\varphi. \quad (27)$$

Детерминированный электростатический потенциал $\varphi(t, \mathbf{r})$ является решением усредненного уравнения Пуассона (12):

$$(\nabla, \varepsilon \nabla \varphi(t, \mathbf{r})) = e(n_c(t, \mathbf{r}) + n_v(t, \mathbf{r}) - N_0(t, \mathbf{r})). \quad (28)$$

Здесь

$$n_c(t, \mathbf{r}) = \sum_{\lambda} n_c(t, \mathbf{r}; \lambda), \quad n_v(t, \mathbf{r}) = \sum_{\xi} n_v(t, \mathbf{r}; \xi). \quad (29)$$

Величины $n_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $n_v(t, \mathbf{r}; \xi)$ будем интерпретировать как средние концентрации газов квазичастиц: электронов c - и v -типов в состояниях, характеризующихся индексами λ и ξ . В полупроводнике им соответствуют электроны в зоне проводимости и в валентной зоне. Векторы $\mathbf{n}_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\mathbf{n}_v(t, \mathbf{r}; \xi)$ являются тогда средними плотностями соответствующих пространственных потоков.

В выражениях (23) и (24)

$$f(s) = (\exp\{s\} + 1)^{-1} \quad (30)$$

— функция распределения Ферми—Дирака, т. е. описываемые квазичастицы — фермионы;

$$\begin{aligned} s_a(t, \mathbf{r}; \alpha) &= [E(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) - F_a(t, \mathbf{r}; \alpha) - \\ & - m_a(\mathbf{u}(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)), \mathbf{v}_a(t, \mathbf{r}; \alpha))] / \Theta(t, \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (31)$$

— микроскопические энтропии квазичастиц; индексы здесь и далее принимают значения: $a = c, v$; $\alpha = \lambda, \xi$;

$$\begin{aligned} E(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) &= (i\hbar/2[\Psi_a^*(t, \mathbf{r}; \alpha) \partial \Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha) / \partial t - \\ & - (\partial \Psi_a^*(t, \mathbf{r}; \alpha) / \partial t) \Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)]) / \rho(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) \end{aligned} \quad (32)$$

— энергии квазичастиц; $F_a(t, \mathbf{r}; \alpha)$ — их химические потенциалы;

$$\mathbf{u}(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) = \mathbf{i}(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) / \rho(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) \quad (33)$$

— микроскопические скорости квазичастиц, а $\mathbf{v}_a(t, \mathbf{r}; \alpha)$ — их гидродинамические скорости, удовлетворяющие уравнениям

$$m_a(\partial/\partial t + (\mathbf{u}(\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)), \nabla))\mathbf{v}_a(t, \mathbf{r}; \alpha) + m_a\mathbf{v}_a(t, \mathbf{r}; \alpha)/\tau_a(t, \mathbf{r}; \alpha) = \Theta(t, \mathbf{r})\nabla s_a(t, \mathbf{r}; \alpha), \quad (34)$$

где $\tau_a(t, \mathbf{r}; \alpha)$ — времена релаксации импульсов полей $\Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha)$,

$$\Theta(t, \mathbf{r}) = k_B T(t, \mathbf{r}), \quad (35)$$

k_B — постоянная Больцмана; $T(t, \mathbf{r})$ — температура окружающей среды.

Для каждого поля $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$ мы ввели свои, вообще говоря, отличные друг от друга химические потенциалы и гидродинамические скорости. Это позволяет интерпретировать каждое из случайных полей $\Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda)$ и $\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)$ как самостоятельный компонент газов квазичастиц. Поскольку, согласно (35), температуры всех компонентов одинаковы, то термодинамическое равновесие между двумя различными компонентами каждого из газов и компонентами различных газов будет достигаться при равенстве их химических потенциалов.

Усреднение по случайному процессу уравнений (13) и (14) приводит к уравнениям баланса потоков квазичастиц:

$$\partial n_c(t, \mathbf{r}; \lambda)/\partial t + (\nabla, \mathbf{n}_c(t, \mathbf{r}; \lambda)) = \sum_{\lambda'} R_{cc}(t, \mathbf{r}; \lambda, \lambda') + \sum_{\xi} R_{cv}(t, \mathbf{r}; \lambda, \xi); \quad (36)$$

$$\partial n_v(t, \mathbf{r}; \xi)/\partial t - (\nabla, \mathbf{n}_v(t, \mathbf{r}; \xi)) = \sum_{\xi'} R_{vv}(t, \mathbf{r}; \xi, \xi') + \sum_{\lambda} R_{cv}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda), \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} R_{aa}(t, \mathbf{r}; \alpha, \alpha') &= \\ &= 2\hbar^{-1} \langle (K-1)^{-1} \text{Im} \{ \Psi_a^*(t, \mathbf{r}; \alpha) U_{ast} \Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha') \} \rangle; \\ R_{cv}(t, \mathbf{r}; \lambda, \xi) &= \\ &= 2\hbar^{-1} \langle K^{-1} \text{Im} \{ \Psi_c^*(t, \mathbf{r}; \lambda) U_{cv} \Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi) \} \rangle, \\ &a = c, v; \quad \alpha = \lambda, \xi. \end{aligned} \quad (38)$$

Поскольку средние скорости переходов между квазичастицами $R_{aa}(t, \mathbf{r}; \alpha, \alpha')$ и $R_{cv}(t, \mathbf{r}; \lambda, \xi)$ антисимметричны по отношению к перестановке индексов α, α' и λ, ξ , получим

$$\partial n_c(t, \mathbf{r})/\partial t + (\nabla, \mathbf{n}_c(t, \mathbf{r})) = -R_{cv}(t, \mathbf{r}); \quad (39)$$

$$\partial n_v(t, \mathbf{r})/\partial t - (\nabla, \mathbf{n}_v(t, \mathbf{r})) = R_{cv}(t, \mathbf{r}). \quad (40)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_a(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\alpha} \mathbf{n}_a(t, \mathbf{r}; \alpha), \quad R_{cv}(t, \mathbf{r}) = \\ &= \sum_{\xi} \sum_{\lambda} R_{cv}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda). \end{aligned} \quad (41)$$

Из соотношений (39) и (40) следует закон сохранения

$$\begin{aligned} \partial(n_c(t, \mathbf{r}) + n_v(t, \mathbf{r}))/\partial t + \\ + (\nabla, \mathbf{n}_c(t, \mathbf{r}) - \mathbf{n}_v(t, \mathbf{r})) = 0. \end{aligned} \quad (42)$$

Величины $R_{cc}(t, \mathbf{r}; \lambda, \lambda')$, $R_{vv}(t, \mathbf{r}; \xi, \xi')$ и $R_{cv}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda)$ определим следующими выражениями ($a = c, v$; $\alpha = \lambda, \xi$):

$$\begin{aligned} R_{aa}(t, \mathbf{r}; \alpha, \alpha') &= (\hbar^2 \tau v)^{-1} \int d^4 k' \int d^4 k \times \\ &\times Q_{aa}^+(t, \mathbf{r}; k', \alpha, \alpha') U_{ast}^*(k') w_{aa}^*(k', \alpha, \alpha') \times \\ &\times Q_{aa}(t, \mathbf{r}; k, \alpha, \alpha') U_{ast}(k) w_{aa}(k, \alpha, \alpha'); \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} R_{cv}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda) &= (\hbar^2 \tau v)^{-1} \int d^4 k' \int d^4 k \times \\ &\times Q_{cv}^+(t, \mathbf{r}; k', \xi, \lambda) U_{cv}^*(k') w_{cv}^*(k', \xi, \lambda) \times \\ &\times Q_{cv}(t, \mathbf{r}; k, \xi, \lambda) U_{cv}(k) w_{cv}(k, \xi, \lambda), \end{aligned} \quad (44)$$

где τ и v — время и объем, по которым проводится усреднение;

$$\begin{aligned} U_{ast}(k) &= \\ &= (2\pi)^{-4} \int dt d^3 x U_{ast}(t, \mathbf{r}) \exp\{-ik_0 t + i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}; \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} U_{cv}(k) &= \\ &= (2\pi)^{-4} \int dt d^3 x U_{cv}(t, \mathbf{r}) \exp\{-ik_0 t + i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}, \end{aligned} \quad (46)$$

— Фурье-компоненты потенциалов $U_{cst}(t, \mathbf{r})$, $U_{vst}(t, \mathbf{r})$ и $U_{cv}(t, \mathbf{r})$;

$$\begin{aligned} w_{aa}(k, \alpha, \alpha') &= \int dt d^3 x \Psi_a^*(t, \mathbf{r}; \alpha) \times \\ &\times \Psi_a(t, \mathbf{r}; \alpha') \exp\{ik_0 t - i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}; \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} w_{cv}(k, \xi, \lambda) &= \int dt d^3 x \Psi_v^*(t, \mathbf{r}; \xi) \Psi_c(t, \mathbf{r}; \lambda) \times \\ &\times \exp\{ik_0 t - i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}; \end{aligned} \quad (48)$$

— амплитуды переходов между квазичастицами с излучением или поглощением плоской волны единичной амплитуды с циклической частотой k_0 и волновым вектором \mathbf{k} ;

$$\begin{aligned} Q_{ab}(t, \mathbf{r}; k, \alpha, \beta) &= \theta(z(t, \mathbf{r}; k)) \times \\ &\times [(1 - f(s_a(t, \mathbf{r}; \alpha)))f(s_b(t, \mathbf{r}; \beta)) \times \\ &\times (1 + \rho(z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} (1 - \exp\{(s_b(t, \mathbf{r}; \beta) - \\ &- s_a(t, \mathbf{r}; \alpha) - z(t, \mathbf{r}; k))/2\}) - \theta(-z(t, \mathbf{r}; k)) \times \\ &\times [(1 - f(s_b(t, \mathbf{r}; \beta)))f(s_a(t, \mathbf{r}; \alpha)) \times \\ &\times (1 + \rho(-z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} (1 - \exp\{(s_a(t, \mathbf{r}; \alpha) - \\ &- s_b(t, \mathbf{r}; \beta) + z(t, \mathbf{r}; k))/2\}); \end{aligned} \quad (49)$$

$$Q_{ab}^+(t, \mathbf{r}; k, \alpha, \beta) = \theta(z(t, \mathbf{r}; k)) \times \\ \times [(1 - f(s_a(t, \mathbf{r}; \alpha)))f(s_b(t, \mathbf{r}; \beta))] \times \\ \times (1 + \rho(z(t, \mathbf{r}; k)))^{1/2} (1 + \exp\{(s_b(t, \mathbf{r}; \beta) - \\ - s_a(t, \mathbf{r}; \alpha) - z(t, \mathbf{r}; k))/2\}) - \theta(-z(t, \mathbf{r}; k)) \times \\ \times [(1 - f(s_b(t, \mathbf{r}; \beta)))f(s_a(t, \mathbf{r}; \alpha))] \times \\ \times (1 + \rho(-z(t, \mathbf{r}; k)))^{1/2} (1 + \exp\{(s_a(t, \mathbf{r}; \alpha) - \\ - s_b(t, \mathbf{r}; \beta) + z(t, \mathbf{r}; k))/2\}) \quad (50)$$

— безразмерные функции, регулирующие статистику спонтанных и вынужденных переходов между квазичастицами ($a, b = c, v; \alpha, \beta = \lambda, \xi$).

Функция $\rho(z)$ представляет собой распределение Бозе — Эйнштейна:

$$\rho(z) = (\exp\{z\} - 1)^{-1} \quad (51)$$

с аргументом

$$z(t, \mathbf{r}; k) = \hbar k_0 / \Theta(t, \mathbf{r}). \quad (52)$$

То есть предполагается, что излучаемые или поглощаемые квазичастицами фермионами плоские волны единичной амплитуды являются бозонами с микроскопической энтропией $z(t, \mathbf{r}; k)$.

Условие

$$Q_{ab}(t, \mathbf{r}; k, \alpha, \beta) = 0 \quad (53)$$

определяет детальное равновесие, при котором переходы между компонентами квазичастиц фермионов в среднем не происходят. Его можно записать в виде уравнения баланса микроскопических энтропий квазичастиц:

$$s_b(t, \mathbf{r}; \beta) - s_a(t, \mathbf{r}; \alpha) - z(t, \mathbf{r}; k) = 0. \quad (54)$$

Нетрудно убедиться, что уравнения (36) и (37) обеспечивают релаксацию к нулю малых отклонений от детального равновесия.

В левой части уравнения Шредингера (26) перед вторым слагаемым стоит знак минус. Поскольку масса m_v положительна, то кинетическая энергия v -электронов отрицательна. Чтобы все квазичастицы имели положительную кинетическую энергию, перейдем от представления c - и v -электроны к представлению электроны — дырки.

Электронами будем считать c -электроны. Во всех формулах, где фигурируют c -электроны, проведем замену индексов c на e , ничего более не изменяя. Волновую функцию дырок $\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)$ и их массу m_h определим соотношениями

$$\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi) = \Psi_v^*(t, \mathbf{r}; \xi), \quad m_h = m_v. \quad (55)$$

Из определений (6), (32) и (33) следует, что

$$\rho(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)) = \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)), \\ \mathbf{i}(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)) = \mathbf{i}(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)), \quad (56) \\ E(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)) = E(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)), \\ \mathbf{u}(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)) = \mathbf{u}(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi)).$$

Уравнения Шредингера (25) и (26) в представлении электроны — дырки примут вид

$$i\hbar\partial\Psi_e(t, \mathbf{r}; \lambda)/\partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m_e^{-1}\nabla\Psi_e(t, \mathbf{r}; \lambda)) - \\ - U_{ed}(t, \mathbf{r})\Psi_e(t, \mathbf{r}; \lambda) = 0; \quad (57)$$

$$i\hbar\partial\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)/\partial t + (\hbar^2/2)(\nabla, m_h^{-1}\nabla\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)) - \\ - U_{hd}(t, \mathbf{r})\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi) = 0, \quad (58)$$

где $U_{ed}(t, \mathbf{r}) = U_{cd}(t, \mathbf{r})$, $U_{hd}(t, \mathbf{r}) = -U_{vd}(t, \mathbf{r})$.

Концентрации, плотности потоков и энтропии электронов совпадают с соответствующими величинами для c -электронов. Для дырок же примем выражения

$$n_h(t, \mathbf{r}; \xi) = \rho(\Psi_v(t, \mathbf{r}; \xi))f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi)), \\ \mathbf{n}_h(t, \mathbf{r}; \xi) = \mathbf{i}(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi))f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi)). \quad (59)$$

Здесь

$$s_h(t, \mathbf{r}; \xi) = [E(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)) + F_h(t, \mathbf{r}; \xi) - \\ - m_h(\mathbf{u}(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)), \\ \mathbf{v}_h(t, \mathbf{r}; \xi)]/\Theta(t, \mathbf{r}) = -s_v(t, \mathbf{r}; \xi), \\ F_h(t, \mathbf{r}; \xi) = F_v(t, \mathbf{r}; \xi). \quad (60)$$

Для гидродинамических скоростей дырок справедливы уравнения

$$m_h(\partial/\partial t - (\mathbf{u}(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)), \nabla))\mathbf{v}_h(t, \mathbf{r}; \xi) + \\ + m_h\mathbf{v}_h(t, \mathbf{r}; \xi)/\tau_h(t, \mathbf{r}; \xi) = -\Theta(t, \mathbf{r})\nabla s_h(t, \mathbf{r}; \xi), \quad (61)$$

в которых $\tau_h(t, \mathbf{r}; \xi) = \tau_v(t, \mathbf{r}; \xi)$.

Уравнение Пуассона (28) примет вид

$$(\nabla, \varepsilon\nabla\varphi(t, \mathbf{r})) = e(n_e(t, \mathbf{r}) - n_h(t, \mathbf{r}) - N(t, \mathbf{r})), \quad (62)$$

где

$$n_e(t, \mathbf{r}) = \sum_{\lambda} n_e(t, \mathbf{r}; \lambda), \quad n_h(t, \mathbf{r}) = \sum_{\xi} n_h(t, \mathbf{r}; \xi), \quad (63)$$

$$N(t, \mathbf{r}) = N_0(t, \mathbf{r}) - N_h(t, \mathbf{r}), \quad N_h(t, \mathbf{r}) = \\ = \sum_{\xi} \rho(\Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi)). \quad (64)$$

В полупроводнике величина $N(t, \mathbf{r})$ — это разность концентраций ионизированной донорной и акцепторной примесей, а $eN_h(t, \mathbf{r})$ — часть плотности заряда ядер кристаллической решетки, которая компенсируется плотностью заряда электронов в валентной зоне.

Из уравнений баланса c - и v -электронов (36) и (37) найдем уравнения баланса электронов и дырок:

$$\begin{aligned} & \partial n_e(t, \mathbf{r}; \lambda) / \partial t + (\nabla, \mathbf{n}_e(t, \mathbf{r}; \lambda)) = \\ & = \sum_{\lambda'} R_{ee}(t, \mathbf{r}; \lambda, \lambda') + \sum_{\xi} R_{ch}(t, \mathbf{r}; \lambda, \xi); \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} & \partial n_h(t, \mathbf{r}; \xi) / \partial t + (\nabla, \mathbf{n}_h(t, \mathbf{r}; \xi)) = \\ & = -\sum_{\xi'} R_{hh}(t, \mathbf{r}; \xi, \xi') - \sum_{\lambda} R_{ch}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda). \end{aligned} \quad (66)$$

Здесь ($a = v, c; \alpha = \lambda, \xi$)

$$\begin{aligned} & R_{aa}(t, \mathbf{r}; \alpha, \alpha') = (\hbar^2 \tau v)^{-1} \int d^4 k' \int d^4 k \times \\ & \times Q_{aa}^+(t, \mathbf{r}; k', \alpha, \alpha') U_{ast}^*(k') w_{aa}^*(k', \alpha, \alpha') \times \\ & \times Q_{aa}(t, \mathbf{r}; k, \alpha, \alpha') U_{ast}(k) w_{aa}(k, \alpha, \alpha'); \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} & R_{eh}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda) = (\hbar^2 \tau v)^{-1} \int d^4 k' \int d^4 k \times \\ & \times Q_{eh}^+(t, \mathbf{r}; k', \xi, \lambda) U_{eh}^*(k') w_{eh}^*(k', \xi, \lambda) \times \\ & \times Q_{eh}(t, \mathbf{r}; k, \xi, \lambda) U_{eh}(k) w_{eh}(k, \xi, \lambda); \end{aligned} \quad (68)$$

$$\begin{aligned} w_{ee}(k, \lambda, \lambda') & = \int dt d^3 x \Psi_e^*(t, \mathbf{r}; \lambda) \Psi_e(t, \mathbf{r}; \lambda') \times \\ & \times \exp\{ik_0 t - i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}; \end{aligned} \quad (69)$$

$$\begin{aligned} w_{hh}(k, \xi, \xi') & = \int dt d^3 x \Psi_h^*(t, \mathbf{r}; \xi) \Psi_h(t, \mathbf{r}; \xi') \times \\ & \times \exp\{-ik_0 t - i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}; \end{aligned} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} w_{eh}(k, \xi, \lambda) & = \int dt d^3 x \Psi_h^*(t, \mathbf{r}; \xi) \Psi_e(t, \mathbf{r}; \lambda) \times \\ & \times \exp\{ik_0 t - i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\}; \end{aligned} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} Q_{ee}(t, \mathbf{r}; k, \lambda, \lambda') & = \theta(z(t, \mathbf{r}; k)) [(1 - f(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda))) \times \\ & \times f(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda')) (1 + \rho(z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} \times \\ & \times (1 - \exp\{(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda') - s_e(t, \mathbf{r}; \lambda) - z(t, \mathbf{r}; k))/2\}) - \\ & - \theta(-z(t, \mathbf{r}; k)) [(1 - f(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda')) f(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda)) \times \\ & \times (1 + \rho(-z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} (1 - \exp\{(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda) - \\ & - s_e(t, \mathbf{r}; \lambda') + z(t, \mathbf{r}; k))/2\}); \end{aligned} \quad (72)$$

$$\begin{aligned} Q_{hh}(t, \mathbf{r}; k, \xi, \xi') & = \theta(z(t, \mathbf{r}; k)) [(1 - f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi))) \times \\ & \times f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi')) (1 + \rho(z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} \times \\ & \times (1 - \exp\{(s_h(t, \mathbf{r}; \xi') - s_h(t, \mathbf{r}; \xi) - z(t, \mathbf{r}; k))/2\}) - \\ & - \theta(-z(t, \mathbf{r}; k)) [(1 - f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi)) f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi')) \times \\ & \times (1 + \rho(-z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} (1 - \exp\{(s_h(t, \mathbf{r}; \xi') - \\ & - s_h(t, \mathbf{r}; \xi) + z(t, \mathbf{r}; k))/2\}); \end{aligned} \quad (73)$$

$$\begin{aligned} Q_{eh}(t, \mathbf{r}; k, \xi, \lambda) & = \theta(z(t, \mathbf{r}; k)) [f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi)) \times \\ & \times f(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda)) (1 + \rho(z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} \times \\ & \times (1 - \exp\{(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda) + s_h(t, \mathbf{r}; \xi) - z(t, \mathbf{r}; k))/2\}) - \\ & - \theta(-z(t, \mathbf{r}; k)) [(1 - f(s_h(t, \mathbf{r}; \xi)) (1 - f(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda))) \times \\ & \times (1 + \rho(-z(t, \mathbf{r}; k)))]^{1/2} (1 - \exp\{-(s_e(t, \mathbf{r}; \lambda) + \\ & + s_h(t, \mathbf{r}; \xi) - z(t, \mathbf{r}; k))/2\}). \end{aligned} \quad (74)$$

Выражения для $Q_{ee}^+(t, \mathbf{r}; k, \lambda, \lambda')$, $Q_{hh}^+(t, \mathbf{r}; k, \xi, \xi')$ и $Q_{eh}^+(t, \mathbf{r}; k, \xi, \lambda)$ получаются из формул (72), (73) и (74) заменой знаков перед соответствующими экспонентами.

