



26-я Международная Крымская конференция СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии

Материалы конференции

**4—10 сентября 2016 г.
Севастополь, Крым, Россия**

Том 7

5b. Нанoeлектроника и нанотехнология

Москва • Минск • Севастополь
2016

УДК 621.3.029.62+621.39
ББК 32я431
С255

Организаторы:

Российский фонд фундаментальных исследований (РФФИ) — проект № 16-07-20068
Российское научно-техническое общество радиотехники, электроники и связи
(РНТОРЭС) им. А. С. Попова
Крымский научно-технологический центр им. проф. А. С. Попова (Севастополь)
Севастопольский государственный университет,
Институт радиоэлектроники и информационной безопасности
Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского,
Физико-технический институт (Симферополь)
Крымская астрофизическая обсерватория,
Отдел радиоастрономии и геодинамики (Кацивели)
ОАО «НПП "Исток" им. Шокина» (Фрязино)
ОАО «Интеграл», НТЦ «Белмикросистемы» (Минск)
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (Минск)
НП ОАО «Фаза» (Ростов-на-Дону)
АО «Микроволновые системы» (Москва)
НПП «Системные ресурсы» (Москва)
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
НПФ «Микран» (Томск)
ООО «Радиокомп» (Москва)
Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина (Екатеринбург)
AWR — National Instruments (Москва)
Таркус (Ростов-на-Дону — Севастополь)
Keysight Technologies (Москва)

Техническая и информационная поддержка:

IEEE, Moscow MTT/ED Chapter
IEEE, Moscow AP Chapter
Медиагруппа «Электроника»

26-я Международная Крымская конференция «**СВЧ-техника** и телеком-
C255 муникационные технологии» (КрыМиКо'2016). Севастополь, 4—10 сентября
2016 г. : материалы конф. в 13 т. — Москва ; Минск ; Севастополь, 2016. —
ISBN 978-966-335-418-7 (тт. 1—13).

Т. 7 : VI, 216 [1438—1653] с. : ил. — ISBN 978-966-335-425-5.

В 7-й том включены материалы 32-х докладов, которые были представлены на заседаниях секций по направлению 5b. Нанoeлектроника и нанотехнология.

Материалы конференции изданы также на флеш-накопителе.

Сборник предназначен для широкого круга специалистов в области СВЧ-техники и телекоммуникационных технологий. Сборник также будет полезен студентам и аспирантам телекоммуникационных, радиотехнических и радиофизических факультетов вузов.

УДК 621.3.029.62+621.39
ББК 32я431

ISBN 978-966-335-418-7 (тт. 1—13)
ISBN 978-966-335-425-5 (т. 7)

© Оргкомитет КрыМиКо'2016
© КНТЦ им. Попова, 2016

Том 7

СЕКЦИЯ 5b/1: НАНОТЕХНОЛОГИИ

5b.1	НАНОЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ НА ИЗОЛЯТОРЕ Преснов Д. Е., Трифонов А. С., Шорохов В. В., Божьев И. В., Крупенин В. А.	1438
5b.2	ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МОЩНОСТЕЙ КОМБИНИРОВАННОЙ ПЛАЗМЫ ПРИ ТРАВЛЕНИИ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОМЕТРОВОГО РАЗРЕШЕНИЯ Климин В. С., Еськов А. В., Солодовник М. С.	1445
5b.3	ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СКОРОСТИ НАГРЕВА НА ПАРАМЕТРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, ВЫРАЩИВАЕМЫХ МЕТОДОМ PECVD Рудык Н. Н., Ильин О. И., Федотов А. А., Ильина М. В.	1452
5b.4	ИССЛЕДОВАНИЯ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В AlAs/GaAs РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ Макеев М. О., Мешков С. А., Иванов Ю. А.	1459
5b.5	РАСТВОРИМОСТЬ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СОЕДИНЕНИЙ I-III-VI ₂ В СИЛИКАТНОЙ МАТРИЦЕ Соловей Н. П., Боднарь И. В., Стрелюхин А. В.	1466
5b.6	ФОРМИРОВАНИЕ МАССИВОВ НАНОПРОВОДОВ Bi И Sb В ПОРАХ АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ТЕПЛОМЕРОВ Горох Г. Г., Лозовенко А. А., Обухов И. А., Смирнова Е. А.	1471
5b.7p	МИКРОСТРУКТУРА И ХЕМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МАТРИЧНЫХ МЕТАЛЛООКСИДНЫХ СИСТЕМ Al ₂ O ₃ /SnMoO ₄ Горох Г. Г., Захлебаева А. И., Жилинский В. В., Пянко А. В.	1478
5b.8p	ЭФФЕКТЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ И ПАМЯТИ В ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ Колосницын Б. С., Троян Е. Ф.	*
5b.9p	БИОТОПЛИВНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ОСНОВЕ НАНОУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ Колесов В. В., Плеханова Ю. В., Китова А. Е., Тарасов С. Е., Решетилов А. Н.	1485
5b.10p	ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ВЫРАЩИВАНИЯ НАНОСТРУКТУР ЖИДКОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИЕЙ Марончук И. И., Санникович Д. Д., Черкашин А. С.	1492
5b.11p	ВЫРАЩИВАНИЕ НАНОСТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ ЖИДКОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИЕЙ Марончук И. И., Санникович Д. Д., Потапков П. В.	1499
5b.12p	МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЕННО-ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ ТОНКИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК Климин В. С., Петров Н. Н., Еськов А. В., Солодовник М. С.	*
5b.13p	ХИМИЧЕСКИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛЕВЫХ ТРАНЗИСТОРОВ Дао Динь Ха, Стемпицкий В. Р.	*

5b.14p	ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ТЕХНОЛОГИИ ТРЕХМЕРНЫХ МЕЖСЛОЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ Ловшенко И. Ю., Стемпицкий В. Р.	1506
5b.15p	РАЗРАБОТКА ДИАГНОСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РТД НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ AlGaAs ГЕТЕРОСТРУКТУР ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЕГО НАДЕЖНОСТИ Мешков С. А., Макеев М. О., Иванов Ю. А.	1513

СЕКЦИЯ 5b/2: НАНОЭЛЕКТРОНИКА

5b.16	СОЗДАНИЕ ОДНОЭЛЕКТРОННЫХ ТРАНЗИСТОРОВ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ И ЭЛЕКТРОТРЕППИНГА Галстян А. Г., Дагесян С. А., Солдатов Е. С.	1520
5b.17	ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ВЕРТИКАЛЬНО ОРИЕНТИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ Ильина М. В., Блинов Ю. Ф., Ильин О. И., Смирнов В. А.	1527
5b.18	МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЕВЫХ ГРАФЕНОВЫХ ТРАНЗИСТОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УПРОЩЕННОЙ КОМБИНИРОВАННОЙ МОДЕЛИ Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А., Романова И. А.	1534
5b.19	МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА НА ПОДЛОЖКАХ h-BN и SiO₂ Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А., Романова И. А.	1541
5b.20	РАСЧЁТ РАБОЧИХ ХАРАКТЕРИСТИК СИНХРОНИЗИРОВАННОГО ВИХРЕВОГО СПИН-ТРАНСФЕРНОГО НАНООСЦИЛЛЯТОРА Стремоухов П. А., Сафин А. Р.	*
5b.21	ИССЛЕДОВАНИЕ АВТОЭМИССИОННЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ МАССИВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР, ОРИЕНТИРОВАННОГО ПЕРПЕНДИКУЛЯРНО ПОДЛОЖКЕ Климин В. С.	*
5b.22p	ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНОВ В КАНАЛЕ ТРАНЗИСТОРНОЙ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ GaAs/AlAs КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПРОДОЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ Борздов А. В., Борздов В. М.	1547
5b.23p	ИМПЕДАНСНЫЕ СВОЙСТВА ПРОВОЛОЧНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР В МОДЕЛИ ЛАНДАУЭРА — ДАТТЫ — ЛУНДСТРОМА Давидович М. В.	1554
5b.24p	ДИОД НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВОГО КАТОДА С АЛМАЗОПОДОБНЫМ ПОКРЫТИЕМ И НЕРЕЗОНАНСНОЙ ЭМИССИЕЙ Гончарук Н. М., Карушкин Н. Ф.	1561
5b.25p	ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ТРАНСФЕР-МАТРИЦ ДЛЯ РАСЧЁТА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СИСТЕМ Мазин А. С., Орленсон В. Б., Шевченко А. И.	1568
5b.26p	НЕЛИНЕЙНОЕ РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КРЕМНИЕВЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ Смирнов А. И.	*
5b.27p	ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПОВЫШЕНИЯ ЧАСТОТЫ И МОЩНОСТИ СУБ-ТГц ИЗЛУЧЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СЕНДВИЧНОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Максименко В. А., Макаров В. В., Короновский А. А., Храмов А. Е.	1574

5b.28p	КВАНТОВАНИЕ ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ В ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЁНКАХ Асанов Э. Э., Килесса Г. В., Зуев С. А.	1581
5b.29p	ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕКТОРА ПОЙНТИНГА ВНУТРИ И ВНЕ ЗОЛОТОГО НАНОЦИЛИНДРА Каневский В. И., Карушкин Н. Ф.	1588
5b.30p	ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ КОНСТРУКЦИЙ НАНОРАЗМЕРНЫХ МДП-ТРАНЗИСТОРОВ Боровик А. М., Стемпичкий В. Р.	1593
5b.31p	ОПТИМИЗАЦИЯ КОНСТРУКЦИИ ТРАНЗИСТОРА С ВЫСОКОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОНОВ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩЕЙ СНИЖЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТА САМОРАЗОГРЕВА Волчѣк В. С., Стемпичкий В. Р.	1600

СЕКЦИЯ 5b/3: НАНОМАТЕРИАЛЫ

5b.32	ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ В ДИСКРЕТНОЙ СРЕДЕ Хлопов Б. В., Самойлович М. И.	1607
5b.33	ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИСПЕРСИЙ НАНОЧАСТИЦ ШУНГИТОВОГО УГЛЕРОДА В ХОЛЕСТЕРИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ Казак А. В., Усольцева Н. В., Смирнова А. И., Рожкова Н. Н., Гвоздев А. А.	1612
5b.34	ЗВЕЗДООБРАЗНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ МНОГООСНОВНЫХ КИСЛОТ С ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ И ХИРАЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ. КОНСТРУИРОВАНИЕ, МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗ МЕЗОМОРФИЗМА Акопова О. Б., Ковалева М. И., Бумбина Н. В., Жарникова Н. В., Смирнова А. И., Казак А. В., Усольцева Н. В., Капралова Т. С., Онучак Л. А. ...	1619
5b.35	ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНО ПОГЛОЩАЮЩИХ ОПТИЧЕСКИХ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТОК Иванова И. Н., Клещенков А. Б., Лерер А. М., Махно В. В., Махно П. В.	1626
5b.36	ГЕТЕРОПЕРЕХОДЫ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОРОШКОВ КРЕМНИЯ И УГЛЕРОДА Мазинов А. С., Карпенко Н. И., Работягов К. В., Гурченко В. С.	*
5b.37	ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНАЯ ПЛАЗМА С НУЛЕВОЙ ЭНТАЛЬПИЕЙ Обухов И. А.	1633
5b.38p	ТЕПЛОВОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ ПЛЕНКАМИ АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ С НАНОПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ Врублевский И. А., Чернякова Е. В., Аль-Адеми Я. Т. А., Горбачев Д. В.	1640
5b.39p	ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПЕРИОДИЧЕСКИ МОДУЛИРОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ Малый С. В.	*
5b.40p	ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОЦЕНТНОГО СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНЫХ РАСТВОРОВ Климин В. С., Библиева Б. С., Захарова В. В.	*
5b.41p	ФОТОДИОДНЫЕ ПРИЁМНИКИ ИК-ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ БАРЬЕРНЫХ СТРУКТУР ТИПА nVn Горн Д. И., Войцеховский А. В.	*

**5b.42p РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРО- И НАНОМЕХАНИЧЕСКИХ
СЕНСОРОВ ЛИНЕЙНЫХ УСКОРЕНИЙ
С ТРЕМЯ ОСЯМИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ**

Лысенко И. Е., Ежова О. А., Молчанова Л. Ф. 1647

* Материалы доклада не поступили в Оргкомитет к моменту формирования сборника.

Nanoelectronic structures based on silicon on insulator

Denis E. Presnov^{1,2}, Artem S. Trifonov^{1,2}, Vladislav V. Shorokhov¹, Ivan V. Bozhev¹, Vladimir A. Krupenin¹

¹ Faculty of Physics, M.V.Lomonosov Moscow State University,
Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russian Federation
vladimir.krupenin@phys.msu.ru

²Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics,
Leninskie gory, GSP-1, Moscow 119991, Russian Federation

Abstract: We report on technological methods for fabrication and investigation of the following nanoelectronic structures from silicon-on-insulator (SOI):

- high sensitive field/charge sensors based on single electron transistor (SET) from high doped silicon including transistor where the effective island is a single As dopant atom,

- high sensitive field/charge sensors based on field effect transistor with nanowire channel (FET).

We made a deep analysis of implementation of the SOI-based devices in physical, chemical, biological and medical applications.

Keywords: silicon-on-insulator, single-electron transistor, field-effect transistor, nanowire, biosensor.

Нанoeлектронные структуры на основе кремния на изоляторе

^{1,2}Преснов Д.Е., ^{1,2}Трифонов А.С., ¹Шорохов В.В., ¹Божьев И.В.,
¹Крупенин В.А.

¹ МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, Дом 1, строение 2, Физический Факультет, г. Москва, 119991, Российская Федерация,
vladimir.krupenin@phys.msu.ru

² Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В.Скобелевца
МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, дом 1, строение 2, г. Москва,
119991, Российская Федерация.

Аннотация: Представлены методы изготовления и экспериментального исследования нанoeлектронных структур на основе кремния на изоляторе (КНИ): - сверхчувствительных полевых/зарядовых сенсоров, таких как одноэлектронный транзистор из сильно легированного кремния, включая его реализацию на одиночном примесном атоме, полевой транзистор с каналом нанопроводом. Проанализированы возможности использования устройств на основе КНИ для применения в различных областях физики, химии, медицины и биологии.

Ключевые слова: кремний на изоляторе, одноэлектроника, полевой транзистор, нанопровод, биосенсор.

1. Введение

На сегодняшний день среди полевых и зарядовых сенсоров наиболее чувствительными являются одноэлектронный транзистор [1] и полевой транзистор с каналом-нанопроводом [2]. Первый из них обладает сверхвысокой зарядовой чувствительностью $\delta Q \sim 10^{-6} e/\Gamma \text{ц}^{1/2}$ [3], а второй немного уступает ему, однако, имеет более широкий диапазон рабочих температур. Настоящая работа посвящена исследованию сенсоров на основе этих двух наноструктур.

Наиболее перспективным материалом для изготовления вышеупомянутых структур в настоящее время считается кремний на изоляторе (КНИ).

2. Методика изготовления образцов

Полевой транзистор с каналом-нанопроводом изготавливался на основе КНИ традиционными методами микроэлектроники с использованием процессов фото- и электронной литографии, реактивно-ионного травления, вакуумного осаждения. Использовались металлические (Ti) контакты к областям стока и истока, образующие барьеры Шоттки.

В качестве материала для изготовления экспериментальных образцов наноструктур полевых транзисторов с каналом-нанопроводом использовались пластины КНИ, обладающие следующими характеристиками:

- верхний слой кремния p-типа допирован бором, толщина — 110 нм, удельное сопротивление - 7-12 Ом·см;
- изолирующий диэлектрик SiO₂, толщина — 200 нм,
- поддерживающая кремниевая пластина p-типа допирована бором, толщина – 725 мкм, удельное сопротивление - 7-12 Ом·см.

Структуры транзисторов формировались в верхнем слое кристаллического кремния методом реактивно-ионного травления

кремния через металлическую маску. В качестве материала подводящих проводов использовались слои титана толщиной 30 нм.

Для изготовления экспериментальных образцов наноструктур одноэлектронных транзисторов использовались пластины КНИ с толщиной верхнего слоя кремния 55 нм и толщиной изолирующего диэлектрика — 145 нм. Верхний слой кремния легировался методом ионной имплантации ионами мышьяка As^+ практически до предела растворимости легирующей примеси в кремнии и обладал квазиметаллической проводимостью, что позволяло проводить измерения при низких температурах, вплоть до единиц милликельвин.

Процесс формирования структуры одноэлектронного транзистора в верхнем слое КНИ практически аналогичен тому, что использовался при изготовлении транзисторов с каналом-нанопроводом. Подводящие провода и контактные площадки формировались в проводящем слое кремния.

Экспериментальный образец модифицировался в серии процессов изотропного травления до тех пор, пока на вольтамперной характеристике не появлялся участок Кулоновской блокады.

3. Результаты измерений

Для полевых сенсоров наиболее важным является направление их совершенствования, связанное с минимизацией собственных шумов транзистора и поиском рабочей области сенсора с максимальным отношением сигнала к шуму.

Оптимальной рабочей областью для сенсора будет являться область с наибольшим отношением сигнал/шум, т.е. точка с наибольшим отношением крутизны сигнальной характеристики (dI/dV_3) к квадратному корню из спектральной плотности флуктуаций тока в единичной полосе частот в этой точке.

Амплитуда тока, спектральные плотности его флуктуаций измерялись в диапазоне частот 0.2 – 500 Гц при 5000 значениях напряжения исток-сток и исток-затвор. Затвором транзистора служила кремниевая подложка пластины КНИ. Каждому измеренному (ток) и вычисленному (dI/dV_3 , сигнал/шум) значениям соответствовало определенное значение затворного и транспортного (сток-исток) напряжений из матрицы их величин размером 50×100 . Отношение сигнала к шуму вычислялось для частоты 10 Гц, выбранной по аналогии с одноэлектронными транзисторами, анализ которых будет проведён ниже.

Зарядовая чувствительность транзисторов оценивалась по формуле:

$$\delta Q = (dQ/dI) \cdot \delta I = C_3 \cdot S_I^{1/2} \cdot \Delta f / (dI/dV_3) = \{S_I^{1/2} \cdot \Delta f / (dI/dV_3)\} \cdot C_3$$

где dI/dQ - отклик тока на изменение заряда на нанопроводе, а C_3 взаимная ёмкость нанопровода и подложки-затвора. C_3 оценивалась как ёмкость цилиндрического провода к бесконечной заземленной плоскости и составила величину 0.2 фФ при длине провода 2 мкм и его диаметре 100 нм. В результате зарядовая чувствительности транзисторов составила величину в диапазоне 0.1 – 0.5 $e/\Gamma\text{ц}^{1/2}$.

Основные исследования одноэлектронных структур проводились при температурах от 15 мК до 4.2 К, когда проявлялись характерные особенности поведения одноэлектронных структур: Кулоновская блокада транспортного тока и периодическая зависимость его величины от напряжения на затворе транзистора. Порог Кулоновской блокады V_{Π} определялся по пересечению асимптоты ВАХ в максимуме блокады с осью абсцисс (напряжение сток-исток) и составил величину 2.2 мВ. Зарядовая энергия E_C в единицах температуры оказалась выше 25 К.

Более подробно характеристики транзисторов исследовались в рефрижераторе растворения при температуре 15 мК. Характерная особенность исследуемых кремниевых транзисторов с резистивными переходами — присутствие блокады транспортного тока в состоянии максимальной проводимости в области малых напряжений смещения (100 - 200 мкВ). Данная особенность является нехарактерной для традиционных металлических одноэлектронных транзисторов с туннельными переходами на основе AlO_x , однако наблюдалась в работе [4], где переходами служили резистивные полосы на основе тонких гранулированных плёнок хрома. Отдельные гранулы таких полосок разделены туннельными контактами высокой прозрачности ($R < R_Q$), проводимость которых является нелинейной функцией приложенного напряжения и достигает минимума в области малых напряжений. У кремниевых одноэлектронных транзисторов, исследуемых в настоящей работе, данную особенность можно объяснить аналогичным образом.

Измеренные модуляционные характеристики позволили определить период модуляции 155 мВ/е и ёмкость острова к затвору $C_3 = 1$ аФ. Минимальный порог зарядовой чувствительности составил величину $1.6 \cdot 10^{-4} e/\Gamma\text{ц}^{1/2}$ на частоте 10 Гц. Эта величина соответствовала транспортному току транзистора $I = 0.5$ нА и напряжению сток-исток $V_{\text{си}} = -2$ мВ. Увеличение напряжения смещения до 4.5 мВ и, как результат, транспортного тока до 3 нА приводило к увеличению порога зарядовой чувствительности до значения $2.5 \cdot 10^{-4} e/\Gamma\text{ц}^{1/2}$.

Одноэлектронный транзистор с предельно малыми размерами демонстрировал Кулоновскую блокаду туннельного тока уже при температуре жидкого азота ($T=77\text{ K}$). Высокое блокадное напряжение ($> 50\text{ мВ}$) указывало на сверхмалые размеры рабочего зарядового центра транзистора. Оценка сверху суммарной ёмкости рабочего зарядового центра транзистора и его характерных размеров составило, соответственно, $C_{\Sigma} \leq 0,8\text{ аФ}$ и $r \leq 3\text{ нм}$. Подробные измерения транспортных характеристик транзистора при $T=4.2\text{ K}$ показали наличие характерных ступеней тока на диаграммах стабильности, что является доказательством дискретности энергетического электронного спектра рабочего зарядового центра — острова транзистора.

Диаграмма стабильности демонстрировала уменьшение размеров блокадных ромбов по мере увеличения затворного напряжения, что свидетельствует о неэквидистантном энергетическом спектре электронных состояний, характерном для примесных атомов. Данная картина может быть объяснена, если островом транзистора является одиночный примесный атом, попавший в резистивный переход одноэлектронного транзистора. Уменьшение размеров ромбов при увеличении затворного напряжения указывает [5] на донорный тип примеси, реализующий такое состояние. Наиболее вероятным в этой роли в данном случае представляется одиночный атом мышьяка. Из грубых оценок на основе принципа неопределённости размер такого атома составляет

$$r \sim \hbar / (2m^* E_{As})^{1/2} \sim 3\text{ нм},$$

где m^* — эффективная масса электрона в кремнии, которая при данной температуре из различных литературных данных составляет 0.2-0.3 массы электрона, а E_{As} — глубина залегания энергетического уровня мышьяка в запрещенной зоне кремния относительно зоны проводимости, составляющая 54 мэВ. Более точный квантовомеханический расчёт даёт значения 2.2 нм для первой боровской орбиты электрона примесного атома [6]. Это значение совпадает с результатами измерений размеров одиночных примесных атомов, наблюдаемых в эксперименте методом сканирующей Кельвин-зондовой силовой микроскопии [7].

4. Заключение

На основе стандартных методов микроэлектроники разработан метод изготовления из кремния на изоляторе полевого транзистора с каналом-нанопроводом. Изготовлены полевые транзисторы с металлическими (Ti) контактами к каналу-нанопроводу (диаметр 100 нм, длина 2 мкм), исследованы их шумовые характеристики в диапазоне

частот 0.2–500 Гц ($T=300$ К) и проведена оценка пороговой зарядовой чувствительности. Замена канала традиционного транзистора нанопроводом создает уникальные возможности — малые поперечные размеры НП и тонкий естественный окисел позволяют существенно увеличить влияние на его проводимость заряженных частиц, приближающихся к поверхности канала. На этом основано детектирование биологических объектов (вирусов и белков), сравнимых с размерами НП. Разработка на его основе высокочувствительных биосенсоров является на сегодня одной из актуальных задач в биологии и медицине.

Представлен технологический метод изготовления одноэлектронных структур на основе КНИ. Проведено исследование транспортных и шумовых характеристик экспериментальных образцов одноэлектронных транзисторов. Минимальное значение уровня зарядового шума составило величину $1.6 \cdot 10^{-4} \text{ e/Гц}^{1/2}$ на частоте 10 Гц. Изготовлен и исследован одноэлектронный транзистор на основе единичного примесного атома As в кремнии. Проведено изучение и анализ его характеристик.

Достигнутые параметры транзисторов на основе КНИ, в совокупности с возможностью интеграции их в кремниевую технологию, позволяют рассматривать полевой и одноэлектронный транзисторы в качестве кандидатов для высокочувствительного полевого сенсора для зондовых систем сканирующего и локального типов с нанометровым пространственным разрешением.

Полученные результаты позволяют рассчитывать на развитие нового направления нанoeлектроники - одноэлектроники на примесных зарядовых центрах, которое в настоящее время также часто называют одноатомной одноэлектроникой. Базовыми рабочими элементами одноатомной одноэлектроники будут одиночные примесные атомы, взаимодействующие электростатически и посредством туннельного обмена электронами.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа подготовлена по итогам исследований одноэлектронных транзисторов, проведенных в рамках проекта Российского Научного Фонда № 16-12-00072 и исследований полевых транзисторов с каналом нанопроводом проведенных в рамках проектов Российского Фонда Фундаментальных Исследований № 14-07-00828 и 16-29-03266. Авторы выражают признательность А.Б. Зорину и С.В. Лотхову (РТВ, Брауншвейг, ФРГ) за помощь в проведении низкотемпературных измерений.

Список литературы

- [1] Averin D. V., Likharev K. K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions // *Journal of Low Temperature Physics*. 1986.—Feb. Vol. 62, no 3-4. pp. 345–373.
- [2] Salfi J., Savelyev I. G., Blumin M. et al. Direct observation of single-charge-detection capability of nanowire field-effect transistors // *Nature Nanotechnology*. 2010.—Sep. Vol. 5, no. 10. pp. 737–741
- [3] Likharev K. Single-electron transistors: Electrostatic analogs of the DC SQUIDS // *Magnetics, IEEE Transactions on*. 1987. Vol. 23, no. 2. pp. 1142–1145.
- [4] Krupenin V. A., Zorin A. B., Savvateev M. N. et al. Single-electron transistor with metallic microstrips instead of tunnel junctions // *Journal of Applied Physics*. 2001. Vol. 90, no. 5. pp. 2411–2415.
- [5] Pierre M., Wacquez R., Jehl X. et al. Single-donor ionization energies in a nanoscale CMOS channel // *Nature Nanotechnology*. 2010. Vol. 5, no 2. pp. 133–137.
- [6] Rue. F. J., Pok W., Goh K. E. J. et al. Electronic properties of atomically abrupt tunnel junctions in silicon // *Physical Review B*. 2007. Vol. 75, no. 12. pp. 121303.
- [7] Ligowski M., Moraru D., Anwar M. et al. Observation of individual dopants in a thin silicon layer by low temperature Kelvin Probe Force Microscope // *Applied Physics Letters*. 2008.—Oct. Vol. 93, no. 14. pp. 142101–142101–3.

References

- [1] Averin D. V., Likharev K. K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions // *Journal of Low Temperature Physics*. 1986.—Feb. Vol. 62, no 3-4. pp. 345–373.
- [2] Salfi J., Savelyev I. G., Blumin M. et al. Direct observation of single-charge-detection capability of nanowire field-effect transistors // *Nature Nanotechnology*. 2010.—Sep. Vol. 5, no. 10. pp. 737–741
- [3] Likharev K. Single-electron transistors: Electrostatic analogs of the DC SQUIDS // *Magnetics, IEEE Transactions on*. 1987. Vol. 23, no. 2. pp. 1142–1145.
- [4] Krupenin V. A., Zorin A. B., Savvateev M. N. et al. Single-electron transistor with metallic microstrips instead of tunnel junctions // *Journal of Applied Physics*. 2001. Vol. 90, no. 5. pp. 2411–2415.
- [5] Pierre M., Wacquez R., Jehl X. et al. Single-donor ionization energies in a nanoscale CMOS channel // *Nature Nanotechnology*. 2010. Vol. 5, no 2. pp. 133–137.
- [6] Rue. F. J., Pok W., Goh K. E. J. et al. Electronic properties of atomically abrupt tunnel junctions in silicon // *Physical Review B*. 2007. Vol. 75, no. 12. pp. 121303.
- [7] Ligowski M., Moraru D., Anwar M. et al. Observation of individual dopants in a thin silicon layer by low temperature Kelvin Probe Force Microscope // *Applied Physics Letters*. 2008.—Oct. Vol. 93, no. 14. pp. 142101–142101–3.

Acknowledgements

The paper is based on the research results of the single-electron transistors, which was done in the framework of the Russian Science Foundation, project № 16-12-00072, and results of the field-effect transistor with nanowire channel research which was done in the framework of the Russian Foundation for Basic Research projects No. 14-07-00828 and 16-29-03266. The authors are grateful to A.B. Zorin and S.V. Lotkhov (PTB, Braunschweig, Germany) for the help in a low temperature measurements.

Investigation of the effect of the combined capacity of the plasma in the etching of gallium arsenide to produce nanometer resolution

Viktor S. Klimin, Andrey V. Eskov, Maxim S. Solodovnik

South Federal University
Taganrog, 347900, Russian Federation
Kliminv.s@mail.ru

Abstract: In work are present the experimental results of plasma chemical etching of the surface samples of gallium arsenide. Showing etching rate depending on the different values of the power sources of plasma inductively coupled and capacitively. The analysis of the surface by atomic force microscopy, the etched surface roughness was studied. The rate of etching of GaAs with increasing power, and thus the bias voltage increases.

Keywords: Nanotechnology; nanostructures; nanomaterials; gallium arsenide, plasma etching, planar technology.

Исследование влияния мощностей комбинированной плазмы при травлении арсенида галлия для получения нанометрового разрешения

Климин В.С., Еськов А.В., Солодовник М.С.

Южный Федеральный Университет
г. Таганрог, 347900, Российская Федерация
Kliminv.s@mail.ru

Аннотация: В работе представлены экспериментальные результаты плазмохимического травления поверхности образцов арсенида галлия. Показаны зависимости скорости травления от различных значений мощности источников плазмы индуктивно-связанной и емкостной. Проведен анализ поверхности методом атомно-силовой микроскопии, изучена шероховатость вытравленной

поверхности. Показано, что скорость травления арсенида галлия при увеличении мощности, а соответственно и напряжения смещения возрастает.

Ключевые слова: Нанотехнологии; наноструктуры; наноматериалы; арсенид галлия, плазмохимическое травление, планарные технологии.

1. Введение

Полупроводниковые соединения группы АЗВ5 являются одними из наиболее перспективных материалов в твердотельной электронике[1-5]. Область применения этих материалов чрезвычайно широка: от дискретных диодов до приборов на гетеропереходах. Основными областями применения этого ряда соединений и твердых растворов на их основе является производство широкого спектра светоизлучающих диодов [6-9].

Одной из многочисленных проблем в технологии создания твердотельных электронных устройств на основе соединений АЗВ5 является поиск эффективных способов обработки и травления поверхности монокристаллов, которые обеспечивали бы требуемое качество поверхности (минимальную микрошероховатость и дефектность), неизменность химического состава поверхности перед формированием очередного слоя гетероструктуры и возможность управления этими характеристиками[10-12]. Одним из перспективных методов травления подобных структур является метод плазменного травления. Преимуществом данного метода по сравнению с жидкостным травлением является высокая анизотропия процесса и отсутствие необходимости проведения дополнительных операций для удаления с поверхности продуктов реакции и сторонних примесей, содержащихся в исходных реагентах [13-15].

2. Методическая часть

Для экспериментального исследования взаимодействия плазмы с GaAs в условиях индуктивно-связанной плазмы использовался цилиндрический проточный плазмохимический реактор. Давление смеси плазмообразующих газов составляло 2 Па. В процессах использовались газы из баллонов с маркой «ОСЧ».

Для проведения плазмохимического травления использовалась установка STE ICРe68. Диаметр обрабатываемых пластин – до 100 мм, с

возможностью использования образцов произвольной формы, что позволяет применять платформу как для прикладных исследований и разработок, так и для производственного выпуска продукции. Установка оснащена реактором с продуманной системой подачи газов, позволяет оптимизировать однородность проведения процессов и снизить время откочки, также в установке предусмотрено гелиевое охлаждение для длительных процессов травления [5].

В качестве экспериментальных образцов были использованы фрагменты пластин GaAs, имеющие поверхность после стандартной жидкостной полировки. Подготовка подложки арсенида галлия заключалась в том, что на поверхности наносился рисунок из защитной маски плазмостойкого фоторезиста.

Контроль поверхности после обработки в плазме проводился посредством зондовой нанолaborатории NTegra с использованием «полуконтактного» режима. Перед проведением измерений на микроскопе фоторезистивная маска удалялась.

Травление экспериментальных образцов проводилось в два этапа. На первом этапе исследовалось влияние мощности источника индуктивно-связанной плазмы, при постоянной мощности $W_{\text{рит}} = 35$ Вт. На втором этапе выявлялось влияние мощности источника емкостной плазмы обеспечивающей реактивное ионное травление, при постоянной мощности $W_{\text{исп}} = 300$ Вт. На каждом этапе обработка проводилась для трех групп образцов, в которых менялась мощность плазмы, в каждой группе образцы подвергались обработке в плазме в течении различного времени, все остальные параметры процесса оставались неизменными.

3. Результаты и их обсуждения

Для образцов, обработанных в плазме на первом этапе, были получены АСМ-изображения. По полученным АСМ-изображениям строилась профиллограмма, по которой определялась глубина травления. Так же с помощью специализированного пакета «Image Analysis» оценивалась шероховатость вытравленной поверхности.

На рисунке 1 показано АСМ-изображение и профиллограмма полученные сканированием образца вытравленного при мощности источника индуктивно-связанной плазмы $W_{\text{исп}} = 400$ Вт в течение $t = 2$ минут. Толщина вытравленного слоя составила $h = 28,2$ нм., средняя квадратичная шероховатость вытравленной области составила $S = 0,542$ нм.

Как уже говорилось в данной работе, в технологии плазмохимического травления является показатель качества вытравленной

поверхности, а также анизотропия процесса. На рисунке 1 показаны АСМ - изображения образца, обработанных в разряде индуктивно связанной плазмы.

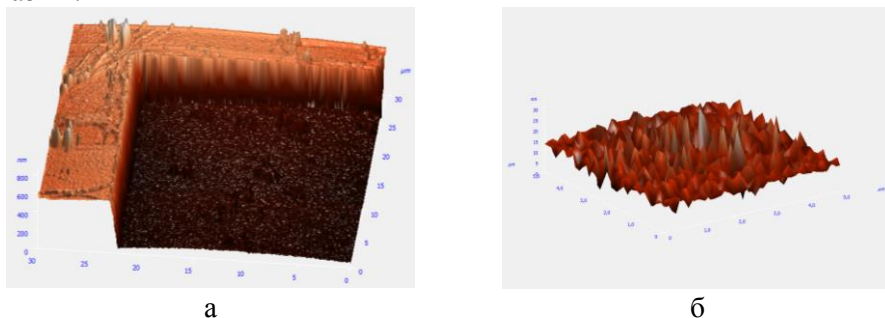


Рис. 1. АСМ- изображения экспериментального образца: а) трехмерное изображение образца; б), двумерное изображение поверхности вытравленной области.

Fig. 1. AFM image of a sample of the pilot: a) a three-dimensional image of the sample; b) a two-dimensional image of the surface of the etched area.

Средняя толщина вытравленного слоя составила $h = 512 \pm 4$ нм, а скорость травления на данном временном участке составляет $V = 8,5$ нм/сек. Средняя квадратичная шероховатость вытравленной области составила $S = 3,570$ нм.

Анизотропию вытравленной поверхности оценим по отношению скоростей травления в различных направлениях. Профиллограммы двух боковых вытравленных поверхностей показаны на рисунке 2.

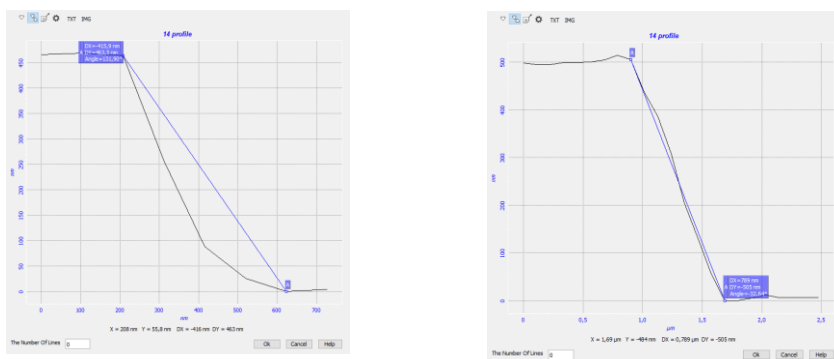


Рис. 2. Профиль вытравленной области.

Fig. 2. Profile etched area.

Скорость травления в направлении $[100]$ $V_{[100]} = 8,5$ нм/сек. Скорость травления в направлении $[110]$ $V_{[110]} = 6,91$ нм/сек, что соответствует минимальной скорости травления. Скорость травления в направлении $[111]$ $V_{[111]} = 13,15$ нм/сек, что соответствует максимальной скорости травления. На рисунке 3 показаны АСМ - изображения вытравленной области и шероховатости вытравленной поверхности.

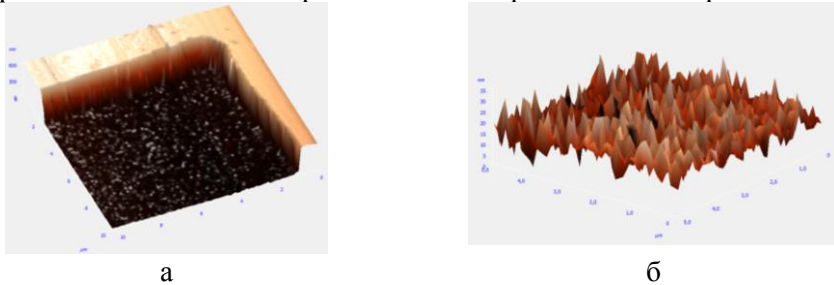


Рис. 3. АСМ- изображения экспериментального образца: а) трехмерное изображение образца; б), двумерное изображение поверхности вытравленной области
Fig. 3. AFM image of a sample of the pilot: a) a three-dimensional image of the sample; b) a two-dimensional image of the surface of the etched area

Средняя толщина вытравленного слоя составила $h = 460 \pm 5$ нм, а скорость травления на данном временном участке составляет $V = 7,5$ нм/сек. Средняя квадратичная шероховатость вытравленной области составила $S = 4,635$ нм.

Анизотропию вытравленной поверхности оценим по отношению скоростей травления в различных направлениях. Профиллограммы двух боковых вытравленных поверхностей показаны на рисунке 4.

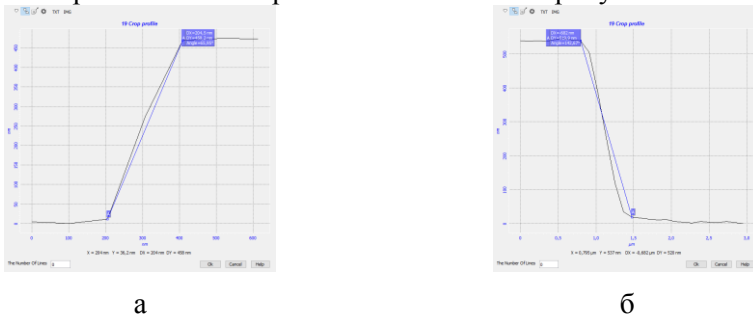


Рис. 4. АСМ - изображения экспериментального образца: а) кристаллографическое направление $[110]$; б) образца: а) кристаллографическое направление $[111]$
Fig. 4. AFM - experimental sample image: a) crystallographic direction $[110]$; b) crystallographic direction $[111]$

Скорость травления в направлении $[100]$ $V_{[100]} = 7,5$ нм/сек. Скорость травления в направлении $[110]$ $V_{[110]} = 3,4$ нм/сек, что соответствует минимальной скорости травления. Скорость травления в направлении $[111]$ $V_{[111]} = 11,36$ нм/сек, что соответствует максимальной скорости травления.

4. Заключение

Проведено исследование влияния режимов процесса плазмохимического травления в комбинированной плазме на шероховатость вытравленной поверхности и анизотропию в среде технологических газов BCl_3/Ar . Определены скорости травления при различных величинах мощности емкостной и индуктивно-связанной плазмы. Показаны величины средней квадратичной шероховатости для режимов, показанных в работе. Показано, что при больших значениях мощности источника индуктивно-связанной плазмы будет толщина вытравленного слоя увеличивается, что связано с большим количеством частиц, отвечающих за образование летучих соединений с продуктами реакций реактивно-ионного травления. Было установлено, что при увеличении мощности источника индуктивно-связанной плазмы шероховатость остается относительно постоянной, а при уменьшении мощности источника емкостной плазмы уменьшается напряжения смещения и соответственно уменьшается средняя квадратичная шероховатость вытравленной поверхности. При комбинировании режимов, можно подобрать оптимальный режим травления, который позволит, наиболее точно контролировать толщину вытравленного слоя и шероховатость вытравленной поверхности.

Источники финансирования и выражение признательности

Доклад подготовлен по итогам исследования, проведенного в рамках проектов Российского научного фонда (проект №15-19-10006).

Список литературы References

- [1] White A. M., Portecus P., Sherman W. F., Stadtmuller A. A. Photocapacitance. Measurements on Deep levels in GaAs under Hydrostatic Pressure // Solid State Phys. 1987. V.10, №17 P. 1473-1476.
- [2] Mircea A., Mitonnean A. A. Study of Electron Trap in Vapour Phase Epitaxial GaAs // J. Appl. Phys. 1999. V. 85. № 2. P. 234-247.
- [3] Sakurai-Hiromi, Yamanaka Zusao, Yoshida Kohichi, Ohshima Naoto, Suzuki Katsuo. Ultrasonic. Attenuation in p-type GaSb // G. Appl Phys. 1984. V. 56. № 6. P. 1613-1616.

- [4] Mitrokhin V. I., Rembeza S. I., Sviridov V.V., Yaroslavl'tsev N. P., Acoustic Probing of Deep Centers in III-V semiconductors // *Phys. Status Sol. (a)*. 1990/V. 119 №2 P. 535-544
- [5] Lagouski G, Jatos H. C., Parsey G. M., Wada K., Kaminska M., Walukiewicz W. Origin of the 0.82 eV Electron Trap in GaAs and its Annihilation by Shallow Donors // *Appl. Phys. Letts.* V. 40. № 4. 1982. P. 342-344.
- [6] Aronov D. A., Mamatkulov V. V. The Capacitance and Characteristics Relaxation Times at Carrier Exclusion in Compensated Semiconductors with Deep Traps and Non-Injecting Contacts // *Phys. Stat. Sol.* 1984. A. 81. № 1/ P/ 85-89.
- [7] Joyce B.A., Vvedensky D.D., Bell G.R., Belk J.G., Itoh M., Jones T.S. Nucleation and growth mechanisms during MBE of III-V compounds // *Mat. Sci. Eng. B.* – 1999. – Vol. 67. – P. 7-16.
- [8] LaBella V. P., Bullock D. W., Ding Z., Emery C., Harter W. G., Thibado P. M. Monte Carlo derived diffusion parameters for Ga on the GaAs(001)-(2x4) surface: A molecular beam epitaxy-scanning tunneling microscopy study // *J. Vac. Sci. Tech. A.* – 2000. – Vol. 18, № 4. – P. 1526-1531.
- [9] Ohtake A., Ozeki M. In situ observation of surface processes in InAs/GaAs(001) heteroepitaxy: The role of As on the growth mode // *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – Vol. 78. – P. 431.
- [10] Riel B.J., Hinzer K., Moisa S., Fraser J., Finnie P., Piercy P., Fafard S., Wasilewski Z.R. InAs/GaAs(100) self-assembled quantum dots: arsenic pressure and capping effects // *J. Cryst. Growth.* – 2002. – Vol. 236. – P. 145-154.
- [11] Morgan C.G., Kratzer P., Scheffler M. Arsenic Dimer Dynamics during MBE Growth: Theoretical Evidence for a Novel Chemisorption State of As₂ Molecules on GaAs Surfaces // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 82, 24. – P. 4886-4889.
- [12] Shchukin V., Scholl E., Kratzer P. Thermodynamics and Kinetics of Quantum Dot Growth // *Semiconductor Nanostructures* / ed. Bimberg D. – Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [13] Daweritz L., Ploog K. Contribution of reflection high-energy electron diffraction to nanometre tailoring of surfaces and interfaces by molecular beam epitaxy // *Semicond. Sci. Tech.* – 1994. – Vol. 9, № 2. – P. 123-136.
- [14] Frenkel J. Theorie der Adsorption und verwandter Erscheinungen // *Zeitschrift für Physik.* – 1924. – Vol. 26, № 1. – P. 117-138
- [15] Nakamura S. High-power GaN p-n junction blue-light-emitting diodes // *Annu.Rev.Mater.Sci.* 1998. V.28.P. 125-152.

Acknowledgements

This research has been supported by the Results obtained using the Center for collective use of equipment and the Research and Education Center, "Nanotechnologies" South Federal University. This work was supported by the Russian Science Foundation Grant No. 15-19-10006..

Research of influence of the heating rate on the parameters of carbon nanotubes growth by PECVD

Nikolay N. Rudyk, Oleg I. Il'in, Alexandr A. Fedotov, Marina V. Il'ina
 Institute of Nanotechnologies, Electronics, and Electronic Equipment Engineering
 of Southern Federal University
 2, Shevchenko St., Taganrog, Rostov-on-Don reg.
 347922, Russian Federation
 Ph.: (903) 4637664, e-mail: nnrudyk@sfedu.ru

Abstract: Experimental study of the effect of heating rate of the sample on the parameters of carbon nanotubes grown by PECVD were conducted. The substrate was Ni/Cr/Si structure. Results of the analysis of the data showed that at 750 °C occurs the growth of CNTs with the required height and the lowest variance of geometrical parameters. The increase of heating time to 45 min resulted in an additional decrease in the CNT diameters dispersion.

Keywords: PECVD, carbon nanotubes.

Исследование влияния скорости нагрева на параметры углеродных нанотрубок выращиваемых методом PECVD

Рудык Н.Н., Ильин О.И., Федотов А.А., Ильина М.В.
 Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения
 Южного федерального университета
 ул. Шевченко, 2, корп. «Е», Таганрог, Ростовской обл., 347922, Россия
 тел.: (903) 4637664, e-mail: nnrudyk@sfedu.ru

Аннотация: Проведены экспериментальные исследования влияния скорости этапа нагрева образца на параметры углеродных нанотрубок, выращиваемых методом PECVD. В качестве подложки использовалась структура Ni/Cr/Si. Результаты анализа полученных данных показали, что при температуре 750 °C происходит рост УНТ с необходимой высотой и с наименьшей дисперсией геометрических размеров. При этом увеличение времени нагрева до 45 мин приводит к дополнительному уменьшению дисперсии диаметров УНТ.

Ключевые слова: PECVD, углеродные нанотрубки, химическое осаждение из газовой фазы в плазме.

1. Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ), проявляя уникальные электрические, механические и химические свойства [1], находят применение в широком диапазоне областей электронной техники [2]. Невысокая работа выхода и высокое аспектное [3] соотношение позволяет использовать УНТ в автоэмиссионных устройствах [4] а также в ионизационных газовых сенсорах [5]. Обладая радиусом кривизны порядка единиц-десятков нанометров, УНТ вносят неоднородность электрического поля вокруг своих вершин, таким образом снижая рабочее напряжение необходимое для функционирования автоэмиссионных устройств [6]. Кроме того, УНТ находят применение в качестве чувствительных элементов сорбционных газовых сенсоров [7], устройств микро- и нанoeлектромеханики [8], мемристоров [9].

Наиболее перспективным методом формирования УНТ для создания устройств нанoeлектроники является химическое осаждение из газовой фазы в плазме (plasma enhanced chemical vapor deposition - PECVD) [10], которое позволяет получать УНТ с заданными параметрами в заданном месте будущего устройства [11]. При этом наличие большого количества управляемых технологических параметров процесса открывает широкие возможности при синтезе УНТ [12]. Кроме того, в отличие от метода химического осаждения из газовой фазы (CVD), наличие плазмы в методе PECVD предоставляет дополнительные возможности контроля ориентации УНТ и их геометрических параметров в процессе выращивания [13].

Таким образом, экспериментальные исследования условий формирования УНТ и выявление влияния каждого фактора процесса PECVD на процесс формирования каталитических центров (КЦ) и УНТ на их основе, с целью выбора оптимальных режимов и параметров выращивания УНТ является актуальной задачей. Процесс PECVD состоит из ряда этапов: нагрев, активация, непосредственно рост УНТ и охлаждение. Во время этапа нагрева происходит коагуляция пленки каталитического слоя (Ni) с последующим образованием КЦ. Размеры и форма КЦ определяют параметры выращиваемых на них УНТ. Поэтому в данной работе проводились исследования влияния скорости нагрева образцов на параметры формируемых УНТ.

2. Экспериментальные исследования

Особенность установки PECVD заключается в том, что температура на этапе нагрева является также и температурой роста УНТ. Таким образом температура и скорость ее нарастания влияют на геометрические размеры формируемых КЦ, и, соответственно, на последующий рост УНТ.

В качестве подложек использовалась структура Ni/Cr/Si с толщинами 10 нм/100 нм/350 мкм, соответственно. Пленки Cr и Ni формировались методом магнетронного распыления. Полученные образцы помещались в установку PECVD, после чего проводился их нагрев до температур 650, 750 и 800 °C за 20 и 45 мин (рис. 1). Таким образом были сформированы 6 партий образцов. Полученные образцы исследовались с помощью методов атомно-силовой (АСМ) и растровой электронной микроскопии (РЭМ).

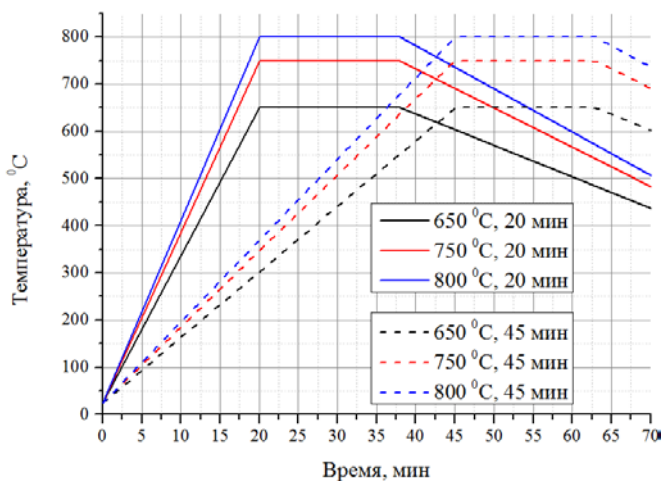
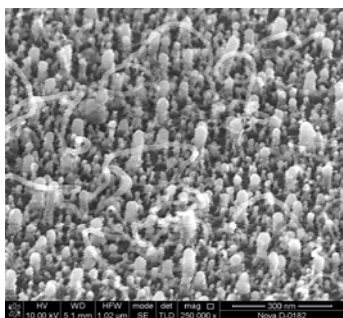


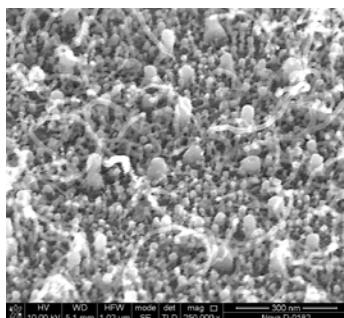
Рис. 1. Режимы получения УНТ с различной скоростью нагрева
Fig. 1. CNT growing conditions for various heating rate

3. Практические результаты

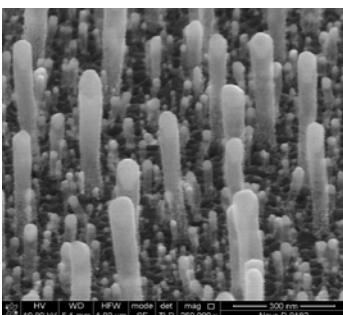
Полученные РЭМ-изображения выращенных УНТ представлены на рисунке 2, а-е. Параметры образцов с УНТ были сведены в таблицу 1.



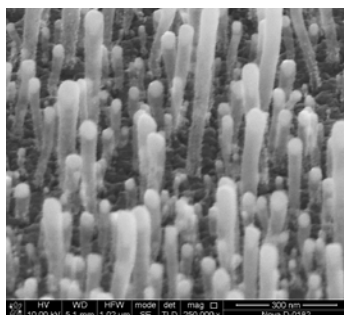
а)



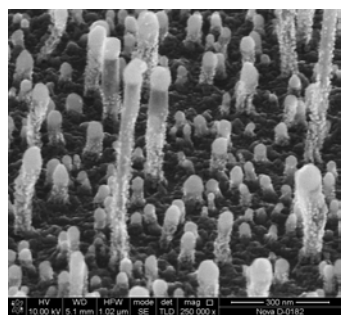
б)



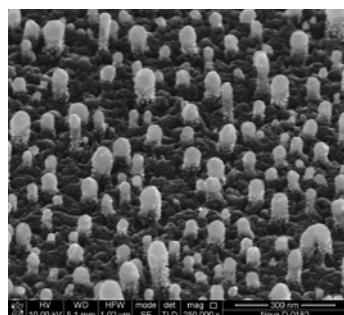
в)



г)



д)



е)

Рис. 2. РЭМ-изображения образцов с УНТ, нагретых за: а) 20 мин до $T = 650\text{ }^{\circ}\text{C}$; б) 45 мин до $T = 650\text{ }^{\circ}\text{C}$; в) 20 мин до $T = 750\text{ }^{\circ}\text{C}$; г) 45 мин до $T = 750\text{ }^{\circ}\text{C}$; д) 20 мин до $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$; е) 45 мин до $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$

Fig. 2. SEM images of samples with CNT heated for: a) 20 minutes to $T = 650\text{ }^{\circ}\text{C}$; б) 45 min to $T = 650\text{ }^{\circ}\text{C}$; в) 20 min to $T = 750\text{ }^{\circ}\text{C}$; г) 45 minutes to $T = 750\text{ }^{\circ}\text{C}$; д) 20 min to $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$; е) 45 minutes to $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$

Табл. 1. Параметры образцов с УНТ

Table 1. Parameters of CNT grown under various conditions

Партия образцов, №	Диаметр, нм	Высота, нм
1	30±3	43±5
2	31±3	45±5
3	54±8	300±35
4	45±4	280±30
5	60±7	120±10
6	65±6	85±10

На основе данных, полученных из РЭМ-изображений, можно сделать вывод о том, что при низких температурах нагрева (650 °С) скорость нагрева не оказывает значительного воздействия на параметры выращиваемых УНТ. В партиях образцов №1-2 диаметр УНТ составил около 30 нм, а высота около 45 нм. При повышении температуры до 750 °С в партии образцов №3, по сравнению с образцами из партий №1-2, наблюдается увеличение высоты УНТ (300±35 нм) и диаметра (54±8 нм), при этом увеличение времени нагрева до 45 мин приводит к снижению дисперсии диаметров КЦ на этапе нагрева. Массивы УНТ из партии №4 обладают большей однородностью нанотрубок (по сравнению с образцами из партии №3), диаметр которых составил 45±4 нм и высота 280±30 нм, что свидетельствует о поглощении мелких КЦ большими на этапе нагрева и активации, с последующей сублимацией больших капель. Нагрев образцов до 800 °С за 20 мин позволил сформировать массивы УНТ с диаметром 60±7 нм и высотой 120±10 нм, при этом наблюдались отдельные УНТ с высотами до 600 нм. Уменьшение скорости нагрева образца (800 °С за 45 мин) приводит к образованию УНТ с диаметром 65±6 нм и высотой 85±10 нм. Можно предположить, что при температуре 800 °С, увеличение времени формирования КЦ приводит к увеличению числа «прыжков» атомов кремния, и их выходу через слой Ni/Cr. Увеличение времени нагрева до 45 мин становится достаточным, чтобы насытить КЦ кремнием, а температура 800 °С приводит к лучшему растворению углерода в отравленном КЦ взаимодействуя с атомами Si. Как следствие, наблюдается пересыщение КЦ углеродом, с последующим науглероживанием катализатора и остановка процесса роста.

Также следует отметить, что нагрев свыше 650 °С, практически не оказывает влияния на диаметр выращиваемых УНТ, однако управление скоростью нагрева и температурой роста позволяют стабилизировать высоту УНТ на уровне 280±30 нм и уменьшить разброс диаметров нанотрубок 45±4 нм.

4. Заключение

В работе показано, что при температуре нагрева 750 °С происходит рост УНТ с наиболее подходящими для устройств электроники и сенсорики геометрическими параметрами. При этом уменьшение скорости нагрева при данной температуре ведет к дополнительному снижению разброса геометрических размеров УНТ. Рост низких УНТ при температуре 650 °С предположительно связан с недостатком термической энергии, а при температуре 800 °С происходит образование силицидов никеля, что ведет к снижению активности КЦ и снижению скорости роста УНТ. Полученные используются для отработки технологических режимов формирования УНТ с заданными параметрами для устройств микро-, наноэлектроники и сенсорики.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-29-14023 офи_м и № 16-37-00101 мол_a).

Список литературы

- [1] Popov, V.N. Carbon nanotubes: properties and application // Materials Science and Engineering. 2004. V. 43. P. 61-120.
- [2] Michael F. L. De Volder. Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications // Science. 2013. V.339. P. 535-539.
- [3] Synthesis, integration, and electrical properties of individual single-walled carbon nanotubes / Kong J. [et.al.] // Appl. Phys.— 1999.— Vol. 69.— 305—308.
- [4] St. Wilfert. Field emitter-based vacuum sensors // Vacuum. 2012. V.86. P. 556-571.
- [5] YunWang and John T. W. Yeow. A Review of Carbon Nanotubes-Based Gas Sensors // Journal of Sensors. 2009. P. 242-266.
- [6] W. B. Choi. Fully sealed, high-brightness carbon-nanotube field-emission display // Appl. Phys. Lett. 1999. V. 75. P.3129-3131.
- [7] T. Ueda, S. Katsuki, K. Takahashi, H.A. Narges, T. Ikegami, F. Mitsugi. Fabrication and characterization of carbon nanotube based high sensitive gas sensors operable at room temperature// Diamond & Related Materials. 2008. V. 17. P. 1586-1589.
- [8] C. Hierold, C. Stampfer, T. Helbling, A. Jungen, M. Tripp, D. Sarangi. CNT Based Nano Electro Mechanical Systems.
- [9] O. A. Ageev, Yu. F. Blinov, O. I. Il'in, A. S. Kolomiitsev, B. G. Konoplev, M. V. Rubashkina, V. A. Smirnov. Memristor effect on bundles of vertically aligned carbon nanotubes tested by scanning tunnel microscopy // Technical Physics. 2013. V. 58. P. 1831-1836.
- [10] Lance Delzeit, Alan Cassell, David Hash. Carbon nanotube growth by PECVD: a review // Plasma Sources Sci. Technol. 2003. V. 12. P. 205-216.
- [11] G.W. Ho Synthesis of well-aligned multiwalled carbon nanotubes on Ni catalyst using radio frequency plasma-enhanced chemical vapor deposition // Thin Solid Films. 2001. V. 388. P. 73-77.

[12] Агеев О.А., Ильин О.И., Климин В.С., Коноплев Б.Г., Федотов А.А. Исследование режимов формирования каталитических центров для выращивания ориентированных массивов углеродных нанотрубок методом PECVD / Химическая физика и мезоскопия. 2011, Т. 13. № 2. С. 226-231.

[13] Ageev, O.A, et al. Development of new metamaterials for advanced element base of micro- and nanoelectronics, and microsystem devices // Springer International Publishing Switzerland. Chapter In: Advanced Materials – Manufacturing, Physics, Mechanics and Applications.- 2016.- P. 563-580.- ISBN: 978-3-319-26324-3

References

[1] Popov, V.N. Carbon nanotubes: properties and application // Materials Science and Engineering. 2004. V. 43. pp. 61-120.

[2] Michael F. L. De Volder. Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications // Science. 2013. V.339. pp. 535-539.

[3] Synthesis, integration, and electrical properties of individual single-walled carbon nanotubes / Kong J. [et.al.] // Appl. Phys. 1999. Vol. 69. pp 305-308.

[4] St. Wilfert, Field emitter-based vacuum sensors // Vacuum. 2012. V.86. pp. 556-571.

[5] YunWang and John T. W. Yeow. A Review of Carbon Nanotubes-Based Gas Sensors // Journal of Sensors. 2009. pp. 242-266.

[6] W. B. Choi. Fully sealed, high-brightness carbon-nanotube field-emission display // Appl. Phys. Lett. 1999. V. 75. pp.3129-3131.

[7] T. Ueda, S. Katsuki, K. Takahashi, H.A. Narges, T. Ikegami, F. Mitsugi. Fabrication and characterization of carbon nanotube based high sensitive gas sensors operable at room temperature// Diamond & Related Materials. 2008. V. 17. pp. 1586-1589.

[8] C. Hierold, C. Stampfer, T. Helbling, A. Jungen, M. Tripp, D. Sarangi. CNT Based Nano Electro Mechanical Systems.

[9] O. A. Ageev, Yu. F. Blinov, O. I. Il'in, A. S. Kolomiitsev, B. G. Konoplev, M. V. Rubashkina, V. A. Smirnov. Memristor effect on bundles of vertically aligned carbon nanotubes tested by scanning tunnel microscopy // Technical Physics. 2013. V. 58. pp. 1831-1836.

[10] Lance Delzeit, Alan Cassell, David Hash. Carbon nanotube growth by PECVD: a review // Plasma Sources Sci. Technol. 2003. V. 12. pp. 205-216.

[11] G.W. Ho Synthesis of well-aligned multiwalled carbon nanotubes on Ni catalyst using radio frequency plasma-enhanced chemical vapor deposition // Thin Solid Films. 2001. V. 388. pp. 73-77.

[12] Ageev O. A., Il'in O. I., Klimin V.S., Konoplev B. G., Fedotov A. A. Research of modes of formation of catalytic centers for growing oriented carbon nanotubes arrays by PECVD // Chemical Physics and Mezoskopiya. 2011, T. 13. № 2. pp. 226-231. (In Russian).

[13] Ageev, O.A, et al. Development of new metamaterials for advanced element base of micro- and nanoelectronics, and microsystem devices // Springer International Publishing Switzerland. Chapter In: Advanced Materials – Manufacturing, Physics, Mechanics and Applications.- 2016.- pp. 563-580.- ISBN: 978-3-319-26324-3

Acknowledgements

This work was supported by Russian foundation for basic research (projects № 16-29-14023 ofi_m и № 16-37-00101 mol_a).

Investigations of diffusion processes in AlAs/GaAs resonant-tunneling heterostructures

Mstislav O. Makeev¹, Sergey A. Meshkov¹, Yury A. Ivanov¹

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russian Federation
mc.stiv@gmail.com

Abstract: The diffusion processes in AlAs/GaAs resonant-tunneling heterostructures by means of Raman spectroscopy were investigated. The estimation of Al in GaAs and Ga in AlAs diffusion coefficients based on the changes in the experimental Raman spectra and analysis of published data are determined.

Keywords: AlAs/GaAs heterostructure, resonant tunneling diode, degradation, diffusion coefficient, Raman scattering, thermal effect.

Исследования диффузионных процессов в AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктурах

¹Макеев М.О., ¹Мешков С.А., ¹Иванов Ю.А.

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
г. Москва, 105005, Российская Федерация
mc.stiv@gmail.com

Аннотация: Исследуются диффузионные процессы в AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктурах методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Получена оценка коэффициентов диффузии Al в GaAs и Ga в AlAs на основе изменений экспериментальных спектров комбинационного рассеяния света и анализа литературных данных.

Ключевые слова: AlAs/GaAs гетероструктура, резонансно-туннельный диод, деградация, коэффициент диффузии, комбинационное рассеяние света, термическое воздействие.

1. Введение

Одним из перспективных приборов современной наноэлектронной элементной базы является резонансно-туннельный диод (РТД) на основе многослойных AlAs/GaAs гетероструктур. Применения РТД в радиоэлектронике исследованы достаточно подробно. В частности, в работах авто-

ров [1-6] показаны преимущества использования РТД в нелинейных преобразователях СВЧ радиосигналов. Вопросы надежности РТД исследованы менее подробно, так, в работах авторов [7-10] упор делается на диффузионные процессы в структуре РТД, приводящие к постепенному отказу.

Для РТД на основе наноразмерных AlAs/GaAs гетероструктур проблемы прогнозирования и обеспечения надежности актуальны вследствие чувствительности вольт-амперной характеристики (ВАХ) диода к процессам деградации ввиду малости толщин слоев (до нескольких атомарных слоев). Интенсивность деградации гетероструктуры зависит как от конструкторско-технологических факторов (толщины слоев, элементный состав слоев, дефекты кристаллической решетки и др.), так и от эксплуатационных факторов (температура, ионизирующие излучения и т.д.), вызывающих ускорение диффузии.

Одним из показателей качества выращивания полупроводниковых гетероструктур с наноразмерными слоями является резкость (гладкость) их гетерограниц. Размытие границ AlAs/GaAs гетероструктур влияет на работоспособность не только резонансно-туннельных диодов, но и других приборов гетероструктурной электроники. Проблема оценки гладкости гетерограниц является актуальной, в частности, в технологии эпитаксиального выращивания полупроводниковых гетероструктур, а также при исследованиях надёжности приборов на основе гетероструктур с наноразмерными слоями.