Для суммарных плотностей электронов и дырок найдем

$$\partial n_e(t, \mathbf{r}) / \partial t + (\nabla, \mathbf{n}_e(t, \mathbf{r})) = -R_{eh}(t, \mathbf{r}); \quad (75)$$

$$\partial n_h(t, \mathbf{r}) / \partial t + (\nabla, \mathbf{n}_h(t, \mathbf{r})) = -R_{eh}(t, \mathbf{r}), \quad (76)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_a(t, \mathbf{r}) & = \sum_{\alpha} \mathbf{n}_a(t, \mathbf{r}; \alpha), \quad a = e, h; \quad \alpha = \lambda, \xi; \\ R_{eh}(t, \mathbf{r}) & = \sum_{\xi} \sum_{\lambda} R_{eh}(t, \mathbf{r}; \xi, \lambda). \end{aligned} \quad (77)$$

Из соотношений (75) и (76) следует закон сохранения плотностей потоков:

$$\begin{aligned} & \partial(n_e(t, \mathbf{r}) - n_h(t, \mathbf{r})) / \partial t + \\ & + (\nabla, \mathbf{n}_e(t, \mathbf{r}) - \mathbf{n}_h(t, \mathbf{r})) = 0. \end{aligned} \quad (78)$$

Уравнения Пуассона (62) и непрерывности потоков (75) и (76) представляют собой систему уравнений дрейфово-диффузионной модели переноса заряда в полупроводниках [3]. Она описывает физические явления в полупроводниковых приборах в квазиклассическом приближении и позволяет учесть влияние процессов рекомбинации и генерации электронов и дырок на их электрические характеристики.

Если детерминированные потенциалы U_{ed} и U_{hd} не зависят от времени или этой зависимостью в главном приближении можно пренебречь, то уравнения (57) и (58) становятся стационарными. Тогда интегрирование по времени в выражениях (69)–(71) приводит к законам сохранения энергии для переходов электрон–электрон, дырка–дырка и электрон–дырка, а условие детального равновесия (54) становится эквивалентным условиям химического равновесия $F_e(t, \mathbf{r}; \lambda) = F_e(t, \mathbf{r}; \lambda')$, $F_h(t, \mathbf{r}; \xi) = F_h(t, \mathbf{r}; \xi')$, $F_e(t, \mathbf{r}; \lambda) = F_h(t, \mathbf{r}; \xi)$.

В стационарном случае при малых отклонениях компонентов электронного газа от химического равновесия, когда $|F_e(t, \mathbf{r}; \lambda) - F_e(t, \mathbf{r}; \lambda')| \ll \Theta(t, \mathbf{r})$, получим $R_{ee}(t, \mathbf{r}; \lambda, \lambda') \sim \hbar^{-1} (F_e(t, \mathbf{r}; \lambda) - F_e(t, \mathbf{r}; \lambda'))$, и из формул (67)–(74) следуют выражения, которые использовались в работах [7, 15, 19] для моделирования переноса заряда в резонансно-туннельных диодах и квантовых приборах на основе нанопроводов.

Заключение

Здесь представлена многокомпонентная модель переноса заряда в полупроводниковых структурах, включающая в себя уравнения Шре-

дингера, уравнения для гидродинамических скоростей, уравнение Пуассона и уравнения баланса потоков квазичастиц электронов и дырок. Каждое возможное состояние квазичастицы рассматривается как самостоятельный компонент, характеризующийся своим химическим потенциалом. В квазиклассическом приближении многокомпонентная модель переходит в дрейфово-диффузионную модель, широко используемую для моделирования характеристик кремниевых приборов.

Представленная модель дополняет дрейфово-диффузионную возможность последовательно учитывать квантовые явления, такие как туннелирование; размерное квантование энергии электронов и дырок; их рассеяние на фононах, дефектах кристаллической решетки, границах раздела сред, друг на друге и т. д. При этом для концентраций и потоков квазичастиц, электростатического и химического потенциалов могут использоваться те же физически ясные и понятные граничные и начальные условия, что и в дрейфово-диффузионной модели.

Многокомпонентная модель позволяет учитывать влияние неравновесных эффектов на электрические характеристики полупроводниковых приборов. Время релаксации электронного газа к состоянию химического равновесия $\tau_{rel} = \hbar/k_B T$ порядка 10^{-14} с при комнатной температуре. Характерная длина релаксации определяется соотношением $L_{rel} = (\hbar\mu_e/e)^{1/2}$, где μ_e — подвижность электронов. При комнатной температуре для объемного GaAs $L_{rel} \approx 23$ нм, а для InSb $L_{rel} \approx 72$ нм. Времена рекомбинации электронов и дырок в полупроводниковых материалах порядка $10^{-8} \dots 10^{-6}$ с, а диффузионные длины, на которых происходит релаксация газов электронов и дырок к состоянию химического равновесия, составляют десятки и сотни микрометров.

Таким образом, неравновесные процессы в электронном и дырочном газах по отдельности, и отклонения от химического равновесия между этими газами характеризуются временами и длинами, различающимися на несколько порядков. Неравновесность газа электронов и/или газа дырок практически не влияет на функционирование приборов с активными областями микрометровых размеров. Характеристики таких приборов существенно зависят от процессов рекомбинации и генерации, нарушающих равновесие между электронами и дырками. В приборах же с субмикрометровыми и нанометровыми размерами активных областей нарушение химического равновесия между электронами и/или между дыр-

ками может принципиально повлиять на электрические характеристики [7, 15, 19].

Многокомпонентная модель применялась для анализа физических явлений в резонансно-туннельных диодах, электронных, термоэлектронных и оптоэлектронных приборах на основе нанопроводов и расчета их ожидаемых статических и высокочастотных характеристик [7, 14, 15, 19—21]. Полученные к настоящему времени экспериментальные результаты согласуются с предсказаниями многокомпонентной модели.

Список литературы

1. **Quantum Transport in Ultrasmall Devices** NATO ASI Ser. D. Vol. 342 // Ed. by D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, A.-P. Jauho. New York, London: Plenum Press, 1995. 544 p.
2. **Datta S.** *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*; Cambridge University Press: Cambridge, UK. 1997. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511805776>.
3. **Абрамов И. И.** *Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники*. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. 437 с.
4. **Gazibegovic S., Car D., Zhang H.** et al. Epitaxy of Advanced Nanowire Quantum Devices // *Nature*. 2017. Vol. 548. P. 434—445.
5. **Ning C.-Z., Dou L., Yang P.** Bandgap Engineering in Semiconductor Alloy Nanomaterials with Widely Tunable Compositions // *Nature reviews, materials*. 2017. Vol. 2. Article Number 17070. P. 1—14.
6. **Datta S.** Quantum devices // *Superlattices and Microstructures*. 1989. Vol. 6, N. 1. P. 83—93.
7. **Obukhov I. A.** Planar One-Dimensional Quantum Devices // *Nanoscience and Nanotechnology*. 2013. Vol. 3, N. 5. P. 115—122.
8. **Chau R., Datta S., Doczy M.** et al. Benchmarking Nanotechnology for High-Performance and Low-Power Logic Transistor Applications // *IEEE Transactions on Nanotechnology*. 2005. Vol. 4, N. 2. P. 153—158.
9. **Das S. R., Delker C. J., Zakharov D., Chen Y. P., Sands T. D., Janes D. B.** Room Temperature Device Performance of Electrodeposited InSb Nanowire Field Effect Transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2011. Vol. 98: 243504.
10. **Yang Z.-X., Han N., Wang F.** et al. Carbon Doping of InSb Nanowires for High-Performance p-Channel Field-Effect Transistors // *Nanoscale*. 2013. Vol. 5. P. 9671—9676.
11. **Solner T. C. L. G., Goodhue W. D., Tannenwald P. E.** et al. Resonant Tunneling through Quantum Wells at Frequencies up to 2.5 THz // *Appl. Phys. Lett.* 1983. Vol. 43. P. 588.
12. **Tsu R., Esaki L.** Tunneling in a Finite Superlattice // *Appl. Phys. Lett.* 1973. Vol. 22, N. 11. P. 562—564.
13. **Luryi S.** Frequency Limit of Double-Barrier Resonant-Tunneling Oscillators // *Appl. Phys. Lett.* 1985. Vol. 47. P. 490—492.
14. **Гаврилов О. Т., Квяткевич И. И., Обухов И. А., Матвеев Ю. А.** Взаимодействие резонансно-туннельного диода с подложкой через распределенную границу // *Письма в ЖТФ*. 1996. Т. 22, Вып. 8. С. 18—21.
15. **Обухов И. А.** Моделирование статических характеристик резонансно-туннельных приборов // *Микросистемная техника*. 2001. № 2. С. 23—28.
16. **Келдыш Л. В.** Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ*. 1964. Т. 47, Вып. 4. С. 1515—1527.
17. **Datta S.** A Simple Kinetic Equation for Steady-State Quantum Transport // *J. Phys.: Condensed Matter*. 1990. Vol. 2. P. 8023—8052.
18. **Klimeck G.** Quantum and Semi-Classical Transport in NEMO-1D // *J. of Comput. Electron.* 2003. Vol. 2. P. 177—182.

19. **Obukhov I. A.** Nonequilibrium Effects in One-Dimensional Quantum Devices. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014. 132 p.

20. **Горох Г. Г., Обухов И. А., Лозовенко А. А.** Массивы нанопроводов из антимонида индия для перспективных

термоэлектрических устройств // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2015. № 1. С. 3—11.

21. **Обухов И. А., Смирнова Е. А.** Нанопровод как активный элемент генератора СВЧ излучения // Нано- и микро- системная техника. 2016. Т. 18, № 8. С. 509—514.

I. A. Obukhov, D. Sc., Senior Research Officer, iao001@mail.ru,
Research and Production Company "Radiotekhnika", Moscow, Russian Federation

Corresponding author:

Obukhov Ivan A., D. Sc., Senior Research Officer, Research and Production Company "Radiotekhnika", Moscow, Russian Federation

E-mail: iao001@mail.ru,

Multicomponent Model of Charge Transport in Quantum Semiconductor Devices

Received on October 20, 2020

Accepted on November 10, 2020

A model that allows taking into account the influence of quantum and non-equilibrium effects to the characteristics of semiconductor devices is presented. The model was successfully used for calculation the characteristics of resonant-tunneling diodes, electronic, thermionic and optoelectronic devices based on nanowires. In a quasi-classical approximation it goes into a drift-diffusion model.

Keywords: modeling, charge transport, semiconductors, quantum devices, non-equilibrium phenomena

For citation:

Obukhov I. A. Multicomponent Model of Charge Transport in Quantum Semiconductor Devices, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2021, vol. 23, no. 1, pp. 24—31.

DOI: 10.17587/nmst.23.24-31

References

1. **Quantum** Transport in Ultrasmall Devices // Ed. by D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, A.-P. Jauho, New York, London, Plenum Press, 1995, NATO ASI Ser. D, v. 342, 544 p.

2. **Datta S.** Electronic Transport in Mesoscopic Systems; Cambridge University Press: Cambridge, UK. 1997. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511805776>.

3. **Abramov I. I.** Basic of Modeling of Micro- and Nanoelectronics Elements. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, 2016, 437 p. (in Russian).

4. **Gazibegovic S., Car D., Zhang H.** et al. Epitaxy of Advanced Nanowire Quantum Devices, *Nature*, 2017, vol. 548, pp. 434—445.

5. **Ning C.-Z., Dou L., Yang P.** Bandgap Engineering in Semiconductor Alloy Nanomaterials with Widely Tunable Compositions, *Nature Reviews, Materials*, 2017, vol. 2, Article Number 17070, pp. 1—14.

6. **Datta S.** Quantum Devices, *Superlattices and Microstructures*, 1989, vol. 6, no. 1, pp. 83—93.

7. **Obukhov I. A.** Planar One-Dimensional Quantum Devices, *Nanoscience and Nanotechnology*, 2013, vol. 3, no. 5, pp. 115—122.

8. **Chau R., Datta S., Doczy M.** et al. Benchmarking Nanotechnology for High-Performance and Low-Power Logic Transistor Applications, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 2005, vol. 4, no. 2, pp. 153—158.

9. **Das S. R., Delker C. J., Zakharov D., Chen Y. P., Sands T. D., Janes D. B.** Room Temperature Device Performance of Electrodeposited InSb Nanowire Field Effect Transistors, *Appl. Phys. Lett.*, 2011, vol. 98: 243504.

10. **Yang Z.-X., Han N., Wang F.** et al. Carbon Doping of InSb Nanowires for High-Performance p-Channel Field-Effect-Transistors, *Nanoscale*, 2013, vol. 5, pp. 9671—9676.

11. **Solner T. C. L. G., Goodhue W. D., Tannenwald P. E.** et al. Resonant Tunneling through Quantum Wells at Frequencies up to 2.5 THz, *Appl. Phys. Lett.*, 1983, vol. 43, p. 588.

12. **Tsu R., Esaki L.** Tunneling in a Finite Superlattice, *Appl. Phys. Lett.*, 1973, vol. 22, no. 11, pp. 562—564.

13. **Luryi S.** Frequency Limit of Double-Barrier Resonant-Tunneling Oscillators, *Appl. Phys. Lett.*, 1985, vol. 47, pp. 490—492.

14. **Gavrilov O. T., Kviatkevich I. I., Obukhov I. A., Matveev Yu. A.** Interaction of Resonant-Tunneling Diode with Substrate through Distributed Boundary, *Pisma v JTF*, 1996, vol. 22, no. 8, pp. 18—21 (in Russian).

15. **Obukhov I. A.** Modeling of Static Characteristics of Resonant-Tunneling Devices, *Mikrosistemnaya tekhnika*, 2001, no. 2, pp. 23—28 (in Russian).

16. **Keldish L. V.** Diagram Technique for Non-Equilibrium Processes, *JETF*, 1964, vol. 47, no. 4, pp. 1515—1527 (in Russian).

17. **Datta S.** A Simple Kinetic Equation for Steady-State Quantum Transport, *J. Phys.: Condensed Matter*, 1990, vol. 2, pp. 8023—8052.

18. **Klimeck G.** Quantum and Semi-Classical Transport in NEMO-1D, *J. of Comput. Electron.*, 2003, vol. 2, pp. 177—182.

19. **Obukhov I. A.** Nonequilibrium Effects in One-Dimensional Quantum Devices. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, 2014, 132 p.

20. **Gorokh G. G., Obukhov I. A., Lazovenko A. A.** Arrays of Indium Antimonide Nanowires for Perspective Thermionic Devices, *Tehnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparature*, 2015, no. 1, pp. 3—11 (in Russian).

21. **Obukhov I. A., Smirnova E. A.** Nanowire as an Active Element of Generator of Microwave Radiation, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2016, vol. 18, no. 8, pp. 509—514 (in Russian).

И. К. Хмельницкий, канд. хим. наук, ст. науч. сотр., khmelnitskiy@gmail.com,
В. М. Айвазян, инженер, **Н. И. Алексеев**, д-р физ.-мат. наук, вед. науч. сотр.,
А. П. Бройко, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., **В. В. Лучинин**, д-р техн. наук,
директор ИЦ ЦМИД, **Д. О. Тестов**, инженер,
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ"
им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ ИОННЫХ ЭАП-АКТЮАТОРОВ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ И ПОЛИМЕРНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Поступила в редакцию 26.11.2020

Перспективными материалами для создания электромеханических преобразователей являются электроактивные полимеры (ЭАП). Среди ионных ЭАП наиболее широко распространены и хорошо изучены ионные полимер-металлические композиты (ИПМК), представляющие собой ионообменную мембрану, на обе стороны которой нанесены металлические электроды. Результатом эволюционного развития ИПМК являются ионные полимер-полимерные композиты (ИППК), в которых используются полимерные электроды.

*Для получения ИПМК-актюаторов с платиновыми электродами был выбран метод химического восстановления из раствора соли, а для получения ИППК-актюаторов с PEDOT-электродами — метод *in situ* полимеризации мономера на поверхности мембраны. Образцы размерами 2×0,5 см на основе мембраны МФ-4СК толщиной 290 мкм предварительно выдерживали в деионизованной воде (H⁺-форма) и в водном 0,1 М растворе CuSO₄ (Cu²⁺-форма), после чего проводили исследования их работоспособности на воздухе, в деионизованной воде, а также в водных растворах CuSO₄ и NaCl.*

При приложении напряжения постоянного тока и напряжения переменного тока синусоидальной формы наблюдали уменьшение максимального отклонения и размаха отклонения ИПМК-актюаторов и ИППК-актюаторов с увеличением ионной силы жидкости за исключением случая работы ИПМК-актюаторов в водных растворах CuSO₄. Во всех рассматриваемых средах ИПМК-актюаторы и ИППК-актюаторы в Cu²⁺-форме отклонялись сильнее соответствующих образцов в H⁺-форме, кроме ИППК-актюаторов в деионизованной воде. Наибольший размах отклонения продемонстрировали ИПМК-актюаторы в Cu²⁺-форме при работе на воздухе (5 мм) и ИППК-актюаторы в H⁺-форме при работе в деионизованной воде (8,4 мм).

Ключевые слова: электроактивные полимеры, ионные полимер-металлические композиты, ионные полимер-полимерные композиты, ИПМК-актюаторы, ИППК-актюаторы, мембрана МФ-4СК, PEDOT-электроды, водная среда

Введение

Актуальной задачей является разработка движителей для биомиметических робототехнических систем. В этом случае электроактивные полимеры (ЭАП) представляют собой инновационные материалы, часто композиты, подходящие

для реализации движителей, поскольку они способны преобразовывать электрический сигнал в механическое движение [1, 2].

Одной из разновидностей ЭАП-структур является ионный полимер-металлический композит (ИПМК) — структура, состоящая из полимерной ионообменной мембраны, пропитанной

электролитом и покрытой с обеих сторон металлическими электродами [3]. ИПМК-актюатор можно применять в медицинских целях, поскольку он изготовлен из биосовместимых материалов и способен работать в водной среде за счет содержания молекул воды внутри него. Кроме того, ИПМК-актюатор физически легок и гибок, характеризуется большой электрической емкостью, а также его можно приводить в действие низким напряжением 1...2 В. В дополнение, он имеет подходящее для плавающих биороботов время отклика с высоким изгибным движением. В связи с этим ИПМК-актюатор может быть использован в качестве тела и хвостового плавника для конструкции рыбоподобного робота [4, 5].

В качестве альтернативы металлическим электродам можно использовать более доступные, более гибкие и непроницаемые для электролитов материалы, например, материалы на основе графена [6–10] или проводящие полимеры [11–15].

Одним из наиболее успешных проводящих полимеров за последние два десятилетия является поли(3,4-этилендиокситиофен) (PEDOT), допированный полистиролсульфонатом (PSS), который коммерчески доступен в форме водной дисперсии в виде частиц коллоидного геля. Поли(3,4-этилендиокситиофен)-полистиролсульфонат (PEDOT:PSS) имеет иерархическую структуру [16]. На рис. 1 представлена первичная структура — последовательность мономерных звеньев PEDOT и PSS.

Этот проводящий полимер в настоящее время играет важную роль в приборах органической электроники. Он широко применяется в полимерных и композитных светодиодах, полевых транзисторах, солнечных элементах, проводящих экранах и покрытиях [17].

Синтетические композиты на основе полимерной ионообменной мембраны, пропитанной электролитом и покрытой с обеих сторон полимерными электродами, называют ионными полимер-полимерными композитами (ИППК). Для создания ИППК-структур может быть использовано нанесение слоев PEDOT:PSS на мембрану методами центрифугирования, погружения или полива [11]. В связи с тем что эти слои водорастворимы, для обеспечения возможности работы ИППК-актюаторов в условиях высокой влажности или в водной среде необходимо получить нерастворимое покрытие. Одним из таких покрытий являются слои PEDOT, которые

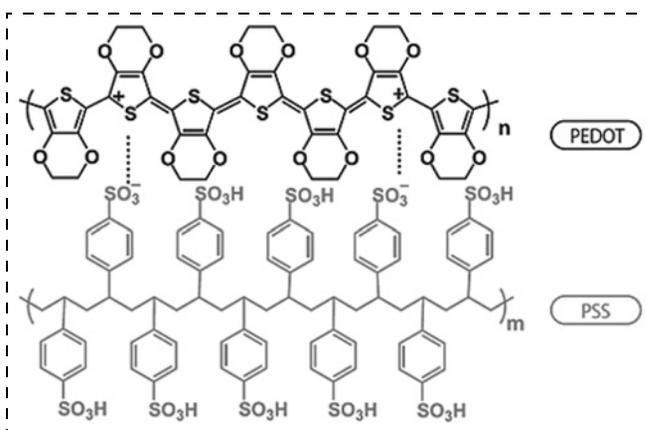


Рис. 1. Структурная формула PEDOT:PSS

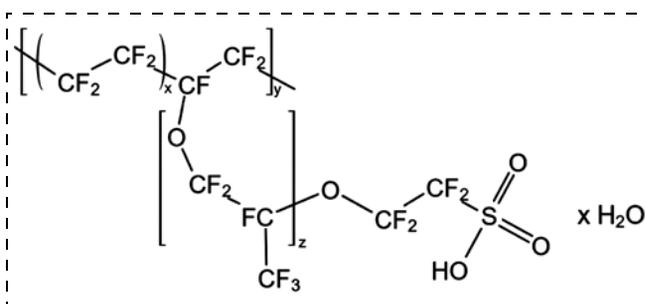


Рис. 2. Структурная формула мембраны Nafion

могут быть получены методом окислительной полимеризации мономера на поверхности мембраны [12].