В данной работе исследуются диффузионные процессы в AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктурах методом спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС).

2. Методика эксперимента

Объектом исследования служили образцы AlAs/GaAs модельной гетероструктуры, выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Модельная гетероструктура представляет собой половину резонансно-туннельной структуры РТД – один широкозонный барьерный слой между двумя узкозонными слоями. Ее структура: GaAs (20 нм) / AlAs (20 нм) / GaAs (200 нм) / GaAs (подложка). Размер образцов 20x20 мм.

Для ускорения диффузионных процессов осуществлялось термическое воздействие на подложки в универсальной вакуумной установке термической и химико-термической обработки. Точность поддержания температуры в установке составляет ± 5 °С. Параметры воздействия были вы-

браны следующими: температура 700 °С, атмосфера Ar, длительность 1 час.

Исследования AlAs/GaAs гетероструктур проводились методом спектроскопии комбинационного рассеяния света на комплексе NTEGRA Spectra. Основные технические характеристики прибора: источник возбуждающего излучения – твердотельный лазер LM473 с длиной волны 473 нм и выходной мощностью до 50 мВт, размер пятна фокусировки менее 1 мкм, спектральное разрешение 1 см⁻¹.

3. Результаты и обсуждение

РТД содержит двухбарьерную резонансно-туннельную структуру (PTC) (набор слоев AlAs/GaAs), приконтактные области (слои Si-легированного GaAs) и омические контакты. PTC состоит из слоев толщиной до нескольких атомарных слоев. Деградационные процессы – межслойная диффузия Al в PTC и Si в приконтактных областях – приводят к изменению формы потенциальных барьеров и ямы и, как следствие, к изменению условий токопереноса в структуре и изменению формы ВАХ. Деградация омических контактов приводит к увеличению контактного сопротивления и смещению ВАХ относительно исходного положения. Изменение ВАХ РТД является причиной изменения выходных электрических характеристик нелинейного преобразователя радиосигналов на основе РТД.

Качество изготовления AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктур предложено оценивать по величинам коэффициентов диффузии Al и Si в GaAs, отражающим интенсивность диффузионных процессов и скорость деградации гетероструктуры в процессе эксплуатации [10].

Анализ литературных данных по коэффициентам диффузии Al и Si в GaAs (обзор содержится в [9-10]) показал, что они сильно варьируются в зависимости от условий изготовления гетероструктур. Это связано с тем, что дефектность выращиваемых гетероструктур зависит от большого числа технологических факторов и дефектности исходной подложки.

Нами было проведено исследование образцов AlAs/GaAs гетероструктур методом КРС-спектроскопии до и после термического воздействия. Спектры комбинационного рассеяния представлены на Рис. 1.

В [11-17] приводятся решения прямой (расчет частот фононов в гетероструктуре) и обратной (определение характеристик гетероструктуры по данным значениям частот фононов) спектральных задач.

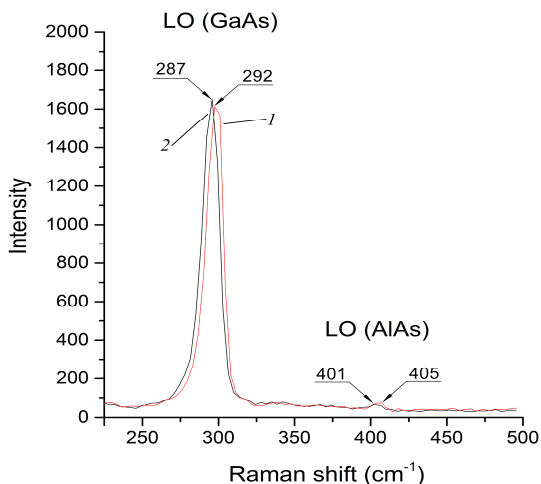


Рис. 1. Спектры образцов до (1) и после термического воздействия (2).

Fig. 1. Raman spectra of samples before (1) and after thermal effect (2).

В работах [11-12] было показано, что разупорядоченность гетерограниц сильно влияет на фоновый спектр в оптическом диапазоне, в то время как на частоты акустических фононов неидеальность гетерограниц оказывает очень слабое влияние. При этом данные о локализованных оптических фононах могут быть использованы для определения как толщин слоев гетероструктуры, так и толщин переходных слоев на гетерограницах [11-12].

В этих работах частоты локализованных оптических фононов в AlAs/GaAs сверхрешетках рассчитывались с использованием модели линейной цепочки, в которой учитывалось взаимодействие атомов с ближайшими и следующими за ними соседями. Детально эта методика описана в [13].

В работах [14-15] приводится математическая модель эффективных масс для локализованных LO-фононов (продольные оптические фононы), которая устанавливает взаимосвязь смещения пиков AlAs и GaAs LO-фононов и степени диффузионного размытия границ гетероструктуры.

При этом по величине сдвига пика AlAs LO-фононов можно определить коэффициент диффузии Al в GaAs, а по сдвигу пика GaAs LO-фононов можно определить коэффициент диффузии Ga в AlAs. Анализ измеренных нами спектров КРС показал, что сдвиг AlAs LO-фононов составил $\sim 4 \text{ см}^{-1}$, а сдвиг GaAs LO-фононов $\sim 5 \text{ см}^{-1}$.

Основываясь на результатах решения обратной задачи в [11-15] нами была проведена оценка коэффициентов диффузии Al в GaAs и Ga в AlAs. По порядку величины они оказались равны 10^{-19} см²/с. Полученные данные о коэффициентах диффузии согласуются с полученными ранее методом ИК-спектроскопической эллисометрии [7-10].

4. Заключение

В нашей работе с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния света проведена экспериментальная оценка коэффициентов диффузии в AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктурах. Результаты могут быть использованы для оценки скорости деградации AlAs/GaAs резонансно-туннельных структур и кинетики параметров РТД на их основе в заданных условиях эксплуатации, а также для оценки качества изготовления AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктур.

Источники финансирования и выражение признательности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-37-60067 мол_а_дк.

Список литературы

- [1] S. Suzuki, M. Asada, A. Teranishi, H. Sugiyama, H. Yokoyama. Fundamental Oscillation of Resonant Tunneling Diodes above 1 THz at Room Temperature // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97, No. 24. 242102.
- [2] Обухов И.А. Особенности функционирования квантовых приборов // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 7. С. 38–45.
- [3] Ivanov Y.A., Meshkov S.A., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin, V.D. Subharmonic mixer with improved intermodulation characteristics based on a resonant tunnel diode // Journal of Communications Technology and Electronics. 2010. V. 55, I 8. P. 982-988.
- [4] Ю. А. Иванов, С. А. Мешков, В. Ю. Синякин, И. А. Федоренко, Н. В. Федоркова, И. Б. Федоров, В. Д. Шашурин. Повышение показателей качества радиоэлектронных систем нового поколения за счет применения резонансно-туннельных нанодиодов // Нанотехнологии. 2011. №1. С. 34-43.
- [5] Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin V.D. Investigation of UHF low power rectifier based on resonant tunneling diode // KpbiMuKo 2010 CriMiCo 2010 - 2010 20th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (Sevastopol: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.) 2010. P. 859-860.
- [6] Ivanov Yu.A., Gudkov A.G., Agasieva S.V., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Makeev M.O. Radio frequency identification technology with passive tags in invasive biosensor systems // CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 1063-1064.

- [7] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков, В.Ю. Сиякин. Исследования термической деградации резонансно-туннельных диодов на базе AlAs/GaAs наногетероструктур // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 12. С. 23-29.
- [8] M.O. Makeev, Yu.A. Ivanov, V.Yu. Sinyakin, S.A. Meshkov, S.V. Agasieva, V.D. Shashurin. Assessment of resistance of AlAs/GaAs nanoscale heterostructures of resonant-tunneling diodes to diffusion destruction by means of IR-spectroscopic ellipsometry // CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 754-755.
- [9] M.O. Makeev, Y.A. Ivanov, S.A. Meshkov. Quality diagnostics of nanoscale AlAs/GaAs resonant tunnelling heterostructures based on IR-spectroscopic ellipsometry // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 584. 012014. doi:10.1088/1742-6596/584/1/012014.
- [10] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков. Оценка стойкости к диффузионной деструкции наноразмерных AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктур методом ИК-спектральной эллипсометрии // Физика и техника полупроводников. 2016. Том 50, вып. 1. С. 83-88.
- [11] Гайслер В.А., Тэннэ Д.А., Мошегов Н.Т., Торопов А.И., Яскин А.А., Шебанин А.П. Фоновый спектр сверхрешеток GaAs/AlAs: прямая и обратная спектральные задачи // Физика твердого тела. 1996. Т. 38, № 7. С. 2242.
- [12] Гайслер В.А., Тэннэ Д.А., Мошегов Н.Т., Торопов А.И., Мараховка И.И., Шебанин А.П. Локализованные оптические фононы в слоях AlAs сверхрешеток GaAs/AlAs // Письма в ЖЭТФ. 1995. Т. 61, № 5. С. 371-374.
- [13] Samson B. et al. Effects of interface broadening on far-infrared and Raman spectra of GaAs/AlAs superlattices // Physical Review B. 1992. Т. 46. №. 4. С. 2375.
- [14] Hara N., Katoda T. Characterization of interdiffusion coefficients in GaAs-AlAs superlattices with laser Raman spectroscopy // Journal of applied physics. 1991. Т. 69. №. 4. С. 2112-2116.
- [15] Levi D. et al. Raman study of the effects of annealing on folded LA and confined LO phonons in GaAs-AlAs superlattices // Physical Review B. 1987. Т. 36. №. 15. С. 8032.
- [16] Molinari E. et al. Effects of disorder on the raman spectra of GaAs/AlAs superlattices // Physical Review B. 1992. Т. 45. №. 8. С. 4280.
- [17] Scrutton P., Fung B., Helmy A. S. Effect of intermixing on bulk and interface Raman modes in GaAs: AlAs superlattice waveguide structures // Journal of Applied Physics. 2008. Т. 104. №. 7. С. 073103.

References

- [1] S. Suzuki, M. Asada, A. Teranishi, H. Sugiyama, H. Yokoyama. Fundamental Oscillation of Resonant Tunneling Diodes above 1 THz at Room Temperature // *Appl. Phys. Lett.* 2010. V. 97, No. 24. 242102.
- [2] Obukhov I.A. Features of functioning of quantum devices. // *Nano- i mikro-sistemnaya tekhnika*. 2009. № 7. P. 38–45. (In Russian).
- [3] Ivanov Y.A., Meshkov S.A., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin, V.D. Subharmonic mixer with improved intermodulation characteristics based on a resonant tunnel diode // *Journal of Communications Technology and Electronics*. 2010. V. 55, I.8. P. 982-988.
- [4] Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinjakin V.Yu., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Fedorov I.B., Shashurin V.D. [Increase of quality of radio-electronic systems of new generation due to application of resonant tunneling nanodiodes] // *Nanoinzheneriya [Nanoengineering]*. 2011. № 1, pp. 34-43.

- [5] Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin V.D. Investigation of UHF low power rectifier based on resonant tunneling diode // *KpbiMuKo 2010 CriMiCo 2010 - 2010 20th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings* (Sevastopol: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.) 2010. P. 859-860.
- [6] Ivanov Yu.A., Gudkov A.G., Agasieva S.V., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Makeev M.O. Radio frequency identification technology with passive tags in invasive biosensor systems // *CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings* (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 1063-1064.
- [7] Makeev M.O., Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu. Investigation of thermal degradation of resonant tunneling diodes based on nanoscale AlAs/GaAs heterostructures // *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*. 2014. № 2. P. 23-29. (In Russian).
- [8] M.O. Makeev, Yu.A. Ivanov, V.Yu. Sinyakin, S.A. Meshkov, S.V. Agasieva, V.D. Shashurin. Assessment of resistance of AlAs/GaAs nanoscale heterostructures of resonant-tunneling diodes to diffusion destruction by means of IR-spectroscopic ellipsometry // *CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings* (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 754-755.
- [9] M.O. Makeev, Y.A. Ivanov, S.A. Meshkov. Quality diagnostics of nanoscale AlAs/GaAs resonant tunnelling heterostructures based on IR-spectroscopic ellipsometry // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2015. V. 584. 012014. doi:10.1088/1742-6596/584/1/012014.
- [10] M.O. Makeev, Y.A. Ivanov, S.A. Meshkov. Assessment of the resistance to diffusion destruction of AlAs/GaAs nanoscale resonant-tunneling heterostructures by IR spectral ellipsometry // *Semiconductors*. 2016. V. 50, I. 1. P. 83-88.
- [11] Gaisler V.A., Ténné D.A., Moshegov N.T., Toropov A.I., Yaskin A.A., Shebanin A.P. Phonon spectra of GaAs/AlAs superlattices: the direct and inverse spectral problems // *Physics of the Solid State*. 1996. V. 38, I. 7. P.1235-1241.
- [12] Haisler V.A., Ténné D.A., Moshegov N.T., Toropov A.I., Marakhovka I.I., Shebanin A.P. Confined optical phonons in the AlAs layers of GaAs/AlAs superlattices // *JETP Letters*. 1995. V. 61. P. 376-380.
- [13] Samson B. et al. Effects of interface broadening on far-infrared and Raman spectra of GaAs/AlAs superlattices // *Physical Review B*. 1992. V. 46. №. 4. P. 2375.
- [14] Hara N., Katoda T. Characterization of interdiffusion coefficients in GaAs-AlAs superlattices with laser Raman spectroscopy // *Journal of applied physics*. 1991. V. 69. №. 4. P. 2112-2116.
- [15] Levi D. et al. Raman study of the effects of annealing on folded LA and confined LO phonons in GaAs-AlAs superlattices // *Physical Review B*. 1987. V. 36. №. 15. P. 8032.
- [16] Molinari E. et al. Effects of disorder on the raman spectra of GaAs/AlAs superlattices // *Physical Review B*. 1992. V. 45. №. 8. P. 4280.
- [17] Scrutton P., Fung B., Helmy A. S. Effect of intermixing on bulk and interface Raman modes in GaAs: AlAs superlattice waveguide structures // *Journal of Applied Physics*. 2008. V. 104. №. 7. P. 073103.

Acknowledgements

The reported study was funded by RFBR, according to the research project No. 16-37-60067 mol_a_dk.

Растворимость и спектральные свойства наночастиц полупроводниковых соединений I-III-VI₂ в силикатной матрице

¹Соловей Н.П., ¹Боднарь И.В., ²Стрелюхин А.В.

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
г. Минск, 220013, Республика Беларусь
33770011@mail.ru

² Белорусский национальный технический университет,
г. Минск, 220013, Республика Беларусь
077033011@mail.ru

Аннотация: Изучено влияние состава матрицы, в частности, содержания щелочных компонентов в силикатных стеклах системы SiO₂-CaO-R₂O (R-Na, K, Li) на растворимость и спектральные свойства наночастиц (НЧ) CuInX₂(X-S, Se, Te), CuGaTe₂. Показано, что совместное введение в состав стекла трех щелочных ионов благоприятно влияет на формирование НЧ теллуридов. Проанализированы спектры поглощения НЧ в области фундаментального края и обсуждаются возможные причины их изменений.

Ключевые слова: Полупроводники, наночастицы, силикатное стекло, стеклянная матрица, спектры пропускания, размерное квантование.

1. Введение

Наночастицы сложных полупроводниковых соединений, сформированные в стеклянных матрицах, вследствие размерных эффектов ограничения движения носителей заряда приобретают ряд новых физических свойств, не присущих объемным полупроводникам. Оптические материалы, созданные на основе таких структур, являются перспективными для использования их в различных устройствах оптоэлектроники.

Для получения таких гетерогенных материалов необходима заметная растворимость полупроводника в стеклянной матрице, инертность по отношению к ее компонентам, собственная устойчивость к высокотемпературной обработке. Технологическая задача синтеза подобных материалов сводится к введению максимально возможного количества прекурсора, подбору температурно-временных режимов охлаждения и термообработки с целью получения НЧ определенного размера и высокого оптического качества, распределенных в объеме стеклянной матрицы.

Цель настоящей работы – исследование влияния химического состава матрицы, в частности, содержания щелочных компонентов, на растворимость и спектральные свойства НЧ тройных соединений CuInX_2 ($X - \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) и CuGaTe_2 .

2. Методика эксперимента и методы исследований

В качестве матрицы использовали стекла системы $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Na}_2\text{O}$, в которой ранее проведенные исследования позволили установить область составов, оптимальных для формирования в них НЧ тройных полупроводниковых соединений [1]. Стекла данной системы прозрачны в видимой и ближней ИК-областях спектра, край их собственного поглощения расположен в области 0,2-0,4 мкм., устойчивы к повторной термообработке. Однако, несмотря на полную прозрачность, их состав, в частности, содержание щелочного компонента, может оказывать заметное влияние на формирование и оптические свойства НЧ. Использовали составы стекол с различным содержанием щелочных компонентов: 15,7 мол.% Na_2O (матрица СМ1), 22 мол.% Na_2O (матрица СМ2) и с тремя щелочными компонентами – 22 мол. % $\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O} + \text{Li}_2\text{O}$ в мольном отношении 1:1:1 (матрица СМ21). В то же время состав матрицы СМ1 видоизменяли путем частичной или полной замены Na_2O на K_2O или Li_2O (5; 10; 15,7 мол.%).

Формирование стекол с НЧ осуществляли путем высокотемпературного плавления смесей, составленных из компонентов стекла и мелкодисперсных полупроводников, по методике, описанной в [2]. Концентрацию полупроводников изменяли от 0,5 до 1,5 мас. %. Размеры сформированных в стеклах НЧ и характер их локализации определяли методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Спектры пропускания записывали на полированных плоскопараллельных образцах толщиной 2,0 мм на спектрофотометре CARY-17Д.

3. Результаты и обсуждение

Характерное окрашивание стекол (исходные матрицы бесцветны) при введении в их состав полупроводниковых соединений, а также результаты ПЭМ подтверждают факт формирования нанокристаллической фазы со средним размером 10-50 нм. Частицы имеют форму, близкую к сферической, расположены, в основном, изолированно, но в ряде случаев образуют цепочки и небольшие агрегаты. При этом характер распределения и локализации наночастиц в различных матрицах существенно не отличаются. Можно предположить, что механизм формирования наночастиц в си-

ликатных матрицах различного состава одинаков, то есть происходит в процессе фазового распада пересыщенного раствора [2].

Как показывают исследования, качественный и количественный состав матрицы существенно влияет на формирование наночастиц и на их спектральные свойства. Так в матрицах с одним щелочным компонентом (СМ1, СМ2) максимальное количество CuInS_2 и CuInSe_2 составило 1,5 и 1,0 мас. % соответственно, при большей концентрации стекла кристаллизовались по поверхности или в объеме. При концентрации CuInS_2 0,5 мас. % ($E_g = 1,47$ эВ) спектральная кривая расположена в области 0,8 мкм (рис. 1, а), что может быть связано с несовершенством сформированных наночастиц; а при увеличении концентрации полупроводника она смещается в область 1,1 мкм. При этом наблюдается лишь небольшая размытость края либо в коротковолновой, либо в длинноволновой области. При использовании матрицы СМ21 растворимость CuInS_2 уменьшается до 1,0 мас. %.

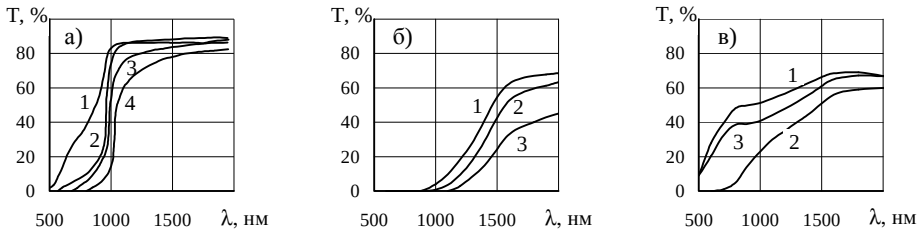


Рис. 1. Спектры пропускания стекол, содержащих наночастицы CuInS_2 (а), CuInSe_2 (б), CuInTe_2 (в); мас. %: 0,5 – 1; 0,75 – 2; 1,0 – 3; 1,5 – 4; а, б – СМ1; в – СМ21

Спектры пропускания для НЧ CuInSe_2 ($E_g = 0,99$ эВ), сформированных в СМ1 (рис. 1, б), отличаются размытостью, более низким пропусканием света по сравнению с НЧ CuInS_2 . При увеличении концентрации полупроводника спектральная кривая смещается в длинноволновую область, при этом максимальное пропускание понижается до 45%.

Отдельного обсуждения заслуживает формирование и спектры пропускания НЧ CuInTe_2 ($E_g = 0,96$ эВ). В матрицах СМ1 и СМ2 максимальная растворимость теллурида меди-индия не превышает 0,5 мас. %; при увеличении концентрации полупроводник не весь растворяется, а выделяется из расплава в виде металлоподобных включений. При совместном введении трех щелочных оксидов в состав стекла (СМ21) растворимость CuInTe_2 повышается до 1,0 мас. %. Однако спектры пропускания характеризуются большой сложностью (рис. 1, в). При концентрации CuInTe_2 0,5

и 1,0 мас. % изменяется форма кривой пропускания, появляется дополнительный максимум в области 0,8 мкм и кривые существенно смещены в коротковолновую область. Следует отметить, что структура, получающаяся непосредственно после синтеза из-за различных факторов, может не отвечать термодинамически равновесному состоянию. Повторная термообработка стекол в ряде случаев благоприятно изменяет ситуацию [2].

На рис. 2 представлены спектры пропускания НЧ вышеуказанных полупроводников (0,75 мас. %), сформированных в различных матрицах. Для НЧ CuInS_2 характерно понижение общего пропускания света при переходе от матрицы СМ1 к СМ2 и СМ21, хотя сохраняется форма спектральной кривой. Спектры пропускания для НЧ CuInSe_2 , сформированных в матрицах СМ2 и СМ21, практически не изменяются, однако наблюдается смещение их либо в коротковолновую область (СМ2), либо в длинноволновую область (СМ21). Для НЧ CuInTe_2 , сформированных в матрице СМ1, наблюдается почти полное поглощение, в матрице СМ2 – незначительное увеличение пропускания, а при совместном введении трех щелочных оксидов в состав стекла СМ21 (в физике-химии стекла это явление известно как полищелочной эффект [3]) формируется четкий край поглощения, который по сравнению с массивным материалом смещен в коротковолновую область. В пределах одной матрицы (СМ1 и СМ2) наблюдается резкое понижение пропускания света в ряду $\text{CuInS}_2 - \text{CuInSe}_2 - \text{CuInTe}_2$, что может быть связано с более выраженными восстановительными свойствами теллура по сравнению с серой и селеном.

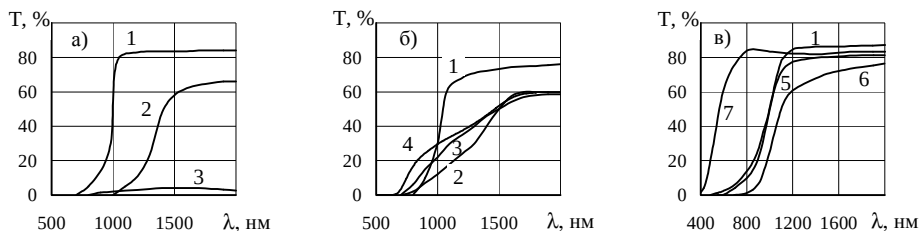


Рис. 2. Спектры пропускания стекол, содержащих наночастицы CuInS_2 (1), CuInSe_2 (2), CuInTe_2 (3), CuGaTe_2 (4); а, в – СМ1, б – СМ21. Содержание Li_2O в матрице СМ1(в), мол. %: 0(1); 5,0(5); 10,0(6); 15,7(7)

Для наночастиц CuInX_2 (X – Se, Te), CuGaTe_2 , сформированных в матрице СМ21, также наблюдается понижение пропускания света по сравнению с НЧ CuInS_2 . Для получения НЧ CuGaTe_2 ($E_g = 1,25$ эВ) использовали матрицу СМ21, спектры пропускания их (рис. 2, б) также смещены в коротковолновую область и на них имеется максимум в области 0,8 мкм.

Среди причин, вызывающих смещение спектров и изменение их формы, можно назвать эффект размерного ограничения, дефекты и изменение стехиометрии НЧ, влияние стеклянной матрицы, изменение кристаллической структуры. Предположение о трансформации тетрагональной структуры типа халькопирита, характерной для массивного материала, в кубическую типа сфалерита при переходе к наночастицам подтверждается рентгенографическими исследованиями НЧ CuInS_2 [4]. В то же время, учитывая, что НЧ располагаются в фазе, обогащенной щелочными компонентами, можно предположить, что на их состояние оказывает влияние активность окружающих их щелочных ионов [5]. Частичная или полная замена Na_2O на Li_2O в матрице СМ1 с НЧ CuInS_2 (рис. 2, в) подтверждает это предположение. Аналогичные результаты получены при замене Na_2O на K_2O . Для получения образцов высокого оптического качества лишь 5 мол.% Na_2O может быть заменено на K_2O или Li_2O .

Полученные результаты могут быть использованы для разработки низкоразмерных структур, представляющих интерес для оптоэлектроники.

4. Заключение

Рассматриваются особенности формирования и поглощения света НЧ полупроводников сложного химического состава, сформированных в матрицах с различным содержанием щелочных компонентов. Отмечается низкая растворимость теллуридов в монощелочных матрицах. Оптимизация состава матрицы позволила получить материалы высокого оптического качества. Природа наблюдаемых изменений спектров пропускания низкоразмерных структур связывается с возможными трансформациями кристаллической решетки НЧ и влиянием активности щелочных ионов.

Список литературы

- [1] Боднарь И.В., Молочко А.П., Соловей Н.П. Влияние химического состава матрицы на спектры пропускания стекол, активированных CuInS_2 // ЖПС. 1996. Т.63. № 2. С. 264-268.
- [2] Боднарь И.В., Гурин В.С., Соловей Н.П., Молочко А.П. Формирование и оптические свойства наночастиц CuInTe_2 в силикатной матрице // ФТП. 2007. Т. 41. Вып. 8. С. 959-964.
- [3] Аппен А.А. Химия стекла // Л.: Химия, 1974. 354 с.
- [4] Гуринович Л.И., Гурин В.С., Иванов В.А., Молочко А.П., Соловей Н.П. Оптические свойства наночастиц CuInS_2 в области фундаментального края поглощения // ЖПС. 1998. Т. 65. № 3. С. 387-393.
- [5] Коцик И., Небреженский И., Фандерман И. Окрашивание стекла // Пер. с чешского. М.: Стройиздат, 1983. 231 с.

Formation of nanowire arrays of Bi and Sb in porous anodic alumina for advanced heat meters

Gennadii G. Gorokh^{1,2}, Andrey A. Lozovenko¹,

Il'ja A. Obukhov², Elizaveta A. Smirnova²

¹Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Minsk, 220013, Republic of Belarus

gorokh@bsuir.by

² System Recourses Ltd., Moscow region, Milkovo 1,

142717, Russian Federation

i_obukhov@systemres.ru

Abstract: The processes of formation of ordered one-dimensional nanostructure arrays of bismuth and antimony in porous template of anodic aluminum oxide (AAO) was studied. Optimum conditions of electrochemical deposition for uniform and reproducible synthesis of nanowire arrays were determined. The microstructure and composition of formed systems was studied. The developed methods are effective for creating perspective nanostructures used in thermoelectric devices.

Keywords: anodic alumina, electrochemical deposition, nanowires, thermoelectric devices.

Формирование массивов нанопроводов Bi и Sb в порах анодного оксида алюминия для перспективных тепломеров

Горох Г.Г.^{1,2}, Лозовенко А.А.¹, Обухов И.А.², Смирнова Е.А.²

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,

г. Минск, 220013, Республика Беларусь

gorokh@bsuir.by

² НПП "Системные ресурсы", 142717, Московская обл., Ленинский р-н,

Мильково, Российская Федерация

i_obukhov@systemres.ru

Аннотация: Исследованы процессы формирования упорядоченных массивов одномерных наноструктур висмута и сурьмы в пористых темплайтах из анодного оксида алюминия (АОА). Установлены оптимальные режимы электрохимического осаждения для воспроизводимого и равномерного синтеза массивов нанопро-

водов. Исследованы микроструктура и состав сформированных систем. Разработанные методы являются эффективными для создания перспективных наноструктур, используемых в термоэлектрических устройствах.

Ключевые слова: анодный оксид алюминия, электрохимическое осаждение, нанопровода, термоэлектрические устройства.

1. Введение

Разработка методов управляемого формирования нанопроводов заданных размеров открывает перспективы для использования широкого спектра квантовых явлений в качестве основы функционирования микроэлектронных приборов, в том числе термоэлектрических устройств [1]. Перспективными материалами для создания цепочек нанопроводов являются полуметаллы (висмут и сурьма) и полупроводники с высокой подвижностью и концентрацией электронов, в частности антимонид индия [2]. Технологически привлекательным для получения наноструктур и нанопроводов из полуметаллов и полупроводников является метод электрохимического осаждения этих материалов на металлические контакты (Au, Ag, Pt, Ni, Cu) в специально приготовленные темплейты, такие, например, как матрицы анодного оксида алюминия (АОА) [3, 4]. Однако для электрохимического осаждения квантовых наноструктур в пористые матрицы необходимо осуществление ряда требований. Первое - наличие электропроводящего контакта у основания пор матрицы АОА, на который возможно электрохимическое осаждение сложных полупроводников или полуметаллов. Второе - формирование регулярной матрицы с размерами пор, соизмеримыми с длиной размерного квантования осаждаемого материала, то есть с размерами, при которых в наноструктурах проявляются квантоворазмерные эффекты [5]. В работе представлены результаты разработки методик создания нанопористых темплейтов из АОА и электрохимического заполнения пор в них сурьмой и висмутом, а также исследований микроструктуры и состава сформированных структур.

2. Формирование массивов нанопроводов в темплейтах из АОА

Экспериментальные образцы для проведения исследований готовили по следующей методике. На подготовленной фольге и закрытой с одной стороны химически стойким лаком (ХСЛ) (рисунок 1, а) методом двухстадийного одностороннего анодирования формировали матрицу АОА в 0,4 М растворе щавелевой кислоты при напряжении 40 В (рисунок

1, b). При этом за время от 60 до 300 минут формировался слой АОА толщиной от 10 до 50 нм. Далее, для создания электрического контакта, на пористую поверхность АОА методом магнетронного напыления в вакууме был нанесен слой меди толщиной 1 мкм (рис. 1, c). Затем, после удаления ХСЛ был селективно растворен слой алюминия, оставшийся после анодирования, в течение 25 минут в растворе следующего состава: 1,25 г/л хлорида меди, 1 л соляной кислоты, 158 мл/л дистиллированной воды (рис. 1, d). Далее в полученных свободных слоях АОА был удален барьерный оксидный слой в 5 % растворе ортофосфорной кислоты в течение 10 минут (рис. 1, e). В таких условиях, скорость растворения БОС составила 3,7 нм/мин. Затем была проведена операция порорасширения в 2 М H_2SO_4 , что позволило очистить поры от загрязнений и увеличить пористость до 25 %. В результате были получены проницаемые пористые темплеты с диаметром пор 30-50 нм, в зависимости от времени расширения пор, и медным контактом, готовые для осаждения сурьмы и висмута.

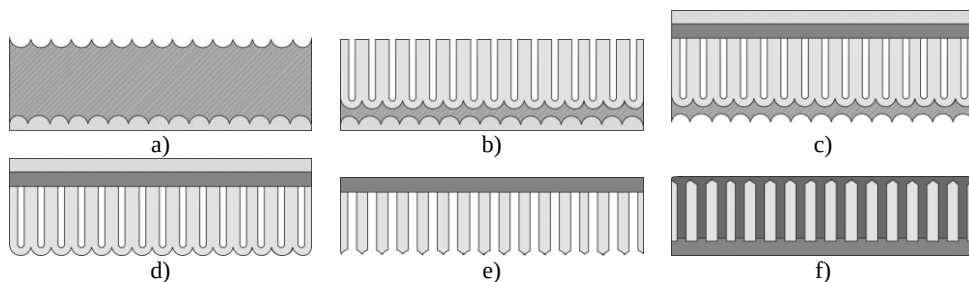


Рис. 1. Схематический маршрут изготовления массивов нанопроводов

Fig 1. Schematic route of nanowires arrays manufacturing

Были подготовлены растворы для осаждения наноструктур висмута и сурьмы. Электролит для осаждения висмута – 0,13М BiCl_3 +1,2М NaCl +1М HCl , для осаждения сурьмы – 0,16М SbCl_3 +0,55М HCl с добавлением EDTA.