Одной из наиболее широко распространенных и хорошо изученных пористых ионообменных мембран является перфторированная мембрана Nafion, разработанная в 1960-х гг. компанией "DuPont". Nafion представляет собой полимер на основе тефлона с короткими боковыми цепями, оканчивающимися сульфогруппами (рис. 2) [18].

Российским аналогом Nafion является мембрана МФ-4СК производства ОАО "Пластполимер". Преимуществом такой мембраны является существенно более низкая стоимость, обеспечивающая ее коммерческую доступность и широкий спрос. В плане перспектив промышленного производства ЭАП-сенсоров и ЭАП-актюаторов в России использование МФ-4СК представляет собой хороший вариант импортозамещения и потому этот материал очень актуален. Кроме того, несмотря на то что ионная проводимость в МФ-4СК несколько ниже, чем в Nafion, известно, что ИПМК-актюаторы с МФ-4СК демонстрируют более высокие актюационные характеристики (амплитуда отклонения, блокирующая

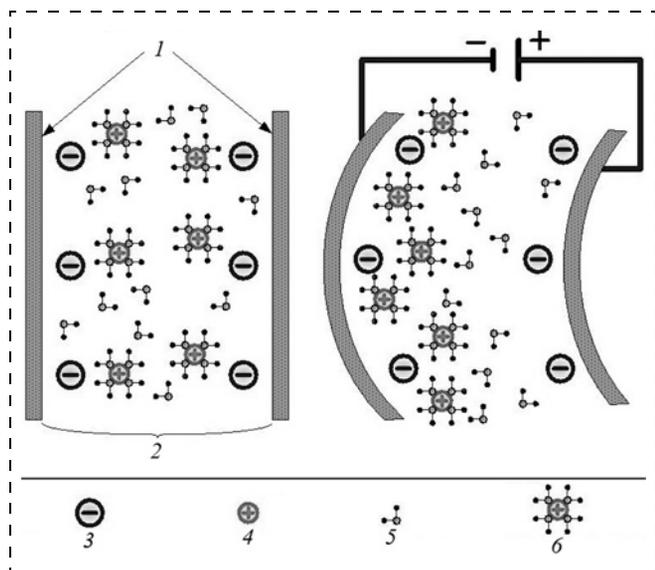


Рис. 3. Принцип действия ионного ЭАП-актюатора:

1 — электроды; 2 — мембрана; 3 — неподвижные анионы; 4 — подвижные катионы; 5 — молекулы воды; 6 — гидратированные катионы

сила и др.), чем с Nafion, что связано с ростом среднего размера пор [19].

Принцип действия ионного ЭАП-актюатора (рис. 3) основан на транспортных процессах в полимерной мембране (Nafion или МФ-4СК). Во время насыщения водой сухой полимер структурируется так, что гидрофильные концы полимерных цепочек обращаются к водонаполненным порам мембраны. Под действием электрического поля, вызванного напряжением, приложенным к электродам, заряженный компонент жидкости в мембране приходит в движение по сквозной системе пор. Возникающий вследствие этого электроосмотический поток воды вызывает рост давления жидкости у одного электрода и снижение в окрестности другого электрода. Разность давлений приводит к изгибу ЭАП-актюатора [19].

Характеристики актюатора зависят от состава электролита, растворенного в воде. При этом ключевую роль играет природа катионов, свободно перемещающихся внутри мембраны. В работе [20] были исследованы характеристики ИПМК-актюаторов на основе Nafion, выдержанных в растворах различных солей, при работе на воздухе. Показано, что наибольшие отклонения наблюдаются для ИПМК-актюатора, выдержанного в водном 0,1 М растворе CuSO_4 .

В связи с отсутствием данных по работоспособности ионных ЭАП-актюаторов на основе МФ-4СК в воде в настоящей работе были изго-

товлены ИПМК-актюаторы и ИППК-актюаторы, выдержанные в деионизованной воде и в водном 0,1 М растворе CuSO_4 , и исследованы их характеристики в водной среде.

Получение и характеристика структуры ИПМК-актюаторов и ИППК-актюаторов

Процесс получения ИПМК-актюаторов с платиновыми (Pt) электродами состоял из двух стадий. На первой стадии мембрану МФ-4СК толщиной 290 мкм предварительно выдерживали в растворе соли платины $\text{Pt}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2$, после чего проводили осаждение платины с помощью боргидрида натрия NaBH_4 . На второй стадии для увеличения толщины электродов проводили осаждение платины из раствора, содержащего соль $\text{Pt}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2$, а также гидразин N_2H_4 и гидраксиламин NH_2OH в качестве восстановителей.

Более подробно технология изготовления ИПМК-структур представлена в работе [20].

Для получения ИППК-актюаторов ранее [13] был использован метод полива водной дисперсии PEDOT:PSS на поверхность мембраны Nafion 117, пропитанной ионной жидкостью 1-аллил-3-метилимидазолия хлорид. Поскольку ее вязкость существенно превышает вязкость воды, получение электромеханической характеристики было затруднено.

По этой причине в работах [14, 15] были получены ИППК-актюаторы с PEDOT-электродами, для чего применялась *in situ* полимеризация EDOT на поверхности мембраны Nafion 117, толщина которой составляет 175 мкм. В данной работе была использована мембрана МФ-4СК толщиной 290 мкм. Изготовление ИППК-структур заключалось в выдерживании мембраны в водном растворе EDOT и NaPSS с последующим добавлением FeCl_3 и перемешиванием содержимого в течение 45 мин.

Было обнаружено, что PEDOT обладает высокой адгезией к содержащим группы SO_3^- перфторированным полимерам, придавая поверхности мембраны сине-черную окраску. Это может быть связано с тем, что в процессе полимеризации сульфогруппы МФ-4СК, как и в случае с Nafion [14, 15], могут служить в качестве противоионов, следовательно, нельзя исключать полимеризацию внутри мембраны.

Изготовленные ИПМК-структуры и ИППК-структуры размерами 4×4 см были разрезаны на полоски размерами $2 \times 0,5$ см, одну часть которых выдерживали в деионизованной воде (H^+ -фор-

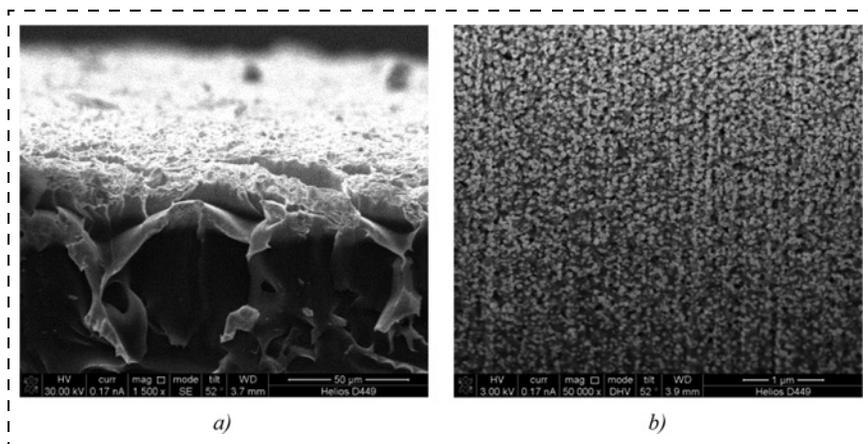


Рис. 4. РЭМ-изображения ИПМК-актюатора:

a — срез; *b* — диффузный слой платины

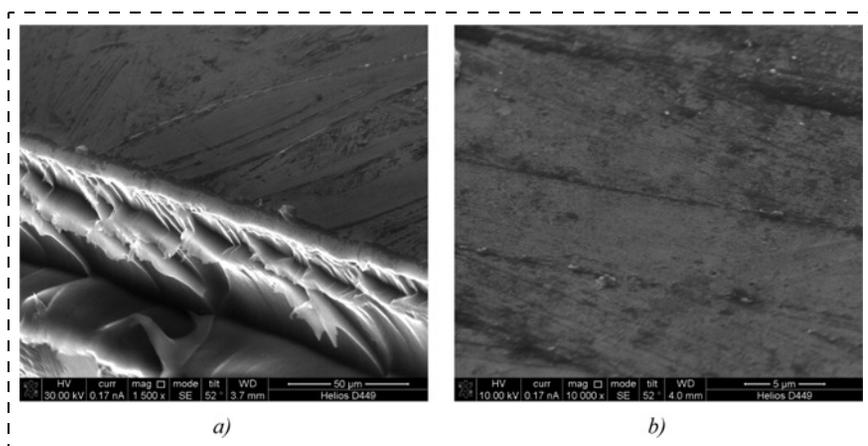


Рис. 5. РЭМ-изображения ИПМК-актюатора:

a — профиль; *b* — поверхность

ма), а другую — в водном 0,1 М растворе сульфата меди (Cu^{2+} -форма).

Для фотографирования образцов использовали растровый электронный микроскоп (РЭМ) "Helios NanoLab D449" (FEI, США). На полученном РЭМ-изображении ИПМК-актюатора (рис. 4, *a*) виден слой платины на поверхности мембраны. Для исследования внутренней структуры Pt-электрода была использована методика создания поперечного сечения остросфокусированным ионным пучком. Эта морфологическая характеристика позволяет измерить толщину диффузного слоя платины; для разных образцов она составляет 6...10 мкм (рис. 4, *b*).

РЭМ-изображение профиля ИПМК-актюатора (рис. 5, *a*) позволяет оценить толщину PEDOT-электрода: ~2 мкм. Более точное измерение толщины электрода затруднено, поскольку на поперечном сечении образцов отсутствует контраст. Поверхность электрода (рис. 5, *b*) по-

лучилась достаточно однородной, и на ней отсутствуют трещины, которые могли бы приводить к утечке электролита.

Для определения шероховатости поверхности образцов был применен атомно-силовой микроскоп (АСМ). Чем ниже шероховатость и сопротивление образца, тем выше качество электрода. Более высокая шероховатость приводит к трещинам в электроде и, следовательно, к более высокому сопротивлению образца, а значит, и к более низким результатам производительности актюатора.

АСМ-изображение (рис. 6, *a*, см. третью сторону обложки) подчеркивает сильно анизотропную природу поверхности Pt-электрода, с высокими пиками и глубокими долинами. На выбранном участке длиной 100 мкм (рис. 6, *b*) максимальный перепад высот составляет ~3 мкм. Средняя шероховатость Pt-электрода составляет 477 нм, средняя квадратичная шероховатость — 587 нм.

В случае поверхности PEDOT-электрода (рис. 7, *a*, см. третью сторону обложки) на выбранном участке длиной 5 мкм (рис. 7, *b*) максимальный перепад высот составляет ~130 нм. Средняя квадратичная шероховатость на данном участке — 15,7 нм.

На АСМ-изображениях более мягкие, более вязкие и рассеивающие энергию компоненты выглядят как темные области, в то время как более твердые и эластичные компоненты — как светлые области [21]. Предлагаемая в настоящее время морфологическая модель твердых пленок PEDOT:PSS заключается в том, что данный комплекс состоит из зерен с гидрофобным высокопроводящим ядром, обогащенным PEDOT, и гидрофильной изолирующей оболочкой, обогащенной PSS. Предположительно, темные области представляют собой матрицу, образованную оболочками, обогащенными PSS, тогда как светлые области являются ядрами, обогащенными PEDOT [22]. Средний диаметр сферического зерна находится в диапазоне 50...80 нм.

Исследование ИПМК-актюаторов и ИППК-актюаторов

Для измерения отклонения свободного конца консоли зафиксированного актюатора в водной среде использовали стенд, схема которого изображена на рис. 8 (см. четвертую сторону обложки), а внешний вид — на рис. 9 (см. четвертую сторону обложки).

Исследуемый актюатор закрепляли щупами, через которые подавалось напряжение от генератора сигнала "Agilent 33500B Series". Отклонение актюатора регистрировал лазерный датчик перемещения "L-GAGE LG5A65PUQ". Для его корректной работы от источника питания "GW Instek GPR-11H30D" на датчик подавалось напряжение ~17 В и положение актюатора относительно датчика регулировали так, чтобы мультиметр "Keysight 34461A" показывал напряжение 3...7 В постоянного тока.

Датчик генерировал электрический сигнал, пропорциональный отклонению актюатора и фиксируемый на осциллографе "Agilent DSO-X 3014A". Затем размах сигнала отображался на персональном компьютере и пересчитывался в отклонение в миллиметрах.

Для исследования актюатора в водной среде его погружали в ванну со стеклянным окном, которую наполняли соответствующей жидкостью. Поскольку лазерный луч, проходя через стекло и жидкость, преломлялся, то для определения истинных значений отклонения использовали калибратор.

Исследование ИПМК-актюаторов. Исследование ИПМК-актюаторов проводили на воздухе

и в жидкостях различной ионной силы: в водных 0,001 М, 0,01 М, 0,1 М и 0,15 М растворах NaCl, в водных 0,001 М, 0,01 М и 0,1 М растворах CuSO₄ и в деионизованной воде. Измеряли зависимости максимального отклонения от управляющего напряжения постоянного тока, размаха отклонения от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц, а также частотные зависимости при размахе управляющего напряжения 10 В.

Исследование работы ИПМК-актюаторов в жидкостях с различной ионной силой при приложении напряжения постоянного тока (рис. 10) показало, что с увеличением ионной силы жидкости уменьшается максимальное отклонение образцов как в H⁺-форме, так и в Cu²⁺-форме. Результаты измерения параметров на управляющем напряжении постоянного тока показали снижение максимального отклонения ИПМК-актюаторов в деионизованной воде по сравнению с максимальным отклонением на воздухе. У образцов в Cu²⁺-форме наблюдаются большие отклонения, чем у образцов в H⁺-форме, как на воздухе, так и в воде (рис. 11). При этом на воздухе при переходе от H⁺-формы к Cu²⁺-форме увеличение максимального отклонения существенно больше (на 130 %), чем в воде (на 30 %).

При переходе от напряжения постоянного тока к напряжению переменного тока отклонения ИПМК-актюаторов уменьшаются. Например, размах отклонения образцов, управляемых напряжением переменного тока синусоидальной формы (5 В, 1 Гц), несмотря на большие управляющие напряжения, меньше, чем максимальное отклонение соответствующих образцов,

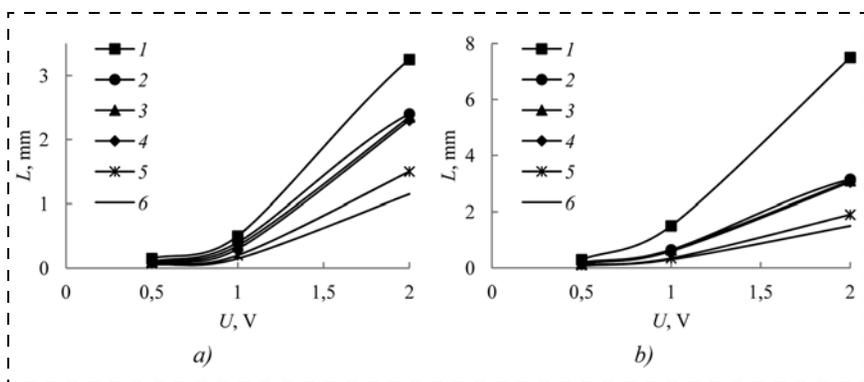


Рис. 10. Зависимости максимального отклонения ИПМК-актюаторов в H⁺-форме (а) и Cu²⁺-форме (б) от управляющего напряжения постоянного тока:

1 — воздух; 2 — деионизованная вода; 3 — 0,001 М NaCl; 4 — 0,01 М NaCl; 5 — 0,1 М NaCl; 6 — 0,15 М NaCl

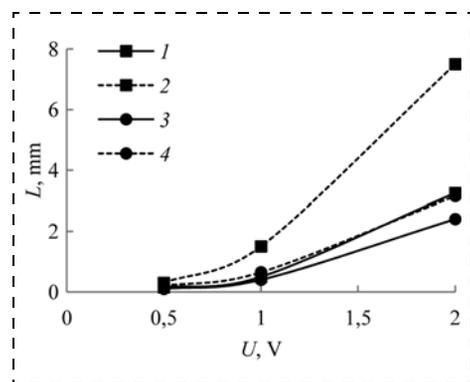


Рис. 11. Зависимости максимального отклонения ИПМК-актюаторов от управляющего напряжения постоянного тока:

1 — H⁺-форма, воздух; 2 — Cu²⁺-форма, воздух; 3 — H⁺-форма, деионизованная вода; 4 — Cu²⁺-форма, деионизованная вода

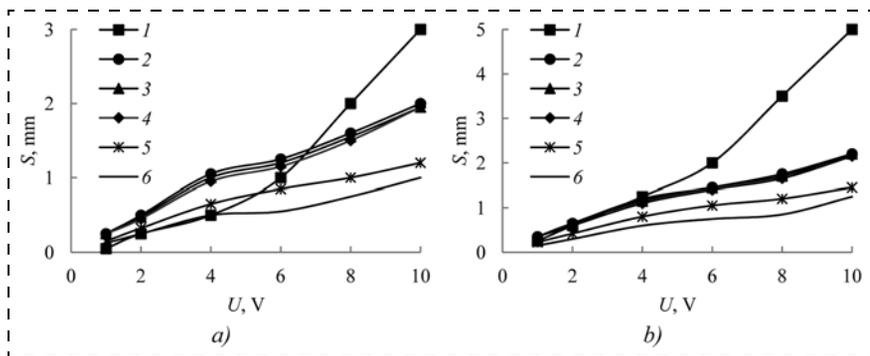


Рис. 12. Зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов в H^+ -форме (a) и Cu^{2+} -форме (b) от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц: 1 — воздух; 2 — деионизованная вода; 3 — 0,001 М NaCl; 4 — 0,01 М NaCl; 5 — 0,1 М NaCl; 6 — 0,15 М NaCl

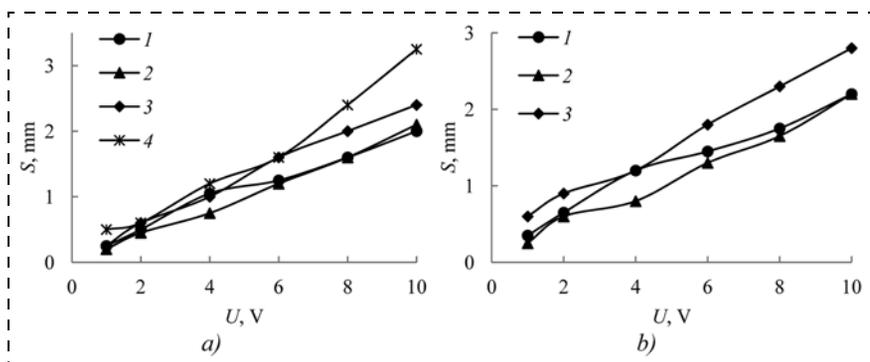


Рис. 13. Зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов в H^+ -форме (a) и Cu^{2+} -форме (b) от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц: 1 — деионизованная вода; 2 — 0,001 М $CuSO_4$; 3 — 0,01 М $CuSO_4$; 4 — 0,1 М $CuSO_4$

работающих под действием напряжения постоянного тока (рис. 12). При сравнении работы ИПМК-актюаторов в H^+ - и Cu^{2+} -формах, управляемых напряжением переменного тока, как и в случае напряжения постоянного тока, с увеличе-

нием ионной силы раствора наблюдается уменьшение отклонения (размаха отклонения). В случае водных растворов $CuSO_4$ наблюдается обратное явление: с увеличением ионной силы раствора размах отклонения увеличивается (рис. 13). По-видимому, это обусловлено тем, что мембрана насыщается ионами меди в ходе работы ИПМК-актюатора.

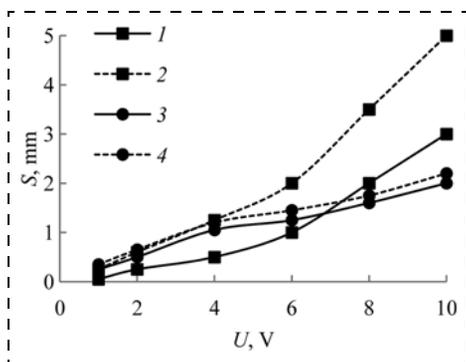


Рис. 14. Зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц: 1 — H^+ -форма, воздух; 2 — Cu^{2+} -форма, воздух; 3 — H^+ -форма, деионизованная вода; 4 — Cu^{2+} -форма, деионизованная вода

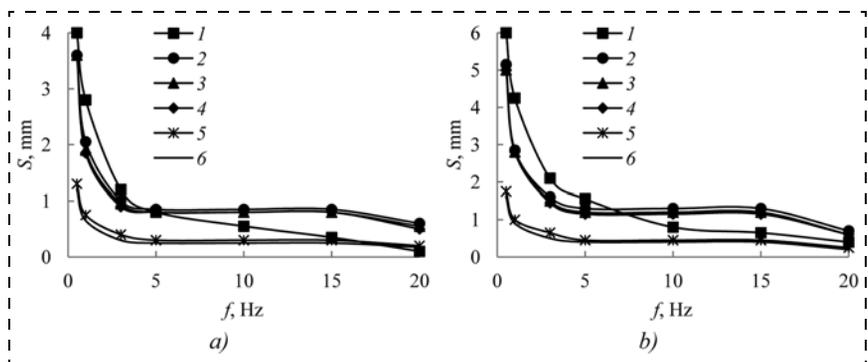


Рис. 15. Частотные зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов в H^+ -форме (a) и Cu^{2+} -форме (b) при размахе управляющего напряжения 10 В: 1 — воздух; 2 — деионизованная вода; 3 — 0,001 М NaCl; 4 — 0,01 М NaCl; 5 — 0,1 М NaCl; 6 — 0,15 М NaCl

Таблица 1

Размахи отклонения ИПМК-актюаторов в различных средах

Среда, в которой работает актюатор	Размах отклонения (при 10 В, 1 Гц) актюатора, мм	
	H ⁺ -форма	Cu ²⁺ -форма
Воздух	3	5
Деионизованная вода	2	2,2
0,001 М раствор NaCl	2	2,2
0,01 М раствор NaCl	2	2,2
0,1 М раствор NaCl	1,2	1,5
0,15 М раствор NaCl	1	1,3
0,001 М раствор CuSO ₄	2,1	2,2
0,01 М раствор CuSO ₄	2,4	2,8
0,1 М раствор CuSO ₄	3,3	Нет данных

с бóльшим размахом отклонения образцов в Cu²⁺-форме.

Выходные характеристики ИПМК-актюаторов в различных средах сведены в табл. 1.

Исследование ИПМК-актюаторов. Для исследования работоспособности ИПМК-актюаторов в водной среде были приготовлены растворы различной ионной силы: деионизованная вода, водный 0,01 М раствор CuSO₄ и водный 0,15 М раствор NaCl. При работе ИПМК-актюаторов под действием напряжения постоянного тока максимальное отклонение в жидкостях оказалось выше, чем на воздухе, причем с увеличением ионной силы раствора оно уменьшалось (рис. 16). Возрастание отклонения в жидкостях по сравнению с работой на воздухе можно объяснить влиянием электрохимических процессов окисления и восстановления в PEDOT-электродах, которые усиливаются в водной среде.

При работе на воздухе ИПМК-актюаторы в Cu²⁺-форме, как и в случае ИПМК-актюаторов, отклонялись сильнее ИПМК-актюаторов в

H⁺-форме (рис. 17). При сравнении максимальных отклонений ИПМК-актюаторов в H⁺- и Cu²⁺-формах в водном 0,01 М растворе CuSO₄ и водном 0,15 М растворе NaCl наблюдалась та же тенденция, что и на воздухе. В случае деионизованной воды значения максимального отклонения образцов в H⁺-форме превосходят соответствующие значения образцов в Cu²⁺-форме (рис. 17). По-видимому, это обусловлено вымыванием ионов меди из мембраны в среде с низкой ионной силой, ускоряющимися электрокинетическими процессами внутри ИПМК-актюатора в ходе его работы.

При сравнении работы ИПМК-актюаторов в H⁺- и Cu²⁺-формах, управляемых напряжением переменного тока синусоидальной формы, как и в случае напряжения постоянного тока, с увеличением ионной силы раствора наблюдается уменьшение отклонения (размаха отклонения) (рис. 18).

При переходе от H⁺-формы к Cu²⁺-форме размах отклонения на воздухе увеличивается на 65 %, тогда как в деионизованной воде — уменьшается на 24 % (рис. 19).

Резонансная частота ИПМК-актюаторов, работающих в деионизованной воде и водном 0,01 М растворе CuSO₄, составила 15 Гц (рис. 20). Как и в случае ИПМК-актюаторов, у ИПМК-актюаторов, исследованных на воздухе на частотах до 20 Гц, резонанса не обнаружилось. Поскольку ИПМК-актюаторы, полученные методом *in situ* полимеризации EDOT, содержат воду в качестве растворителя, было необходимо исследовать их непрерывную работу на воздухе (рис. 21, а) и сравнить ее с непрерывной работой в деионизованной воде (рис. 21, б).

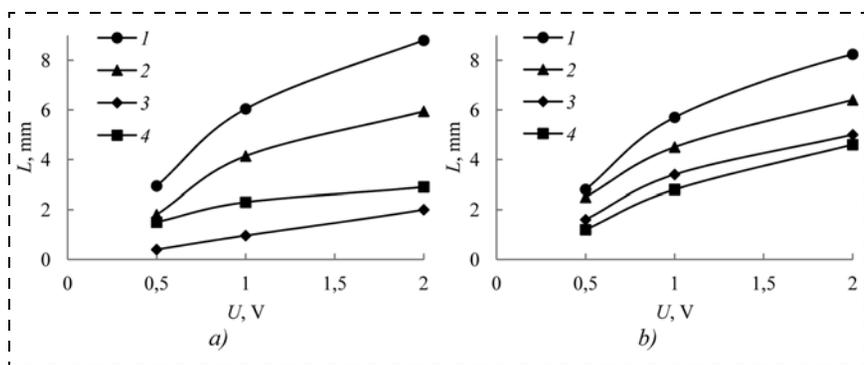


Рис. 16. Зависимости максимального отклонения ИПМК-актюаторов в H⁺-форме (а) и Cu²⁺-форме (б) от управляющего напряжения постоянного тока:

1 — деионизованная вода; 2 — 0,01 М CuSO₄; 3 — 0,15 М NaCl; 4 — воздух

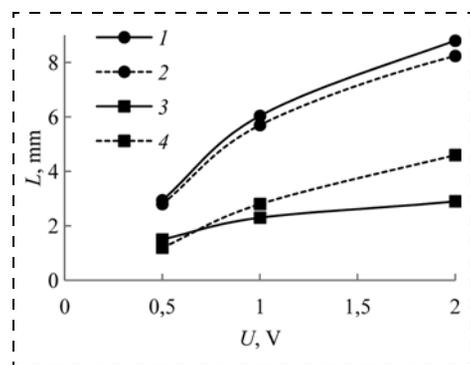


Рис. 17. Зависимости максимального отклонения ИПМК-актюаторов от управляющего напряжения постоянного тока:

1 — H⁺-форма, деионизованная вода; 2 — Cu²⁺-форма, деионизованная вода; 3 — H⁺-форма, воздух; 4 — Cu²⁺-форма, воздух

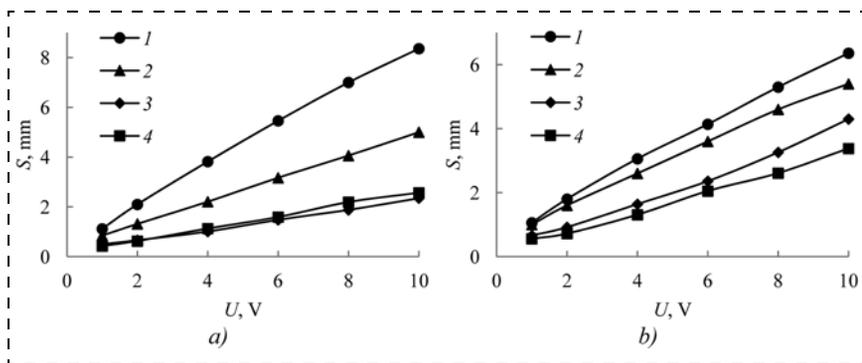


Рис. 18. Зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов в H^+ -форме (a) и Cu^{2+} -форме (b) от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц: 1 — деионизованная вода; 2 — 0,01 М $CuSO_4$; 3 — 0,15 М $NaCl$; 4 — воздух

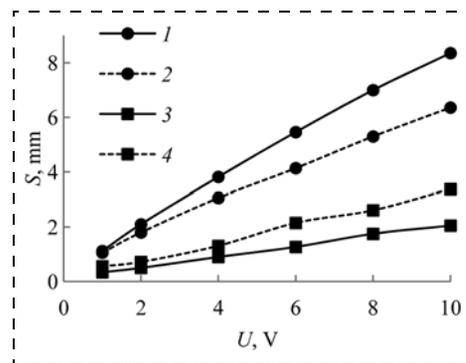


Рис. 19. Зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц: 1 — H^+ -форма, деионизованная вода; 2 — Cu^{2+} -форма, деионизованная вода; 3 — H^+ -форма, воздух; 4 — Cu^{2+} -форма, воздух

В связи с потерей растворителя время непрерывной работы ИПМК-актюаторов в H^+ - и Cu^{2+} -формах на воздухе находится в диапазоне 20...30 мин. В деионизованной воде ИПМК-актюаторы способны непрерывно работать не менее 24 ч, при этом их размах отклонения нестабилен: после снижения до 73 % от максимального значения он возрастает до 91 % от максимального значения.

Выходные характеристики ИПМК-актюаторов в различных средах сведены в табл. 2.

Сравнение ИПМК-актюаторов и ИПМК-актюаторов. На рис. 22—24 представлены сравнительные характеристики работоспособности ИПМК-актюаторов и ИПМК-актюаторов на воздухе и в деионизованной воде.

С увеличением управляющего напряжения постоянного тока и размаха управляющего напряжения наблюдается преобладание максимального отклонения и размаха отклонения ИПМК-актюаторов над соответствующими величинами ИПМК-актюаторов при их работе на воздухе, что особенно заметно у образцов в Cu^{2+} -форме. В деионизованной воде ИПМК-актюаторы отклоняются значительно сильнее ИПМК-актюаторов как в H^+ -форме, так и в

Cu^{2+} -форме, во всем рассматриваемом диапазоне напряжений и частот. Кроме того, характеристики ИПМК-актюаторов при их работе в деионизованной воде превосходят даже соответствующие характеристики ИПМК-актюаторов в Cu^{2+} -форме, работающих на воздухе.

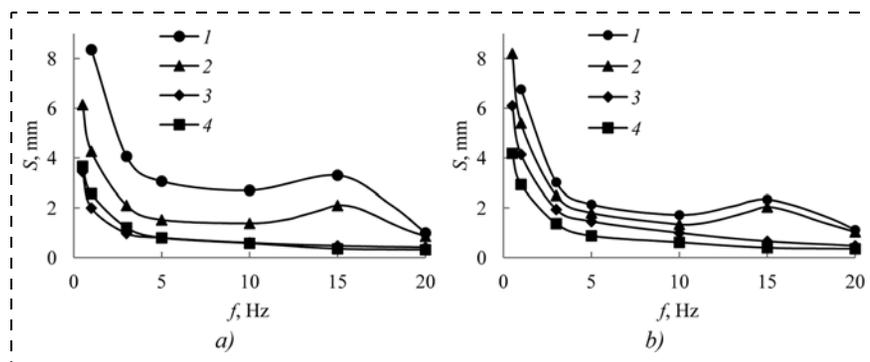


Рис. 20. Частотные зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов в H^+ -форме (a) и Cu^{2+} -форме (b) при размахе управляющего напряжения 10 В: 1 — деионизованная вода; 2 — 0,01 М $CuSO_4$; 3 — 0,15 М $NaCl$; 4 — воздух

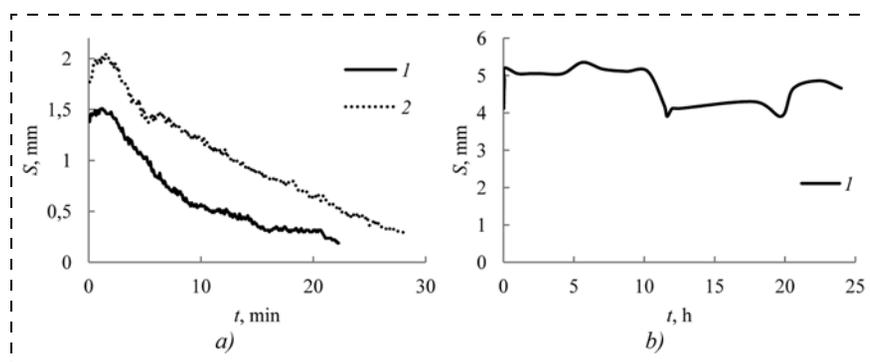
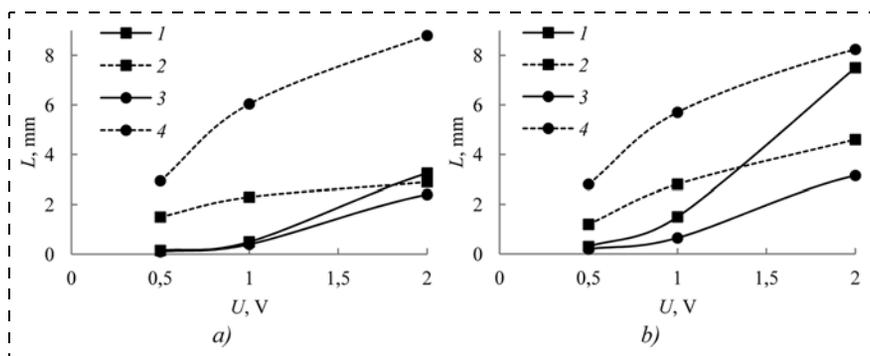


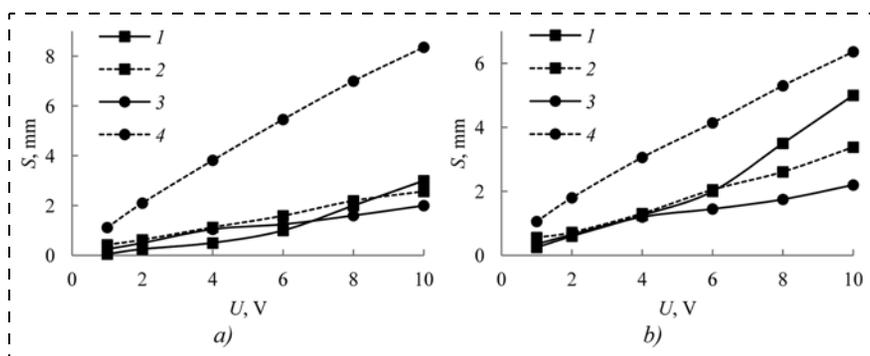
Рис. 21. Временные зависимости размаха отклонения ИПМК-актюаторов на воздухе (a) и в деионизованной воде (b) при размахе управляющего напряжения 5 В и частоте 1 Гц: 1 — H^+ -форма; 2 — Cu^{2+} -форма

Размахи отклонения ИППК-актюаторов в различных средах

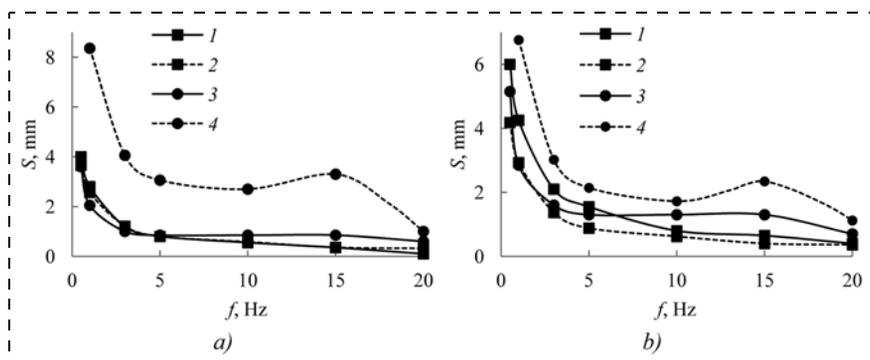
Среда, в которой работает актюатор	Размах отклонения (при 10 В, 1 Гц) актюатора, мм	
	H ⁺ -форма	Cu ²⁺ -форма
Воздух	2,6	3,4
Деионизованная вода	8,4	6,4
0,01 М раствор CuSO ₄	5,0	5,4
0,15 М раствор NaCl	2,4	4,3

Рис. 22. Зависимости максимального отклонения актюаторов в H⁺-форме (а) и Cu²⁺-форме (б) от управляющего напряжения постоянного тока:

1 — ИПМК, воздух; 2 — ИППК, воздух; 3 — ИПМК, деионизованная вода; 4 — ИППК, деионизованная вода

Рис. 23. Зависимости размаха отклонения актюаторов в H⁺-форме (а) и Cu²⁺-форме (б) от размаха управляющего напряжения при частоте 1 Гц:

1 — ИПМК, воздух; 2 — ИППК, воздух; 3 — ИПМК, деионизованная вода; 4 — ИППК, деионизованная вода

Рис. 24. Частотные зависимости размаха отклонения актюаторов в H⁺-форме (а) и Cu²⁺-форме (б) при размахе управляющего напряжения 10 В:

1 — ИПМК, воздух; 2 — ИППК, воздух; 3 — ИПМК, деионизованная вода; 4 — ИППК, деионизованная вода

Существенное различие в работоспособности ИППК-актюаторов и ИПМК-актюаторов в водной среде заключается в том, что механизм актюации ИППК основан также на изменении объема PEDOT-электродов в процессе электрохимического допирования/дедопирования. В процессе окисления, при отщеплении электронов, поведение сшивки и введение анионов приводят к набуханию пленки PEDOT в окисленном состоянии. Когда допирующие анионы в цепи PEDOT являются большими и неподвижными, такими как PSS, они охватываются полимерной матрицей в процессе синтеза и не могут покинуть ее при восстановлении. В это время катионы мигрируют из раствора в цепь PEDOT для нейтрализации анионов и отрицательных зарядов, что приводит к расширению пленки в восстановленном состоянии. Кроме того, поскольку PEDOT:PSS имеет пористую структуру, то легко абсорбирует воду, следовательно, расширение полимерной пленки также может быть вызвано увеличением содержания воды [23].

Заключение

Получены ИПМК-актюаторы с Pt-электродами химическим восстановлением из раствора соли платины и ИППК-актюаторы с PEDOT-электродами *in situ* полимеризацией EDOT на поверхности мембраны МФ-4СК толщиной 290 мкм. Образцы размерами 2 × 0,5 см выдерживались в деионизованной воде (H⁺-форма) и в водном 0,1 М растворе сульфата меди (Cu²⁺-форма). Структура электродов полученных образцов была охарактеризована методами растровой электронной и атомно-силовой микроскопии.

Исследование работоспособности актюаторов проводили на воздухе, в деионизованной воде, а также в водных растворах NaCl и CuSO₄ различной ионной силы. Общая тенденция заключается в том, что ИПМК-актюаторы и ИППК-актюаторы отклоняются сильнее в жидкостях с меньшей ионной силой при подаче как напряжения постоянного тока, так и напряжения переменного тока синусоидальной формы. Исключение составляет водный раствор CuSO₄, при работе в котором наблюдается увеличение размаха отклонения ИПМК-актюаторов с увеличением ионной силы.

Переход от H⁺-формы к Cu²⁺-форме приводит к увеличению максимального отклонения и размаха отклонения ИПМК-актюаторов и ИППК-актюаторов во всех рассматриваемых средах, кроме деионизованной воды в случае ИППК-актюаторов. Наибольший размах отклонения ИПМК-актюаторов достигается при работе на воздухе образцов в Cu²⁺-форме (5 мм), а ИППК-актюаторов — при работе в деионизованной воде образцов в H⁺-форме (8,4 мм). При этом в большинстве случаев в водной среде ИППК-актюаторы отклоняются сильнее, чем на воздухе. Данное явление обусловлено расширением PEDOT-электродов в восстановленном состоянии, что усиливается при сорбции влаги во время работы ИППК-актюаторов в водной среде.

Исследование выполнено в рамках гранта РНФ (проект № 16-19-00107).