Электрохимическое осаждение проводили в приготовленные матрицы, через поры, на медный подслой, декапированный в 5% растворе серной кислоты. В процессе осаждения были сняты катодные поляризационные кривые, в диапазоне напряжений 0-1,2 В, со скоростью сканирования 0,005 В/с и шагом 0,0025 В, в трехэлектродной ячейке с хлорсеребряным электродом (ХСЭ) сравнения. Электрические режимы

задавались потенциостатом Autolab PGSTAT302N, подключенным к персональному компьютеру с установленным программным комплексом Nova 2.0.

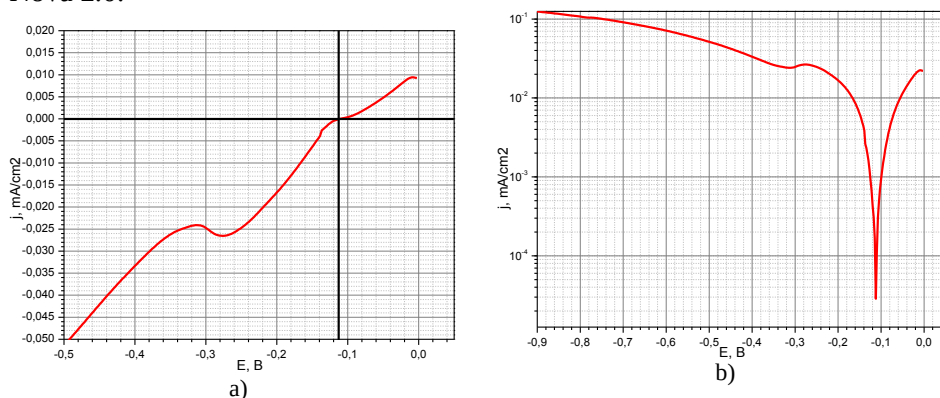


Рис. 2. Катодная поляризационная кривая (а), в тафелевских координатах (б).

Fig. 2. Cathodic polarization curve (a), in Tafel coordinates (b)

Анализ поляризационных кривых позволил определить оптимальные режимы для осаждения висмута и сурьмы. Наиболее равномерно осаждение висмута ведется в диапазоне напряжений - 0,16-0,24 В относительно ХСЭ и при плотностях катодного тока 5-24 mA/cm^2 , плотность тока выше 24 mA/cm^2 соответствует предельному току диффузии. Дальнейшая поляризация приводит к увеличению плотности тока за счет восстановления водорода. Осаждение при плотностях тока, превышающих предельный ток диффузии, приведет к образованию рыхлых осадков. Наноструктуры сурьмы осаждаются при напряжениях 0,8-0,9 В относительно ХСЭ.

3. Исследование структуры и состава массивов наноструктур Bi и Sb

Морфологию поверхности и сколов полученных структур с высоким разрешением изучали в СЭМ Supra 55 WDS при ускоряющем напряжении 15 кВ. На рисунке представлены СЭМ изображения сечений модифицированных пористых темплейтов из мембран АОА с нанопроводами Bi, полученных при осаждении при плотностях тока 9,6 mA/cm^2 (рисунок 3, а), 19,2 mA/cm^2 (рисунок 3, б) и 28,8 mA/cm^2 (рисунок 3, с).

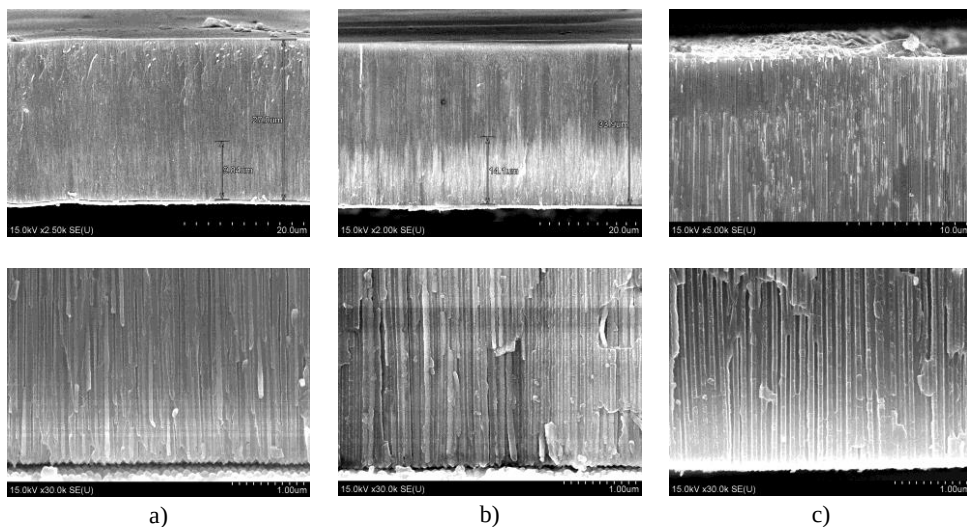


Рис. 3. Скол темплейтов из АОА с нанопроводами Bi.

Fig. 3. The profile of anodic alumina templates with bismuth nanowires

Электронно-микроскопические исследования показали высокую воспроизводимость при осаждении висмута из хлористого раствора со скоростью осаждения $0,61 \text{ мкм/мин}$ при плотности тока $19,2 \text{ мА/см}^2$. При плотности тока выше 25 мА/см^2 на медном подслое у основания пор начинает восстанавливаться водород, который препятствует формированию нанопроводов висмута в порах матрицы АОА, и осаждение происходит на поверхность мембраны, в порах висмут не обнаружен (рисунок 2, с). На рисунке 4 представлены СЭМ изображения сечений мембран АОА с осажденными нанопроводами Sb. Показано увеличение равномерности осаждения при добавлении EDTA.

В результате электрохимического осаждения в каждой поре образовались нанонити с диаметрами, соответствующими диаметрам пор, которые равны 70 нм для нанопроводов Sb и 55 нм для нанопроводов висмута. Исходя из времени осаждения, определили скорость осаждения сурьмы и висмута в поры АОА, которая составила около $0,33 \text{ мкм/мин}$ для Sb и $0,61 \text{ мкм/мин}$ для Bi. Таким образом, создавая темплейты из мембран АОА с различными размерами пор (от 10 до 70 нм) и варьируя время осаждения, можно получать наноструктуры с различным аспектным отношением диаметра к длине и, соответственно, с различными электрофизическими свойствами.

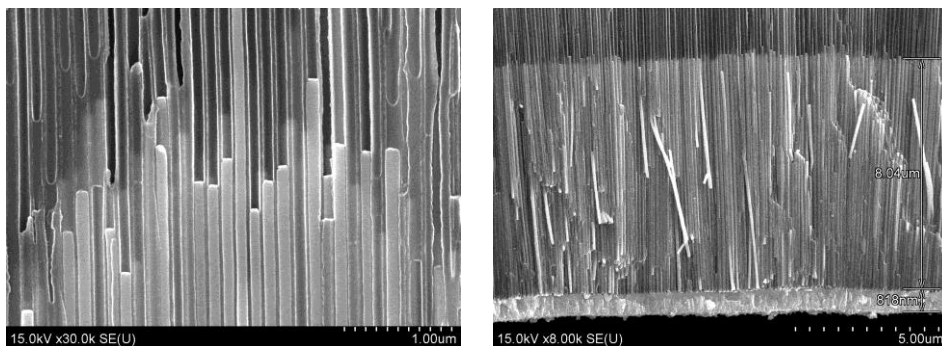


Рис. 4. СЭМ изображения сечения темплейта из АОА с осажденными нанопроводами Sb.

Fig. 4. SEM micrographs of cross-section of AA template with Sb nanowires

4. Заключение

В результате проведенных исследований разработан метод формирования нанопористых темплейтов для электрохимического синтеза нанопроводов из полупроводников и полуметаллов с большим аспектным отношением диаметра к длине, при этом, варьируя условия формирования, можно контролируемо управлять размерами пор и их масштабированием. Нанопористые темплейты были использованы для получения массивов нанопроводов висмута и сурьмы методом электрохимического осаждения из хлоридных растворов. Проведенные электронно-микроскопические исследования сформированных Sb и Bi наноструктур показали, что нанопровода образуются в каждой поре, при этом диаметры созданных структур соответствуют размерам пор, их длина определяется длительностью осаждения. Разработанные методики позволяют воспроизводимым образом получать нанопровода из полуметаллов с требуемыми физико-химическими свойствами, что открывает перспективы для создания широкого спектра термоэлектрических приборов и устройств, таких как, термогенераторы, микроохлаждающие устройства, а так же приборов работающих на квантовых эффектах, с низкой себестоимостью изготовления.

Источники финансирования и выражение признательности

Доклад подготовлен по итогам исследования, проведенного в рамках гранта Белорусского фонда фундаментальных исследований и Министерства образования № Ф16МВ-021.

Список литературы

- [1] Landis S. Nano-lithography // London UK: ISTE Hoboken. NJ.: Wiley.— 2011.— 345 p.
- [2] M. Ibrahim Khan, Xu Wang, Krassimir N. Bozhilov, Cengiz S. Ozkan. Templated Fabrication of InSb Nanowires for Nanoelectronics // *Journal of Nanomaterials*, 2008, Vol.2008, pp. 1-5.
- [3] Формирование нанонитей InSb в пористых матрицах анодного оксида алюминия / Г.Г. Горох, И.А. Обухов, А.А. Лозовенко, А.И. Захлебаева, Е.В. Сочнева // *Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах* : сб. научн. ст. / Ин-т тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова ; редкол. : П.А. Витязь (отв. ред.) [и др.]. – Минск, 2013. – С. 377–387.
- [4] Темплейтный метод формирования квантовых нанопроводов InSb с большим аспектным отношением / Г.Г. Горох, И.А. Обухов, А.А. Лозовенко, А.И. Захлебаева, Е.В. Сочнева // *СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо'2013* : Материалы 23-й Междунар. Крым. конф. в 2 т., Севастополь, 8–13 сент. 2013 г. / Изд-во Вебер ; редкол. : П.П. Ермолов [и др.]. – Севастополь, 2013. – С. 820–823.
- [5] Обухов И.А. Неравновесные эффекты в электронных приборах. Москва – Киев – Минск – Севастополь: Изд-во «Вебер», 2010. – 303 с.

References

- [1] Landis S. Nano-lithography / *London UK; ISTE Hoboken. New-Jersey: Wiley*. 2011. 345 p.
- [2] Khan M.I., Wang X., Bozhilov K.N., Ozkan C.S. Templated fabrication of InSb nanowires for nanoelectronics. *Journal of Nanomaterials*, 2008, vol. 2008, pp. 1 - 5.
- [3] Gorokh G.G., Obukhov I.A., Lozovenko A.A., Zakhlebaeva A.I., Sochneva E.A. [Formation of InSb nanowires in the porous matrix of anodic alumina]. *Fullereny i nanostruktury v kondensirovannyh sredah: sbornik nauchnyj statej* / ITMO im. A.V. Lykova NAN RB; P.A. Vitjaz' (ed.). Minsk, 2013, pp. 377 - 387. (In Russian)
- [4] Gorokh G.G., Obukhov I.A., Lozovenko A.A., Zakhlebaeva A.I., Sochneva E.A. [Template method of forming InSb large aspect ratio quantum nanowires]. *Materials of 23th Int. Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology" (CriMiCo'2013)*, Sevastopol, 8-13 September 2013, vol. 1, pp. 820 - 823. (In Russian).
- [5] Obukhov I.A. Non-equilibrium effects in electronic devices / *Moscow-Kiev-Minsk-Sevastopol: Veber*. 2010. 303 p. (In Russian).

Acknowledgements

The paper is based on the research, which was conducted in the framework of projects of the Belarusian Foundation for Basic Research and Ministry of Education No. Ф16МВ-021.

Microstructure and chemosensitive properties of template-based metal oxide systems $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$

Gennadii G. Gorokh¹, Anna I. Zakhlebayaeva¹,

Valeriy V. Zhilinskiy², Anna V. Pyanko²

¹Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Minsk, 220013, Republic of Belarus

gorokh@bsuir.by

²Belarusian State Technological University

Minsk, 220006, Republic of Belarus

zhilinski@yandex.ru

Abstract: Metal oxide thin film systems $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ was formed by electrophoretic layer deposition of metal hydroxides in the ordered anodic alumina templates. Microstructure, chemosensitivity and electrical characteristics of the formed systems were researched. Nanostructured metal oxide SnMoO_4 has regular ordered structure, chemosensitivity homogeneity and high sensitivity. The fabricated template-based structures are promising for applications in sensor microsystems.

Keywords: anodic alumina, template-based systems, metal oxides, chemosensitive films, electrophoretic deposition.

Микроструктура и хемочувствительные свойства матричных металлооксидных систем $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$

¹Горох Г.Г., ¹Захлебаева А.И., ²Жилинский В.В., ²Пянко А.В.

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

г. Минск, 220013, Республика Беларусь

gorokh@bsuir.by

²Белорусский государственный технологический университет

г. Минск, 220006, Республика Беларусь

zhilinski@yandex.ru

Аннотация: Представлены результаты исследований структурно-управляемого формирования металлооксидных тонкопленочных систем $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ путем электрофоретического послойного осаждения гидроксидов металлов в упорядоченные матрицы анодного оксида алюминия. Показано, что применение пористого оксида алюминия позволило создать регулярные наноструктурированные мат-

рицы металлооксидов SnMoO_4 , обладающие упорядоченной микроструктурной и хемочувствительной однородностью, а также повышенной чувствительностью к малым концентрациям газов. Разработанные матричные структуры являются перспективными для дальнейшего применения в сенсорных микросистемах.

Ключевые слова: анодный оксид алюминия, матричные системы, металлооксиды, хемочувствительные пленки, электрофоретическое осаждение.

1. Введение

В условиях постоянного роста потребности в высокоточных и быст-родействующих системах мониторинга состава окружающей среды особое внимание уделяется получению и исследованию новых материалов, обладающих хорошими рабочими характеристиками и чувствительностью к определенным типам газов. Наибольший интерес вызывают полупроводниковые пленки на основе оксидов металлов (SnO_2 , ZnO , WO_3 , In_2O_3 , MoO_3 и др.), характеризующиеся стабильностью характеристик, разнообразием методов формирования структур на их основе, относительной дешевизной, а также чувствительностью электропроводности к составу поверхности пленок, благодаря чему они получили широкое распространение в качестве чувствительных материалов газовых сенсоров [1].

Одним из наиболее перспективных и исследуемых направлений при разработке газочувствительных материалов является формирование смешанных оксидов металлов. Варьируя составом металлооксидных пленок можно оказывать влияние на морфологию, размер зерен и аспектное отношение площади поверхности формируемых структур к их толщине, что позволяет улучшить селективность пленок по отношению к определенным типам газов [2]. Повысить чувствительные свойства металлооксидов можно путем их структурирования при нанесении на упорядоченные диэлектрические матрицы, наиболее подходящим материалом для формирования которых является пористый анодный оксид алюминия (АОА), обладающий упорядоченной ячеисто-пористой структурой, хорошей механической прочностью и высокими показателями жесткости, упругости и износостойкости [3]. Простота формирования АОА и возможность варьирования параметрами его ячеисто-пористой структуры в диапазоне от десятков до сотен нм позволяет получать на его основе металлооксидные системы, обладающие определенным и заданным структурированием. Структурирование металлооксидов в совокупности с выбором их состава позволяет изготавливать на их основе высокочувствительные газовые сенсоры, обладающие высокой селективностью к широкому спектру газов различной химической природы [4].

В данной работе методом электрофоретического осаждения сформированы матричные наносистемы $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$, исследована их структура и электрофизические характеристики.

2. Формирование матричных систем

Матрицы АОА изготавливали двухстадийным электрохимическим анодированием Al в 0,4 М растворе H_3PO_4 при напряжении анодирования 160 В в электрохимических условиях, обеспечивающих размер и профиль пор, позволяющий равномерно заполнить матрицу металлооксидами [5]. В качестве исходных образцов использовали кремниевые подложки, на которые методом магнетронного напыления в вакууме был нанесен слой Al толщиной 1,2 мкм. На первой стадии анодирования формировали слой пористого оксида толщиной 0,7 мкм при плотности анодного тока 6 mA/cm^2 и напряжении стационарного роста 160 В, который затем селективно удаляли в нагретом до 80°C водном фосфорно-хромовом растворе, в результате чего поверхность непроанодированного алюминия структурировалась отпечатками оксидных ячеек. На второй стадии анодирования, в электрохимических условиях, аналогичных первой стадии, формировали упорядоченный слой АОА толщиной $\sim 0,8$ мкм. Для расширения и очистки пор, сформированные матрицы выдерживали 10 минут в водном растворе $\text{CrO}_3:\text{H}_3\text{PO}_4$, нагретом до 60°C , в результате чего диаметр пор увеличивался до ~ 220 нм.

Матричные системы в порах АОА формировали послойным осаждением с чередованием слоев из гидроксидов олова и молибдена. Электрофоретическое осаждение слоя из коллоидного гидроксида олова(II) в матрицу АОА осуществляли в течение 60 с при анодной поляризации электрода и напряжении 50 В из водного раствора, содержащего 0,01 М $\text{K}_2[\text{Sn}(\text{OH})_4]$ и 0,01 М K_2SO_4 , при $\text{pH}=8$. Полученный таким образом слой коллоидного гидроксида олова(II) после естественной сушки на воздухе отжигали в кислородо-азотной смеси в течение 60 мин при температуре 750°C для перехода Sn^{+2} в Sn^{+4} . Осаждение слоя из гидроксида молибдена проводили путем частичного электрохимического восстановления молибдат-ионов в 0,01 М $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_3$ при катодной поляризации электрода при напряжении 50 В в течение 60 с. После естественной сушки образовавшийся слой гидроксида молибдена отжигали в кислородо-азотной смеси при температуре 750°C в течение 120 мин для формирования соединения SnMoO_4 . По данной методике были получены хеморезистивные матричные структуры, содержащие от 10 до 30 слоев SnMoO_4 . Технологическая методика формирования матричных систем представлена на рисунке 1.

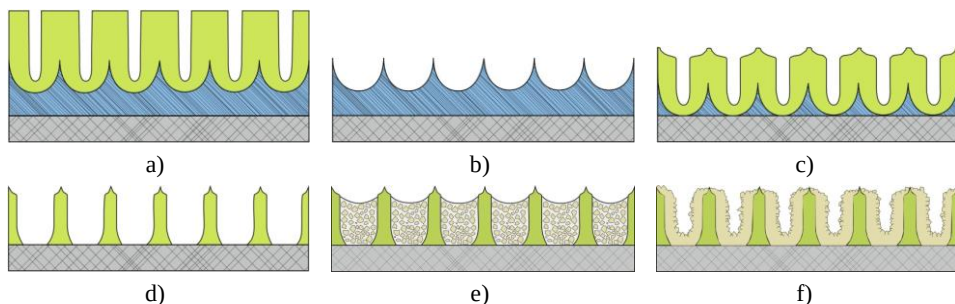


Рис. 1. Технология формирования матричных систем $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$: двухстадийное анодирование Al (a-c), расширение пор АОА (d), электрофоретическое осаждение гидроксидов металлов в матрицы АОА (e), отжиг сформированных структур для формирования систем $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ (f).

Fig. 1. Formation of template-based system $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$: two-step anodization of Al (a-c), expansion of pores of anodic alumina (d), electrophoretic deposition of metal hydroxides in NAA (e), annealing of the structures for the formation of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ systems (f)

3. Исследование структуры, состава и хемочувствительных свойств $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ систем

Исследования микроструктуры сформированных системы проводили с помощью сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-806 при ускоряющем напряжении 20 кВ. Микрофотографии поверхности и скола АОА матрицы с нанесенной пленкой SnMoO_4 представлены на рисунке 2.

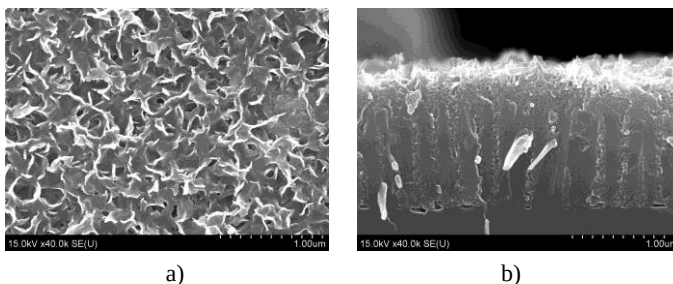


Рис. 2. Поверхность (a) и скол (b) матрицы АОА с нанесенной пленкой SnMoO_4 .

Fig. 2. The surface (a) and the profile (b) of template-based NAA with SnMoO_4 film

Электронно-микроскопические исследования показали, что в результате химического осаждения с последующей термообработкой структур на поверхности и в порах АОА происходит формирование равномерно распределенной наноструктурированной пленки соединения SnMoO_4 .

Обнаруженные по результатам электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа в спектре исследуемых структур линии соответствовали элементному составу исходной матрицы АОА и образованному в результате химического осаждения и отжига молибдату олова: 1,432 эВ – алюминий, 0,56 эВ – кислород, 1,77 эВ – кремний, 2,31 – молибден, 3,44 – олово. Рентгенограмма состава сформированной $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ структуры приведена на рисунке 3.

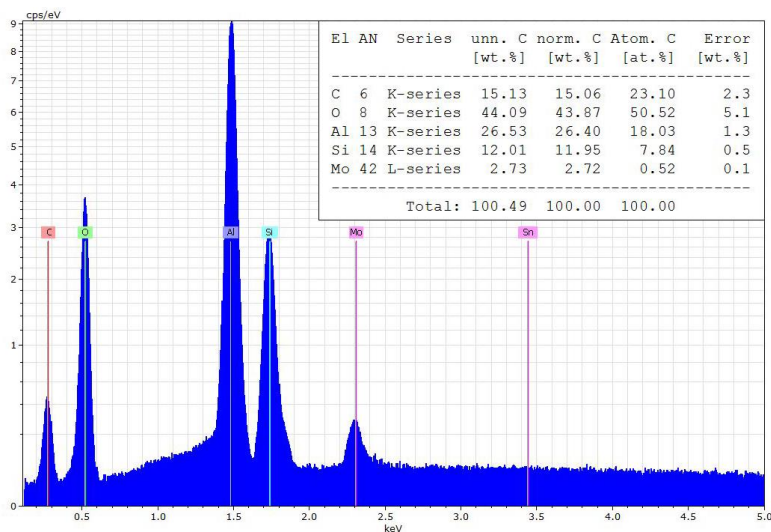
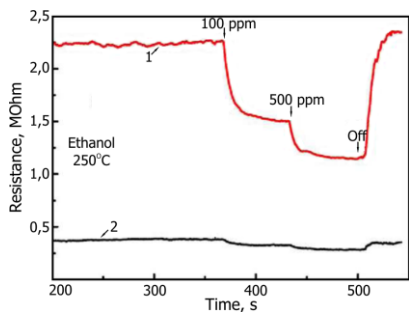


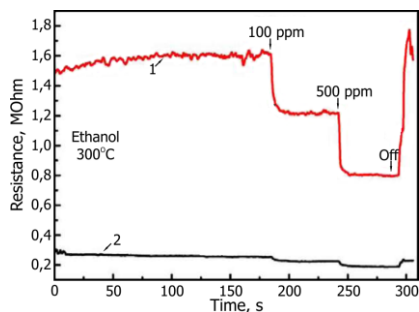
Рис. 3. Данные электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа состава системы $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$.

Fig. 3. Energy-dispersive X-ray analysis of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SnMoO}_4$ system

Исследования хемочувствительных свойств сформированных наносистем проводили на тестовой сенсорной структуре, представляющей собой кремниевую подложку с матрицей АОА, содержащей осажденные слои SnMoO_4 , на обратной стороне которой был сформирован Pt нагреватель, а к газочувствительному слою подведены внешние контакты. Отклики пленок SnMoO_4 анализировали в среде этанола при температурах 250°C и 300°C. В процессе исследований регистрировали изменения сопротивлений исследуемых структур в чистой атмосфере и в среде с различной концентрацией анализируемого газа. Чувствительность систем определяли по формуле $S = |R_{\text{gas}} - R_{\text{air}}| / R_{\text{air}}$, где R_{air} – сопротивление пленок в чистой атмосфере, R_{gas} – сопротивление пленок в среде анализируемого газа. Отклики исследуемых структур в среде этанола приведены на рисунке 4.



a)



b)

Рис. 4. Отклики структурированных (1) и неструктурированных (2) пленок SnMoO_4 на этанол при 250°C (a) и 300°C (b).

Fig. 4. Responses of structured (1) and non-structured (2) films SnMoO_4 on Ethanol at 250°C (a) and 300°C (b)

Сформированные наносистемы показали хорошие отклики на 100–500 ppm этанола, причем наилучшую чувствительность исследуемых пленок к анализируемому газу наблюдали при температуре 250°C. Увеличение температуры пленки до 300°C позволяет понизить время отклика системы, однако приводит к уменьшению величины изменения ее сопротивления. Сравнение полученных откликов с откликами гладких пленок аналогичных металлооксидов, напыленных на кремниевые подложки, показало, что чувствительность сформированных наноструктурированных пленок на несколько порядков превышает чувствительность гладких пленок.

4. Заключение

Таким образом, разработанная методика химического синтеза матричных наносистем позволяет формировать высокоструктурированные слои металлооксидов, обладающие хорошими хемочувствительными свойствами. Разработанные структуры являются перспективными для дальнейшего применения в газовых сенсорах и сенсорных микросистемах.

Источники финансирования и выражение признательности

Доклад подготовлен по итогам исследования, проведенного в рамках гранта Белорусского фонда фундаментальных исследований и Министерства образования № Ф16МВ-021.

Список литературы

- [1] Румянцева М.Н., Коваленко В.В., Гаськов А.М., Панье Т. Нанокompозиты на основе оксидов металлов как материалы для газовых сенсоров. Российский химический журнал. 2007. Т. LI. № 6. С. 61-70.
- [2] Galatsis K., Li Y.X., Wlodarski W., Cominid E., Sberveglieri G., Cantalini S., Santucci S., Passacantando M. Comparison of single and binary oxide MoO_3 , TiO_2 and WO_3 sol-gel gas sensors. *Sensors and Actuators B*. 2002. Vol. 83. P. 276-280.
- [3] Горох Г.Г., Захлебаева А.И., Таратын И.А., Реутская О.Г., Хатько В.В. Пути снижения потребляемой мощности тонкопленочных химических сенсоров. Материалы 25-й Международной Крымской конференции «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» («КрыМиКо`2015»). Севастополь, 6–12 сентября 2015 г. Т. 1. С. 645-648.
- [4] Жилинский В.В., Пянко А.В., Богомазова Н.В., Горох Г.Г., Захлебаева А.И. Газочувствительные пленки на основе оксидов олова и цинка в матрицах анодного оксида алюминия для перспективных хеморезистивных сенсоров. Материалы МНТК «Новейшие достижения в области инновационного развития в химической промышленности и производстве строительных материалов». Минск, 18–20 ноября 2015 г. С. 223–226.
- [5] Захлебаева А.И., Пянко А.В., Жилинский В.В. Химический синтез композитных матричных наносистем с хемочувствительными свойствами. Сборник тезисов докладов конгресса молодых ученых. Санкт-Петербург, 13–15 апреля 2016 г. Электронное издание. Режим доступа: <http://openbooks.ifmo.ru/ru/file/3075/3075.pdf>

References

- [1] Rumjanceva M.N., Kovalenko V.V., Gas'kov A.M., Pan'e T. [Nanocomposites based on metal oxides as materials for gas sensors]. *Rossiiskij himicheskij zhurnal*, 2007, vol. LI, no. 6, pp. 91-70. (In Russian).
- [2] Galatsis K., Li Y.X., Wlodarski W., Cominid E., Sberveglieri G., Cantalini S., Santucci S., Passacantando M. Comparison of single and binary oxide MoO_3 , TiO_2 and WO_3 sol-gel gas sensors. *Sensors and Actuators B*, 2002, vol. 83, pp. 276 - 280.
- [3] Gorokh G.G., Zakhlebaeva A.I., Taratyn I.A., Reutskaya O.G., Khatko V.V. [The ways of power consumption reducing of thin-film gas sensors]. *Materials of 25th Int. Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology" (CriMiCo '2015)*, Sevastopol, 6-12 September 2015, vol. 1, pp. 645-648. (In Russian).
- [4] Zhilinskij V.V., Pjanko A.V., Bogomazova N.V., Goroh G.G., Zahlebaeva A.I. [Gas sensing films based on tin and zinc oxides in anodic alumina for perspective chemoresistive sensors]. *Materialy MNTK «Novejshie dostizhenija v oblasti innovacionnogo razvitija v himicheskoy promyshlennosti i proizvodstve stroitel'nyh materialov»*, Minsk, 18–20 November 2015, pp. 223 – 226. (In Russian).
- [5] Zahlebaeva A.I., Pjanko A.V., Zhilinskij V.V. [The chemical synthesis of nanocomposite template-based structures with chemosensitivity properties]. *Sbornik tezisov dokladov kongressa molodyh uchenyh*, Saint Petersburg, 13–15 April 2016, elektronnoe izdanie, rezhim dostupa: <http://openbooks.ifmo.ru/ru/file/3075/3075.pdf>. (In Russian).

Acknowledgements

The paper is based on the research, which was conducted in the framework of projects of the Belarusian Foundation for Basic Research and Ministry of Education No. Ф16МВ-021.

The fuel cells based on the nanocarbon materials

Vladimir V. Kolesov¹, Yulia V. Plekhanova², Anna E. Kitova²,
Sergey E. Tarasov², Anatoly N. Reshetilov²

Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS, Moscow
kvv@cplire.ru

*Scryabin Institute of Biochemistry and Physiology of microorganisms of RAS,
Puschino, Moscow Region*

Abstract: The possibility of development of the fuel element bioanode on the basis of thermoexpanded graphite and the immobilized membrane fractions of bacteria *G. oxydans* is shown. The obtained data can be use when developing microbic biosensors and electrodes of biofuel elements.

Keywords: biofuel elements, bioanode, oxidation of substrata enzymes and microbe cells, membrane fractions, nanocarbon materials, *Gluconobacter oxydans*, printing electrodes.

Биотопливные элементы на основе наноуглеродных материалов

¹Колесов В.В., ²Плеханова Ю.В., ²Китова А.Е.,
²Тарасов С.Е., ²Решетилов А.Н.

¹*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*
kvv@cplire.ru

²*Институт биохимии и физиологии микроорганизмов им. Г.К. Скрыбина РАН,
Пушино*

Аннотация: Показана возможность создания биоанода топливного элемента на основе терморасширенного графита и иммобилизованных мембранных фракций бактерий *G. oxydans*. Полученные данные могут быть использованы при разработке микробных биосенсоров и электродов биотопливных элементов.

Ключевые слова: биотопливные элементы, биоанод, окисление субстратов ферментами и микробными клетками, мембранные фракции, наноуглеродные материалы, *Gluconobacter oxydans*, печатные электроды.

1. Введение

В последние годы широкий интерес вызывают разработки методов генерации электроэнергии с использованием биологического материала,

что связано с поиском новых источников энергии, а также с экологическими проблемами человечества. Разработка технологии микробных топливных ячеек представляет новейший альтернативный подход к способам генерации электричества [1]. Системы или топливные элементы, в которых в общем случае используется биологический материал, окисляющий неорганические материалы (газообразный водород) или, как в большинстве случаев, органику, и производится генерация электрического потенциала, называют биотопливными (БТЭ). Материалы по БТЭ широко представлены в научной печати [2-4].

В микробной клетке энергия окисления органических субстратов превращается в два компонента- электрическую часть, обеспечивающую мембранные потенциалы, и химическую, в форме АТФ. В работе [5] представлен иммуносенсор на основе печатных графитовых электродов, модифицированных наночастицами золота и восстановленным оксидом графена. Исследование показало, что модифицированные печатные электроды имели более высокую эффективную площадь поверхности, кинетику электронного транспорта и стабильность в отношении электрокаталитического окисления пероксида водорода.

В работе [6] в качестве материалов анода использовали углеродные нанокompозитные гидрогели, полученные с помощью метода суспензионной полимеризации на основе нанотрубок и оксида графена. В работе [7] в качестве материала электрода применяли терморасширенный графит (ТРГ). Этот материал обладает высокой электрической проводимостью, высокой удельной площадью поверхности, достигающей до 2000 м²/г, биосовместимостью и химической устойчивостью в агрессивных средах [8]. Таким образом, совмещение наноматериалов с традиционными графитовыми материалами, а также создание электродов из наноматериалов, в том числе из ТРГ, позволит улучшить их электрохимические характеристики.