Список литературы

1. Бройко А. П., Калёнов В. Е., Хмельницкий И. К. и др. Движители на основе электроактивных полимеров для водных биомиметических робототехнических систем // Биотехносфера. 2017. № 6 (54). С. 21—27.
2. Калёнов В. Е., Орехов Ю. Д., Хмельницкий И. К. и др. Движители на основе электроактивных полимеров для шагающих биомиметических робототехнических систем // Динамика систем, механизмов и машин. 2019. Т. 7, № 3. С. 64—70.
3. Kim K. J., Shahinpoor M. Ionic polymer—metal composites: II. Manufacturing techniques // Smart Mater. Struct. 2003. Vol. 12, N. 1. P. 65—79.
4. Guo S., Ge Y., Li L., Liu S. Underwater Swimming Micro Robot Using IPMC Actuator // Proceedings of the 2006 IEEE International Conference on Mechatronics and Automation, June 25—28, 2006. Luoyang, China. P. 249—254.
5. Cha Y., Verotti M., Walcott H. et al. Energy harvesting from the tail beating of a carangiform swimmer using ionic polymer—metal composites // Bioinspir. Biomim. 2013. Vol. 8, N. 3. 036003 (15 p.).
6. Kim J., Jeon J.-H., Kim H.-J. et al. Durable and Water-Floatable Ionic Polymer Actuator with Hydrophobic and Asymmetrically Laser-Scribed Reduced Graphene Oxide Paper Electrodes // ACS Nano. 2014. Vol. 8, N. 3. P. 2986—2997.
7. He Q., Yu M., Yang X. et al. An ionic electro-active actuator made with graphene film electrode, chitosan and ionic liquid // Smart Mater. Struct. 2015. Vol. 24, N. 6. 065026 (9 p.).
8. Алексеев Н. И., Бройко А. П., Калёнов В. Е. и др. Структура гибких графеновых электродов, модифицированных серебром, для разработки актюаторов биомиметических систем // Журнал структурной химии. 2018. Т. 59, № 4. С. 929—937.
9. Алексеев Н. И., Бройко А. П., Калёнов В. Е. и др. Структура электроактивного полимера, модифицированного графеном, для мембран биомиметических систем. Моделирование и эксперимент // Журнал структурной химии. 2018. Т. 59, № 7. С. 1766—1777.
10. Алексеев Н. И., Багрец В. С., Бройко А. П. и др. Ионные полимерные электроактивные актюаторы на основе ионообменной мембраны МФ-4СК. Часть 2. Ионные полимер-графеновые композиты // Журнал структурной химии. 2020. Т. 61, № 4. С. 639—647.
11. Di Pasquale G., Fortuna L., Graziani S. et al. A study on IP²C actuators using ethylene glycol or EmI-Tf as solvent // Smart Mater. Struct. 2011. Vol. 20, N. 4. 045014 (9 p.).
12. Di Pasquale G., Graziani S., Messina F. G. et al. An investigation of the structure—property relationships in ionic polymer polymer composites (IP²Cs) manufactured by polymerization in situ of PEDOT/PSS on Nafion[®] 117 // Smart Mater. Struct. 2014. Vol. 23, N. 3. 035018 (12 p.).
13. Хмельницкий И. К., Алексеев Н. И., Бройко А. П. и др. Электромеханические преобразователи на основе ионных полимер-полимерных композитов // Нано- и микросистемная техника. 2018. Т. 20, № 3. С. 167—174.
14. Khmelntskiy I. K., Aivazyan V. M., Andryukhin K. A. et al. PEDOT and PANI electrodes for IP²C actuators // Proceedings of the 2019 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus), January 28—30, 2019. St. Petersburg and Moscow, Russia. P. 815—818.
15. Khmelntskiy I. K., Aivazyan V. M., Alekseev N. I. et al. Producing and investigation of PEDOT films as electrodes of ionic electroactive actuators // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. Vol. 1281, N. 1. 012033 (5 p.).
16. Li Y., Tanigawa R., Okuzaki H. Soft and flexible PEDOT/PSS films for applications to soft actuators // Smart Mater. Struct. 2014. Vol. 23, N. 7. 074010 (8 p.).
17. Александрова О. А., Алешин А. Н., Белорус А. О. и др. Новые наноматериалы. Синтез. Диагностика. Моделирование: лаб. практикум / Под ред. В. А. Мошниковой, О. А. Александровой. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ "ЛЭТИ", 2015. 248 с.
18. Di Pasquale G., Graziani S., La Rosa M. et al. IP²C Sensor Modeling // IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. 2013. Vol. 62, N. 5. P. 1284—1291.
19. Алексеев Н. И., Багрец В. С., Бройко А. П. и др. Ионные полимерные электроактивные актюаторы на основе ионообменной мембраны МФ-4СК. Часть 1. Ионные полимер-металлические композиты // Журнал структурной химии. 2020. Т. 61, № 4. С. 631—638.
20. Khmelntskiy I. K., Vereshagina L. O., Kalyonov V. E. et al. Improvement of manufacture technology and research of actuators based on ionic polymer-metal composites // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. Vol. 857, N. 1. 012018 (4 p.).
21. Park J. K., Jones P. J., Sahagun C. et al. Electrically stimulated gradients in water and counterion concentrations within electroactive polymer actuators // Soft Matter. 2010. Vol. 6, N. 7. P. 1444—1452.
22. Lang U., Naujoks N., Dual J. Mechanical characterization of PEDOT: PSS thin films // Synth. Met. 2009. Vol. 159, N. 5—6. P. 473—479.
23. Hu F., Xue Y., Xu J., Lu B. PEDOT-Based Conducting Polymer Actuators // Front. Robot. AI. 2019. Vol. 6. P. 1—17.

I. K. Khmelnitskiy, Ph. D., Senior Researcher, khmelnitskiy@gmail.com, **V. M. Aivazyanyan**, Engineer, **N. I. Alekseyev**, D. Sc., Leading Researcher, **A. P. Broyko**, Ph. D., Senior Researcher, **V. V. Luchinin**, D. Sc., Director of ITs TsMID, **D. O. Testov**, Engineer, St. Petersburg State Electrotechnical University "LETI" named after V. I. Ulyanov (Lenin), Russian Federation

Corresponding author:

Khmelnitskiy Ivan K., Ph. D., Senior Researcher, khmelnitskiy@gmail.com, St. Petersburg State Electrotechnical University "LETI" named after V. I. Ulyanov (Lenin), Russia

Investigation of Ionic EAP Actuators with Metal and Polymer Electrodes in Aqueous Medium

Received on November 26, 2020

Accepted on December 07, 2020

Electroactive polymers (EAP) are promising materials for creating electromechanical transducers. Among ionic EAP, ionic polymer-metal composites (IPMC), which are an ion-exchange membrane with metal electrodes on both sides, have been widely spread and well studied. The evolutionary development of IPMC results in ionic polymer-polymer composites (IP²C), in which polymer electrodes are used.

To obtain IPMC actuators with platinum electrodes, the method of chemical reduction from the salt solution was chosen, and to obtain IP²C actuators with PEDOT electrodes, the method of in situ polymerization of the monomer on the membrane surface was chosen. Samples of 2 × 0.5 cm in size based on the MF-4SK membrane with a thickness of 290 μm were preliminarily kept in deionized water (H⁺ form) and in 0.1 M CuSO₄ aqueous solution (Cu²⁺ form), after which their performance was studied in air, in deionized water, as well as in aqueous solutions of CuSO₄ and NaCl.

When applying a DC voltage and a sine wave AC voltage, a decrease in the maximum displacement and peak-to-peak displacement of the IPMC actuators and IP²C actuators with an increase in the ionic strength of the liquid was observed, except for the case of the IPMC actuator operation in CuSO₄ aqueous solutions. In all considered media, the IPMC actuators and IP²C actuators in Cu²⁺ form displaced more strongly than the corresponding samples in H⁺ form, except for the IP²C actuators in deionized water. The largest peak-to-peak displacement was demonstrated by the IPMC actuators in Cu²⁺ form when operating in air (5 mm) and the IP²C actuators in H⁺ form when operating in deionized water (8.4 mm).

Keywords: electroactive polymers, ionic polymer-metal composites, ionic polymer-polymer composites, IPMC actuators, IP²C actuators, MF-4SK membrane, PEDOT electrodes, aqueous medium

For citation:

Khmelnitskiy I. K., Aivazyanyan V. M., Alekseyev N. I., Broyko A. P., Luchinin V. V., Testov D. O. Investigation of Ionic EAP Actuators with Metal and Polymer Electrodes in Aqueous Medium, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2021, vol. 23, no. 1, pp. 32–43.

DOI: 10.17587/nmst.23.32-43

References

1. **Broyko A. P., Kalyonov V. E., Khmelnitskiy I. K.** i dr. Dvizhiteli na osnove elektroaktivnykh polimerov dlya vodnykh biomimeticheskikh robototekhnicheskikh sistem, *Biotekhnosfera*, 2017, no. 6 (54), pp. 21–27 (in Russian).
2. **Kalyonov V. E., Orekhov Yu. D., Khmelnitskiy I. K.** i dr. Dvizhiteli na osnove elektroaktivnykh polimerov dlya shagayushchikh biomimeticheskikh robototekhnicheskikh sistem, *Dinamika sistem, mekhanizmov i mashin*, 2019, vol. 7, no. 3, pp. 64–70 (in Russian).
3. **Kim K. J., Shahinpoor M.** Ionic polymer-metal composites: II. Manufacturing techniques, *Smart Mater. Struct.*, 2003, vol. 12, no. 1, pp. 65–79.
4. **Guo S., Ge Y., Li L., Liu S.** Underwater Swimming Micro Robot Using IPMC Actuator, *Proceedings of the 2006 IEEE International Conference on Mechatronics and Automation*, June 25–28, 2006. Luoyang, China, pp. 249–254.
5. **Cha Y., Verotti M., Walcott H.** et al. Energy harvesting from the tail beating of a carangiform swimmer using ionic polymer-metal composites, *Bioinspir. Biomim.*, 2013, vol. 8, no. 3, 036003 (15 p.).
6. **Kim J., Jeon J.-H., Kim H.-J.** et al. Durable and Water-Floatable Ionic Polymer Actuator with Hydrophobic and Asymmetrically Laser-Scribed Reduced Graphene Oxide Paper Electrodes, *ACS Nano*, 2014, vol. 8, no. 3, pp. 2986–2997.
7. **He Q., Yu M., Yang X.** et al. An ionic electro-active actuator made with graphene film electrode, chitosan and ionic liquid, *Smart Mater. Struct.*, 2015, vol. 24, no. 6, 065026 (9 p.).
8. **Alekseyev N. I., Broyko A. P., Kalyonov V. E.** i dr. Struktura gibkikh grafenovykh elektrodov, modifitsirovannykh serebrom, dlya razrabotki aktyuatorov biomimeticheskikh sistem, *Zhurnal Strukturnoi Khimii*, 2018, vol. 59, no. 4, pp. 929–937 (in Russian).
9. **Alekseyev N. I., Broyko A. P., Kalyonov V. E.** i dr. Struktura elektroaktivnogo polimera, modifitsirovannogo graf-

enom, dlya membran biomimeticheskikh sistem. Modelirovanie i eksperiment, *Zhurnal Strukturnoi Khimii*, 2018, vol. 59, no. 7, pp. 1766–1777 (in Russian).

10. **Alekseyev N. I., Bagrets V. S., Broyko A. P.** i dr. Ionnyye polimernyye elektroaktivnyye aktyuatory na osnove ionoobmennoy membrany MF-4SK. Chast' 2. Ionnyye polimer-grafenovyye kompozity, *Zhurnal Strukturnoi Khimii*, 2020, vol. 61, no. 4, pp. 639–647 (in Russian).

11. **Di Pasquale G., Fortuna L., Graziani S.** et al. A study on IP²C actuators using ethylene glycol or EmI-Tf as solvent, *Smart Mater. Struct.*, 2011, vol. 20, no. 4, 045014 (9 p.).

12. **Di Pasquale G., Graziani S., Messina F. G.** et al. An investigation of the structure—property relationships in ionic polymer polymer composites (IP²Cs) manufactured by polymerization in situ of PEDOT/PSS on Nafion® 117, *Smart Mater. Struct.*, 2014, vol. 23, no. 3, 035018 (12 p.).

13. **Khmelnitskiy I. K., Alekseyev N. I., Broyko A. P.** i dr. Elektromekhanicheskie preobrazovateli na osnove ionnykh polimer-polimernykh kompozitov, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2018, vol. 20, no. 3, pp. 167–174 (in Russian).

14. **Khmelnitskiy I. K., Aivazyan V. M., Andryukhin K. A.** et al. PEDOT and PANI electrodes for IP²C actuators, *Proceedings of the 2019 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus)*, January 28–30, 2019. St. Petersburg and Moscow, Russia, pp. 815–818.

15. **Khmelnitskiy I. K., Aivazyan V. M., Alekseev N. I.** et al. Producing and investigation of PEDOT films as electrodes of ionic electroactive actuators, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, vol. 1281, no. 1, 012033 (5 p.).

16. **Li Y., Tanigawa R., Okuzaki H.** Soft and flexible PEDOT/PSS films for applications to soft actuators, *Smart Mater. Struct.*, 2014, vol. 23, no. 7, 074010 (8 p.).

17. **Aleksandrova O. A., Aleshin A. N., Belorus A. O.** i dr. Novyye nanomaterialy. Sintez. Diagnostika. Modelirovanie: lab. praktikum / ed. by V. A. Moshnikov, O. A. Aleksandrova. SPb.: Izd-vo SPbGETU "LETI", 2015, 248 p. (in Russian).

18. **Di Pasquale G., Graziani S., La Rosa M.** et al. IP²C Sensor Modeling, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 2013, vol. 62, no. 5, pp. 1284–1291.

19. **Alekseyev N. I., Bagrets V. S., Broyko A. P.** i dr. Ionnyye polimernyye elektroaktivnyye aktyuatory na osnove ionoobmennoy membrany MF-4SK. Chast' 1. Ionnyye polimer-metallicheskie kompozity, *Zhurnal Strukturnoi Khimii*, 2020, vol. 61, no. 4, pp. 631–638 (in Russian).

20. **Khmelnitskiy I. K., Vereshagina L. O., Kalyonov V. E.** et al. Improvement of manufacture technology and research of actuators based on ionic polymer-metal composites, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2017, vol. 857, no. 1, 012018 (4 p.).

21. **Park J. K., Jones P. J., Sahagun C.** et al. Electrically stimulated gradients in water and counterion concentrations within electroactive polymer actuators, *Soft Matter*, 2010, vol. 6, no. 7, pp. 1444–1452.

22. **Lang U., Naujoks N., Dual J.** Mechanical characterization of PEDOT: PSS thin films, *Synth. Met.*, 2009, vol. 159, no. 5–6, pp. 473–479.

23. **Hu F., Xue Y., Xu J., Lu B.** PEDOT-Based Conducting Polymer Actuators, *Front. Robot. AI*, 2019, vol. 6, pp. 1–17.

DOI: 10.17587/nmst.23.43-46

Камалджит Сингх, e-mail: kamaljs@isac.gov.in, **С. В. Шарма**, Systems Engineering Group, Спутниковый центр UR Rao, Бангалор, Индия

ИЗГОТОВЛЕНИЕ И РЕШЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК С МИКРОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКОЙ

Поступила в редакцию 10.10.2020

Изготовление сенсоров на основе тонких пленок с применением процесса объемной микромеханической обработки и использованием жидкостной химии является сложной задачей ввиду эффекта бокового травления. Эффект усечения выпуклых углов связан с процессом жидкостной микромеханической обработки, для которого требуется дифференциальное травление. Дифференциальное травление позволяет формировать различную глубину в непосредственной близости, но его сложность накладывает дополнительные ограничения на технологический процесс. Современные тенденции диктуют необходимость в одновременном травлении близкорасположенного туннеля и полости на обратной стороне, которые имеют разную глубину, при этом не должно быть повреждений слоя лицевой стороны. Это основное "узкое место", но его удалось ликвидировать с помощью модифицированной технологии. В этой статье представлены важные аспекты проведенных экспериментов по комбинированию жидкостного и сухого методов травления, что позволило достичь большей глубины. Другим важным аспектом является определение этапов технологического процесса, совместимых с КМОП-интеграцией. Также представлены последующие исследования пьезоэлектрического слоя и скорости травления различных нанесенных слоев. Подробно описаны технологические подходы, проблемы и способы их решения, а также важные аспекты разработки сенсора на основе микромеханической обработки.

Ключевые слова: тонкие пленки, сенсор, жидкостная микромеханическая обработка

Corresponding author:

Kamaljeet Singh, ISRO Satellite Centre, Bangalore, e-mail: kamaljs@isac.gov.in

Thin Film Based Micro-Machined Sensor Development and Mitigation of Process Challenges

Received on October 10, 2020

Accepted on November 02, 2020

Realization of thin film based sensor employing bulk micro-machined process using wet chemistry is challenging due to lateral etching phenomena. This phenomenon of convex corner undercutting is associated with wet micromachining process where differential etching is required. The challenge of having differential etching to achieve varied depth in close vicinity imposes extra constraint on the process. The present requirement simultaneously etching of closely spaced tunnel and cavity from back side having varied depth keeping intact front side layers is the main bottleneck which was circumvented with modified process. Etching trials related combining wet and dry etching techniques for deeper etching are also carried out and critical aspects are presented in this article. Another aspect is to define process steps compatible with CMOS integration. Further study of piezo-electric layer and etch rate of various deposited layer are also presented. This article details process trials, challenges, mitigation techniques and realization aspects of the micro-machined based sensor.

Keywords: thin film, sensor, micromachining, wet process

For citation:

Kamaljeet Singh, Sharma S. V. Thin Film Based Micro-Machined Sensor Development and Mitigation of Process Challenges, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2020, vol. 23, no. 1, pp. 44–46.

DOI: 10.17587/nmst.23.44-46

I. Introduction

Micromachined acoustic devices are having applications in various domain such as hearing-aid, cellular phone, micro-personal digital assistant, aerospace for measuring sound pressure and earphone [1]. Sensor based on piezo-electric layer are having more robust process and further CMOS-MEMS sensor have the advantage of on-chip electronics. The sensor having piezo-electric layer is sandwiched between two thin film layers with backside having closely spaced tunnel and cavity. Micromachined based sensor are based on the piezoelectric layer which converts the sound pressure into electrical energy. Preferably zinc oxide (ZnO) layer is employed as piezo-electric layer but other piezoelectric materials such as lead zirconate titanate (PZT), PVDF, PbTiO₃, LiNbO₃ crystals, and AlN can be used but compatibility and ease of processing are the important considerations. Zinc oxide is having excellent piezoelectric and dielectric properties so piezo electric film and sensors based on it are prominently employed for the realization of the acoustic sensor [2], gas sensors, microphones, ultrasonic transducers, FBAR device which finds applications in space, defence and commercial domain [1].

In this article, diaphragm based sensor with ZnO as piezo-electric layer and backside incorporation of micro-tunnel for the compensation of charge with sound pressure during diaphragm vibration is pre-

sented. The cavity is etched to achieve desired diaphragm thickness whereas tunnel facilitates pressure equalization of the diaphragm. Thus depth of tunnel and cavity are varied so as to achieve the desired performance [3]. Various techniques such as DRIE, surface chemical treatment, corner compensation are employed to achieve differential etching but are having limitations either due to uncontrolled etching or due to convex corner undercutting phenomena [4]. Lateral etching observed in silicon bulk micromachining using wet etching techniques while etching of <100> surface and various compensation techniques proposed to overcome these phenomena such as mask having square/rectangular/conical shapes, <110> oriented beams but compromise structure compactness and surface roughness [5]. Dry etching for cavity and tunnel can be carried out using DRIE process but the process become complex and yield different cavity geometry which can change the resonance frequency. Alternatively, wet etching employing KOH, TMAH can be employed but the process yields convex corner undercutting phenomena.

Present developments focused on the micro-machined process for which various trials are conducted to differential etch cavity and tunnel. Differential etching techniques are employed to create cavity of $\sim 3 \times 3$ mm with ~ 500 um depth and tunnel width of 35 um with 100 um depth. Further process trials, thin film and sensor characterization are also presented.

II. Sensor Process

SOI wafer is employed as the base layer having the added advantage of buried silicon dioxide layer which acts as an etch stop for KOH solution, and also having good selectivity over SiO_2 . This machining process also ensures uniformity of diaphragm thickness. The overall cross section is shown in Fig. 1.

Stress and etch rates of various layers are analyzed before finalizing the process (Fig. 2). The piezo-electric layer of ZnO deposition is carried out on the front side and the flow chart depicting the back end process is shown in Fig. 3. The lateral stress on the zinc oxide layer generates charge which is converted into voltage.

The process starts with selection of the base material which is taken as SOI where oxide and nitride layers are deposited (Fig. 3). The process employ low pressure based chemical vapour deposition of oxide followed by lithography. Polyimide is taken as photo resist which is a negative photo-resist material. Dry etching for backside removal of oxide and nitride followed by thick oxide deposition using PECVD process carried out which is having low mean tensile stress (Fig. 3).

Front side ZnO layer is deposited using sputtering [6] and its characterization employing various techniques such as XRD, AFM, SEM, STM are carried out (Fig. 4).

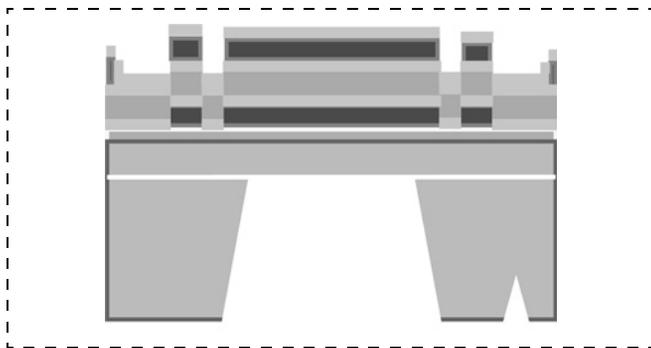


Fig. 1. Cross section view of the sensor

Material	Etchant	Typical Etch rate(E/s)
PECVD oxide	BOE	>70
LPCVD oxide	BOE	<15
Grown oxide	Dry etching	>85
Deposited oxide	Dry etching	>100

Fig. 2. Typical etch rate of masking layer

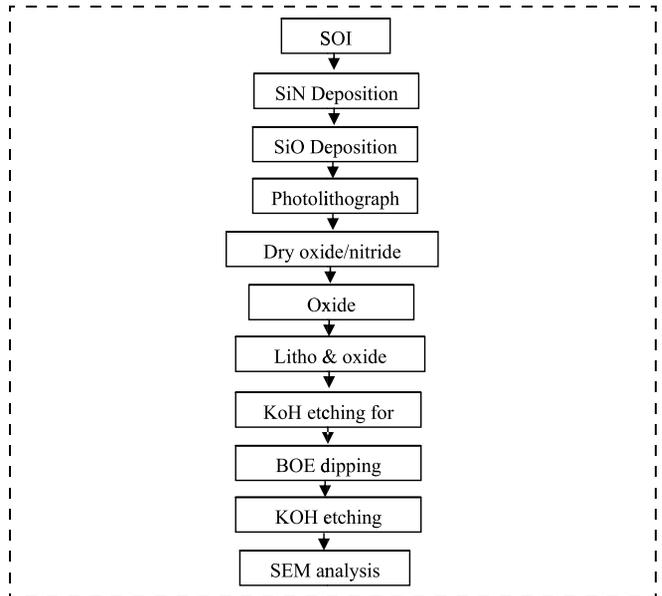


Fig. 3. Back side process steps

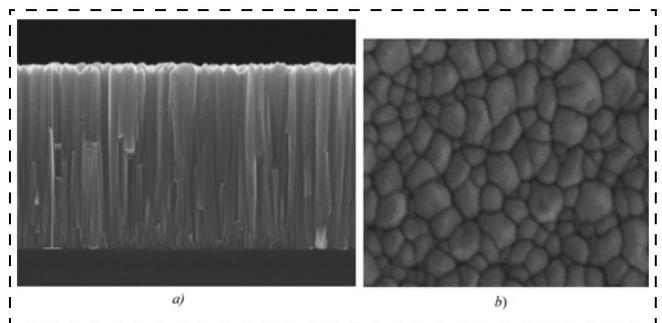


Fig. 4. SEM and AFM image of the deposited ZnO layer: a – SEM image of deposited layer; b – AFM image of the layer

Thickness uniformity and controlled grain size are important to achieve desired performance.