2. Материалы и методы

В работе использовался бактериальный штамм *G. oxydans* ВКМ В-1280. Эксперименты выполнялись на печатных электродах фирмы “ЭЛКОМ” (Россия). На рабочем электроде прессованием закреплялась пластинка из ТРГ диаметром 3 мм и толщиной 0.05 мм. На рабочий электрод, покрытый ТРГ, наносилось 4 мкл биомассы (250 мг/мл), затем электрод высушивался при комнатной температуре в течение 40 мин. Аналогичная процедура выполнялась для немодифицированного электрода.

Измерения проводились в соответствии с разработанной методикой. Для этого 100 мкл 25 мМ калий-фосфатного буфера, рН 6, содержащего 10

мМ хлорида натрия, наносилось на рабочую поверхность биосенсора. Затем в раствор вносилось 2 мкл 500 мМ гексацианоферрата(III) калия (ГЦФ) и 10 мкл 1 М раствора этилового спирта или глюкозы. Конечная концентрация ГЦФ составляла 10 мМ, конечная концентрация субстратов составляла 100 мМ. Измерения проводились по трехэлектродной схеме. Хроноамперометрические зависимости регистрировались при потенциале 400 мВ относительно электрода сравнения.

На анод из спектрального графитового электрода наносилось на каждую сторону 5 мкл смеси, состоящей из суспензии бактериальных клеток в концентрации 1 мг/мкл и 2 %-го раствора хитозана, растворенного в 1 % уксусной кислоте. Соотношение клеток и хитозана в смеси было 2:1. Содержание клеток на поверхности электрода составляло 0.12 мг/мм², соответственно. Для модификации электрода порошок ТРГ массой 1,2 мг смешивался с 20 мкл суспензии бактериальных клеток и 10 мкл раствора хитозана. 5 мкл полученной смеси наносилось на каждую сторону анода и подсушивалось при комнатной температуре.

Измерения проводились по двухэлектродной схеме в ячейках биотопливного элемента, объем анодного отделения был равен объему катодного и составлял 5 мл. Кюветы разделялись протонселективной мембраной МФ-4СК. В качестве фонового раствора использовался 25 мМ калий-фосфатный буфер pH 6.5, содержащий 10 мМ хлорида натрия, а в качестве медиаторов использовали 2,6-дихлорофенолиндофенол в анодной ячейке и гексацианоферрат(III) калия (ГЦФ) в катодной ячейке. В качестве субстрата для окисления клетками *G. oxydans* использовался этиловый спирт в концентрации 10 мМ. Регистрация циклических вольтамперных характеристик (ЦВА) проводилась при скорости развертки 3 мВ/с. Для измерений использовался гальванопотенциостат (Princeton Applied Research, США).

3. Результаты и обсуждение

Ранее было показано, что ТРГ позволяет обеспечить при иммобилизации на его поверхности высокую поверхностную концентрацию бактерий или их мембранных фракций [9]. ТРГ дает также возможность формировать электроды различной формы простой методикой прессования. В нашей работе [7] было показана принципиальная возможность создания биоанода топливного элемента на основе терморасширенного графита и иммобилизованных мембранных фракций бактерий *G. oxydans*. При внесении этилового спирта в рабочий электролит стационарный потенциал биоанода сдвигался в область отрицательных значений потенциала. Максимальное изменение потенциала рабочего электрода от исходного значе-

ния составляло около 60 мВ за 1000 с для мембранных фракций. Данный эффект может свидетельствовать о наличии в мембранных фракциях бактерий *G. oxydans* фермента, предположительно PQQ-зависимой алкоголь-дегидрогеназы, катализирующего электроокисление этилового спирта по механизму безмедиаторного биоэлектрокатализа.

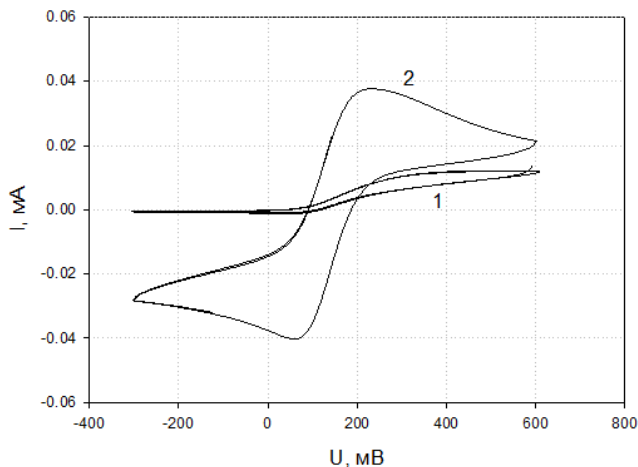


Рис. 1. Влияние ТРГ на генерацию сигнала при регистрации ЦВА характеристик для немодифицированного электрода (кривая 1) и для модифицированного ТРГ электрода (кривая 2) после введения этилового спирта.

Fig. 1. The influence of TEG on generation of a signal at registration of CVA characteristics for an unmodified electrode (a curve 1) and for the modified electrode TEG (a curve 2) after introduction of ethyl alcohol

Для улучшения электрофизических характеристик БТЭ и повышения биосовместимости электродной структуры с биоматериалом проводилась модификация печатных электродов терморасширенным графитом. На полученный комбинированный электрод наносили бактериальные клетки *Gluconobacter oxydans* методом физической адсорбции. На рис. 1 приведены виды циклических вольтамперограмм (ЦВА) печатных электродов, модифицированных ТРГ, и контрольного электрода без ТРГ. ЦВА характеристики для электродов, модифицированных ТРГ (кривая 2), имели выраженные области окисления и восстановления медиатора при внесении субстрата (этиловый спирт) в отличие от немодифицированного ТРГ (контрольного) электрода (кривая 1).

Величина откликов модифицированного ТРГ электрода возрастала более чем в 3 раза по сравнению с контрольным электродом и составляла 400 ± 20 мкА/см². Рост амплитуды сигнала обусловлен более высокой ад-

сорбцией клеток на ТРГ ввиду высокой удельной поверхности терморасширенного графита.

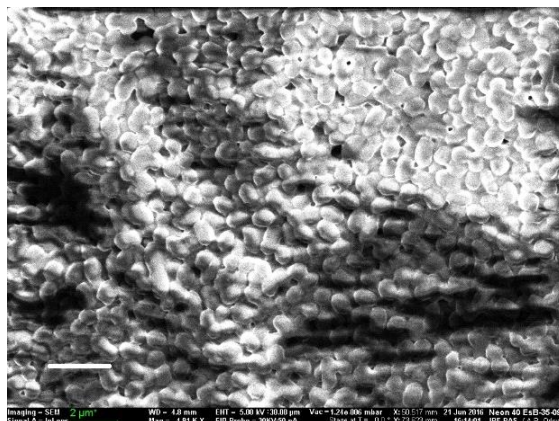


Рис. 2. Изображение поверхности электрода из ТРГ, содержащего бактериальные клетки в хитозане (длина масштабной метки 2 μm).

Fig. 2. The image of a surface of TEG electrode containing bacterial cells in the chitosan (length of a scale tag 2 μm)

Модификация спектрального графитового электрода ТРГ (порошок ТРГ смешивался с суспензией клеток в хитозане и наносились на поверхность электрода физической сорбцией) практически не изменяла электрохимических характеристик спектрального графитового электрода в диапазоне подаваемых потенциалов от -400 до 0 мВ. В то же время величина откликов модифицированного ТРГ электрода была примерно на 20 % ниже откликов немодифицированного электрода. Мощностные характеристики электрода вычисляются в области подаваемых потенциалов от -400 до 0 мВ, поэтому мощности модифицированного и контрольного электрода не отличаются и составляют 5 мВт/см^2 .

С помощью электронной сканирующей микроскопии были получены снимки поверхности электродов, содержащих клетки. Так как в экспериментах использовали количество клеток, необходимое для получения максимальных сигналов, вид поверхности электродов вне зависимости от материала электрода и его модификации был примерно одинаков и показан на рис. 2.

4. Заключение

Таким образом, исследование нового типа электрохимического преобразователя — модифицированного терморасширенным графитом печатного

электрода — показало, что биосенсоры, в которых используется такой преобразователь, имеют более высокую амплитуду сигнала, а вольт-амперные характеристики этих электродов имеют выраженные области окисления и восстановления (медиатора и субстрата). Чувствительность модифицированного биосенсора при анализе этилового спирта превосходила чувствительность немодифицированного биоэлектрода более чем в 3 раза. В то же время модификация спектрального графитового электрода ТРГ не приводила к увеличению чувствительности, амплитуды сигнала и изменению токов окисления-восстановления на вольтамперных характеристиках, что говорит о нежелательности использования ТРГ в таком формате. Тем не менее, результаты, полученные в работе, свидетельствуют в пользу целесообразности разработки электрохимических преобразователей на основе печатных электродов, модифицированных терморасширенным графитом, для биосенсорных устройств и применения ТРГ как основы биоанодов БТЭ.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа поддержана Государственным заданием Минобрнауки РФ № 14.094.2014/К, Программой Президиума РАН I.8П, а также грантом РФФИ 15-29-01292 ОФИ_М_2015.

Список литературы

- [1] Logan BE. Microbial fuel cells. New Jersey, John Wiley & Sons, 2008, 200 p.
- [2] Rakesh, Chandra, Meda U. S., Suresh R. Performance studies of microbial fuel cell. // IJRET. 2014. V. 3 (11). P. 169-173.
- [3] Wang H.-Y., Bernarda A., Huang C.-Y., Lee D.-J., Chang J.-S. Micro-sized microbial fuel cell: A mini-review. // Bioresource Technology. 2011. V. 102. P. 235–243.
- [4] Choi S. Microscale microbial fuel cells: Advances and challenges. // Biosensors and Bioelectronics. 2015. V. 69. P. 8–25.
- [5] Chan K.F., Lim H.N., Shams N., Jayabal S., Pandikumar A., Huang N.M. Fabrication of graphene/gold-modified screen printed electrode for detection of carcinoembryonic antigen // Materials Science and Engineering. 2016. V. C 58. P. 666–674.
- [6] Kumar G.G., Hashmi S., Karthikeyan C., GhavamiNejad A., Vatanikhah-Varnoosfaderani M., Stadler F.J. Graphene Oxide/Carbon Nanotube Composite Hydrogels-Versatile Materials for Microbial Fuel Cell Applications. // Macromol. Rapid Commun. 2014. V. 35. P. 1861–1865.
- [7] Reshetilov A. N, Kitova A. E, Kolesov V.V., A.I. Yaropolov A.I. Mediator-free bioelectrocatalytic oxidation of ethanol on an electrode from thermally expanded graphite modified by Gluconobacter oxydans membrane fractions. //Electroanalysis. 2015. V.27. № 6. P.1443–1448.
- [8] Wang X., Gu H., Yin F., Tu Y. A glucose biosensor based on Prussian blue/chitosan hybrid film // Biosensors and Bioelectronics. 2009. V. 24. № 5. P. 1527-1530.
- [9] Alferov Valery A., Vasilov Raif G., Gubin Sergey P., Kashin Vadim V., Kolesov Vladimir V., Kitova Anna E., Machulin Andrey V., Reshetilov Anatoly N., Reshetilova Tatiana A., The biofuel elements on the basis of the nanocarbon materials, RENSIT, 2014, 6(2):187-208 DOI: 10.17725/RENSITe.0006.201412d.0187.

References

- [1] Logan BE. Microbial fuel cells. New Jersey, John Wiley & Sons, 2008, 200 p.
- [2] Rakesh, Chandra, Meda U. S., Suresh R. Performance studies of microbial fuel cell. // IJRET. 2014. V. 3 (11). P. 169-173.
- [3] Wang H.-Y., Bernarda A., Huang C.-Y., Lee D.-J., Chang J.-S. Micro-sized microbial fuel cell: A mini-review. // Bioresource Technology. 2011. V. 102. P. 235–243.
- [4] Choi S. Microscale microbial fuel cells: Advances and challenges. // Biosensors and Bioelectronics. 2015. V. 69. P. 8–25.
- [5] Chan K.F., Lim H.N., Shams N., Jayabal S., Pandikumar A., Huang N.M. Fabrication of graphene/gold-modified screen printed electrode for detection of carcinoembryonic antigen // Materials Science and Engineering. 2016. V. C 58. P. 666–674.
- [6] Kumar G.G., Hashmi S., Karthikeyan C., GhavamiNejad A., Vatankeh-Varnoosfaderani M., Stadler F.J. Graphene Oxide/Carbon Nanotube Composite Hydrogels—Versatile Materials for Microbial Fuel Cell Applications. // Macromol. Rapid Commun. 2014. V. 35. P. 1861–1865.
- [7] Reshetilov A. N, Kitova A. E, Kolesov V.V., A.I. Yaropolov A.I. Mediator-free bioelectrocatalytic oxidation of ethanol on an electrode from thermally expanded graphite modified by *Gluconobacter oxydans* membrane fractions. // Electroanalysis. 2015. V.27. № 6. P.1443–1448.
- [8] Wang X., Gu H., Yin F., Tu Y. A glucose biosensor based on Prussian blue/chitosan hybrid film // Biosensors and Bioelectronics. 2009. V. 24. № 5. P. 1527-1530.
- [9] Alferov Valery A., Vasilov Raif G., Gubin Sergey P., Kashin Vadim V., Kolesov Vladimir V., Kitova Anna E., Machulin Andrey V., Reshetilov Anatoly N., Reshetilova Tatiana A., The biofuel elements on the basis of the nanocarbon materials, RENSIT, 2014, 6(2):187-208 DOI: 10.17725/RENSITe.0006.201412d.0187.

Acknowledgements

Work is supported by the State task of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation No. 14.2094.2014/K, the Program of Presidium of RAS I.8P and also grant of RFBR 15-29-01292 OFI_m_2015.

The optimization of nanostructures cultivation by the liquid phase epitaxy

Igor I. Maronchuk, Daria D. Sanikovich, Alexander S. Cherkashin

Sevastopol State University

Sevastopol, 299053, Russian Federation

igimar@mail.ru

Abstract: The shortcomings in the equipment and the technological approaches used previously for the process of growing of nanostructures with quantum dots by the method of liquid phase epitaxy were revealed. A new drum cassette of vertical type was designed and manufactured. A physical and mathematical modeling of growing processes of nanostructures by the liquid phase epitaxy using the software SolidWorks, FlowSimulation program, which determined the presence of negative factors affecting the growing process, were carried out. The optimization of mathematical model, the modernization of equipment and its adjusting, were implemented. It was found a good agreement between the calculated and the experimentally obtained temperatures distribution within the process of growing of structures with good reproducibility.

Keywords: liquid phase epitaxy, pulsed cooling nanogeteroepitaxy structure, quantum dots, substrate.

Оптимизация процессов выращивания наноструктур жидкофазной эпитаксией

Марончук И.И., Саникович Д.Д., Черкашин А.С.

Севастопольский государственный университет

г. Севастополь, 299053, Российская Федерация

igimar@mail.ru

Аннотация: Выявлены недостатки в оборудовании и технологических подходах проведения процессов выращивания наноструктур с квантовыми точками методом жидкофазной эпитаксии, использовавшиеся нами ранее. Разработана и изготовлена новая барабанная кассета вертикального типа. Проведено физико-математическое моделирование процессов выращивания наноструктур жидкофазной эпитаксией с помощью программного продукта SolidWorks, программа FlowSimulation, определившего наличие негативных факторов, влияющих на процессы. Проведена оптимизация математической модели и оборудования, его на-

стройка. Установлено хорошее согласие расчетного и экспериментального распределения температур в процессе выращивания воспроизводимых структур.

Ключевые слова: жидкофазная эпитаксия, импульсное охлаждение, наногетероэпитаксиальные структуры, квантовые точки, подложка.

1. Введение

На современном этапе развития устройств полупроводниковой электроники и солнечной энергетики актуальным становится получение наногетероэпитаксиальных структур (НГЭС), которые имеют в активной области квантово-размерные объекты типа квантовых ям (КЯ) и квантовых точек (КТ) [1]. В этой связи развитие методов позволяющих получать НГЭС по механизму Странского-Крастанова не содержащих «смачиваемых» слоев между КТ [2], в частности, используемый нами метод жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) с импульсным охлаждением подложки (ИОП) [3], является весьма перспективным и актуальным направлением. Переход к приборам на основе НГЭС с КТ сопровождается ужесточением требований к качеству структур и прежде всего: снижению дефектности; однородности толщин КЯ и структуры в целом; удельному сопротивлению; однородности размеров, концентрации и распределения КТ по радиусу подложки; воспроизводимости структур. Использование подложек больших диаметров более ужесточает требования к качеству таких структур.

Применяемое нами экспериментальное эпитаксиальное оборудование при выращивании НГЭС с КТ не всегда позволяет получать воспроизводимый результат, что требует объективного внимания к усовершенствованию рабочей кассеты и технологической оснастки, оптимизации технологических параметров. Поэтому, целью работы являлось усовершенствование технологического оборудования и оптимизация тепловых режимов получения НГЭС с КТ методом ЖФЭ с ИОП.

2. Техника проведения эксперимента

При ранее проведенных научно-исследовательских работах в области выращивания НГЭС с КТ [4,5] нами были выявлены ряд недостатков в конструкции используемого нами ростового оборудования и в технологических подходах проведения процессов, которые негативным образом влияли на качество получаемых нами наноструктур методом ЖФЭ с ИОП. Для устранения недостатков нами была разработана и изготовлена новая барабанная кассета с корпусом цилиндрической формы, вертикального типа (рис. 1).

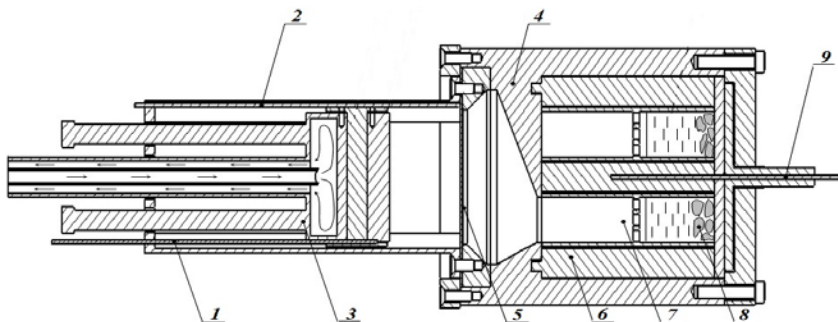


Рис. 1. Принципиальная схема кассеты с водоохлаждаемым теплопоглотителем для выращивания НГЭС с КТ методом ЖФЭ с ИОП. 1 – термопара теплопоглотителя, 2 – термопара подложки, 3 – каркас с водоохлаждаемым теплопоглотителем, 4 – корпус кассеты, 5 – подложка, 6 – барабан для контейнеров, 7 – контейнер для навесок под растворы-расплавы, 8 – растворы-расплавы, 9 – контрольная подвижная термопара

Fig. 1. Schematic cross section diagram of the cassette with the water cooled heat absorber used for growing NHES QDs by the method of LPE method with applied PCS. 1- thermo-couple of the heat absorber, 2 - thermo-couple of the substrate, 3 - frame of the water-cooled heat absorber, 4 – corpus of the cassette, 5 – substrate, 6 – cylinder for the containers, 7 – containers. for the holders with melt solution materials, 8 – melt solution materials, 9 – moving (slippery) thermo-couple.

Для оптимизации тепловых режимов и конструкций теплового узла установки и рабочей кассеты, проведено физико-математическое моделирование процессов выращивания НГЭС с КТ методом ЖФЭ с ИОП со стороны анализа термодинамического состояния, используя продукт SolidWorks программы FlowSimulation. В основу расчетов, положены материалы, полученные нами в ранних работах [6]. В проводимых расчетных и экспериментальных процессах разность температуры на теплопоглотителе и подложке составляла $\Delta T_F = 4^\circ\text{C}$, температура в рабочей зоне при процессе выращивания была $T_{np} = 425^\circ\text{C}$. При этом температура в центральной части нагревательных элементов трехзонной муфельной печи составляла 430°C , 460°C и 468°C соответственно. В качестве легкоплавкого металла для приготовления растворов-расплавов использовали олово. Процессы проводили в потоке водорода. При проведении моделирования и в ростовых экспериментах в качестве подложки использовали Si пластины $\varnothing 52$ мм п-типа проводимости с ориентацией (111).

Моделирование выявило ряд факторов приводящих к негативному влиянию на характеристики получаемых структур. Неравномерность теплового поля в зоне размещения рабочей кассеты составляла до 4 град/см по оси и до 2 град/см по радиусу. В районе рабочей плоскости теплопоглотителя наблюдали наличие негативного температурного градиента до

20 град/см. Выявлена высокая инертность процесса при смене тепловых условий и зависимость качества, равномерности и воспроизводимости выращивания НГЭС от позиционирования теплопоглотителя на тыльной стороне подложки, несовершенство технологической оснастки.

При оптимизации математической модели, теплового узла установки и конструкции графитовой кассеты, оснастки и теплопоглотителя, получилось минимизировать влияние негативных характеристик на процесс выращивания. Значительно усложнена сборная конструкция теплопоглотителя, подобраны материалы с различной теплопроводностью для его изготовления. Оптимизированы материалы для изготовления других конструкционных деталей кассеты. С целью выравнивания теплового поля на подложке изменена конструкция ее крепления в кассете, использованы материалы с разной теплопроводностью. Разработана система экранов в тепловой зоне вокруг кассеты, подобраны материалы для их изготовления. Проведен анализ динамики потоков течения газа в реакторе при различных расходах. Проведено измерение температуры по оси кассеты от ее торца к пластине, и эти значения сопоставлены с распределениями температур на поверхности кассеты и различных частях печного блока установки. Осуществлена настройка имеющегося у нас теплового оборудования. Выращены образцы открытых КТ Ge на Si подложке. Процессы проводили по технологической схеме, описанной в наших предыдущих работах [4,5]. Морфологию поверхности полученных образцов исследовали с помощью микроскопа СММ-2000 атомно-силовой микроскопией.

3. Результаты и обсуждение

В работе проводили сравнительный анализ результатов измерения реальной температуры в объектах теплового узла установки с их расчетными значениями, полученными с помощью пакета SolidWorks.

Анализировали распределение температурного поля по диаметру рабочей плоскости теплопоглотителя, определили, что, разброс температуры по диаметру не превышает 0,07 град., температурное поле равномерно, средняя температура на рабочей плоскости составила 417,66 °С. Результат достигнут при скорости подачи воды на данной конструкции в 60 л/ч и средней ее температуре 26 °С.

Рассчитывали распределение температур по диаметру рабочей плоскости Si подложки. Средняя температура на ней составила 421,85°С, разброс температуры по радиусу не превышал 0,01 град. Экспериментальные данные хорошо гармонируют с расчетными. Незначительные отклонения (не более 0,1 град.) связаны с измерениями на грани погрешности термо-

пар и измерителей температуры, расчеты также были проведены без учета гравитационной составляющей, поскольку программа FlowSimulation ее не учитывает. Экспериментальные измерения проводили с точностью до 0,1 град. Разница средних температур между рабочими плоскостями теплопоглопителя и подложки по расчетам была $\Delta T_F = 4,19^\circ\text{C}$, что отличается от экспериментального значения и вызвано вышеописанными объяснениями.

При совмещении Si подложки с теплопоглопителем и раствором-расплавом показано, что негативные последствия, вызванные несимметричным расположением элементов конструкции кассеты, не сказываются на качестве выращивания НГЭС с КТ, так как процесс совмещения приводит к выравниванию теплового профиля на подложке.

Изучали распределение температурного профиля по длине кассеты. Объяснение разницы в незначительном различии расчетных и экспериментальных данных связаны на наш взгляд с тем, что измерения проводили с помощью скользящей термодпары помещенной в кварцевый капилляр, который в свою очередь был расположен в сквозном отверстии, сделанном по оси графитовой кассеты. Расчетные значения же получали по целно графитовому изделию. Получен прямолинейный градиентный участок с перепадом 0,1 град. от пластины к торцу кассеты, пригодный для реализации технологических особенностей метода. Радиальный перепад между температурой на внешней поверхности кассеты и ее центром оставался постоянным и составил не более 0,5 градуса. В итоге неравномерность теплового поля в зоне размещения рабочей кассеты по оси уменьшили до 0,4 град/см, а по радиусу до 0,1 град/см. На рабочем торце теплопоглопителя наличие негативного температурного градиента снизили до 1 град/см.

На рис. 2 представлены результаты исследования атомно-силовой микроскопией, структуры с открытыми КТ Ge на Si буферном слое, подложка Si с ориентацией (111) полученной после модернизации и оптимизации оборудования, один импульс холода. На рис. 2а показан двухмерный кадр, а на рис. 2б его трехмерное изображение. Структура изготовлена по методике, описанной в [4,5]. Обработав информацию с рис. 2 получили линейные размеры КТ, которые в среднем составляют около 30 нм по диаметру и до 5 нм в высоту. Разброс по размерам КТ не превышал 20%. Шероховатость поверхности структуры не более 1 Å. Плотность высева образований бала на уровне $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. В получаемых нами структурах до модернизации оборудования при тех же условиях выращивания плотность высева КТ была ниже и составляла менее 10^{10} см^{-2} , равномерность высева КТ была значительно хуже. Размеры КТ и шероховатость поверхности структуры находились примерно на том же уровне.

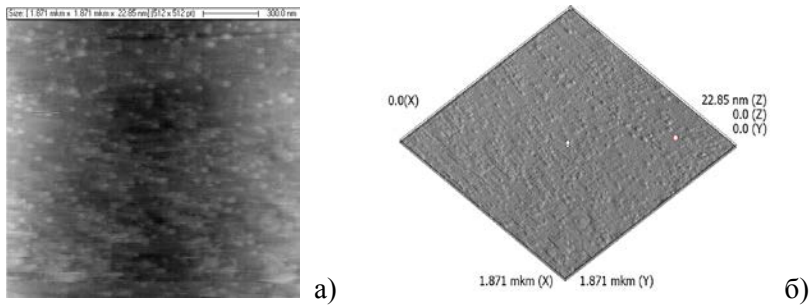


Рис.2. Структура с КТ Ge на Si подложке: а – двумерное изображение, б – трехмерное изображение.

Fig.2. Structure with Ge QDs on a Si substrate: a – two-dimensional image, b – three dimensional image.

4. Заключение

В результате проведенной работы был выявлен ряд недостатков негативным образом влияющих на качество получаемых нами наноструктур методом ЖФЭ с ИОП. Для их устранения разработана и изготовлена новая кассета. Проведено физико-математическое моделирование процессов выращивания НГЭС с КТ методом ЖФЭ с ИОП со стороны анализа термодинамического состояния с помощью программного продукта SolidWorks и измерения температуры в объектах теплового узла установки. При оптимизации математической модели, получилось минимизировать влияние негативных характеристик на процесс выращивания. Произвести модернизацию имеющегося оборудования, без дополнительных многочисленных опытов и измерений, используя материалы с разной теплопроводностью.

Разработана методика проведения и осуществлена настройка имеющегося теплового оборудования. Установлено хорошее согласие расчетного и экспериментального распределения температур в процессе выращивания НГЭС с КТ. Проведены контрольные эксперименты по выращиванию открытых КТ Ge на Si подложке, показывающие хорошую воспроизводимость, что подтверждает правильность проведенной модернизации.

Источники финансирования и выражение признательности

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ по базовой части государственного задания №2015/702

Список литературы

[1]. Пчеляков О.П., Болховитянов Ю.Б., Двуреченский А.В., Соколов Л.В., Никифоров А.И., Якимов А.И., Фойхтлендер Б. Кремний-германиевые наноструктуры с квантовыми

ми точками: механизмы образования и электрические свойства // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34. № 11. С. 1281-1299.

[2]. Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32. № 4. С. 385-410.

[3]. T.F. Kulyutkina, I.E. Maronchuk, A.I. Maronchuk, M.V. Naidencova Epitaxial growth of structures with nano-dimensional features from liquid phase by pulse cooling of substrate. United States Patent US 7,422,632 B2 Int.Cl. C30B 19/02 provisional application №60/688,769 Jun.8, 2005; date of patent sep. 9, 2008.

[4]. Dimova-Malinovska D., Nichev H., Maronchuk I.I., Sanikovich D.D. Study of the morphology of Ge quantum dots grown by liquid phase epitaxy // Journal of Physics: Conference Series. 2016. № 700. 012043.

[5]. Maronchuk I.I., Maronchuk I.E., Sankovitch D.D., Lovchinov K. and Dimova-Malinovska D. Deposition by liquid epitaxy and study of the properties of nano-heteroepitaxial structures with quantum dots for high efficient solar cells // Journal of Physics: Conference Series. 2014. № 558. 012049.

[6]. Ginkin V.P., Folomeev V.I., Lyukhanova T.M., Rakov V.V., Maronchuk I.I., Kartavykh A.V., Egorov A.V. Method research and developing a method to control directed semiconductor crystallization in space // J. Crystal Growth. 2002. V.236. No4. P.551-556.

References

[1] Pchelyakov O P, Bolkhovityanov Y B, Dvurechensky A V, Sokolov L V, Nikiforov A I, Yakimov A I and Voitlander B [Silicon-germanium nanostructures with quantum dots: formation mechanisms and electrical properties]. *Semiconductors*, 2000, V. 34, No11, pp. 1281-1299. (In Russian).

[2] Ledencov N N, Ustinov V M, Shchukin V A, Kopiev P S, Alferov J I, Bimberg D [Heterostructures with quantum dots: production, properties, lasers. Overview]. *Semiconductors*, 1998, V. 32, No4, pp. 385-410. (In Russian).

[3]. T.F. Kulyutkina, I.E. Maronchuk, A.I. Maronchuk, M.V. Naidencova Epitaxial growth of structures with nano-dimensional features from liquid phase by pulse cooling of substrate. United States Patent US 7,422,632 B2 Int.Cl. C30B 19/02 provisional application №60/688,769 Jun.8, 2005; date of patent sep. 9, 2008.

[4]. Dimova-Malinovska D., Nichev H., Maronchuk I.I., Sanikovich D.D. Study of the morphology of Ge quantum dots grown by liquid phase epitaxy. *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2016. no 700. 012043.

[5]. Maronchuk I.I., Maronchuk I.E., Sankovitch D.D., Lovchinov K. and Dimova-Malinovska D. Deposition by liquid epitaxy and study of the properties of nano-heteroepitaxial structures with quantum dots for high efficient solar cells // *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2014. no 558. 012049.

[6]. Ginkin V.P., Folomeev V.I., Lyukhanova T.M., Rakov V.V., Maronchuk I.I., Kartavykh A.V., Egorov A.V. Method research and developing a method to control directed semiconductor crystallization in space. *J. Cryst. Growth*. 2002. vol.236. no4. pp.551-556.

Acknowledgements

The work has been supported by the base part of the state task №2015/702 from the Ministry of Education and Sciences of the Russian Federation.

The growing of nanostructures with quantum dots by the liquid phase epitaxy

Igor I. Maronchuk, Daria D. Sanikovich, Pavel V. Potapkov
Sevastopol State University
Sevastopol, 299053, Russian Federation
igimar@mail.ru

Abstract: The experimental results, which show the possibility of obtaining of semiconductor nanostructures with quantum dots from the liquid phase for high-performance devices in nanoelectronics and energetics, are presented. The essence of the method and its theoretical aspects are considered. The experiments on the obtaining of nanostructures with Ge quantum dots were implemented. These structures are based on the simple semiconductors and compounds III-V on the Si substrates. The series of researches of materials at various stages of the technological processes and at various conditions were carried out. The size and the morphology of the quantum dots were determined by the analysis of the drawings obtained by AFM. The measurements and the analysis of the samples photoluminescence spectra were carried out.

Keywords: pulsed cooling, structure, quantum dots, substrate.

Выращивание наноструктур с квантовыми точками жидкофазной эпитаксией

Марончук И.И., Саникович Д.Д., Потапков П.В.
Севастопольский государственный университет
г. Севастополь, 299053, Российская Федерация
igimar@mail.ru

Аннотация. Представлены экспериментальные результаты показывающие возможность получения из жидкой фазы полупроводниковых наноструктур с квантовыми точками для высокоэффективных приборов нанозлектроники и энергетики. Рассматривается суть метода, его теоретические аспекты. Проведены эксперименты по получению наноструктур с квантовыми точками Ge на основе простых полупроводников и соединений III-V на Si подложках. Проведен комплекс исследований материалов на различных стадиях технологического процесса и различных технологических условиях. Размеры и морфологию квантовых точек определяли из анализа изображений полученных методом АСМ. Проведены измерения и анализ спектров фотолюминесценции, полученных образцов.

Ключевые слова: импульсное охлаждение, структуры, квантовые точки, подложка.

1. Введение

В настоящее время 80% солнечных элементов (СЭ) с эффективностью до 22% изготавливают из Si. При условии роста фотоэнергетики (ФЭ) на 30% в год к 2030г. потребность в Si возрастет более чем в 200 раз, что представляет проблему, как технологическую, так и экологическую.