III. Process Trials

The present requirement of micromachining is to etch tunnel and cavity with unequal depth as per design requirements. The critical aspects associated with the differential etching is the prolong exposure of the wafer which lead to exposure of various other planes such as $\langle 411 \rangle$, $\langle 311 \rangle$. This process eventually leads to convex corner undercutting. The cavity and tunnel as required on the backside of the die are shown in Fig. 5.

The tunnel and cavity etching carried out using the compensation structures leads to lateral undercut in the present case of deep etch cavity (Fig. 6).

Another trial employing DRIE based process yields same depth etching so modified process having the combination of dry and wet is tried. DRIE based process yields same depth and the shape of the cavity also changed to rectangular instead of trapezoidal [7]. Fur-

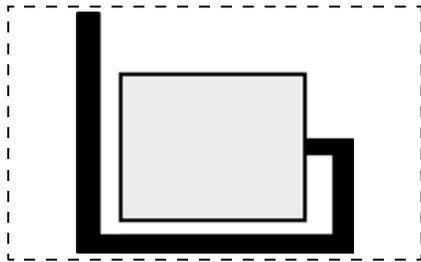


Fig. 5. Schematic of backside topology

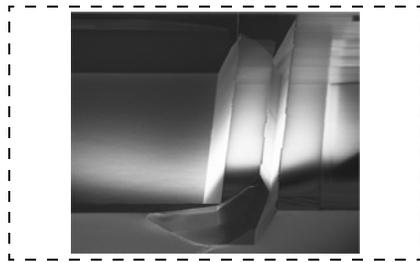


Fig. 6. Phenomena of convex undercutting

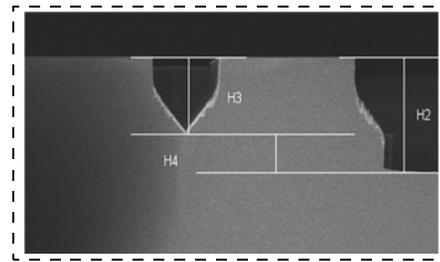


Fig. 7. Combination of dry etching with aqueous KOH etching

ther combination of wet and dry etching technique yields the desired structure but results in the variation in the cavity shape which impacts the cut off frequency (Fig. 7). Also tight etch control in these structures are difficult to achieve. Modified process is implemented to achieve the desired depth is carried out in phased manner. First phase oxide is removed from the cavity region and etching the cavity until certain depth using the corner compensated mask (Fig. 8). Etch depth calculation can be carried out by deducing the etch rate and in-situ measurement technique. In the second phase, oxide from the tunnel region is also removed and simultaneous etching of both cavity and tunnel carried out. This process yields desired cavity depth of $500 \pm 25 \mu\text{m}$ and tunnel depth of $35 \pm 10 \mu\text{m}$.

Measurement Results

Main parameters in sensor measurement are capacitance which affects the voltage and charge sensitivity. Further loss tangent value provides insight of the layers quality as well as affects the linearity of the

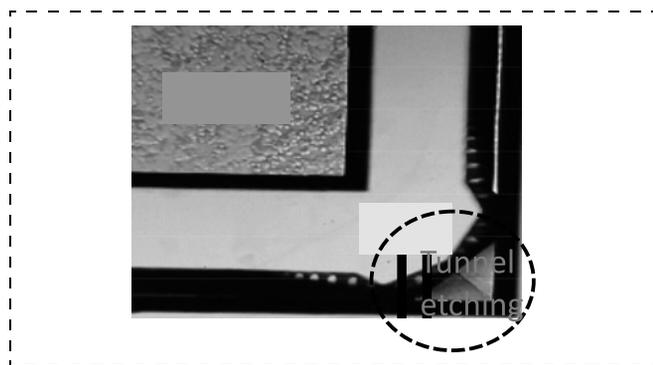


Fig. 8. Final structure with modified process

Characterization of acoustic dies

Die No	Capacitance, pF	Dissipation Factor
1	110	0.05
2	100	0.04
3	105	0.02
4	115	0.02
5	105	0.03
6	105	0.03
7	106	0.05
8	104	0.04

device. The measurement is carried out after assembly of the devices. LCR meter is employed to measure the capacitance value.

Controlled die to die variation (Table) shows the repeatability of the process whereas stable capacitance and low dissipation value indicates least deviation resulting in better voltage and charge sensitivity.

Discussions

This article details the mitigation techniques for overcoming convex undercutting phenomena while carrying out differential etching. The present process for differential etching of the sensor topology is fully compatible with the CMOS process. Narrow tunnel and deep cavity is simultaneously etched by combination of two phase etching with corner compensation technique yielding desired geometry. Also capacitance and dissipation factor measurement of the sensor capacitance shows the stability of the process. The process is fully compatible with CMOS paving way for electronics integration on the single chip.

Authors gratefully acknowledge the support provided by Director, URSC. Also thankful for the support of Sh. A. V. Nirmal, Sh. K. Nagachenchaiah, Prof. Vinay Gupta, Dr Khan and colleagues of erstwhile MDD and ISRO.

References

1. Ananthuresh G. K. et al. Micro and Smart Systems, Wiley. India, 2005.
2. Prasad M., Shukla V., Khanna V. K. Design & Fabrication of Si diaphragm ZnO piezo electric film based MEMS acoustic sensor using SOI wafers, *IEEE Transactions on semiconductor manufacturing*, 2013, vol. 26, no. 2, pp. 233–236.
3. Arora A., Arora Anil, Dwivedi V. K., George P. J., Srinivas K., Gupta V. Zinc oxide thin film based MEMS acoustic sensor with tunnel compensation, *Sensors and Actuators*, 2008, A141, pp. 256–261.
4. Burrer M. Bao. Chr., Esteve J., Bansells J., Marco S. Etching front control of <110> strips for corner compensation, *Sensors and Actuators*, 1993, no. 37–38, pp. 727–732.
5. Puers B., Sansen W. Compensation structures for convex corner micromachining in (100) silicon, *Sensors and Actuators*, 1990, A21-A23, pp. 1036–1042.
6. Kamaljeet Singh, Nirmal A. V. et al. Process Optimization and thin film characterization of ZnO layer for sensor applications, *IJEEI Journal*, 2019, Issue-2.
7. Nitesh et al. Resistance Analysis of Acoustic Sensor Vent Tunnel, *INAC-03*, 2017, Oct.

Н. А. Кульчицкий, д-р техн. наук, проф., зам. начальника управления, Государственный научный центр РФ, Акционерное общество "Научно-производственное объединение "Орион", Россия, Москва, 111538, e-mail n.kulchitsky@gmail.com, МИРЭА — Российский технологический университет (РТУ МИРЭА), Россия, Москва, 119454

МЕТОД КОНТРОЛЯ АТОМНЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ В МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ

Поступила в редакцию 10.09.2020

Представлен конструктивно простой и достаточно универсальный метод определения интенсивностей атомных и молекулярных пучков, основанный на регистрации значений малоуглового рассеяния электронов, возникающих при взаимодействии узкого электронного луча с атомами испаряемого вещества.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, диагностика пучков, рассеяние электронов

Введение

Бурное развитие молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в последние десятилетия привело к появлению как многообразных технологических установок, так и электронных и оптических средств диагностики растущих слоев, а также атомных и молекулярных потоков [1, 8–10]. Известные методы контроля атомных и молекулярных пучков в установках МЛЭ — масс-спектрометрический и люминесцентный [1] — предполагают громоздкие датчики, размещение которых возможно только в специальных ростовых камерах.

В настоящей работе описан конструктивно простой и достаточно универсальный метод определения интенсивностей атомных и молекулярных пучков, основанный на регистрации значений рассеяния электронов на малые углы, возникающих при взаимодействии узкого электронного луча с атомами испаряемого вещества [2]. Рассмотрим теоретические предпосылки для диагностики атомного пучка по явлению рассеяния в нем быстрых электронов.

Малоугловое электронное рассеяние

Неупругое рассеяние электронов обусловлено возбуждением и ионизацией атомов. Если анализировать рассеяние на малые углы, за которые

ответственны исключительно процессы возбуждения, то, как будет показано ниже, отношение концентраций атомов в пучках с точностью до коэффициента порядка 1 равно отношению токов рассеянных электронов. Дифференциальное и полное сечения рассеяния вычислены, например, в работе [3]; они приобретают особенно простой вид в интервале углов $E_{on}/E < \Theta < (E_{on}/E)^{1/2}$:

$$d\sigma = 8\pi(e/h\nu)^2 \langle d^2 \rangle d\Theta/d\Theta;$$
$$\sigma = 8\pi(e/h\nu)^2 \langle d^2 \rangle \ln(\Theta_{max}/\Theta_{min}), \quad (1)$$

где E_{on}/E — отношение характерной энергии атомных переходов энергии электронов луча; Θ_{max} и Θ_{min} — угловые апертуры поглотителя луча и детектора соответственно; $\langle d_x^2 \rangle$ — усредненный по основному состоянию атома квадрат дипольного момента; e — заряд электрона; ν — частота излучения. Для характерных энергий атомных электронов $E \approx 10^2$ эВ (для больших Z) и электронов пучка $E \approx 10^4$ эВ диапазоны углов $\Delta\Theta \sim 10^{-1} \dots 10^{-2}$ рад.

Отсюда видно, что интервал углов, удобных по технологическим и конструктивным соображениям, входит в диапазон допустимых углов. Число событий w , регистрируемых детектором в секунду, пропорционально концентрации атомов в пучке (что и определяет идею метода):

$$w = INd\sigma/e, \quad (2)$$

где I — ток луча; N — концентрация атомов; d — эффективный диаметр пучка. При реальных значениях параметров ($I = 10^{-5}$ А, $d = 5$ см, $\sigma = 10^{-17}$ см, $N = 10^9$ см $^{-3}$), что соответствует скорости роста порядка 1 монослой/с, $w \approx 10^6$ с.

Для сравнения интенсивностей пучков различных компонентов необходимо знать, как соотносятся сечения рассеяния на соответствующих атомах. Такую калибровку для элементов с коэффициентом конденсации, равным единице, можно провести, сравнивая количество вещества, осажденное на подложке с полным числом зарегистрированных за время осаждения событий. Для элементов со средними и большими значениями Z (Z — атомный номер) сечения можно вычислить в явном виде, используя при усреднении d_x^2 в (1) распределение электронной плотности, найденное по методу Томаса—Ферми. Простой расчет показывает, что сечение имеет вид:

$$\sigma = 8\pi(e/hv)^2 kZ^{1/3}(ea)^2 \ln(\Theta_{\max}/\Theta_{\min}), \quad (3)$$

где k — безразмерный коэффициент порядка единицы, не зависящий от сорта атома; a — боровский радиус. Отношение сигналов от пучков с концентрациями N_1 и N_2 , следовательно, таково:

$$w_1/w_2 = (Z_1/Z_2)^{1/6}(N_1/N_2). \quad (4)$$

Последнее выражение, по-видимому, наиболее точно для элементов одной группы. В случае индия и галлия, например, получим $w_{\text{In}}/w_{\text{Ga}} = 1,165N_{\text{In}}/N_{\text{Ga}}$. Чтобы задать желаемое соотношение концентраций вещества в пленке n_1/n_2 , необходимо сделать поправку на различные скорости атомов в потоках:

$$w_1/w_2 = (Z_1/Z_2)^{1/6}(T_1/T_2)(n_1/n_2), \quad (5)$$

где T_1 и T_2 — температуры испарителей (принято, что коэффициенты конденсации равны единице).

Из полученного выражения видно, что как расчетные погрешности, связанные с использованием приближенной функции распределения электронной плотности в атомах, так и возможные неточности в определении температуры источников потоков слабо сказываются на определяемом отношении концентраций атомов в пленке; это обстоятельство делает предлагаемый метод диагностики технологически удобным.

Люминесценция

Было бы логичным использовать хорошо разработанные экспериментальные методики измерения вероятностей переходов между уровнями

энергии в атоме по излучению соответствующей спектральной линии для целей диагностики интенсивностей молекулярных пучков в установках МЛЭ. Действительно, интенсивность спектральной линии при неизменных условиях возбуждения пропорциональна произведению вероятности перехода на концентрацию атомов в данном элементе объема. Оптические спектры атомов интенсивно исследуют, и к настоящему времени существует обширная справочная литература, где указаны силы осцилляторов f_{ik} переходов в видимой и ближней ультрафиолетовой части спектров [4]. Мы рассматриваем данную область спектра в связи с ограничениями, которые накладываются спектральной чувствительностью фотокатода фотоэлектронного умножителя. Однако условия регистрации интенсивности излучения спектральной линии в установках МЛЭ довольно сильно отличаются от существующих, например, в специализированных установках со скрещенными пучками [5]. Поэтому представляется весьма существенной оценка числа регистрируемых фотоэлектронов при типичных для установок МЛЭ концентрациях атомов в потоках, параметрах электронного пучка и телесного угла обзора ФЭУ. В таблице сведены результаты расчетов ожидаемого фотоотклика N_f с использованием табличных сил осцилляторов для следующих элементов — In, Ga, Al, Hg, Cs, Cd при концентрации атомов $n = 10^9$ см $^{-3}$ в предположении отсутствия самопоглощения (или ресорбции) для типичных параметров МЛЭ. Число квантов

Параметры люминесцентной диагностики ($n = 10^9$ см $^{-3}$).

Элемент	λ , нм	f	τ , нс	$d^2, \times 10^{54}$ (Кл · см) 2	$\sigma_e, \times 10^{17}$ см 2	κ^{-1} , см	N_f , с $^{-1}$
Ga	403,3	0,13	18,7	1,24	6	72	10^3
	417,2	0,14	9,3	1,38	6,8	420	10^3
	287,4	0,32	7,7	2,17	10	86	10^3
	294,4	0,038	34,2	0,26	1,27	347	10^3
In	410,2	0,14	18	1,4	6,8	63	10^3
	451,1	0,16	9,5	1,8	8,2	1526	10^3
	303,9	0,36	7,6	2,6	12,6	48	10^3
	325,9	0,37	6,45	2,8	13,6	84	10^3
Al	396,2	0,15	8	1,4	6,7	134	10^3
	394,5	0,15	16	1,4	6,7	2,72	10^3
	309,3	0,23	7,2	1,7	8,2	219	10^3
	308,2	0,22	1,3	1,6	7,7	230	10^3
Cd	326	0,00018	2300	140	0,067	11 340	10
	228,8	1,2	2	6,5	31,2	24	10^4
Cs	852	0,8	27	16	77	7	10^4
	894	0,4	30	8,4	40	11	10^4
Hg*	253,7	0,03	960	180	0,086	3,9	10^3

* $n = 10^{12}$ см $^{-3}$ для Hg; f — сила осциллятора; κ — коэффициент поглощения света.

в секунду (N_I) из небольшого объема (диаметром 0,1 см и высотой 1 см) молекулярного пучка с концентрацией n (см^{-3}), регистрируемых ФЭУ на расстоянии 0,5 м, есть

$$N_I = 3 \cdot 10^{-7} (I/e) n \sigma_e, \quad (6)$$

где I — ток пучка электронной пушки; численный коэффициент есть геометрический фактор сбора света, включающий диаметр фотокатода, его эффективность, телесный угол обзора; σ_e — сечение возбуждения атома.

Сечение возбуждения атома быстрыми электронами выражается через дипольный момент перехода d_{ik} , скорость электронов v [3]:

$$\sigma_e = 8\pi(e/hv)^2 |d_{ik}|^2 \ln(vh/e^2). \quad (7)$$

Соответствующий дипольный момент

$$d_{ik} = 3he(2J_1 + 1) f_{ik} / (4\pi m_o v_{ik}). \quad (8)$$

При расчете учитывалось время жизни τ_{ik} перехода, если существовали конкурирующие каналы рекомбинации возбужденного состояния:

$$1/\tau_{ik} = 8\pi^2 e^2 v_{ik}^2 f_{ik} g_i / (m_o c^3 g_k),$$

где v_{ik} — частота линии; g_i, g_k — статистические веса уровней; f_{ik} — сила осциллятора.

Возбуждение атомов быстрыми электронами явление не резонансное и следует учитывать, что заселение, например, $6^2 S_{1/2}$ уровня индия для перехода $5^2 P_{3/2} - 6^2 S_{1/2}$ ($\lambda = 451$ нм) происходит преимущественно из основного состояния $5^2 P_{1/2}$ и в выражение (7) следует подставить соответствующий дипольный момент, так как при температурах $\sim 10^3$ К атомов в состоянии $5^2 P_{3/2}$ примерно на порядок меньше, чем в основном.

Расчет значения фотоотклика с использованием дипольных моментов (8) является по сути оценкой снизу, так как не учитываются дополнительные каналы возбуждения, например из внутренних оболочек, и квадрупольные переходы.

Как видно из таблицы, у всех элементов существует спектральная линия с интенсивностью, достаточной для измерения плотности потока $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$ с эффективностью $\sim 10^3$ фотоотчетов/с. Это означает возможность за 1 с измерить скорость роста пленки 0,1 нм/с с точностью $\sim 3\%$. Увеличением времени измерения, а это вполне возможно при длительных процессах эпитаксии, достигается более высокая точность.

Как уже упоминалось, оценку проводили в предположении отсутствия самопоглощения. Заметим, что в данном случае традиционный термин "самопоглощение" не отражает существа де-

ла. Атом пучка, поглотивший фотон в отсутствие столкновений, не имеет каналов безизлучательной рекомбинации и фотон будет испущен им, только в ином направлении. Поэтому здесь скорее подходит термин "саморассеяние", хотя для наблюдателя, регистрирующего фотон только в определенном малом телесном угле и при не очень малой длине поглощения, эффект рассеяния эквивалентен поглощению. Поэтому в дальнейшем везде, где это не является принципиальным, мы оставляем термин "самопоглощение". Следует ожидать, что эффект самопоглощения для атомарных пучков гораздо сильнее выражен, чем для газа той же концентрации. Рассмотрим однородный, без столкновений поток атомов. Легко заметить, что в направлении, перпендикулярном направлению потока, отсутствует доплеровский сдвиг, для всех других направлений профиль доплеровской линии поглощения зависит от угла. В обычных установках МЛЭ большинство источников атомарных потоков установлено так, что ось регистрации составляет угол $\sim 15^\circ$ (испарители наклонены) с перпендикулярным потоку направлением. Далее рассмотрим самопоглощение для таких условий регистрации.

Самопоглощение в наклонном потоке

Определим вероятность поглощения света на единицу длины в однородном потоке, атомы которого движутся под углом $90^\circ + \alpha$ к направлению распространения света. Нас будет интересовать коэффициент поглощения света k на частоте излучения фракции атомов с наиболее вероятной скоростью. При определенных условиях регистрации света, которые будут обсуждены далее, указанный коэффициент дает представление об интенсивности самопоглощения в атомарном пучке реальной установки МЛЭ. Для этого необходимо, чтобы расходимость пучка в области, дающей основной вклад в поглощение, не превышала d .

Классический профиль доплеровской линии поглощения в газе в данном случае не пригоден, во-первых, ввиду направленного движения атомов, во-вторых, ввиду немаксвелловского распределения атомов по скоростям. Вычисления проводили в предположении, что естественная ширина линии существенно уже доплеровской, так что линия может считаться δ -образной. При этом окончательное выражение заведомо непригодно при малых углах, когда доплеровские эффекты не существенны и самопоглощение определяется естественной шириной спектральной линии.

Сечение резонансного рассеяния фотона свободным атомом имеет вид (см. формулу 64.7 [6]):

$$\begin{aligned}\sigma_w &= \frac{2J_2 + 1}{2(J_1 + 1)} \lambda^2 \frac{\Gamma_{12}^2}{2\Gamma} \left[\frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_{12}) + \Gamma^2/4} \right] = \\ &= \frac{\pi}{2} \sigma_0 \Gamma \left[\frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_{12})^2 + \Gamma^2/4} \right],\end{aligned}\quad (9)$$

где J_1, J_2 — полные моменты атома в начальном и конечном состояниях; ω_{12} — круговая частота перехода; λ — соответствующая длина волны; Γ — полная ширина верхнего уровня (здесь учитывается, что состояние может распадаться несколькими способами); σ_0 — сечение в центре линии ($\omega = \omega_0$),

$$\sigma_0 = \frac{(2J_2 + 1)\lambda^2}{2(J_1 + 1)\pi} \left(\frac{\Gamma_{12}}{\Gamma} \right)^2. \quad (10)$$

Для атома, движущегося со скоростью v , резонансная частота смещения на величину $\Delta\omega = \omega_{12}v\sin\alpha/c$, следовательно, вместо (9) получим

$$\sigma_{\omega, v} = \frac{\pi}{2} \sigma_0 \Gamma \left[\frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_{12} - \omega v \sin\alpha/c)^2 + \Gamma^2/4} \right]. \quad (11)$$

Выражение для κ_ω имеет вид

$$\kappa_\omega = \int_v \sigma_{\omega v} dn(v), \quad (12)$$

где $n(v)$ — концентрация атомов в потоке со скоростями, не превосходящими v . Для оценок можно использовать следующее распределение (см. [7] с. 31):

$$dn = n_0 2\beta^2 \exp(-\beta v^2) v^3 dv, \quad (13)$$

где n_0 — полная концентрация атомов в потоке; $\beta = M/2\kappa T$ (M — масса атома; T — температура источника).

Каждой скорости v соответствует определенное положение линии поглощения на шкале частот с максимумом $\omega_m = \omega_{12}(1 + v/c\sin\alpha)$, поэтому распределение (13) может быть представлено как распределение по частотам ω_m :

$$\begin{aligned}dn &= 2n_0\beta^2 c^4 (\omega_m/\omega_{12} - 1)^3 \frac{1}{\sin^4 \alpha} \times \\ &\times \exp\left[-\frac{\beta c^2}{\sin^2 \alpha} (\omega_m/\omega_{12} - 1)^2\right] \frac{d\omega_m}{\omega_{12}}.\end{aligned}\quad (14)$$

Тогда переходя в (12) к интегрированию по частотам, получим

$$\begin{aligned}d\kappa_\omega &= \frac{\pi}{2} \sigma_0 \Gamma \left[\frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4} \right] \frac{2n_0\beta^2 c^4}{\sin^4 \alpha} \times \\ &\times (\omega_m/\omega_{12} - 1)^3 \exp\left[-\frac{\beta c^2}{\sin^2 \alpha} (\omega_m/\omega_{12} - 1)^2\right] \frac{d\omega_m}{\omega_{12}}.\end{aligned}\quad (15)$$

Первый множитель в квадратных скобках при $\Gamma \rightarrow 0$ стремится к $\delta(\omega - \omega_m)$, чем мы и воспользовались, учитывая малость Γ по сравнению с характерной шириной доплеровского уширения $\sin\alpha \cdot \omega_{12}/(c \cdot \sqrt{\beta})$ (что выполняется, как было отмечено выше при не слишком малых α).

Итак, для κ_ω получим

$$\begin{aligned}\kappa_\omega &= \pi \sigma_0 n_0 \frac{\Gamma \beta^2 c^4}{\omega_{12} \sin^4 \alpha} (\omega/\omega_{12} - 1)^3 \times \\ &\times \exp\left[-\frac{\beta c^2}{\sin^2 \alpha} (\omega/\omega_{12} - 1)^2\right].\end{aligned}\quad (16)$$

Для определения характерной величины рассеяния можно было бы усреднить (16) по распределению (14). Вместо этого найдем наиболее вероятное значение κ , определив интенсивность рассеяния на частоте, соответствующей центру линии излучения фракции атомов с наиболее вероятной скоростью v , соответствующей максимуму распределения

$$v = (\sqrt{3}/2)/\sqrt{\beta}. \quad (17)$$

Центр линии испускания для атомов, движущихся со скоростью v , лежит на частоте $\omega = \omega_{12}(1 + \sqrt{3}/2\sin\alpha/(c \cdot \sqrt{\beta}))$. Подставляя в (15), окончательно найдем

$$\kappa = \pi(3/2)^{3/2} e^{-3/2} \sigma_0 n_0 \Gamma c \cdot \sqrt{\beta} / \omega_{12} \sin\alpha, \quad (18)$$

либо, учитывая, что $\Gamma/2 = \sum 1/\tau_{2k}$, $\omega = 2\pi\nu_{12}$, получим эквивалентное выражение (τ_{2k} — частичное время жизни уровня 2 по отношению к уровню k):

$$\kappa = (3/2)^{3/2} e^{-3/2} \sigma_0 n_0 \left(\nu_{12}^{-1} \sum_k 1/\tau_{2k} \right) c \cdot \sqrt{\beta} / \sin\alpha. \quad (19)$$

Для того чтобы сохранялась линейность сигнала N_I от концентрации n_0 , длина пути фотона в молекулярном пучке должна быть гораздо меньше длины поглощения на длине волны выбранной спектральной линии. Для типичных устано-

вок МЛЭ свет проходит в атомарном пучке до входа в систему регистрации путь длиной от 6 см. В таблице представлена длина поглощения I_{hv} , вычисленная как величина, обратная выражению (19) при концентрации атомов в потоке $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$ для скорости роста пленки $\sim 0,1 \text{ нм/с}$.

Проведенный в соответствии со сказанным выше анализ величины I_{hv} показывает, что, например, для диагностики потока Ga (синтез GaAs) следует использовать спектральную линию 417,2 нм ($P_{3/2} \rightarrow S_{1/2}$) длина поглощения 420 см, а при диагностике потоков щелочных металлов следует либо менять геометрию регистрации, либо работать в области меньших на порядок плотностей n_0 . Таким образом, величины N_I и I_{hv} задают для данного элемента границы применимости люминесцентного метода, с одной стороны, по значению сигнала, а, с другой стороны, по линейности $N_I = f(n_0)$. Отметим, что для разных спектральных линий длина поглощения различна и этот факт может быть использован для определения n_0 без проведения предварительной калибровки.

Определение концентрации атомов на основе эффекта самопоглощения

Спин-орбитальное взаимодействие приводит к распределению основного состояния атомов ряда элементов (Al, Ga, In) на два уровня. Обычно наблюдаются две спектральные линии переходов на оба уровня α и β (рис. 1), n — уровень, заселяющийся в результате электронного удара.

Отношение интенсивностей линий определяется отношением парциальных ширин:

$$I_{n\alpha}^0 / I_{n\beta}^0 = \Gamma_{n\alpha} / \Gamma_{n\beta}, \quad (20)$$

где индекс $(^0)$ означает, что пока не учтено взаимодействие света с потоком.

В результате самопоглощения наблюдаемые интенсивности линий меняются в соответствии с выражениями

$$I_{n\alpha} = I_{n\alpha}^0 \exp(-\kappa_{n\alpha} L); \quad I_{n\beta} = I_{n\beta}^0 \exp(-\kappa_{n\beta} L), \quad (21)$$

где L — путь фотона в потоке.

Обозначим отношение невозмущенных линий (20) как r_n , а наблюдаемое отношение как R_n , тогда $\ln R_n = \ln r_n - (\kappa_{n\alpha} - \kappa_{n\beta})L$.

Коэффициент поглощения определяется выражениями (21), в которых под концентрацией

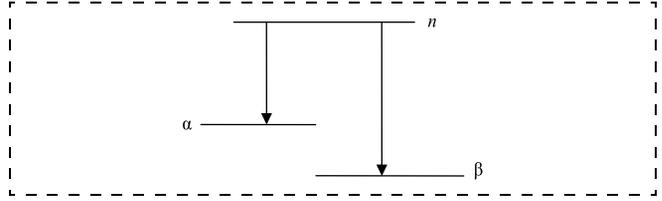


Рис. 1. Схема спектральных линий переходов при спин-орбитальном взаимодействии

необходимо понимать концентрацию атомов в соответствующем состоянии (α и β):

$$\begin{aligned} \kappa_{n\alpha} &= (3/2)^{(3/2)} e^{(-3/2)} \frac{\Gamma_{n\alpha} \sqrt{\beta} \lambda_{n\alpha}^3}{\Gamma_n 2\pi} \times \\ &\times \frac{2J_n + 1}{2J_\alpha + 1} \cdot \frac{S}{1 + S} \cdot \frac{n_0}{\sin \alpha}; \\ \kappa_{n\beta} &= (3/2)^{(3/2)} e^{(-3/2)} \frac{\Gamma_{n\beta} \sqrt{\beta} \lambda_{n\beta}^3}{\Gamma_n 2\pi} \times \\ &\times \frac{2J_n + 1}{2J_\beta + 1} \cdot \frac{S}{1 + S} \cdot \frac{n_0}{\sin \alpha}, \end{aligned} \quad (22)$$

где $S = (2J_\alpha + 1/2J_\beta + 1) \exp(-E_{\alpha\beta}/kT)$ — отношение концентраций на уровнях.

Тогда для определения концентрации n_0 по измеренному отношению R_n получим выражение

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{2\pi e^{3/2} \ln(r_n/R_n)}{(3/2)^{3/2} L / \sin \alpha} \times \\ &\times \frac{\sqrt{\beta} (2J_n + 1)}{\Gamma_n (1 + S)} \left(\frac{\Gamma_n \lambda_n^3 S}{2J + 1} - \frac{\Gamma_n \lambda_n^3}{2J + 1} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Входящая в (23) как параметр температура может быть определена приближенно. Действительно, когда заселенность уровня α значительна ($E_{\alpha\beta} \sim kT$), относительная погрешность определения концентрации порядка $(E_{\alpha\beta}/T) \Delta T/T$, т. е. невелика. В противоположном случае ($E_{\alpha\beta} > T$) уровень α почти пуст, и выражение для n_0 вообще не зависит от температуры (если не считать слабой зависимости $T^{1/2}$, связанной с β).

Определение температуры потока

Система уровней иногда, как в случае In и Ga (рис. 2), позволяет по люминесценции определить температуру потока.

Наличие двух пар переходов с уровнями n и k позволяет, используя соотношение (18), записанное для переходов n и k , исключить обычно неточно известный параметр L и получить выражение для температуры потока

$$T = \frac{E_{\alpha\beta}}{\ln(1/S) + \ln[(2J_\alpha + 1)/(2J_\beta + 1)]}, \quad (24)$$

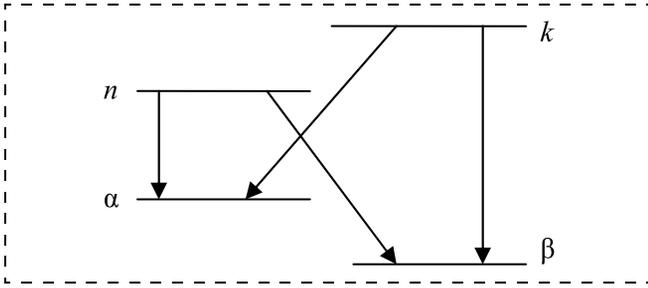


Рис. 2. Система спектральных уровней для определения температуры

где

$$S = \frac{2J_\alpha + 1}{2J_\beta + 1} \frac{\lambda_k^3 M - \lambda_n^3}{\lambda_n^3 M - \lambda_k^3},$$

$$M = \frac{\Gamma_k}{\Gamma_n} \frac{2J_k + 1}{2J_n + 1} \frac{\ln(r_n/R_n)}{\ln(r_k/R_k)}. \quad (25)$$

Самопоглощение при регистрации излучения в направлении, перпендикулярном оси диаграммы направленности источника

В установках МЛЭ используется обычно несколько источников атомных и молекулярных пучков, направленных на подложку под некоторыми углами. В ряде случаев предусмотрено место и для источника, ось которого перпендикулярна плоскости подложкодержателя. Представляет интерес в связи с этим расчет длины поглощения линии в направлении, перпендикулярном оси источника. Выражения (18) или (19) для коэффициента поглощения получены в предположении малости естественной ширины линии по сравнению с доплеровским уширением. Этот факт и множитель $1/\sin\alpha$, содержащийся в формулах (18), (19), говорит о невозможности ее применения при $\alpha \rightarrow 0$. Рассмотрим поглощение в потоке атомов от точечного источника на расстоянии H (рис. 3). В данном случае, поскольку фотоны пересекают поток при своем движении к датчику под существенно различными углами, нельзя ввести один удельный параметр рассеяния (вероятность рассеяния на единице длины).

Вместо этого необходимо вычислить полную вероятность рассеяния для фотона, рожденного на оси потока (самая неблагоприятная область для диагностики). Находясь вблизи оси, фотон наиболее интенсивно взаимодействует с потоком, рассеиваясь на практически доплеровски несмещенных линиях с естественным уширением. При углах, больших некоторого значения d_c , будем использовать для вычислений формулу (19). Будем считать полную искомую вероят-

ность малой, концентрацию в потоке постоянной до определенного угла d_m ($d_m < 1$) и равной нулю при больших углах (рис. 3).

Распределение вероятности испускания фотонов возбужденным атомом по частотам имеет вид

$$dW = \frac{\Gamma}{2\pi} \left[(\omega - \omega_{12})^2 + \frac{\Gamma^2}{4} \right] d\omega. \quad (26)$$

Резонансная частота не смещена, так как рассматривается излучение атомов, движущихся вдоль оси источника (перпендикулярно линии наблюдения). Сечение рассеяния атомами, близкими к оси, описывается формулой (9). Полная вероятность рассеяния в интервале углов $[0, d_c]$ есть

$$P_1 = n_o l_c \int_{\omega} \sigma_w d\omega, \quad (27)$$

где $l_c = d_c H$ (H — высота линии наблюдения над уровнем источника); σ_c — сечение (9).

Для P_1 , следовательно, получаем

$$P_1 = n_o \alpha_c H \sigma_o \frac{\Gamma_{12} \Gamma}{8\pi} \int \frac{d\omega}{\left[(\omega - \omega_{12})^2 + \frac{\Gamma^2}{4} \right]^2} =$$

$$= \frac{n_o \sigma_o H \alpha_c \Gamma_{12}}{\pi \Gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + x^2)^{-2} dx. \quad (28)$$

Интеграл в (28) равен $\pi/2$, и для P_1 окончательно имеем

$$P_1 = n_o \sigma_o H \alpha_c \Gamma_{12} / 2\Gamma. \quad (29)$$

В области углов $[\alpha_c, \alpha_m]$ вероятность рассеяния P_2 будет

$$P_2 = \int_{\alpha_c}^{\alpha_m} \kappa(\alpha) d\alpha. \quad (30)$$

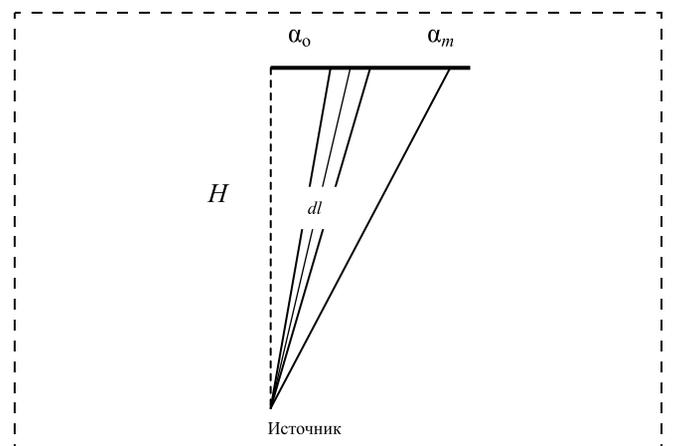


Рис. 3. Схема вычисления самопоглощения в случае, когда ось источника перпендикулярна линии наблюдения

Подставляя $\kappa(\alpha)$ из (18) и предполагая $\alpha \approx \sin \alpha$, найдем

$$P_2 = \pi(3/2)^{3/2} e^{-3/2} \sigma_o n_o H \Gamma c \cdot \sqrt{\beta} \left(1 + \ln \frac{\alpha_m}{\alpha_c}\right) \frac{1}{\omega_{12}}. \quad (31)$$

Полная вероятность рассеяния $P = P_1 + P_2$. Угол α_c определим из условия равенства удельных вероятностей рассеяния, которые можно получить для точки $\alpha = \alpha_c$ из (27) и (18):

$$\Gamma_{12} n_o \sigma_o / 2\Gamma = \pi(3/2)^{-3/2} e^{3/2} \sigma_o n_o \Gamma c \beta^{1/2} \alpha_c,$$

откуда

$$\alpha_c = 2\pi(3/2)^{3/2} e^{-3/2} \frac{\Gamma^2}{\Gamma_{12}} \frac{c\beta^{1/2}}{\omega_{12}}. \quad (32)$$

Тогда для $P = P_1 + P_2$ получим

$$P = \pi(3/2)^{3/2} e^{-3/2} \sigma_o n_o H \Gamma c \beta^{1/2} \left(1 + \ln \frac{\alpha_m}{\alpha_c}\right) \frac{1}{\omega_{12}}, \quad (33)$$

где α_c определено выражением (32).

Интересно сравнить вероятности рассеяния для потока с углами наклона α и протяженностью L вдоль линии наблюдения s (33):

$$P/P_L \alpha = H \alpha \left(1 + \ln \frac{\alpha_m}{\alpha_c}\right) \frac{1}{L}. \quad (34)$$

Например, для установки с $H = 15$ см, $L = 5$ см, $\alpha = 1/4$ и при $\alpha_c = 10^{-2}$ получим $P/P_L \alpha \approx 3,4$.

Следовательно, для рассматриваемого положения источника верхний предел линейной зависимости сигнала от плотности потока в несколько раз ниже и учет самопоглощения необходим при меньших плотностях, чем для наклонных источников.

Амплитудная селекция счетных импульсов при высоком уровне шумов

При спектральных измерениях всегда существует проблема регистрации фотоэлектронным множителем (ФЭУ) слабых оптических сигналов. Пусть полная интенсивность сигнала на ширине спектральной линии — N_S , интенсивность шума на этом же спектральном участке — $N_N \gg N_S$. Для идентификации линии необходимо, чтобы было $N_S \tau = k(N_N \tau)^{1/2}$, где τ — необходимое время накопления; k — числовой коэффициент, значение которого определяет достоверность регистрации. Положив $k = 1$, получим для времени накопления $\tau = N_N / N_S^2$. Интегральная амплитуда сигнала представляет сумму импульсов ФЭУ разной амплитуды:

$$N_S = \int n_S(x) dx; \quad N_N = \int n_N(x) dx, \quad (35)$$

причем амплитудные распределения $n_S(x)$, $n_N(x)$ в общем случае различны. Если под N_S , N_N понимать число импульсов в секунду, прошедших окно дискриминатора с порогами x_1 и x_2 , для характерного времени накопления τ получим

$$\tau(x_1, x_2) = \frac{\int_{x_1}^{x_2} n_N(x) dx}{\left(\int_{x_1}^{x_2} n_S(x) dx\right)^2}. \quad (36)$$

В данном случае естественно возникает задача минимизации времени накопления с помощью удачного выбора порогов дискриминатора x_1 и x_2 . Дискриминатор — это электронное устройство, тракт которого пропускает только импульсы с амплитудой $x_1 < x < x_2$. Сам факт существования оптимальных порогов легко понять, проанализировав поведение функции $\tau(x_1, x_2)$. Предположим, что n_N и n_S — ограниченные функции, тогда при малой ширине окна числитель (36) пропорционален $(x_2 - x_1)$, знаменатель — $(x_2 - x_1)^2$, и $\tau(x_1, x_2) \sim (x_2 - x_1)^{-1}$, т. е. при близких порогах время накопления велико. При расширении амплитудного диапазона выше некоторого значения, включающего основную часть световых импульсов, знаменатель (36) практически перестает расти, в то же время числитель продолжает возрастать, так как темновые сигналы обычно имеют более широкий спектр амплитуд.

Записав требование минимизации $\tau(x_1, x_2)$ в виде условий

$$d\tau/dx_1 = 0; \quad d\tau/dx_2 = 0, \quad (37)$$

приходим к системе уравнений на x_1 и x_2 :

$$\int_{x_1}^{x_2} [2n_S(x_1)n_N(x) - n_N(x_1)n_S(x)] dx = 0; \quad (38)$$

$$n_S(x_1)/n_N(x_1) = n_S(x_2)/n_N(x_2).$$

При поиске оптимальных порогов численными методами система ничем не лучше исходного соотношения (36), однако второе уравнение в (38) показывает, что и при малых уровнях сигнала отношение сигнал/шум играет важную роль. Именно, если амплитудное распределение отношения сигнал/шум имеет максимум, оптимальные пороги должны располагаться по разные стороны от максимума, причем так, чтобы значения отношения сигнал/шум на нижнем и верхнем порогах были одинаковыми.

Экспериментальное оборудование и методики электронной диагностики

На рис. 4 приведена схема взаимного расположения элементов диагностической системы в ростовой камере установки МЛЭ. Электронная пушка с системой отклонения смонтирована на одном из фланцев на достаточном удалении от подложкодержателя. Датчики расположены таким образом, чтобы одновременно удовлетворять нескольким условиям. Во-первых, присутствие датчиков в технологической камере не должно вести к изменению технологической оснастки (источников МП, держателя подложки, криопанелей). Во-вторых, информация о потоке должна поступать из области, максимально приближенной к подложке. В-третьих, узлы датчиков не должны приводить к изменению плотности потока атомов, т. е. не затенять подложку, не создавать отраженных потоков, попадающих на подложку и изменяющих показания других датчиков, не иметь нагретых до высокой температуры деталей в прямой видимости подложки.

Все эти условия можно считать выполненными, когда электронная пушка и датчики находятся в одной плоскости, а оси фланцев пересекаются в точке, лежащей ниже (не менее 20 мм) от центра подложкодержателя.