Увеличение интенсивности развития ФЭ возможно с применением СЭ на основе наногетероэпитаксиальных структур (НГЭС) с квантовыми точками (КТ). В 2006г. установлено, что при облучении ультрафиолетом КТ PbSe один фотон порождает семь электронов, а в 2007г., что один фотон излучения с длиной волны 0,48 мкм порождает 2 электрона в КТ Si. Теория показывает, что утилизация длинноволновой и коротковолновой частей спектра солнечного излучения с помощью КТ позволяет достичь эффективности СЭ близкой к термодинамической границе (до 84 %) [1].

Попытка создания методами МВЕ и МOCVD СЭ на основе НГЭС с КТ, где в качестве матричного материала использовали GaAs, а материала КТ InAs не увенчались успехом, т. введение КТ не увеличивали, а уменьшали квантовую эффективность СЭ, причем с увеличением количества массивов КТ эффективность СЭ уменьшалась. Это связывают с наличием в НГЭС деформированных напряженно «смачивающих» слоев узкозонных полупроводников, образующихся между КТ, в которых создаются генерационно-рекомбинационные центры, ответственные за безизлучательные каналы рекомбинации. Используемый нами метод получения НГЭС жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) с импульсным охлаждением и нагревом подложки (ИОНП) [2] позволяет получать массивы КТ не содержащие упруго-напряженные слои в промежутках между КТ, что способствует возможности получения СЭ с эффективностью более 35%. Изготовление НГЭС требует не только высокотехнологического оборудования для их получения, но и создание новых методик и оборудования для подготовки основных и вспомогательных материалов, контроля качества исходных материалов и изготавливаемых структур на различных стадиях производства.

Целью работы являлось решение научно-технических проблем связанных с исследованием процессов выращивания и получения многослойных НГЭС с КТ в процессе ЖФЭ с ИОНП, изучением их свойств.

2. Материалы и методы исследования.

НГЭС с КТ выращивали методом ЖФЭ с ИОНП [2], суть его состоит в том, что на тыльную поверхность подложки, находящейся лицевой поверхностью в контакте с насыщенным раствором-расплавом при темпе-

ратуре T , помещали теплопоглотитель, температура которого $T_{\text{п}}$ меньше температуры подложки на величину $\Delta T = T - T_{\text{п}}$. Через время $\tau \approx 10^{-3} \div 10^{-1}$ сек, определяющее длительность импульса охлаждения подложки, теплопоглотитель принимает ее температуру. За время τ на лицевой поверхности подложки происходит кристаллизация нанослоя или массива КТ.

Из-за различия постоянных решеток материалов КТ и подложки, в начальной стадии формируется сплошной «смачивающий» слой по механизму Странского-Крастанова, с ростом толщины которого в нем возникают периодически механические напряжения с максимумами в середине периода нониуса совершенного строения на гетерогранице. В процессе роста происходит формирование КТ в местах минимальных механических напряжений, в позициях нониуса совершенного строения. Плотность КТ при оптимальных режимах кристаллизации лимитируется в основном периодом нониуса совершенного строения на гетерогранице. Технология изготовления НГЭС с КТ включает выращивание КТ из узкозонного материала на монокристаллической подложке широкозонного материала, при температуре печи $450\text{--}500^\circ\text{C}$ в атмосфере очищенного водорода. Выращивания массива КТ завершается, когда теплопоглотитель примет температуру подложки. Затем на тыльную поверхность подложки помещается теплонагреватель, температура которого $T_{\text{нг}}$, выше температуры подложки T на величину $\Delta T_{\text{нг}} = T_{\text{нг}} - T$. Импульс нагрева $\Delta T_{\text{нг}}$ приводит к растворению части наноразмерного «смачивающего» слоя между КТ. Удаление части «смачивающего» слоя позволяет в НГЭС с КТ существенно снизить генерационно-рекомбинационные токи и получить массивы КТ с параметрами близкими к «идеальным». Затем массив КТ заращивается наноразмерным слоем матричного материала (спейсерным слоем).

Спейсерные слои выращиваются толщиной, которая обеспечивает туннельный переход носителей заряда от КТ одного массива, расположенного параллельно поверхности подложки, к КТ другого массива, т.е. по вертикально-связанным КТ. Расположение сверхрешеток с вертикально-связанными КТ в области р-п перехода, приводит к разделению электростатическим полем р-п перехода генерируемых в КТ носителей заряда.

Многократное последовательное повторение стадий выращивания массивов КТ, заросших спейсерными слоями различного типа проводимости, формирует многослойную р-п НГЭС с КТ. В качестве подложечного материала в исследованиях были использованы пластины Si п-типа проводимости с кристаллографической ориентацией (111), диаметр пластин составлял 40 мм. В качестве растворителя использовали олово. В качестве матричного материала использовали GaP, а для получения КТ - Ge.

Для проведения экспериментов были разработаны, изготовлены и налажены лабораторная установка горизонтального типа и графитовая кассета, позволяющие выращивать НГЭС с КТ высокого качества методом ЖФЭ с ИОНП. Морфология поверхности полученных образцов исследовалась с помощью микроскопа СММ-2000 в режиме АСМ.

3. Результаты и обсуждение

Определенно, что исходная пластина Si, имеющая визуально зеркальную поверхность, при исследовании методом АСМ имеет ряд дефектов на наноуровне, шероховатость поверхности на участке длиной 3,7 мкм составила 3,2 нм, максимальный перепад по текстуре поверхности—30 нм. Видны царапины, оставленные шлифовальным зерном при химико-механической полировке, имеющие глубину до 40 нм и длину до 400 нм.

Первый этап подготовки пластин к процессу заключался в подборе и подготовке травильных смесей для их химико-динамической полировки. В результате литературного анализа для экспериментов были отобраны стандартные методики: по Дешу и RCA. В результате полировки был снят нарушенный слой, образовавшийся после резки и химико-механической полировки, значительно улучшена морфология исходной поверхности. Шероховатость поверхности на участке длиной 3,7 мкм для методики по Дешу составила 18 нм, а по RCA—11 нм. Царапины отсутствуют.

В процессе ЖФЭ отработаны оптимальные режимы выращивания буферного эпитаксиального слоя Si из насыщенных растворов-расплавов. Шероховатость его поверхности на участке длиной 3,7 мкм составила 1,2 нм, а максимальный перепад по текстуре поверхности – 4 нм при подготовке по RCA. Полученные результаты, на наш взгляд, являются достаточными для процессов дальнейшего выращивания НГЭС с КТ. На буферном слое выращивали толстый слой GaP, легированный Sn, на котором получали открытые КТ Ge при 1 и 3 импульсах холода с разницей температур между теплопоглотителем и подложкой $\Delta T_F = 5^\circ$. Исследовав полученные образцы методом АСМ определили линейные размеры выращенных КТ высота составила в среднем около 5 нм и 10 нм, а ширина в около 40 нм и 60 нм, соответственно. Шероховатость поверхности на образцах не превышает $1 \div 5 \text{ \AA}$. На рис. 1 показано типичное изображение выращенных КТ Ge полученное при трех импульсах холода теплопоглотителем.

Основным методом контроля параметров изготавливаемых НГЭС являются спектральные зависимости поглощения, отражения и фотолюминесценции (ФЛ) [3] изучение которых проводили с помощью набора спектральной аппаратуры на базе монохроматоров МДР-41.

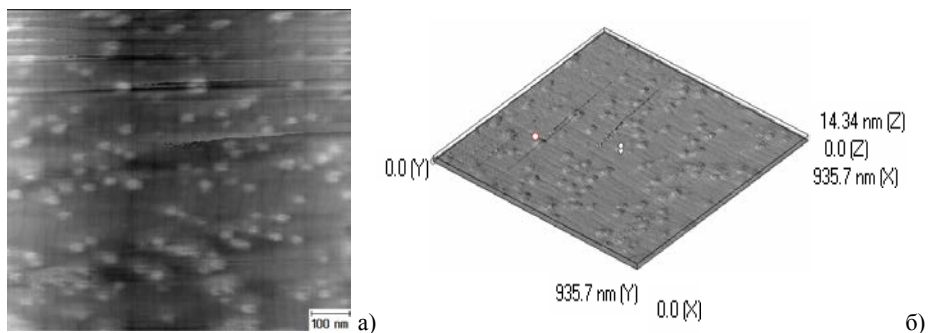


Рис.1. Структура с КТ Ge на Si подложке, три импульса: а – двумерное изображение, б – трехмерное изображение.

Fig.1. Structure with Ge QDs on a Si substrate, three pulses: a – two-dimensional image, b – three dimensional image.

Были также выращены НГЭС с КТ по двум структурным схемам. Образцы полученные по первой схеме включали: Si подложку, подготовленную по вышеописанной технологии; буферный слой GaP легированный Sn; сверхрешетки n- и p- типа, состоящие из КТ Ge, разделенных спейсерными слоями n-типа GaP легированные Te и спейсерными слоями p-типа GaP легированные Zn; слой p- типа GaP толщиной 80 нм. Между сверхрешетками располагали: слой n-типа GaP толщиной 20 нм, прилегающий к сверхрешетке n-типа; слой p-типа GaP толщиной 20 нм, прилегающий к сверхрешетке p-типа. НГЭС с КТ полученные по второй схеме отличались отсутствием слоев n- и p-типа GaP между сверхрешетками.

На рис. 2а представлены спектры ФЛ образца выращенного по первой схеме при возбуждении лазерным излучением с $\lambda=4880\text{\AA}$ в сравнении с n-p структурой на основе GaP. На этих спектрах видим широкую полосу с максимумом 1.5 eV. При возбуждении лазерным излучением с $\lambda=5145\text{\AA}$ этой же структуры, максимум излучения ФЛ в области КТ был меньше, чем максимум ФЛ p-n GaP. Наблюдаемая зависимость интенсивности ФЛ этой полосы от энергии фотонов возбуждающего излучения, объясняется эффектом экситонного дробления высокоэнергетичных квантов жесткого излучения, когда КТ может генерировать две и более электронно-дырочные пары, если энергия фотона превышает в 2 и более раз энергию образования электронно-дырочной пары.

На рис. 2 б представлены спектры ФЛ, полученные при $T=77\text{K}$, $T=300\text{K}$ и $\lambda=4880\text{\AA}$ НГЭС, с образцов выращенных по второй структурной схеме в сравнении с n-p структурой на основе GaP. Из сопоставления спектров, представленных на рис. 2 при $T=300\text{K}$, видно, что наличие КТ в

области р-п перехода приводит к уменьшению излучательной рекомбинации. Совпадение значений энергии максимумов фотолюминесценции НГЭС с КТ обусловлено различием рассогласования постоянных решеток GaP-Ge (3.7%), которое приводит к формированию соответственно КТ с высотой $h \leq 13$ нм для Ge, что подтверждается и исследованиями АСМ. Полученные значения энергии для КТ Ge вышеуказанных размеров сопоставимы с энергией пиков ФЛ КТ, представленных на рис. 2 а. Небольшое изменение энергетического положения максимумов ФЛ в интервале температур $T=300-77$ К, наблюдаемое на рис. 2 б, соответствует характеру температурной зависимости энергетического спектра КТ.

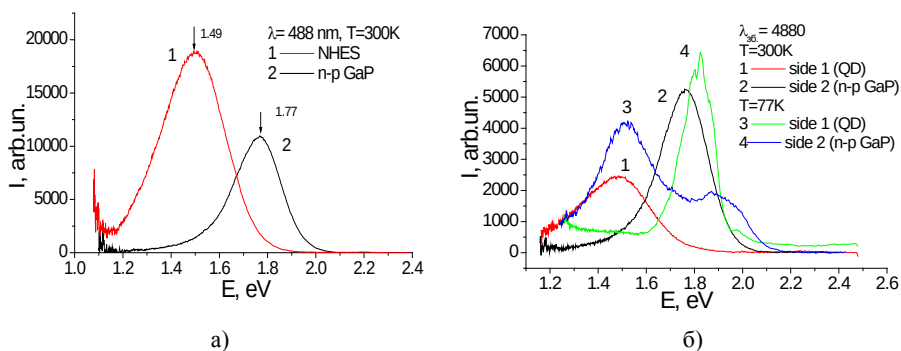


Рис. 2. Спектры фотолюминесценции: а - образцы полученные по первой структурной схеме, б - образцы полученные по второй структурной схеме.

Fig.2. Photoluminescence spectra: a-samples obtained by the first structural scheme, b-samples obtained by the second structural scheme.

Из спектров, представленных на рис. 2 также следует, что отсутствие КТ в области р-п перехода уменьшает безизлучательную рекомбинацию неравновесных носителей зарядов и для создания высокоэффективных СЭ необходимо создавать массивы КТ в объеме р- и п областей, но не в центральной части обедненного слоя р-п перехода.

Полученные результаты хорошо совпадают с литературными данными [4], при этом мы получаем результаты, используя более дешевое оборудование и оригинальный метод.

4. Заключение

Разработаны, изготовлены и налажены специальная установка и каскада горизонтального типа. Экспериментально обоснован выбор режима химико-динамической полировки исходной Si пластины, отработаны оптимальные режимы выращивания буферного эпитаксиального слоя из насыщенных растворов-расплавов. Получены открытые КТ Ge на буферных

Si слоях исходной подложки Si при различных технологических условиях методом ЖФЭ с ИОНП, проведены их исследования методом АСМ, выявлены морфология, шероховатость поверхности, линейные размеры КТ, плотность их высева. Показано, что применение метода АСМ позволяет проводить контроль качества поверхности исходных материалов при различных стадиях технологического процесса. Проведены измерения и анализ спектров ФЛ, образцов полученных по двум структурным схемам. Обнаружено, что для уменьшения безизлучательной рекомбинации в многослойных р-п НГЭС необходимо создавать массивы КТ в объеме р- и п областей, но не в центральной части обедненного слоя р-п перехода.

Источники финансирования и выражение признательности

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ по базовой части государственного задания №2015/702

Список литературы

- [1]. Nozik A. Believes quantum-dot solar power could boost output in cheap photovoltaics // N.-Y.: Technology Review, 2007, March/April, p. 49.
- [2]. Марончук І.Є., Кулюткіна Т.Ф., Марончук І.І. Спосіб вирощування епітаксійних наногетероструктур з масивами квантових точок Патент України UA № 94699 Кл. С 30В 19/00, С 30В 29/00, Н 01L 21/20; замов. 20.09.2010; опуб. 10.06.2011, Бюл. №5.
- [3]. Maronchuk I.I., Maronchuk I.E., Sankovitch D.D., Dimova-Malinovska D., Lovchinov K. Deposition by liquid epitaxy and study of the properties of nanoheteroepitaxial structures with quantum dots for high efficient solar cells // Journal of Physics: Conference Series. 2014. № 558. 012049.
- [4]. Köhler U., Jusko O., Pietsch G., Müller B., Henzler M. Strained-layer growth and islanding of Ge on Si(111)-(7×7) studied with STM // Surface Science, 1991, vol. 248, pp. 321-331.

References

- [1] Nozik A. Believes quantum-dot solar power could boost output in cheap photovoltaics. N.-Y.: Tech. Rev., 2007, March/April, p. 49.
- [2]. Maronchuk I E, Kulyutkina T F and Maronchuk I I Method of growth epitaxial nano hetero-junction structures with quantum dots array Patent Ukraine UA № 94699 Class C 30B 19/00, C 30B 29/00, H 01L 21/20. 20.09.2010-10.06.2011 bulletin №5. (In Ukrainian)
- [3]. Maronchuk I.I., Maronchuk I. E., Sankovitch D.D., Dimova-Malinovska D., Lovchinov K. Deposition by liquid epitaxy and study of the properties of nanoheteroepitaxial structures with quantum dots for high efficient solar cells. J. of Phys.: Conf. Ser. 2014. no 558. 012049.
- [4]. Köhler U., Jusko O., Pietsch G., Müller B., Henzler M. Strained-layer growth and islanding of Ge on Si(111)-(7×7) studied with STM. Surf. Sci., 1991, vol. 248, pp. 321-331.

Acknowledgements

The work has been supported by the base part of the state task №2015/702 from the Ministry of Education and Sciences of the Russian Federation.

Investigation of mechanical stresses in the Through-Silicon Vias Technology

Ivan Yu. Lovshenko, Viktor R. Stempitsky

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (BSUIR)

Minsk, 220013, Belarus

lovshenko@bsuir.by, vstem@bsuir.by

Abstract: *The results of the stress distribution and three-dimensional deformations computer simulation in “Through-Silicon Vias” structures presented. The research results improve production processes manufacturability and reliability of formed integrated circuits.*

Keywords: *Through-Silicon Vias Technology, 3D-integration, mechanical stress, CAD, modeling.*

Исследование механических напряжений в технологии формирования трехмерных межслойных соединений

Ловшенко И.Ю., Стемпицкий В.Р.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

г. Минск, 220013, Республика Беларусь

lovshenko@bsuir.by, vstem@bsuir.by

Аннотация: *Представлены результаты моделирования распределения механических напряжений и деформаций в структурах трехмерных межслойных соединений. Результаты исследований обеспечивают повышение технологичности производственных процессов и надежности формируемых интегральных микросхем.*

Ключевые слова: *технология трехмерных межслойных соединений, 3D-интеграция, механические напряжения, САПР, моделирование.*

1. Введение

Технология 3D-интеграции обеспечивает высокую плотность интеграции компонентов при малом форм-факторе, малых габаритах корпуса и меньшей потребляемой мощности и, следовательно, меньшую стоимость 3D-устройств в сравнении с 2D-схемами [1]. Трехмерная интеграция

кремниевых схем обладает рядом преимуществ по сравнению с другими путями развития микроэлектроники (2D масштабирование, нанозлектроника). К таким преимуществам можно отнести следующее: энергоэффективность, повышение производительности, значительная миниатюризация изделий, снижение затрат, модульная конструкция для улучшения времени выхода на рынок [1-2].

3D-интеграция пластин позволяет получать требуемые для каждой системы электрические, высокочастотные, оптические, тепловые и механические характеристики. Так, первоначально с помощью оптимизированных технологических процессов можно изготовить логику и память на отдельных пластинах, а затем объединить эти пластины в ходе 3D-интеграции. Тем самым увеличивается выход годных систем и уменьшается их стоимость. При объединении каждая последующая пластина утоняется. Первая пластина, толщина которой не уменьшается, служит механическим основанием. В результате пакет пластин по толщине почти не отличается от основной пластины, что допускает монтаж в корпус с помощью существующего оборудования. Благодаря наличию множества коротких (длиной в несколько микрометров) межслойных соединений обеспечивается широкая полоса пропускания данных и чрезвычайно малые значения задержки сигнала и потребляемой мощности [1].

2. Технология трехмерных межслойных соединений

Гетерогенная 3D-интеграция пластин с применением технологии трехмерных межслойных соединений (англ. Through-Silicon Vias Technology, TSV Technology), совместимая с процессами конечной обработки благодаря возможности объединения различных материалов, технологических процессов и функциональных компонентов – наиболее перспективная технология формирования трехмерных систем.

Ведущие компании, занимающиеся сборкой и тестированием интегральных схем (ИС) и разрабатывающие технологию сквозных межсоединений, достигли определенного прогресса, благодаря чему началось серийное производство по новой технологии [3]. Научно-исследовательская деятельность многих компаний (IBM, TSMC, Globalfoundries) направлена на обеспечение правил проектирования, оптимизацию конструкций и технологических процессов. Лидирующие позиции в рассматриваемой сфере занимает тайваньская фаундрикомпания TSMC, которая в 2012 году освоила производство кристаллов 3D по тех-

нологии TSV и совместно с компанией Qualcomm приступила к разработке и изготовлению соответствующих изделий [4].

Элементы интегральных схем 3D микросборок могут изготавливаться следующими способами:

- между слоями межсоединений в пленке рекристаллизованного кремния, для получения которого проводится лазерный нагрев либо быстрый термический отжиг участка, осажденного на пластину аморфного кремния. Транзисторы изготавливаются с помощью процесса, совместимого с BEOL-операциями.

- послойно в пленках поликристаллического кремния, получаемых осаждением аморфного материала поверх слоя с готовыми транзисторными структурами и его последующего лазерного нагрева или быстрого отжига для получения поликремния. Соединения приборов выполняются с помощью вольфрамовых межслойных сквозных отверстий.

- послойно в пленках монокристаллического кремния. Слой монокристаллического кремния переносится с КНИ-пластины на оксидную поверхность слоя с готовыми транзисторами. Промежуточные сквозные отверстия заполняются поликремнием и/или вольфрамом [5-6].

Существует ряд проблем реализации технологии трехмерных межслойных соединений. Параметры технологического процесса (в частности, температурный режим) влияют на свойства транзисторов и ограничивают выбор используемых материалов – кремнием и вольфрамом. Серьезная проблема трехмерных процессоров – более сильный нагрев в сравнении с однокристалльными схемами и низкий выход годных. TSV велики по сравнению с транзисторными структурами. Так для технологии 45 нм, площадь TSV (10 мкм x 10 мкм) сравнима с 50 МОП-транзисторами. Существуют эффекты, обусловленные стрессом, который вызван несоответствием между материалом, заполняющим отверстия (медь, вольфрам) и кремнием.

Использование всех преимуществ 3D-интеграции требует сложных методов проектирования с использованием новых инструментов САПР.

3. Результаты

Моделирование структуры TSV отверстий проводилось в программном комплексе компании Silvaco, который позволяет рассчитывать механические напряжения и деформации в трехмерных структурах и их изменение во время выполнения технологического маршрута. Структуры TSV формировались в объеме кремния размерами 10 мкм x 10 мкм x 5 мкм. На

подложку осаждался нитрид кремния толщиной 0,1 мкм. В осажденном слое нитрида кремния создается маска для последующей операции травления. На рис. 1 представлены окна в нитриде кремния: квадрат с длиной стороны 1 мкм (далее структура №1) и восьмиугольник, описанный окружностью с радиусом 1,5 мкм (далее структура №2).

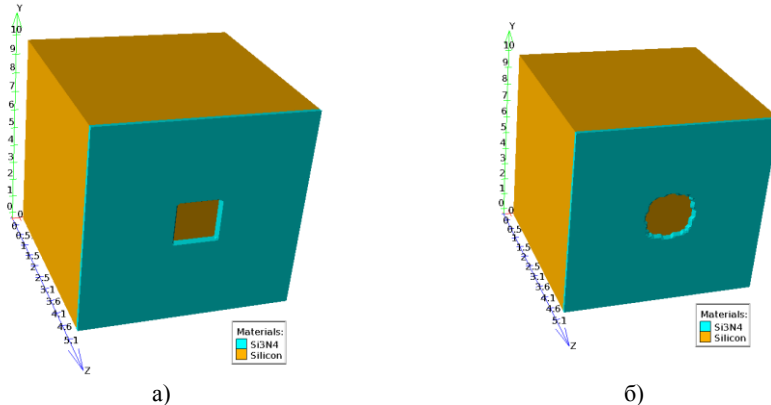


Рис. 1. Окна в нитриде кремния (а - структура №1, б — структура №2).

Fig. 1. The windows in the silicon nitride (a - №1 structure, b - structure №2)

Далее происходит анизотропное травление кремния в течении 5 минут со скоростью в вертикальном направлении – 2 мкм/мин. Создание слоя диэлектрика на боковых стенках отверстия, достигается проведением операции окисления. Результат представлен на рис. 2.

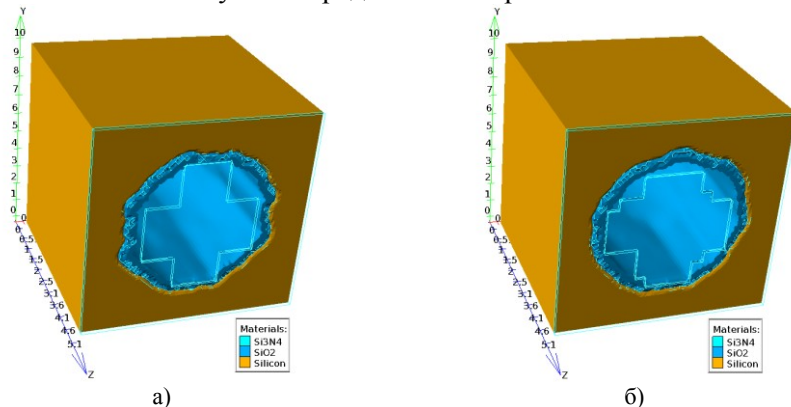


Рис. 2. Слой оксида кремния на боковых стенках отверстия (а - структура №1, б — структура №2).

Fig. 2. A layer of silicon oxide on the hole sidewalls (a - №1 structure, b - structure №2)

Отверстие заполняется вольфрамом в процессе осаждения. На рис. 3 представлена структура после проведения химико-механической полировки (ХМП).

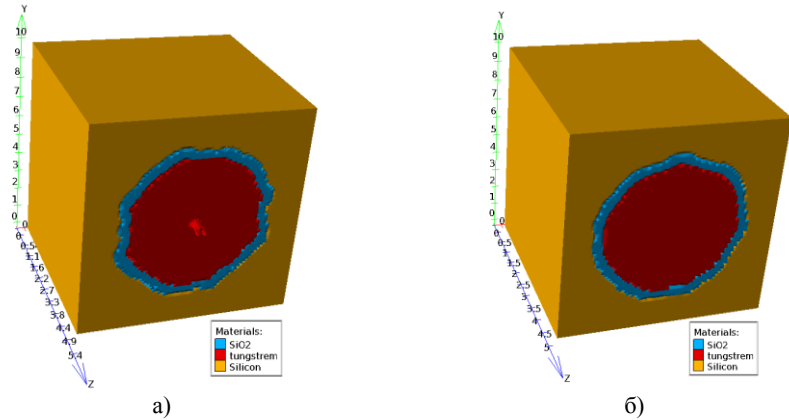


Рис. 3. Отверстие, заполненное вольфрамом после ХМП
(а - структура №1, б — структура №2).

Fig. 3. The hole filled with tungsten after CMP (a - №1 structure, b - structure №2)

Исследование механических напряжения проводилось при условии нагрева структуры (изменение температуры от 27 °С до 200 °С). Результаты распределения нормальных механических напряжений σ_{YY} и σ_{ZZ} вдоль соответствующих направлений представлены на рис. 4–5.

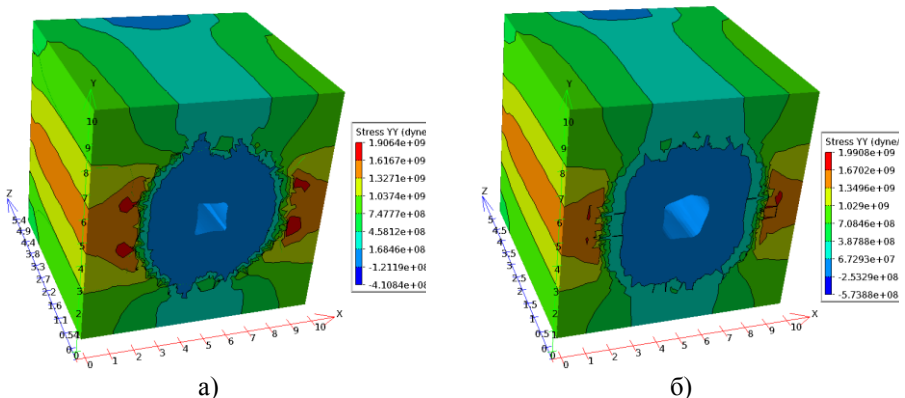


Рис. 4. Распределение механических напряжений в плоскости YY
(а - структура №1, б — структура №2).

Fig. 4. Mechanical stresses distribution in the YY plane (a - №1 structure, b - structure №2)

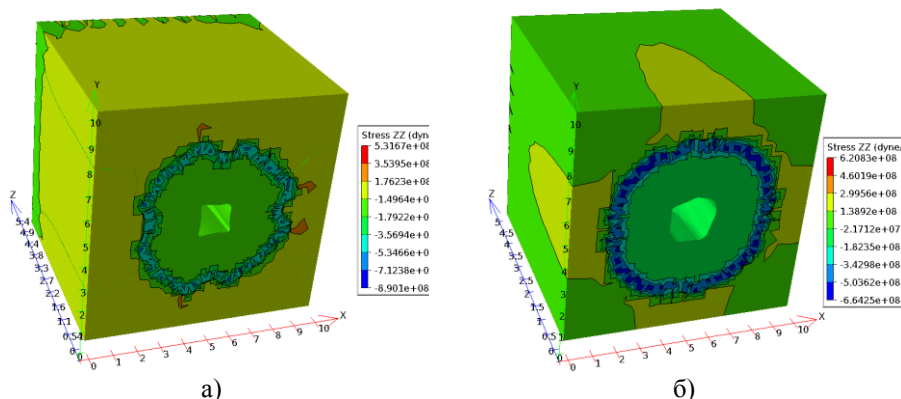


Рис. 5. Распределение механических напряжений в плоскости ZZ (a - структура №1, б — структура №2).

Fig. 5. Mechanical stresses distribution in the ZZ plane (a - №1 structure, b - structure №2)

Из приведенных распределений механических напряжений в структурах видно, что максимальная абсолютная величина механических напряжений зависит от конфигурации TSV. Так для направления YY максимальное значение механических напряжений по модулю равно 0,19 ГПа для структуры № 1 и 0,2 ГПа для структуры № 2. Для направления ZZ напряжения соответственно равны $8,9 \cdot 10^7$ Па и $6,64 \cdot 10^7$ Па.

Кроме того, конфигурация оказывает значительное влияние на распределение механических напряжений по пластине. Для структуры № 2 распределение механических напряжений более равномерно, что и отражается на более низких абсолютных значениях σ_{YY} и σ_{ZZ} .

4. Заключение

Проведено технологическое моделирование структуры трехмерных межслойных соединений. Проанализировано распределение нормальных механических напряжений σ_{YY} и σ_{ZZ} для структур с разными конфигурациями масок травления. Для структуры с окном в виде восьмиугольника, описанного окружностью с радиусом 1,5 мкм распределение механических напряжений более равномерно, что и отражается на более низких абсолютных значениях σ_{YY} и σ_{ZZ} (максимальная абсолютная величина нормальных механических напряжений составляет 0,2 ГПа).

Источники финансирования

Исследования проводятся при финансовой поддержке государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Фотоника, опто и микроэлектроника» (задание 3.1.01).

Список литературы

- [1] Юденцов В. Трехмерная кремниевая технология. Что, где, когда? Часть 1 // Электроника: наука, технология, бизнес. 2011. №4. С. 70-75.
- [2] Васильев А. Современные технологии 3D-интеграции // Компоненты и технологии. 2010. №1. С. 156-158.
- [3] Мариниссен Э.Я., Ервант З. Тестирование трехмерных чипов, содержащих межуровневые переемы. Часть 1 // Компоненты и технологии. 2011. №2. С. 19-24.
- [4] Мариниссен Э.Я., Ервант З. Тестирование трехмерных чипов, содержащих межуровневые переемы. Часть 2 // Компоненты и технологии. 2011. №3. С. 12-16.
- [5] Ranganathan N., Da Y., Lee L.Y. [et al.]. Influence of Bosch Etch Process on Electrical Isolation of TSV Structures // IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology. 2011. No 10. P. 1497-1507.
- [6] Kraft J., Schrank F., Teva J., Siegert J. [et al.] 3D Sensor Application with Open Through Silicon Via Technology // Electronic Components and Technology Conference. 2011. P. 560-566.

References

- [1] Judencov V. [Trehmernaja kremnievaja tehnologija. Chto, gde, kogda? Chast' 1]. Elektronika: nauka, tehnologija, biznes. 2011. No. 4. pp. 70-75. (In Russian).
- [2] Vasil'ev A. [Sovremennye tehnologii 3D-integracii]. Komponenty i tehnologii. 2010. No. 1. pp. 156-158. (In Russian).
- [3] Marinissen Je.Ja., Ervant Z. [Testirovanie trehmernyh chipov, sodержashhih mezhurovnevye peremychki. Chast' 1]. Komponenty i tehnologii. 2011. No. 2. pp. 19-24. (In Russian).
- [4] Marinissen Je.Ja., Ervant Z. [Testirovanie trehmernyh chipov, sodержashhih mezhurovnevye peremychki. Chast' 2]. Komponenty i tehnologii. 2011. No. 3. pp. 12-16. (In Russian).
- [5] Ranganathan N., Da Y., Lee L.Y. [et al.]. Influence of Bosch Etch Process on Electrical Isolation of TSV Structures. IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology. 2011. No 10. P. 1497-1507.
- [6] Kraft J., Schrank F., Teva J., Siegert J. [et al.] 3D Sensor Application with Open Through Silicon Via Technology. Electronic Components and Technology Conference. 2011. P. 560-566.

Acknowledgements

This work was supported by the grant 3.1.01 of Belarusian National Scientific Research Program “Photonics, Opto- and Microelectronics”.