При разработке пространственных диагностик атомарных пучков определяющим является

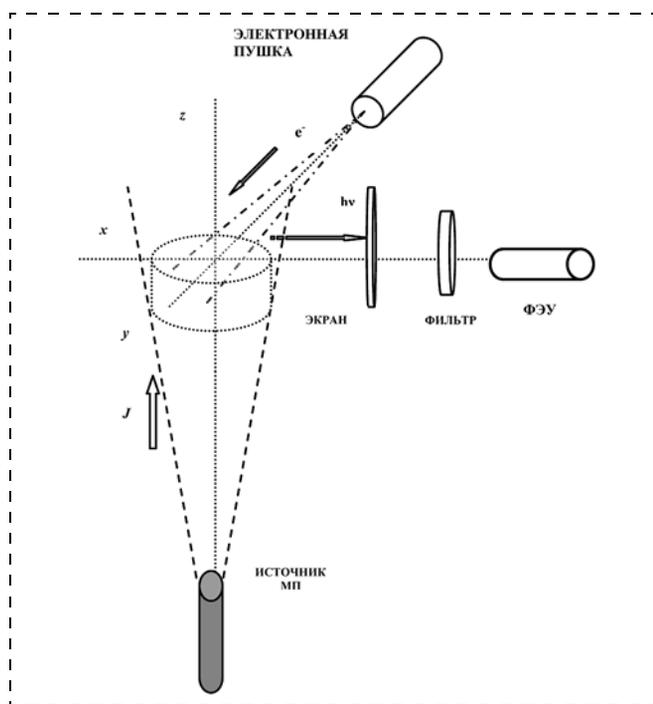


Рис. 4. Схема расположения элементов диагностической системы в технологическом объеме установки МЛЭ

требование малости расходимости и поперечного сечения электронного пучка ($S \approx 10^{-5} \text{ см}^2$). Этим требованиям удовлетворяют пушки осциллографического типа с характерными токами в диапазоне $10^{-5} \dots 10^{-4} \text{ А}$ при ускоряющих напряжениях $U \sim 0, 1 \dots 2 \text{ кВ}$. Электроны пучка, пронизывая поток молекул и атомов, с некоторой вероятностью возбуждают, ионизируют и рассеиваются на них. Возникающее при этом характеристическое излучение регистрируется ФЭУ-130, а ионы — каналным электронным умножителем КЭУ-6. Оба регистратора работают в режиме счета импульсов. Таким образом, информация об интенсивности МП сразу представляется в виде потока импульсов. Последующая математическая обработка образованного потока импульсов и представление результатов ведется с помощью ЭВМ, что позволяет представлять результаты в виде графиков или изображений в реальном времени.

Исследование спектральных линий люминесценции в потоках Cd, Ga, In и других элементов проведено с использованием разработанной автоматизированной системы накопления спектральной информации, позволяющей уверенно выделять на фоне шума слабый сигнал. Для накопления информации было использовано многократное измерение всего доступного спектра с фиксацией результата в памяти ЭВМ. В спектрах атомов In, Ga и Cd существуют пары линий с резко различающимися коэффициентами самопоглощения.

В соответствии с выражением (23) по изменению отношения интенсивностей спектральных линий можно рассчитать абсолютные значения плотностей атомов в потоке. Найденные таким образом значения хорошо согласуются с плотностями потока, полученными на основании измерения массы осажденного элемента или толщины выращенной пленки.

Для определения пространственного распределения частиц в потоке осуществляется прецизионное сканирование электронным пучком с помощью внешней магнитной системы отклонения. Система позволяет получать изображения потока на электронно-лучевой трубке с частотой кадров около 1 Гц. На рис. 4 приведена геометрия измерений пространственного излучения. Электронный пучок создает светящийся "шнур" из люминесцирующих атомов потока. Ясно, что распределение интенсивности излучения вдоль "шнура" отражает распределение плотности атомов в потоке вдоль траектории электронов. Если с помощью щелевого экрана (см. рис. 4) ограни-

чивать сектор обзора ФЭУ по оси y , то мы будем фиксировать измерение только небольшой части "шнура". Оставляя щель неподвижной и перемещая электронный пучок, можно проводить относительные измерения интенсивности в секторе обзора. Разрешающая способность метода по оси y определяется размером щели, а в плоскости анализа — диаметром электронного пучка. Если проводить измерения интенсивности излучения в некоторой области последовательно перемещая луч и заполняя матрицу (i, j) , можно построить двумерный график распределения плотности потока.

Система сканирования и фотоумножители с помощью аппаратуры сопряжения подключены к аппаратно-программному комплексу. Специально разработанный пакет программ обеспечивает определение "in situ" диаграмм направленности источников и визуализацию функций распределения на цветном дисплее.

После калибровки системы предельная чувствительность по скорости роста пленок, например CdTe, составляет 0,01 нм/с, что вполне достаточно, так как скорости роста слоев в методе МЛЭ обычно составляют 0,1...1 нм/с. Помимо очевидного достоинства — возможности визуального контроля функционирования испарителей, метод позволяет определять их диаграммы направленности, трансформацию по мере расхода навески, что особенно важно при разработке испарителей для подложек большой площади. Метод дает принципиальную возможность по распределению концентрации атомов вблизи подложки определять наличие или отсутствие отраженных потоков. Многоканальный вариант дает возможность вести параллельный и независимый контроль за несколькими потоками, а также оперативно определять их взаимное влияние.

Для получения надежных данных по всему газовому составу в камере МЛЭ была проведена модернизация известной масс-спектрометрической диагностики. Вместо ионизационной камеры с термокатодом, которые являются источниками загрязнений МП, была создана холодная ионизационная камера масс-спектрометра, имеющая малую поверхность и большую угловую апертуру входного потока. Камера имеет конструкцию в виде ажурного сетчатого объема, молекулы газов внутри которого ионизируются электронным пучком, направленным в ионизационную камеру от удаленной электронной пушки. Электронная пушка и отклоняющая система используются те же, что и в люминесцентной диаг-

ностике. Отказ от громоздкой ионизационной камеры с термокатодом значительно уменьшает искажение потока, позволяет сочетать масс-спектрометрию с электронно-лучевым зондированием и проводить коррекцию калибровки масс-спектрометра во время процесса МЛЭ. Потребность в такой калибровке вызвана возможным изменением свойств электронной оптики, вытягивающей ионы из ионизационной камеры. Действительно, на сетчатый объем могут нарасти диэлектрические пленки, которые зарядившись от электронного пучка, приведут к погрешности в измерениях. В этом случае калибровка по всему масс-спектру корректируется методом сравнения показаний люминесцентного и масс-спектрометрического датчиков на одном или нескольких элементах.

Для калибровки выбирается элемент, имеющий сильную уверенно регистрируемую спектральную линию, например, кадмий при эпитаксии теллурида кадмия. Измеренная интенсивность атомного пучка кадмия масс-спектрометром сравнивается с истинным значением плотности, измеренным люминесцентным датчиком. Вводимый поправочный коэффициент распространяется на весь спектр. Масс-спектрометрическая методика позволяет проводить измерения интенсивности атомных и молекулярных пучков в диапазоне $10^{11}...10^{17}$ ат/см²·с в диапазоне масс от 1 до 300 а. е. м. за 0,1 с.

Заключение

Описанный метод определения интенсивностей атомных и молекулярных пучков, основанный на регистрации значения рассеяния электронов на малые углы, возникающих при взаимодействии узкого электронного луча с атомами испаряемого вещества, может быть использован в управлении процессов роста в реальном времени. При определенных условиях практической реализации данный метод позволяет также определять концентрации и температуры атомов в потоке на основе эффекта самопоглощения.

Список литературы

1. Schlereth F. H., Cogol D. H., Holkeboer C. A., Lightner M. J. An instrument for controlling and monitoring film composition // Proc. 7-th Int. Vac. Cong., Vienna, 1977. P. 2205.
2. Баланюк В. В., Краснов В. Ф., Кульчицкий Н. А., Мушер С. Л. и др. Электронно-лучевая томография потоков частиц в установках молекулярно-лучевой эпитаксии. Физические основы твердотельной электроники // Материалы I Всесоюзной конференции, Ленинград, 1989. Т. В. С. 109—110.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.

4. Зайдель А. Н., Прокофьев К. А., Райский С. М., Шрейдер Е. А. Таблицы спектральных линий. М.: Физматгиз, 1962. 607 с.

5. Запесошный А. И., Алексахин И. С., Запесошный И. П., Зацаринный О. И. Резонансные явления при неупругих взаимодействиях медленных электронов с ионами щелочных металлов // ЖЭТФ. 1986. Т. 90, вып. 6. С. 1972.

6. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. М.: Наука, 1968.

7. Бурнштейн А. И. Молекулярная физика. Новосибирск: Наука, 1986. 290 с.

8. Cheng K. Y. Development of molecular beam epitaxy technology for III–V compound Semiconductor heterostructure devices // Journal of Vacuum Science & Technology A 31, 2013. Vol. 31. P. 050814 (1–10); doi: 10.1116/1.4816932.

9. Ptak A. J. Principles of Molecular Beam Epitaxy in Handbook of Crystal Growth. 2015. P. 162–187. Elsevier. [Http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-63304-0.00004-4161](http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-63304-0.00004-4161).

10. Jackson A. W., Pinsukanjana P. R., Gossard A. C., Coldren L. A. In Situ Monitoring and Control for MBE Growth of Optoelectronic Devices // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 1997. Vol. 3, N. 3. P. 836–844.

N. A. Kulchitsky, D. Sc., Professor, e-mail: orion@orion-ir.ru
Orion R & P Association, JSC Moscow, 111538, Russian Federation
MIREA — Russian Technological University (RTU MIREA), Moscow, 119454, Russian Federation

Corresponding author:

Kulchitsky Nicolay A., D. Sc., Professor, MIREA — Russian Technological University (RTU MIREA), Moscow, 119454, Russian Federation
E-mail: orion@orion-ir.ru

Atomic and Molecular Beams Control in Molecular Beam Epitaxy

Received on September 10, 2020

Accepted on October 08, 2020

Rapid development of molecular beam epitaxy (MBE) in recent decades has led to the emergence of a variety of technological installations, as well as electronic and optical diagnostics of growing layers, as well as atomic and molecular beams. Known methods for monitoring atomic and molecular beams in MBE installations—mass spectrometric and luminescent — involve bulky sensors, which can only be placed in special growth chambers.

This paper describes a structurally simple and fairly universal method for determining the intensities of atomic and molecular beams, based on registering the amount of electron scattering at small angles that occur when a narrow electron beam interacts with the atoms of a vaporized substance. We consider the theoretical prerequisites for the diagnosis of an atomic beam by the phenomenon of scattering of fast electrons in it.

Keywords: molecular beam epitaxy, diagnosis, electron scattering

For citation:

Kulchitsky N. A. Atomic and Molecular Beams Control in Molecular Beam Epitaxy, *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2021, vol. 23, no. 1, pp. 47–56.

DOI: 10.17587/nmst.23.47-56

References

1. Schlereth F. H., Cogol D. H., Holkeboer C. A., Lightner M. J. An instrument for controlling and monitoring film composition. *Proc. 7-th Int. Vac. Cong., Vienna*, 1977, p. 2205.

2. Balanyuk V. V., Krasnov V. F., Kulchitskiy N. A., Mushner S. L. *Materialy 1 Vsesoyuznoy konferentsii. "Fizicheskiye osnovy tverdotel'noy elektroniki"*, Leningrad, 1989, vol. B, pp. 109–110 (in Russian).

3. Landau L. D., Lifshic E. M. *Kvantovaya mekhanika*. Moscow, Nauka, 1974, 607 p. (in Russian).

4. Zajdel' A. N., Prokofev K. A., Rajskij S. M., Shreyder E. A. *Tablicy spektral'nyh linij*. Moscow, Fizmatgiz, 1962, 607 p. (in Russian).

5. Zapesochnyj A. I., Aleksahin I. S., Zapesochnyj I. P., Zaccarinnyj O. I. *ZHETF*, 1980, vol. 90, is. 6, p. 1972 (in Russian).

6. Beresteckij V. B., Lifshic E. M., Pitaevskij L. P. *Relyativistskaya kvantovaya teoriya*. Moscow, Nauka, 1968, 480 p. (in Russian).

7. Burnshitejn A. I. *Molekulyarnaya fizika*. Novosibirsk, Nauka, 1986, 290 p. (in Russian).

8. Cheng K. Y. Development of molecular beam epitaxy technology for III–V compound Semiconductor heterostructure devices, *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 2013, vol. 31, p. 050814 (1–10); doi: 10.1116/1.4816932

9. Ptak A. J. Principles of Molecular Beam Epitaxy in Handbook of Crystal Growth. 2015, pp. 162–187, Elsevier. <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-63304-0.00004-4161>

10. Jackson A. W., Pinsukanjana P. R., Gossard A. C., Coldren L. A. In Situ Monitoring and Control for MBE Growth of Optoelectronic Devices, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1997, vol. 3, no. 3, pp. 836–844.

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

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

Свидетельство о регистрации ПИ № 77-18289 от 06.09.04.

Технический редактор Т. А. Шацкая. Корректор Е. В. Комиссарова.

Сдано в набор 14.12.2020. Подписано в печать 28.01.2021. Формат 60×88 1/8. Заказ МС121. Цена договорная

Оригинал-макет ООО «Авансед солюшнз». Отпечатано в ООО «Авансед солюшнз». 119071, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 19, стр. 1. Сайт: www.aov.ru

Рисунки к статье И. К. Хмельницкого, В. М. Айвазяна, Н. И. Алексева,
А. П. Бройко, В. В. Лучинина, Д. О. Тестова

**«ИССЛЕДОВАНИЕ ИОННЫХ ЭАП-АКТЮАТОРОВ
С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ И ПОЛИМЕРНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ В ВОДНОЙ СРЕДЕ»**

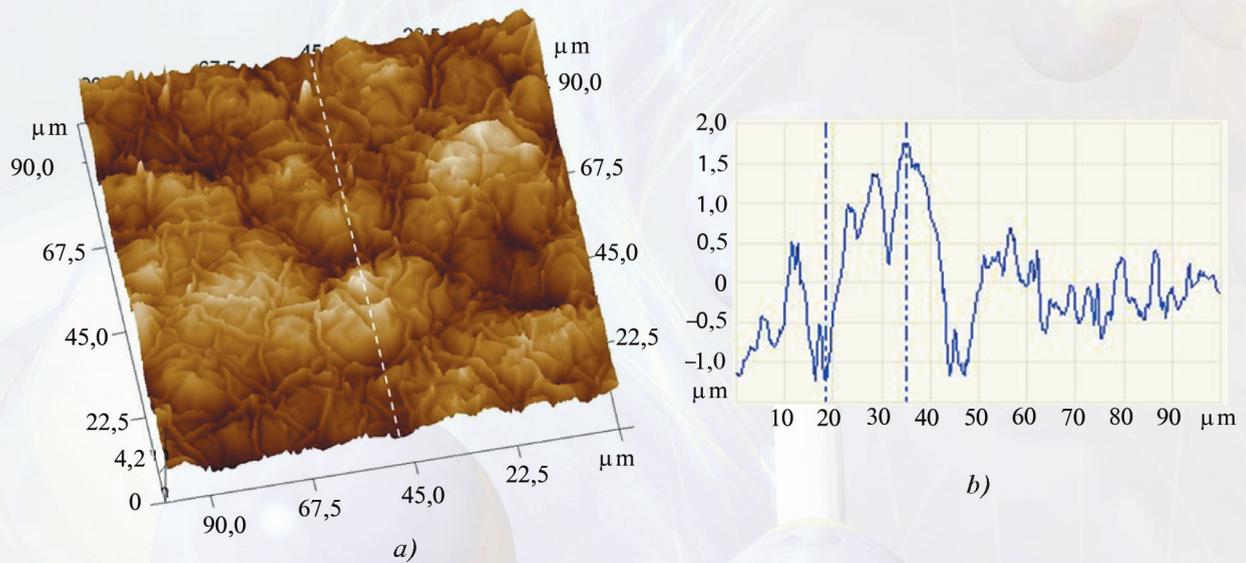


Рис. 6. АСМ-изображение (а) и профиль сечения (b) поверхности электрода ИШМК-актюатора

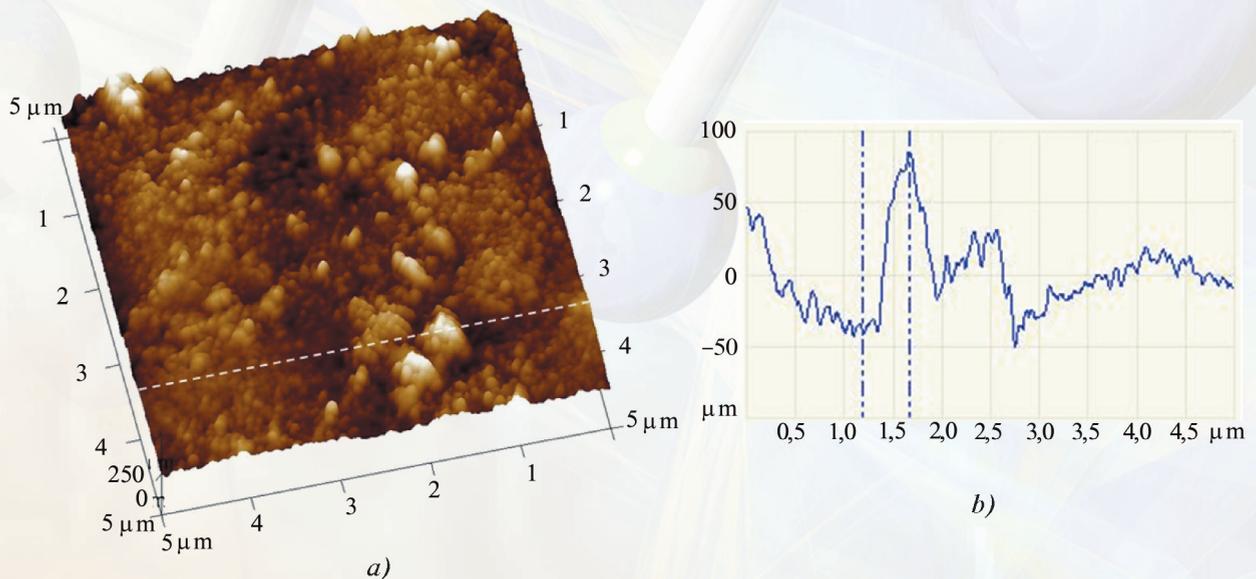


Рис. 7. АСМ-изображение (а) и профиль сечения (b) поверхности электрода ИШМК-актюатора

Рисунки к статье И. К. Хмельницкого, В. М. Айвазяна, Н. И. Алексева,
А. П. Бройко, В. В. Лучинина, Д. О. Тестова

«ИССЛЕДОВАНИЕ ИОННЫХ ЭАП-АКТЮАТОРОВ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ И ПОЛИМЕРНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ В ВОДНОЙ СРЕДЕ»



Рис. 8. Схема стенда для исследования актюаторов:

1 – актюатор; 2 – щипцы; 3 – ванна; 4 – генератор сигнала; 5 – лазерный датчик перемещения;
6 – источник питания; 7 – осциллограф; 8 – персональный компьютер

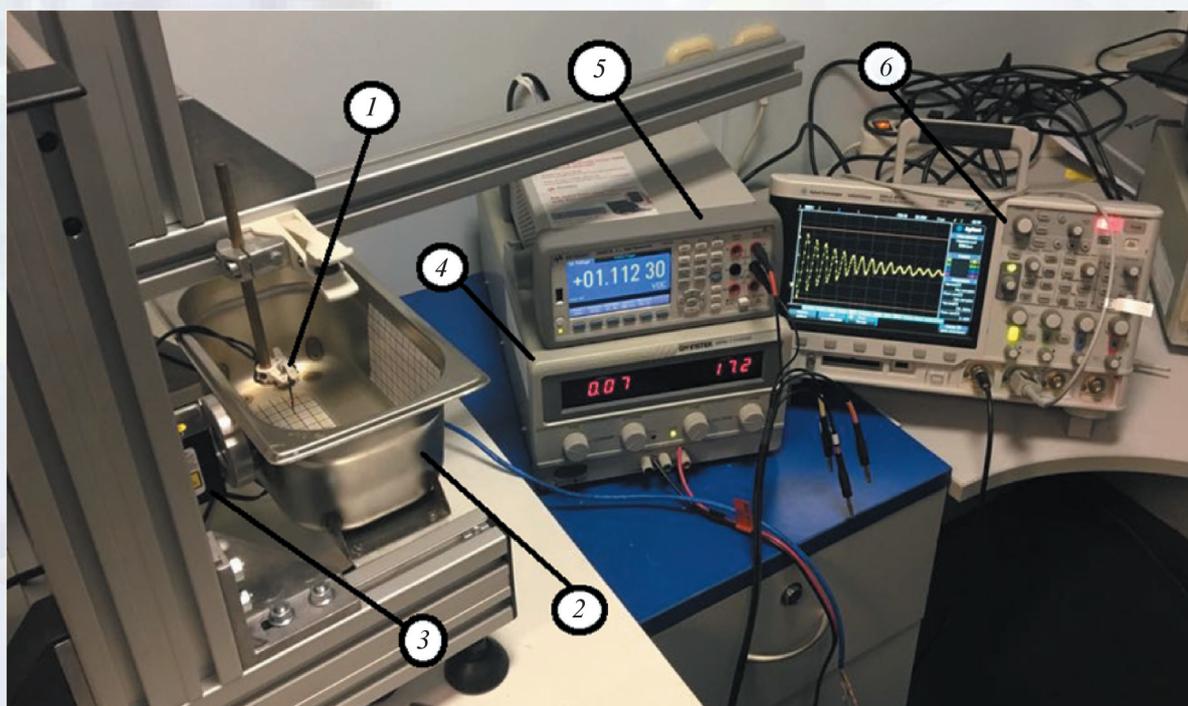


Рис. 9. Внешний вид стенда для исследования актюаторов:

1 – щипцы; 2 – ванна; 3 – лазерный датчик перемещения; 4 – источник питания;
5 – мультиметр; 6 – осциллограф