Development of diagnostic model of RTD based on nanoscale multilayer AlGaAs heterostructures for prediction it reliability

Sergey A. Meshkov¹, Mstislav O. Makeev¹, Yury A. Ivanov¹

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russian Federation
sb67241@mail.ru

Abstract: The RTD functionality region formation technique, reliability forecast technique and diagnostic models are considered. The results of the application of such experimental methods as IR-spectroscopic ellipsometry, Auger spectroscopy, Raman spectroscopy, atomic force microscopy, secondary electron microscopy, focused ion beam in combination with the accelerated aging of studied samples to obtain diagnostic information on the state of RTD are considered.

Keywords: resonant tunneling diode, reliability forecast, diagnostic model, diagnostic information.

Разработка диагностической модели РТД на основе наноразмерных многослойных AlGaAs гетероструктур для прогнозирования его надежности

¹Мешков С.А., ¹Макеев М.О., ¹Иванов Ю.А.

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
г. Москва, 105005, Российская Федерация
sb67241@mail.ru

Аннотация: Рассматриваются методика построения области работоспособности, методика построения прогноза надежности и диагностическая модель резонансно-туннельного диода. Приводятся результаты применения экспериментальных методов получения диагностической информации о состоянии РТД: ИК-спектроскопической эллипсометрии, Оже-спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, атомно-силовой микроскопии, микроскопии во вторичных электронах и фокусированного ионного пучка в комбинации с приёмом искусственного старения исследуемых образцов.

Ключевые слова: резонансно-туннельный диод, диагностика, прогнозирование надежности, диагностическая модель, диагностическая информация.

1. Введение

Одним из перспективных приборов современной наноэлектронной элементной базы является резонансно-туннельный диод (РТД) на основе многослойных AlGaAs гетероструктур. Применения РТД в радиоэлектронике исследованы достаточно подробно. В частности, в работах авторов [1-5] показаны преимущества использования РТД в нелинейных преобразователях СВЧ радиосигналов. Вопросы надежности РТД исследованы менее подробно, так, в работах авторов [6-10] акцент делается на диффузионных процессах в структуре РТД, приводящих к постепенному отказу.

Очевидно, что наиболее достоверные и полные показатели надежности РЭС дают результаты эксплуатации. Однако это требует больших затрат времени. Традиционные методы испытаний во многих случаях также не позволяют подтвердить заданный уровень надежности РЭС из-за наличия скрытых дефектов, а также ввиду того, что ускорение процессов деградации в процессе испытаний не всегда приводит к отказу.

Одним из перспективных направлений в разработке методов оценки надежности наноэлектронной элементной базы представляется прогнозирование ее будущего состояния. Задачу повышения надежности технической системы с построением прогноза надежности на заданный период эксплуатации в заданных условиях решает техническая диагностика (ТД), научные основы которой изложены, в частности, в [11]. В докладе рассматриваются основные элементы структуры ТД, а именно, методика построения области работоспособности, методика построения прогноза надежности и диагностическая модель применительно к РТД. При этом надежность РТД рассматривается в работе с позиций модели постепенных отказов, а отказ РТД обуславливается отказом нелинейного преобразователя радиосигналов, в состав которого входит и параметры которого определяет РТД.

2. Диагностическая модель РТД

РТД содержит резонансно-туннельную структуру (РТС) (набор слоев AlAs/GaAs), приконтактные области (слои Si-легированного GaAs) и омические контакты. РТС состоит из слоев толщиной до нескольких атомарных слоев. Деградационные процессы – межслойная диффузия Al в РТС и Si в приконтактных областях – приводят к изменению формы по-

тенциальных барьеров и ямы и, как следствие, к изменению условий токопереноса в структуре и изменению формы ВАХ. Деградация омических контактов приводит к увеличению контактного сопротивления и смещению ВАХ относительно исходного положения. Изменение ВАХ РТД вызывает изменение выходных электрических характеристик нелинейного преобразователя радиосигналов на основе РТД.

Диагностическая модель предназначена для построения прогноза надежности РТД. Она включает:

- математическую модель токопереноса в РТС,
- математическую модель деградации РТС и приконтактных областей,
- математическую модель деградации омических контактов.

Построение ВАХ РТС ведется с использованием формулы Цу-Есаки [12-13]:

$$J(E, U) = C \int_0^{\infty} E_F \cdot F(E, U) \cdot T(E, U) dE, \quad (1)$$

где J – плотность тока поперек слоев, А/см^2 ; U – напряжение, приложенное к структуре, В; C – постоянная, равная $2 \cdot 10^9 \text{ А/}(\text{см}^2 \cdot \text{эВ}^2)$; E – кинетическая энергия движения электронов в зоне проводимости поперек слоев РТС, эВ; E_F – уровень Ферми, эВ; $F(E, U)$ – подынтегральная функция Ферми; $T(E, U)$ – прозрачность гетероструктуры, рассчитывается методом матриц переноса [13].

Математическая модель диффузионной деградации РТС и приконтактных областей основывается на законах Фика. Коэффициенты диффузии Al и Si в GaAs зависят от температуры (закон Аррениуса) и от концентрации n-легирующей примеси (эффект уровня Ферми) [9]:

$$D_{\text{Al, Si}}(n) = D_0 \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{k_B T}\right)} \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^3, \quad (2)$$

где $D_{\text{Al, Si}}(n)$ – коэффициент диффузии Al и Si в n-легированном GaAs; D_0 – предэкспоненциальный множитель, $\text{см}^2/\text{с}$; E_a – энергия активации деградационного процесса, эВ; k_B – постоянная Больцмана; T – температура, К; n и n_i – концентрации электронов в зоне проводимости и собственных носителей заряда, см^{-3} .

Предэкспоненциальные множители для двух гетероструктур различных изготовителей в (2) определены авторами экспериментально [6-9].

Моделирование диффузии в AlAs/GaAs резонансно-туннельной гетероструктуре проводится методом конечных элементов.

Математическая модель деградации омических контактов описывает изменение омического сопротивления R_C во времени. Авторами предложено соотношение [14]:

$$R_C = R_{C0} + \gamma \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{2kT}\right) \cdot \sqrt{t}, \quad (3)$$

где R_{C0} – сопротивление омических контактов в начальный момент эксплуатации, Ом; γ – коэффициент, Ом/с^{1/2}; E_a – энергия активации деградационных процессов AuGeNi омических контактов, эВ; t – время, с.

3. Практические результаты

Получение практических результатов нацелено на определение численных параметров, входящих в диагностическую модель РТД и описывающих скорость изменения ВАХ под действием внешних факторов. Для получения диагностической информации используются приём искусственного старения путем приложения повышенной температуры для интенсификации деградационных процессов, и методы оптической и атомно-силовой микроскопии, ИК-спектроскопической эллипсометрии, Оже-электронной спектроскопии с профилированием по глубине, спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) для определения скорости диффузионной деградации РТС, микроскопии во вторичных электронах и фокусированного ионного пучка для определения скоростей диффузионной деградации РТС и приконтактных областей в сочетании с измерениями ВАХ диодов и TLM-структур.

В работах авторов настоящей статьи [6-9] методом ИК-спектроскопической эллипсометрии определены коэффициенты диффузии Al и Si в GaAs (исследуемые гетероструктуры были изготовлены на различных предприятиях):

$$D_{Al, Si} = 0,17 \cdot \exp\left(-\frac{3,5}{k_B T}\right) \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^3, \quad (4)$$

$$D_{Al, Si} = 0,22 \cdot \exp\left(-\frac{3,5}{k_B T}\right) \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^3. \quad (5)$$

Исследование диффузионных процессов в AlAs/GaAs гетероструктурах проводилось также на «модельных» подложках методом спектроскопии комбинационного рассеяния света с длиной волны лазера 473 см⁻¹. Искусственное старение подложек проводилось в атмосфере азота при температуре 700°C в течение 1 часа. Полученные данные о коэффициентах

диффузии ($\sim 10^{-19}$ см²/с) по порядку величины совпадают с полученными ранее методом ИК-спектроскопической эллипсометрии.

Коэффициент γ , характеризующий скорость диффузионной деградации омических контактов определен авторами для двух партий РТД различных изготовителей экспериментально [6,10,14].

4. Заключение

Методика построения прогноза надежности РТД в заданных условиях эксплуатации основана на последовательном приложении циклов дестабилизирующих воздействий на партию РТД, эффект которых постепенно накапливается в каждом цикле, с тем, чтобы в каждом цикле получить вызванное ими изменение ВАХ в рабочей области не менее, чем на порядок больше погрешности измерения. С другой стороны, интенсивность, доза и длительность воздействия не должны привести к отказу РТД уже в первом цикле воздействий. Интенсивность, доза, длительность и количество циклов воздействий выбираются исходя из условий эксплуатации, априорной информации о чувствительности ВАХ РТД к воздействию данного вида, требуемой точности прогнозной оценки надежности и трудоемкости процесса искусственного старения.

После приложения дестабилизирующих воздействий и получения отклика на них с использованием диагностической модели осуществляется пересчет изменений ВАХ на заданные условия эксплуатации и определяется момент времени отказа. Отказ РТД классифицируется как выход ВАХ за пределы области работоспособности, методика построения которой рассматривается в докладе.

Полученные материалы и методы могут быть использованы также в производственных условиях при испытаниях и планировании технологических операций контроля параметров элементной базы.

Источники финансирования и выражение признательности

Приведенные результаты получены в рамках выполнения государственного задания № 16.1116.2014/К Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

- [1] S. Suzuki, M. Asada, A. Teranishi, H. Sugiyama, H. Yokoyama. Fundamental Oscillation of Resonant Tunneling Diodes above 1 THz at Room Temperature // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97, No. 24. 242102.
- [2] Ivanov Y. A., Meshkov S. A., Fedorenko I. A., Fedorkova N. V., Shashurin, V. D. Sub-harmonic mixer with improved intermodulation characteristics based on a resonant tunnel diode // Journal of Communications Technology and Electronics. 2010. V. 55, I 8, pp. 982-988.

- [3] Ю. А. Иванов, С. А. Мешков, В. Ю. Синякин, И. А. Федоренко, Н. В. Федоркова, И. Б. Федоров, В. Д. Шашурин. Повышение показателей качества радиоэлектронных систем нового поколения за счет применения резонансно-туннельных нанодиодов // Наноинженерия. 2011. №1. С. 34-43.
- [4] Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin V.D. Investigation of UHF low power rectifier based on resonant tunneling diode // KpbiMuKo 2010 CriMiCo 2010 - 2010 20th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (Sevastopol: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.) 2010. P. 859-860.
- [5] Ivanov Yu.A., Gudkov A.G., Agasieva S.V., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Makeev M.O. Radio frequency identification technology with passive tags in invasive biosensor systems // CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 1063-1064.
- [6] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков, В.Ю. Синякин. Исследования термической деградации резонансно-туннельных диодов на базе AlAs/GaAs наногетероструктур // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 12. С. 23-29.
- [7] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, В.Ю. Синякин, С.А. Мешков, С.В. Агасиева, В.Д. Шашурин. Assessment of resistance of AlAs/GaAs nanoscale heterostructures of resonant-tunneling diodes to diffusion destruction by means of IR-spectroscopic ellipsometry // CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 754-755.
- [8] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков. Quality diagnostics of nanoscale AlAs/GaAs resonant tunnelling heterostructures based on IR-spectroscopic ellipsometry // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 584. 012014. doi:10.1088/1742-6596/584/1/012014.
- [9] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков. Оценка стойкости к диффузионной деградации наноразмерных AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктур методом ИК-спектральной эллипсометрии // Физика и техника полупроводников. 2016. Том 50, вып. 1. С. 83-88.
- [10] М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков, В.Д. Шашурин. К вопросу о повышении надежности смесительных AlAs/GaAs резонансно-туннельных диодов конструкторско-технологическими методами // Наука и образование: электронное научно-техническое издание. 2013. № 11. С. 229-243.
- [11] Биргер И. А. Техническая диагностика. М.: Машиностроение», 1978. 240 с.
- [12] R. Tsu, L. Esaki. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Lett., V. 22, I. 11, 1973. P. 562-564.
- [13] Нанотехнологии в электронике / Под ред. Ю.А. Чаплыгина. – М.: Техносфера, 2005. – С. 448.
- [14] Макеев М.О., Иванов Ю.А., Мешков С.А., Назаров В.В. Исследование термической деградации AuGeNi омических контактов резонансно-туннельных диодов на базе наноразмерных AlAs/GaAs гетероструктур // Наука и образование: электронное научно-техническое издание. 2012. №9. С. 14.

References

- [1] S. Suzuki, M. Asada, A. Teranishi, H. Sugiyama, H. Yokoyama. Fundamental Oscillation of Resonant Tunneling Diodes above 1 THz at Room Temperature // *Appl. Phys. Lett.* 2010. V. 97, No. 24. 242102.

- [2] Ivanov Y.A., Meshkov S.A., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin, V.D. Sub-harmonic mixer with improved intermodulation characteristics based on a resonant tunnel diode // *Journal of Communications Technology and Electronics*. 2010. V. 55, I 8, pp. 982-988.
- [3] Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinjakina V.Yu., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Fedorov I.B., Shashurin V.D. [Increase of quality of radio-electronic systems of new generation due to application of resonant tunneling nanodiodes] // *Nanoinzheneriya [Nanoengineering]*. 2011. № 1, pp. 34-43.
- [4] Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Fedorenko I.A., Fedorkova N.V., Shashurin V.D. Investigation of UHF low power rectifier based on resonant tunneling diode // *KpbiMuKo 2010 CriMiCo 2010 - 2010 20th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings* (Sevastopol: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.) 2010. P. 859-860.
- [5] Ivanov Yu.A., Gudkov A.G., Agasieva S.V., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Makeev M.O. Radio frequency identification technology with passive tags in invasive biosensor systems // *CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings* (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 1063-1064.
- [6] Makeev M.O., Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu. Investigation of thermal degradation of resonant tunneling diodes based on nanoscale AlAs/GaAs heterostructures // *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*. 2014. № 2. P. 23-29. (In Russian).
- [7] M.O. Makeev, Yu.A. Ivanov, V.Yu. Sinyakin, S.A. Meshkov, S.V. Agasieva, V.D. Shashurin. Assessment of resistance of AlAs/GaAs nanoscale heterostructures of resonant-tunneling diodes to diffusion destruction by means of IR-spectroscopic ellipsometry // *CriMiCo 2014 - 2014 24th International Crimean Conference Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings* (Sevastopol, Crimea, Russia, 2014). P. 754-755.
- [8] M.O. Makeev, Y.A. Ivanov, S.A. Meshkov. Quality diagnostics of nanoscale AlAs/GaAs resonant tunnelling heterostructures based on IR-spectroscopic ellipsometry // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2015. V. 584. 012014. doi:10.1088/1742-6596/584/1/012014.
- [9] M.O. Makeev, Y.A. Ivanov, S.A. Meshkov. Assessment of the resistance to diffusion destruction of AlAs/GaAs nanoscale resonant-tunneling heterostructures by IR spectral ellipsometry // *Semiconductors*. 2016. V. 50, I. 1. P. 83-88.
- [10] Makeev M.O., Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Shashurin V.D. [About reliability improvement of mixing AlAs/GaAs resonant tunneling diodes by design and engineering means] // *Nauka i obrazovanie: jelektronnoe nauchno-tehnicheskoe izdanie [Science and education: electronic scientific and technical journal]*. 2013. № 11, pp. 229-243. (In Russian).
- [11] Birger I A 1978 Tehnicheskaja diagnostika (Moscow: Mashinostroenie). (In Russian).
- [12] R. Tsu, L. Esaki. Tunneling in a finite superlattice // *Appl. Phys. Lett.*, V. 22, I. 11, 1973. P. 562-564.
- [13] Chaplugin Yu. A. [Nanotechnology in Electronics] (Moscow: Tehnosfera) 2005. 448 p. (In Russian).
- [14] Makeev M.O., Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Nazarov V.V. [Study of thermal degradation of AuGeNi ohmic contacts of resonant tunneling diodes based on nanoscale AlAs/GaAs heterostructures] // *Nauka i obrazovanie: jelektronnoe nauchno-tehnicheskoe izdanie [Science and education: electronic scientific and technical journal]*. 2012. №9. P. 14. (In Russian).

Acknowledgements

The research work was supported by Ministry of Education and Science of the Russian Federation (State contract № 16.1116.2014/K).

Creating the single-electron transistors by electromigration and electrotrapping

Andrew G. Galstyan, Sarkis A. Dagesyan, Eugene S. Soldatov

Moscow state university n.a. M.V. Lomonosov

Moscow, 119991, Russian Federation

ag.galstjan@physics.msu.ru

Abstract: The technique of manufacturing the planar high-temperature single-electron transistors is presented. Elaborated improved electromigration system allows creation the 2-4 nm wide nanogaps. A system of quantum dots (2-4 nm gold nanoparticles) incorporation into such gaps by elektrotrapping is developed. Electron transport characteristics of prepared nanotransistors show a correlated character of electron tunneling in such systems at 77 K.

Keywords: nanostructures, single-electron transistor, electromigration, electrostatic trapping, gold nanoparticles

Создание одноэлектронных транзисторов с помощью электромиграции и электротреппинга

А.Г. Галстян, С.А. Дагесян, Е.С. Солдатов

Московский Государственный университет имени М.В. Ломоносова

г. Москва, 119991, Российская Федерация

ag.galstjan@physics.msu.ru

Аннотация: Представлена методика изготовления планарных высокотемпературных одноэлектронных транзисторов с применением диэлектрофореза для встраивания острова (наночастицы золота диаметром 2-4 нм) в созданные с помощью электромиграции нанозазоры между электродами транзисторов шириной 2-4 нм. Измеренные при $T=77$ К вольтамперные характеристики таких нанозадаментов свидетельствуют о коррелированном характере транспорта электронов в полученных структурах.

Ключевые слова: наноструктуры, одноэлектронный транзистор, электромиграция, золотые наночастицы, электротреппинг.

1. Введение

Создание высокотемпературных одноэлектронных транзисторов ($T_{\text{oper}} \geq 77$ К) является весьма актуальной задачей, поскольку подобные устройства позволяют существенно расширить область использования уникальных характеристик одноэлектронных транзисторов в различных областях науки, техники, медицины и др. Ключевым элементом одноэлектронного транзистора (SET) является его центральная часть - остров, который, для реализации высокотемпературного режима работы, должен иметь характерные размеры менее 3 нм для выполнения условий малости влияния температурных и квантовых флуктуаций на систему [1, 2]:

Малость квантовых флуктуаций: $\frac{e^2}{2C} \gg \frac{\hbar}{R_T C}$. Данное соотношение приводит к ограничению сопротивления туннельных переходов:
 $R_T \gg R_q = \hbar / e^2 \approx 25,8 \text{ кОм}$

Малость тепловых флуктуаций: $\frac{e^2}{2C} \gg k_B T$. Это выражение приводит к ограничениям по емкости острова C и его размерам.

При создании высокотемпературных SET для формирования нанозазоров наиболее пригодным является метод электромиграции [3]. Явление электромиграции состоит в увеличении подвижности атомов в тонких пленках металлов при пропускании по ним электрических токов большой плотности, приводящем к разрыву тонкого узкого проводника - нанопровода. Процесс разрыва имеет лавинообразный характер и поэтому для *контролируемого* создания малых нанозазоров необходима своевременная остановка процесса.

Для встраивания наночастиц в зазор простейшим способом является метод высушивания капли раствора с частицами, нанесенной на образец (гравитационный метод) [3]. Однако при использовании данного метода попадание единичной частицы в нанозазор имеет малую вероятность и не может контролироваться по ходу осаждения. Для встраивания *одиночной* рабочей квантовой точки (наночастицы) в зазор весьма перспективным является использование явления диэлектрофореза [4]. Основным преимуществом данного метода является “адресность” и контролируемость процесса. В настоящей работе представлен способ использования данного метода для встраивания золотых наночастиц диаметром 2-4 нм в наноза-

зоры, изготовленные методом электромиграции с помощью специально разработанной усовершенствованной методики.

2. Методика изготовления образцов

На первом этапе изготовления образцов методами электронно-лучевой нанолитографии по методике, описанной в [3], на изолированной слое диэлектрика (SiO_2) подложке изготавливалась система подводящих проводов, управляющих электродов (Рис. 1а) и узких (60 нм) тонкопленочных (14 нм) нанопроводов из золота (Рис. 1б), которые в дальнейшем разрываются с помощью электромиграции. Для этого через нанопровод с помощью разработанного алгоритма пропускались импульсы тока большой плотности с регулируемой амплитудой, а все изменения сопротивления нанопровода отслеживались автоматизированной системой слежения. По прошествии некоторого времени нанопровод разрывался в самом узком месте.

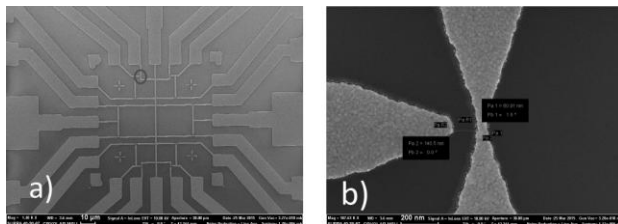


Рис. 1. а) - система электродов (кругом обведена часть, показанная на рис. 1б); б) - тонкопленочный нанопровод шириной 60 нм и управляющий электрод на расстоянии 150 нм от него.

Fig. 1. а) – A system of electrodes (circle circled portion shown in Figure 1b); б) - the nanowire thin film 60 nm in width and gate electrode at a distance of 150 nm from it .

В ходе предварительных измерений было установлено, что для стабильного получения нанозазоров размера 2-4 нм необходимо, чтобы задержка срабатывания автоматизированной системы слежения за изменением сопротивления нанопровода составляла менее 15 мкс. Для реализации такого режима в данной работе была разработана следящая система на основе системы сбора экспериментальных данных ADwin Gold.

В результате был разработан алгоритм, подающий на нанопровод пилообразное напряжение до того момента, когда сопротивление нанопровода достигнет автоматически определяемого порогового значения. При этом экспериментально было определено, что для получения в результате наиболее узких нанозазоров по достижении сопротивлением нанопровода определенного значения (в данной работе это - 2 кОм) необходимо прекратить пропускание тока через образец [5]. После этого в нанопроводе идет процесс релаксации механических напряжений, в результате которого в нем через некоторое время (в данной работе от 1 до 10 часов для разных образцов) происходил саморазрыв провода. В результате получались нанозазоры с характерным размером 2-4 нм (Рис. 2).

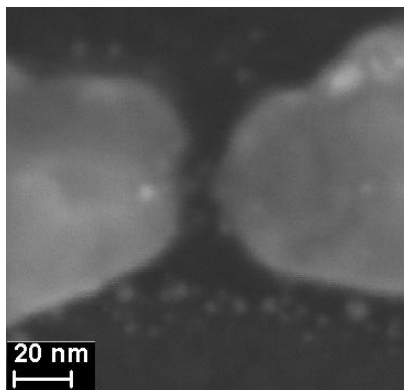


Рис. 2. Типичный вид полученного нанозазора с наночастицами.

Fig. 2. Typical view of obtained nanogap with nanoparticles.

Данный размер зазоров является оптимальным для создания одно-электронных транзисторов на основе используемых в данной работе золотых наночастиц с диаметром 2-4 нм. Именно такие наночастицы были использованы для встраивания в изготовленные зазоры на следующем, заключительном этапе изготовления транзисторов.

3. Электротреппинг

Для надежного встраивания наночастиц в зазор был применен метод диэлектрофореза (электротреппинга) [6], который основан на том, что частицы, находясь в неоднородном электрическом поле электродов, поляризуются и движутся в этом поле вдоль линии его градиента.

В качестве центрального острова одноэлектронного транзистора в данной работе использовались золотые наночастицы диаметром 2-4 нм. Капля раствора с наночастицами наносилась на образец, на зазор подавалось напряжение V_{trap} и, с помощью автоматизированной системы на основе пикоамперметра Keithley 6487, начиналось измерение сопротивления нанозазора, зависимость которого от времени представлена на Рис. 3.

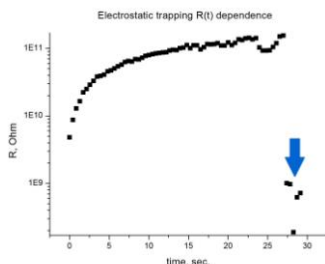


Рис. 3. Зависимость сопротивления нанозазора от времени при проведении электротреппинга.

Fig. 3. The dependence of nanogap resistance on time during the elektrotrapping process.

В момент, когда частица попадает в зазор, сопротивление нанозазора резко уменьшается на несколько порядков (стрелка на рис. 3). Для того, чтобы в зазор была встроена единичная наночастица, в этот момент необходимо прекратить подачу напряжения. Это обеспечивалось разработанной автоматизированной следящей системой.

4. Электрические измерения

После проведения захвата наночастицы в зазор при температуре 77 К проводились тестовые измерения электронного транспорта через полученную систему. Типичный вид полученных ВАХ представлен на Рис. 4. На графике отчетливо видна область, где ток близок к нулю. На данном участке полученный одноэлектронный транзистор находится в состоянии кулоновской блокады туннелирования [1, 2]. Такой вид ВАХ является свидетельством того, что электронный транспорт в полученном нанозаэлементе имеет характер коррелированного туннелирования электронов, а сам нанозаэлемент является одноэлектронным транзистором.

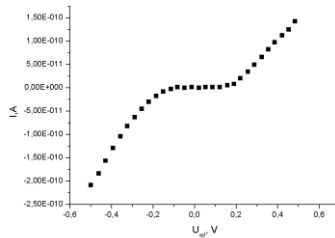


Рис. 4. Вольтамперная характеристика полученного одноэлектронного транзистора.

Fig. 4. The current-voltage characteristic of the resulting single-electron transistor.

5. Заключение

В данной работе разработана усовершенствованная методика изготовления одноэлектронных транзисторов с высокой рабочей температурой ($T_{\text{oper}} > 77$ K). В итоге были получены следующие результаты:

- На основе системы сбора экспериментальных ADwin Gold создана следящая система для проведения электромиграции, позволяющая изготавливать нанозазоры с характерным размером 2–4 нм.
- Разработана система проведения электротреппинга, имеющая преимущество в “адресности” попадания единичной наночастицы в зазор, что позволило значительно повысить эффективность процесса формирования одноэлектронных транзисторов.
- Измеренные при высокой (77 K) температуре вольтамперные характеристики электронного транспорта в полученных с помощью разработанных систем нанозазахорах показывают, что в нанозазахорах было произведено помещение единичных частиц и что электронный транспорт через полученные структуры имеет характер коррелированного туннелирования электронов.

Список литературы

[1] Averin D. V., Likharev K. K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions // Journal of low temperature physics. 1986. V. 62. No. 3-4. P. 345-373.

- [2] Likharev K. K. Single-electron devices and their applications //Proceedings of the IEEE. 1999. V. 87. No. 4. P. 606-632.
- [3] Dagesyan S. A. et al. High-temperature single-electron transistor based on a gold nanoparticle //Proc. of SPIE Vol. – 2014. – V. 9440. – P. 94400P-1.
- [4] Green N. G., Morgan H., Milner J. J. Manipulation and trapping of sub-micron bioparticles using dielectrophoresis //Journal of Biochemical and Biophysical Methods. 1997. V. 35. No. 2. P. 89-102.
- [5] Дагесян С.А., Солдатов Е.С., Степанов А.С., Изготовление предельно малых зазоров в металлических нанопроводах и исследование их характеристик, в журнале Известия РАН. Серия физическая, 2014. Т. 78. № 2. С. 211-215
- [6] Bezryadin A., Dekker C., Schmid G. Electrostatic trapping of single conducting nanoparticles between nanoelectrodes //Applied Physics Letters. – 1997. V. 71. No. 9. P. 1273-1275.

References

- [1] Averin D. V., Likharev K. K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions //Journal of low temperature physics. 1986. V. 62. No. 3-4. P. 345-373.
- [2] Likharev K. K. Single-electron devices and their applications //Proceedings of the IEEE. 1999. V. 87. No. 4. P. 606-632.
- [3] Dagesyan S. A. et al. High-temperature single-electron transistor based on a gold nanoparticle //Proc. of SPIE Vol. – 2014. – V. 9440. – P. 94400P-1.
- [4] Green N. G., Morgan H., Milner J. J. Manipulation and trapping of sub-micron bioparticles using dielectrophoresis //Journal of Biochemical and Biophysical Methods. 1997. V. 35. No. 2. P. 89-102.
- [5] Dagesyan S. A., Soldatov E. S., Stepanov A. S. Forming extremely small gaps in metal nanowires and studying their properties //Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2014. V. 78. No. 2. P. 139-143.
- [6] Bezryadin A., Dekker C., Schmid G. Electrostatic trapping of single conducting nanoparticles between nanoelectrodes //Applied Physics Letters. – 1997. V. 71. No. 9. P. 1273-1275.

Study of the resistive switching effect in vertically aligned carbon nanotubes for the creation of promising memory elements

Marina V. Il'ina, Yuriy F. Blinov, Oleg I. Il'in, Vladimir A. Smirnov
Southern Federal University, Institute of Nanotechnologies, Electronics and
Electronic Equipment Engineering
Taganrog, 347922, Russian Federation
mailina@sfedu.ru

Abstract: The results of experimental and theoretical studies of the resistive switching effect in the vertically aligned carbon nanotubes (VACNTs) are presented. It is shown that under the influence of an external electric field the nanotube deformed and polarized, that leads to the formation of the internal field and to change its resistance. The dependence of the VACNT resistance on polarity and amplitude of the applied voltage pulse is theoretically established and experimentally confirmed. The obtained results can be used to develop and create of promising memory elements based on VACNTs.

Keywords: nanoelectronics, vertically aligned carbon nanotubes, resistive switching, nonvolatile memory.

Исследование эффекта резистивного переключения в вертикально ориентированных углеродных нанотрубках для создания перспективных элементов памяти

Ильина М.В., Блинов Ю.Ф., Ильин О.И., Смирнов В.А.
Южный федеральный университет, Институт нанотехнологий,
электроники и приборостроения
г. Таганрог, 347922, Российская Федерация
mailina@sfedu.ru

Аннотация: В работе представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований эффекта резистивного переключения в вертикально ориентированных углеродных нанотрубках (ВОУНТ). Показано, что под действием внешнего электрического поля нанотрубка поляризуется и деформируется, что приводит к формированию внутреннего поля и изменению ее сопротивления. Теоретически установлена и экспериментально подтверждена зависимость сопро-

тивления *ВОУНТ* от полярности и амплитуды прикладываемого импульса напряжения. Полученные результаты могут быть использованы при разработке и создании перспективных элементов памяти на основе *ВОУНТ*.

Ключевые слова: наноэлектроника, вертикально ориентированные углеродные нанотрубки, резистивное переключение, энергонезависимая память.

1. Введение

Одним из основных направлений развития современной электроники является разработка и исследование энергонезависимых запоминающих устройств с высокими значениями быстродействия и степени интеграции [1-2]. Анализ публикаций показал, что разработка энергонезависимых запоминающих устройств на основе углеродных нанотрубок (УНТ) является перспективным направлением, основанном на использовании уникальных электрических свойств УНТ и малых геометрических размеров, позволяющих повысить масштабируемостью элементов до 2 нм [3-9].

В настоящее время, принцип работы энергонезависимых элементов памяти на основе УНТ построен на электромеханическом взаимодействии ориентированных УНТ между собой или с подложкой [3-6], либо на проявлении мемристорного эффекта в структурах на их основе [7-10]. Среди элементов памяти, построенных на электромеханическом взаимодействии, наилучшие значения плотности ячеек (до 10^{13} см⁻²) и времени переключения (до 10^{-12} пс) продемонстрировал элемент на основе двухслойных вертикально ориентированных углеродных нанотрубок (ВОУНТ) [6]. Однако из-за сложной трехэлектродной структуры контактов и высоких требований к ВОУНТ данный элемент не получил дальнейшего развития [6].

Работы в области создания элементов памяти на основе мемристорного эффекта в структурах с углеродными нанотрубками находятся на начальном этапе и носят несистематический характер [7, 8]. Наиболее перспективным направлением представляется формирование мемристорных структур на основе вертикально ориентированных углеродных нанотрубках, испытывающих упругие деформации [9, 10].

Однако, теоретическое описание эффекта переключения сопротивления в ВОУНТ, испытывающих деформации, под действием внешнего электрического поля на данный момент отсутствует, что ограничивает создание на его основе энергоэффективных устройств обработки и хранения информации с заданными и воспроизводимыми параметрами.

Целью данной работы является теоретическое и экспериментальное исследования эффекта резистивного переключения в ВОУНТ, испытыва-

ющих упругие деформации, под действием внешнего электрического поля.

2. Исследуемая модель

В качестве исследуемой модели ячейки энергонезависимой памяти рассматривалась структура, состоящая из верхнего электрода, туннельного зазора d , вертикально ориентированной углеродной нанотрубки (диаметром D , длиной L и модулем Юнга Y) и нижнего электрода (рис. 1). Туннельный зазор формировался для предотвращения релаксации упругой деформации, возникающей в нанотрубке, после прекращения воздействия внешнего электрического поля.

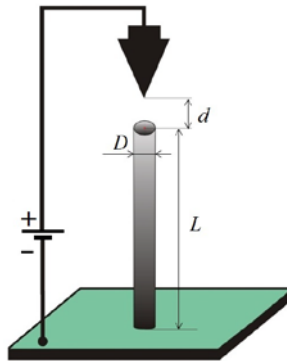


Рис. 1. Схематическое изображение ячейки энергонезависимой памяти на основе ВОУНТ.

Fig. 1. Schematics of the nonvolatile memory cell based on VACNT.

Так как углеродные нанотрубки обладают диэлектрической поляризацией с высоким значением продольной диэлектрической проницаемости $\epsilon_{\parallel}$ [12, 13], то при приложении внешнего электрического поля на поверхности ВОУНТ возникают поляризационные заряды, создающие в нанотрубке напряженность поля $E_P(x,t)$, направленную противоположно внешнему полю $E(x,t)$. С другой стороны, при приложении внешнего электрического поля $E(x,t)$ параллельно с процессом поляризации ВОУНТ наблюдается процесс деформации $\Delta L(x,t)$, который приводит к возникновению объемных пьезоэлектрических зарядов и соответствующей напряженности поля $E_{def}(x,t)$, сонаправленной с деформацией $\Delta L(x,t)$ [10]. Согласно уравнениям пьезоэлектрического эффекта, $E_{def}(x,t)$ равна:

$$E_{def}(x,t) = \frac{b}{\epsilon_0 \epsilon_{\parallel}} \frac{\Delta L}{L}, \quad (1)$$

где $b = \sigma(x,t)/E(x,t)$ – пьезоэлектрический коэффициент. Пьезоэлектрический коэффициент для ВОУНТ с $Y = 1$ ТПа, $L = 2$ мкм, $\Delta L = 1,5$ нм и $D = 90$ нм равен $0,019$ Кл/м², что хорошо коррелирует со значениями, полученными на основании квантово-химического подхода [11].

Таким образом, при приложении импульса положительного напряжения амплитудой U_0 к структуре на основе ВОУНТ, находящейся в исходном состоянии (вершину ВОУНТ и верхний электрод разделяет зазор), нанотрубка под действием $E(x,t) = U(t)/d$ поляризуется и удлиняется, на вершине ВОУНТ начинает формироваться положительный пьезоэлектрический заряд. В результате в ВОУНТ возникает внутреннее поле $E_{CNT}(x,t)$, представляющее собой сумму поляризационного $E_P(x,t)$ и пьезоэлектрического полей $E_{def}(x,t)$. Для структуры на основе ВОУНТ с $L = 2$ мкм, $D = 90$ нм, $Y = 1$ ТПа, $\varepsilon_{||} \approx 8$ и $d = 1$ нм при $U_0 = 0,5$ В: $\Delta L(L,t) < d$, $E(x,t) = 5 \cdot 10^8$ В/м, $E_P(x,t) = 4,37 \cdot 10^8$ В/м, $E_{def}(x,t) = 1,01 \cdot 10^5$ В/м, а результирующее поле в структуре $E(x,t)$ составляет $6,29 \cdot 10^7$ В/м.

При увеличении $U_0 \geq 1$ В нанотрубка касается верхнего электрода, и величина напряженности внешнего электрического поля резко уменьшается до $E(x,t) = U(t)/L$, также уменьшается поляризационное поле $E_P(x,t)$, а пьезоэлектрическое поле $E_{def}(x,t)$ увеличивается пропорционально удлинению $\Delta L(x,t)$. Это приводит к тому, что внутреннее поле нанотрубки $E_{CNT}(x,t)$ становится сравнимо или превышает внешнее поле $E(x,t)$, и ток в структуре на протекает. Так, при $U_0 = 1$ В, $\Delta L(L,t_0) = 1,05$ нм внешнее поле $E(x,t) = 5 \cdot 10^5$ В/м полностью компенсируется внутренним полем $E_{CNT}(x,t)$ ($E_P(x,t) = 4,37 \cdot 10^5$ В/м, $E_{def}(x,t) = 1,34 \cdot 10^5$ В/м).

При смене полярности напряжения, прикладываемого к структуре в состоянии, когда вершина ВОУНТ касается верхнего электрода, напряженность внешнего поля $E(x,t) = U(t)/L$ и соответствующая ему напряженность поляризационного поля $E_P(x,t)$ изменяют свое направление на противоположное, а пьезоэлектрическое поле $E_{def}(x,t)$ сохраняет свое направление, т.к. деформация ВОУНТ остается положительной. В результате поляризационное и пьезоэлектрическое поля внутри ВОУНТ частично компенсируют друг друга, и при приложении отрицательного напряжения любой амплитуды в структуре будет протекать ток.

3. Практические результаты

При проведении экспериментальных исследований к структуре на основе вертикально ориентированной углеродной нанотрубке ($D = 95$ нм, $L = 2$ мкм), выращенной методом плазмохимического осаждения из газо-

вой фазы (PECVD), прикладывались серии прямоугольных импульсов длительностью 0,1 с амплитудой от $\pm 0,5$ до ± 10 В с использованием сканирующего зондового микроскопа Solver P47Pro («НТ-МДТ», Россия). В качестве верхнего электрода структуры выступал вольфрамовый зонд сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Туннельный зазор d составлял 1 нм и контролировался с помощью обратной связи СТМ.

Анализ полученных ток-временных зависимостей ВОУНТ показал, что при приложении импульсов положительного напряжения амплитудой от 0,5 до 10 В ток в системе «ВОУНТ-зонд СТМ» не протекает (рис. 2а), что хорошо согласуется с результатами моделирования процессов поляризации и накопления пьезоэлектрического заряда ВОУНТ.

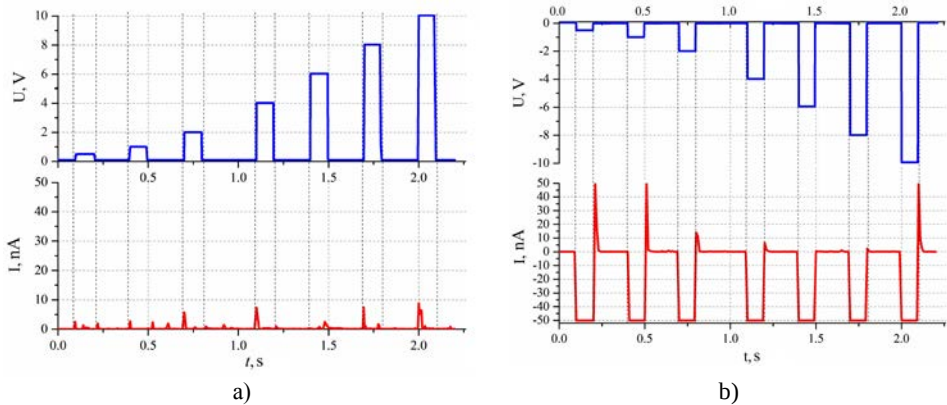


Рис. 2. Ток-временные зависимости ВОУНТ, полученные методом СТМ при приложении: а) – положительного напряжения; б) – отрицательного напряжения.

.Fig. 2. The current-time dependence of VACNT obtained by STM applying: a) – positive voltage; b) – negative voltage.

Скачки тока, соответствующие моментам резкого роста значения dE/dt (передний фронт импульсов напряжения на рис. 2а), возрастают с ростом амплитуды напряжения, но не превышают 10 нА. Наличие скачков, соответствующих переднему фронту импульсов напряжения, вызвано процессами формирования положительного пьезоэлектрического заряда ВОУНТ. Наличие небольших скачков (1-2 нА), соответствующих резкому падению значения dE/dt (заднему фронту импульсов напряжения), вызвано перераспределением внутреннего поля E_{CNT} и особенностями измерительной системы.

При приложении импульсов отрицательного напряжения амплитудой от 0,5 до 10 В в системе «ВОУНТ-зонд СТМ» протекает ток более 50

нА (рис. 2б), что также согласуется с результатами моделирования. При этом скачки тока, соответствующие переднему фронту импульсов напряжения, отсутствуют, т.к. положительные токи, связанные с формированием пьезоэлектрического заряда, компенсируются отрицательным током проводимости ВОУНТ. Скачки тока, соответствующие заднему фронту импульсов напряжения, уменьшаются с ростом амплитуды напряжения, за исключением импульса амплитудой -10 В. Наличие данных скачков вызвано аналогичными процессами, что и при приложении положительного напряжения. При этом перераспределение внутреннего поля E_{CNT} приводит к появлению значительного тока проводимости.

4. Заключение

Таким образом, в работе исследовано влияние внешнего электрического поля на резистивное переключение структуры на основе вертикально ориентированной углеродной нанотрубки, испытывающей упругую деформацию. Теоретически установлено и экспериментально показано, что в данной структуре при приложении прямоугольного импульса напряжения амплитудой от $\pm 0,5$ до ± 10 В наблюдается два стабильных состояния: при отрицательном напряжении протекает ток, т.к. поляризационное и пьезоэлектрическое поля внутри ВОУНТ частично компенсируют друг друга; при положительном напряжении ток не протекает, т.к. внешнее электрическое поле компенсируется внутренним полем нанотрубки. Таким образом, структура на основе ВОУНТ проявляет два стабильных состояния: высокоомное при положительном напряжении ($I \sim 1$ нА) и низкоомное при отрицательном напряжении ($I > 50$ нА).

Необходимо отметить, что при приложении пилообразных импульсов напряжения к структуре на основе ВОУНТ, испытывающей деформации, будет происходить перераспределение механического напряжения и соответствующего ему внутреннего поля в нанотрубке, что приведет к формированию гистерезиса на вольтамперной характеристике и проявлению мемристорного эффекта.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке и создании элементов резистивной энергонезависимой памяти с высокой плотностью ячеек на основе вертикально ориентированных углеродных нанотрубок.

Результаты получены с использованием оборудования Научно-образовательного центра и Центра коллективного пользования «Нанотехнологии» Южного федерального университета.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-29-14023 офи_м и № 16-37-00101 мол_а).

References

- [1] Meena J.S., Sze S.M., Chand U., Tseng T.-Y. Overview of emerging nonvolatile memory technologies // *Nanoscale Research Letters*. 2014. V. 9. No. 1. P. 1-33.
- [2] Akinaga H., Shima H. Resistive Random Access Memory (ReRAM) Based on Metal Oxides // *Proc. IEEE*. 2010. V. 98. No. 12. P. 2237-2251.
- [3] Kinaret J.M., Nord T., Viefers S. A carbon-nanotube-based nanorelay // *Applied Physics Letters*. 2003. V. 82. No. 8. P. 1287-1289.
- [4] Lee S.W. et al. A Three-Terminal Carbon Nanorelay // *Nano Letters*. 2004. V. 4. No. 10. P. 2027-2030.
- [5] Jang J.E., Cha S.N., Choi Y., Amaratunga G.A.J. Nanoelectromechanical switches with vertically aligned carbon nanotubes // *Applied Physics Letters*. 2005. V. 87. No. 163114. P. 1-3.
- [6] Maslov L. Concept of nonvolatile memory based on multiwall carbon nanotubes // *Nanotechnology*. 2006. V. 17. P. 2475-2482.
- [7] Yao J., Jin Z., Zhong L., Natelson D., Tour J.M. Two-Terminal Nonvolatile Memories Based on Single-Walled Carbon Nanotubes // *ACS Nano*. 2009. V. 3. No. 12. P. 4122-4126.
- [8] Radoi A., Dragoman M., Dragoman D. Memristor device based on carbon nanotubes decorated with gold nanoislands // *Applied physics letters*. 2011. No. 99. P. 093102-1 - 3.
- [9] Ageev O.A., Blinov Yu.F., Il'in O.I., Kolomiitsev A.S., Konoplev B.G., Rubashkina M.V., Smirnov V.A.. Memristor effect on bundles of vertically aligned carbon nanotubes tested by scanning tunnel microscopy // *Technical Physics*. 2013. V. 58. P. 1831-1836.
- [10] Ageev O.A., Blinov Yu.F., Il'in O.I., Konoplev B.G., Rubashkina M.V., Smirnov V.A., Fedotov A.A. Study of the Resistive Switching of Vertically Aligned Carbon Nanotubes by Scanning Tunneling Microscopy // *Physic of Solid State*. 2015. V. 57. No. 4. P. 825-831.
- [11] Lebedev N.G., Chernozatonskiy L.A., Quantum- Chemical Calculations of the Piezoelectric Characteristics of Boron Nitride and Carbon Nanotubes // *Physics of the Solid State*. 2006. V. 48. No. 10. P. 2028-2034.
- [12] Mayer A. Polarization of metallic carbon nanotubes from a model that includes both net charges and dipoles // *Physical Review B*. 2005. V. 71. No. 235333. P. 1-10.
- [13] Lu W., Wang D., Chen L. Near-Static Dielectric Polarization of Individual Carbon Nanotubes // *Nano Letters*. 2007. V. 7. No. 9. P. 2729-2733.

Acknowledgements

The study was funded by Russian Foundation for Basic Research according to the research projects No. 16-29-14023 ofi_m and No. 16-37-00101 mol_a.

Simulation of electrical characteristics of graphene field-effect transistors with the using of simple combined model

Igor I. Abramov, Natali V. Kolomeitseva, Vladimir A. Labunov,
Irina A. Romanova

Belarussian State University of Informatics and Radioelectronics
6, P.Brovki str., Minsk-220013, Belarus
nanodev@bsuir.edu.by

Abstract: In the paper a simulation of dual-gate field-effect transistor based on mono-layer graphene with the use of proposed combined model is considered. Investigations of dependence of a drain current on drain voltage for various top-gate-to-source voltages are performed. Influence of source and drain resistances on output characteristics of the device is shown. Comparison of calculation results with simulation ones obtained with the known models was carried out. The program realizing model was included in the nanoelectronic devices simulation system NANODEV developed in BSUIR since 1995.

Keywords: simulation, dual-gate field-effect transistor, graphene, simple model.

Моделирование электрических характеристик полевых графеновых транзисторов с использованием упрощенной комбинированной модели

Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунув В.А., Романова И.А.
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Беларусь
nanodev@bsuir.edu.by

Аннотация: В докладе рассмотрено моделирование двухзатворных полевых транзисторов на однослойном графене с использованием предложенной упрощенной комбинированной модели. Проведены расчеты зависимости тока стока от напряжения стока при различных смещениях на верхнем затворе. Исследовано влияние сопротивлений стока и истока на выходные характеристики прибора. Проведено сравнение результатов расчетов с результатами моделирования по

известным моделям. Программа, реализующая модель, включена в систему моделирования нанoeлектронных устройств NANODEV, разрабатываемую в БГУИР с 1995 года.

Ключевые слова: моделирование, двухзатворный полевой транзистор, графен, упрощенная модель.

1. Введение

Большое внимание в настоящее время в высокочастотной нанoeлектронике уделяется созданию приборных структур на основе углеродных наноматериалов [1]. Перспективным, в частности, считается разработка полевых графеновых транзисторов (ПГТ) [2]. В связи с этим проводятся интенсивные исследования по созданию моделей таких приборных структур, без которых их разработка и оптимизация будут просто не возможны. Анализ показывает, что в моделях ПГТ важно учитывать следующие факторы: 1) различие подвижностей электронов и дырок; 2) квантовую емкость; 3) сопротивления стока и истока.

Целью работы является создание простой (экспрессной) модели ПГТ, учитывающей совместное влияние всех отмеченных факторов, и иллюстрация ее возможностей при расчете электрических характеристик ПГТ.

2. Модель

Так как ПГТ является приборной структурой, в которой важны квантовые явления, то, строго говоря, необходимо разрабатывать квантовые модели [3]. Анализ показывает, что в качестве исходных достаточно использовать для ПГТ с характерными на настоящий момент времени размерами уравнения квантовой диффузионно-дрейфовой модели [3]. Далее нами применялось традиционное для МОП-транзисторов приближение мелкого и длинного канала [4,5]. В результате может быть получено следующее соотношение для тока стока:

$$I_d = \frac{W \int_0^{V_{ch}} \mu Q dV}{L + \left| \int_0^{V_{ch}} \frac{\mu}{V_{sat}} dV \right|}, \quad (1)$$

где W – ширина канала, L – длина канала, μ – эффективная подвижность носителей заряда, учитывающая подвижности электронов и дырок, Q –

плотность заряда листа графена, V_{sat} – скорость насыщения, V_{ch} – полное падение напряжения в канале.

Квантовые явления могут быть учтены с помощью μ , Q и квантовой емкости C_q . На данном этапе для них нами применялись простые модели. Так, для μ и Q нами использовались формулы работы [6].

Напряжение в канале V двухзатворного ПГТ определяется по формуле [7]:

$$V = \frac{C_t(V_{tg} - V_{tg0} - V(x)) + C_b(V_{beff} - V(x))}{C_t + C_b + \alpha C_q}, \quad (2)$$

где C_t , C_b , C_q – емкости верхнего, нижнего затворов и квантовая емкость, V_{tg} – напряжение на верхнем затворе, V_{beff} – эффективное напряжение на нижнем затворе, V_{tg0} – напряжение Дирака для верхнего затвора, $V(x)$ – электростатический потенциал канала при нулевом смещении для $V(x=0)=0$ и $V(x=L)=V_{ch}$, α – коэффициент равный 0,5 при $q|V| \gg kT$, q – заряд электрона, k – постоянная Больцмана, T – температура окружающей среды.

Для расчета квантовой емкости применялась упрощенная формула работы [7]:

$$C_q = \frac{2q^3}{\pi(\hbar V_F)}, \quad (3)$$

где $\hbar$ – постоянная Планка, деленная на 2π , а скорость Ферми $V_F = 10^6$ м/с.

Заметим, что, если не учитывать квантовые явления и падения напряжений на областях стока и истока, то в этом случае $V_{ch} = V_d$ (V_d – напряжение, прикладываемое к стоку относительно истока), а соотношение (1) приводит к традиционной диффузионно-дрейфовой модели, используемой многими авторами (правда иногда с модификациями и коррекциями) при расчете тока стока ПГТ.

Далее в нашей модели после нахождения I_d перерасчитывается напряжение V_d с учетом падений напряжений на сопротивлениях стока

R_d и истока R_s , т.е. $V_d = V_{ch} + (R_d + R_s)I_d$. Заметим, что в общем случае $R_d \neq R_s$ и не равны 0.

Таким образом, предложенная упрощенная модель является комбинированной моделью двухзатворного ПГТ (согласно классификации [3 – 5]), сочетающей элементы физико-топологической и электрической моделей.

3. Результаты моделирования

С применением разработанной комбинированной модели проводился расчет стоковых (выходных) и сток-затворных (передаточных) характеристик двухзатворного ПГТ на однослойном графене на подложке SiO_2/Si . Тонкий слой Al_2O_3 является диэлектриком верхнего затвора. Длина канала $L = 5$ мкм, а другие параметры ПГТ даны в [8].

На рис.1 приведены результаты расчета стоковых характеристик ПГТ при различных напряжениях на верхнем затворе. Они рассчитаны

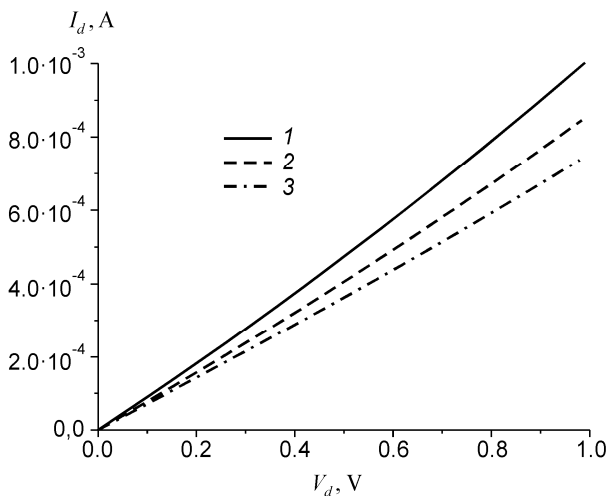


Рис. 1. Стоковые характеристики ПГТ с длиной канала 5 мкм при различных напряжениях на верхнем затворе:

1 – $V_{tg} = 1,0$ В; 2 – $V_{tg} = 1,5$ В; 3 – $V_{tg} = 2,0$ В.

Fig. 1. Drain characteristics of 5- μm graphene field-effect transistor for various top-gate-to-source voltages: 1 – $V_{tg} = 1.0$ V; 2 – $V_{tg} = 1.5$ V; 3 – $V_{tg} = 2.0$ V.

с учетом не только электронной, но и дырочной проводимости при условии когда эффективное напряжение на нижнем затворе поддерживается равным $-50,2$ В. Полученные результаты качественно согласуются с результатами расчета по модели [6] и экспериментальными данными [8].

На рис. 2 показаны стоковые характеристики двухзатворного ПГТ при различных сопротивлениях стока R_d и истока R_s . Отметим, что результаты для случая $R_d \neq R_s$ получены впервые. В целом, они качественно правильно отражают известные экспериментальные данные, т.е. с ростом R_d ток стока снижается. Заметим, что с помощью некоторых моделей подобные результаты не получаются, так как в них не перерасчитывается напряжение V_d .

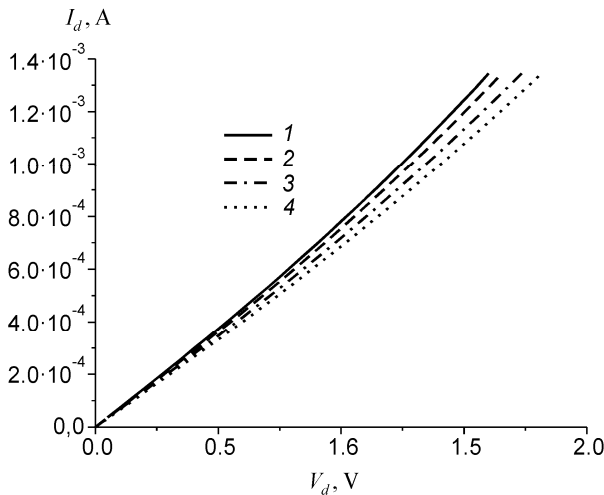


Рис. 2. Стоковые характеристики ПГТ с длиной канала 5 мкм при различных сопротивлениях истока и стока:

1 – $R_d = R_s = 0$ Ом; 2 – $R_s = 10$ Ом, $R_d = 30$ Ом; 3 – $R_s = 10$ Ом, $R_d = 90$ Ом; 4 – $R_s = 10$ Ом, $R_d = 150$ Ом.

Fig. 2. Drain characteristics of 5- μ m graphene field-effect transistor for various source and drain resistances:

1 – $R_d = R_s = 0 \Omega$; 2 – $R_s = 10 \Omega$, $R_d = 30 \Omega$; 3 – $R_s = 10 \Omega$, $R_d = 90 \Omega$; 4 – $R_s = 10 \Omega$, $R_d = 150 \Omega$.

4. Заключение

В работе предложена упрощенная комбинированная модель двухзатворного полевого графенового транзистора исходя из уравнений квантовой диффузионно-дрейфовой модели в приближении мелкого и длинного канала. В модели допустим совместный учет ряда важных факторов, а именно: 1) различия подвижностей электронов и дырок; 2) квантовой емкости; 3) сопротивлений стока и истока и возможного их различия. С помощью предложенной модели исследованы стоковые характеристики двухзатворного ПГТ на основе однослойного графена на подложке SiO_2/Si при различных напряжениях на верхнем затворе, а также сопротивлениях стока R_d и истока R_s , причем R_d может быть не равно R_s . Полученные результаты согласуются качественно либо с результатами расчета по известным моделям, либо с экспериментальными данными. Программа, реализующая модель, включена в систему моделирования нанoeлектронных устройств NANODEV [9,10], разрабатываемую в БГУИР с 1995 года.

Источники финансирования и выражение признательности

Доклад подготовлен по итогам исследования, проведенного в рамках государственной программы научных исследований "Конвергенция".

Список литературы

- [1] Быстров Р.П., Гуляев Ю.В., Никитов С.А., Соколов А.В. Микро- и наноэлектроника применительно к системам радиолокации и радиосвязи // Успехи современной радиоэлектроники. 2010. № 9. С. 11-50.
- [2] Ferrari A.C., Bonaccorso F., Fal'ko V., Novoselov K.S. et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems // Nanoscale. 2015. V. 7. P. 4598-4810.
- [3] Абрамов И.И. Основы моделирования элементов микро- и наноэлектроники. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. 444 с.
- [4] Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. М.–Ижевск: НИЦ РХД, 2005. 152 с.
- [5] Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем микроэлектроники. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012, 116 с.
- [6] Tian J., Katsounaros A., Smith D., Hao Y. Graphene field-effect transistor model with improved carrier mobility analysis // IEEE Trans. Electron. Dev. 2015. V. 62. No. 10. P. 3433-3440.
- [7] Zhu W., Linghu C., Zhang J., Zhang L., Yu Z. Compact model of graphene field effect transistors and its application in circuit simulation of RF mixer consisting of GFETs and CMOS // Proc. of SISPAD. 2012. P. 79-82.

[8] Wang H., Hsu A., Antoniadis D.A., Palacios T. Compact virtual-source current-voltage model for top- and back-gated graphene field-effect transistors // *IEEE Trans. Electron. Dev.* 2011. V. 58. No. 5. P. 1523-1533.

[9] Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Игнатенко С.А., Королев А.В., Новик Е.Г., Рогачев А.И. Система моделирования наноэлектронных приборов – NANODEV // *Микроэлектроника*. 2003. Т. 32. № 2. С. 124-133.

[10] Abramov I.I., Baranoff A.L., Goncharenko I.A., Kolomejtseva N.V., Bely Y.L., Shcherbakova I.Y. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities // *Proc. of SPIE*. 2010. V. 7521. P. 75211E-1-11.

References

[1] Bystrov R.P., Guluayev Ju.V., Nikitov S.A., Sokolov A.V. [Micro- and nanoelectronics relating to radar and radio communication system]. *Uspekhi sovremennoi radioelektroniki*, 2010, no. 9, pp. 11 - 50. (In Russian).

[2] Ferrari A.C., Bonaccorso F., Fal'ko V., Novoselov K.S. et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale*, 2015, vol. 7, pp. 4598-4810.

[3] Abramov I.I. [Bases of micro- and nanoelectronic devices simulation]. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. 444 p. (In Russian).

[4] Abramov I.I. [Lectures on simulation of integrated circuits elements] / M.-Izhevsk: RCD, 2005. 152 p. (In Russian).

[5] Abramov I.I. [Lectures on simulation of integrated circuits elements of microelectronics]. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012, 116 p. (In Russian).

[6] Tian J., Katsounaros A., Smith D., Hao Y. Graphene field-effect transistor model with improved carrier mobility analysis. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, 2015, vol. 62, no. 10, pp. 3433 - 3440.

[7] Zhu W., Linghu C., Zhang J., Zhang L., Yu Z. Compact model of graphene field effect transistors and its application in circuit simulation of RF mixer consisting of GFETs and CMOS. *Proc. of SISPAD*, 2012, pp. 79 - 82.

[8] Wang H., Hsu A., Antoniadis D.A., Palacios T. Compact virtual-source current-voltage model for top- and back-gated graphene field-effect transistors. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, 2011, vol. 58, no. 5, pp. 1523 - 1533.

[9] Abramov I.I., Goncharenko I.A., Ignatenko S.A., Korolev A.V., Novik E.G., Rogachev A. I. NANODEV: a nanoelectronic-device simulation software system. *Russian Microelectronics*, 2003. vol. 32, no. 2, pp. 97 - 104.

[10] Abramov I.I., Baranoff A.L., Goncharenko I.A., Kolomejtseva N.V., Bely Y.L., Shcherbakova I.Y. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities. *Proc. of SPIE*, 2010, vol. 7521, pp. 75211E-1 - 11.

Acknowledgements

The paper is based on the research results, which was performed in the framework of State Research Program “Convergence” of Belarus.

Simulation of graphene-based nanostructures on h-BN and SiO₂ substrates

Igor I. Abramov, Natali V. Kolomejtseva, Vladimir A. Labunov,

Irina A. Romanova

Belarussian State University of Informatics and Radioelectronics

Minsk, 220013, Belarus

nanodev@bsuir.edu.by

Abstract: *Simulation of graphene-based nanostructures on hexagonal boron nitride and silicon dioxide substrates was performed using proposed self-consistent numerical model. The possibility of using a proposed self-consistent model for double- and triple-barrier graphene-based heterostructures simulation was illustrated.*

Keywords: graphene, numerical model, simulation, Schrödinger equation, resonant tunneling, hexagonal boron nitride, silicon dioxide, graphene-based heterostructures, IV-characteristics.

Моделирование наноразмерных структур на основе графена на подложках h-BN и SiO₂

Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

г. Минск, 220013, Республика Беларусь

nanodev@bsuir.edu.by

Аннотация: *С использованием разработанной численной самоогласованной модели, основанной на формализме волновых функций, проведено моделирование наноразмерных структур на основе графена на подложках гексагонального нитрида бора и диоксида кремния. Продемонстрированы возможности применения разработанной модели для исследования двух- и трехбарьерных гетероструктур на основе графена на различных подложках.*

Ключевые слова: графен, численная модель, моделирование, уравнение Шредингера, резонансное тунелирование, гексагональный нитрид бора, диоксид кремния, гетероструктуры на основе графена, вольт-амперные характеристики.

1. Введение

Перспективным направлением нанoeлектроники является разработка приборных структур на основе графена [1], в частности на эффекте резонансного туннелирования [2]. В наших предыдущих работах [3–5] исследовались такие структуры. В статье [3] анализировалось влияние ширин барьеров на вольт-амперные характеристики (ВАХ) двухбарьерной резонансно-туннельной структуры на графене на подложке карбида кремния SiC с помощью модели, основанной на численном решении только уравнения Шредингера (модель 1). В последующих работах [4, 5] исследовались резонансно-туннельные диоды (РТД) на графене на подложках SiC и гексагонального нитрида бора h-BN, в частности влияние ширин квантовой ямы, барьеров и температуры окружающей среды на ВАХ. При расчетах использовались модель 1 и численная самосогласованная модель 2, основанная на численном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Разработанные модели 1 и 2 описаны в статье [5]. При этом применялся формализм волновых функций, как наиболее экономичный для решения подобных задач [6, 7].

Целью данной работы является, с одной стороны, исследование РТД на другой подложке, в частности диоксиде кремния SiO₂, а с другой, – не только двухбарьерных, но и трехбарьерной структуры на основе графена на подложке h-BN.

2. Результаты моделирования

В работах [4, 5] было показано, что для расчета ВАХ РТД на основе графена с протяженными приконтактными областями принципиально необходимо использовать самосогласованные модели. Поэтому для получения приведенных ниже результатов использовалась только модель 2 [5].

На рис.1 приведена структура РТД на основе трехбарьерной гетероструктуры графен/h-BN, где цифрами обозначены области: 1 – графен; 2 – подложка; 3 – контакты. Пассивными областями для данной структуры являются области графена, расположенные между омическими контактами и барьерами активной области, как со стороны эмиттера, так и со стороны коллектора, с ширинами w_l и w_r соответственно (рис.1). К активной области относятся области барьеров с ширинами w_{b1} , w_{b2} и w_{b3} , а также заключенные между ними квантовые ямы с ширинами d_1 и d_2 . Высота потенциальных барьеров H_b в трехбарьерной гетероструктуре графен/h-BN формируются большими запрещенными зонами h-BN и составляет 3,137 эВ [8, 9].

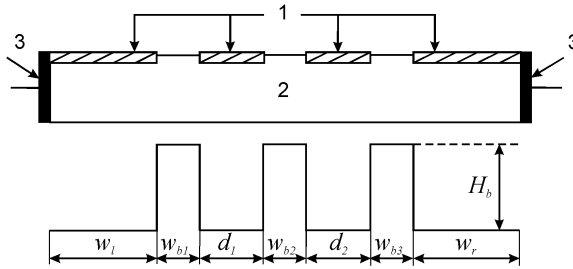


Рис. 1. Структура РТД на основе графена с трехбарьерной активной областью и энергетическая диаграмма зоны проводимости

Fig. 1. RTD structure based on graphene with a triple-barrier active area and conduction band energy

Результаты расчета ВАХ (точнее плотности тока от напряжения; в дальнейшем просто ВАХ) трехбарьерной гетероструктуры графен/h-BN представлены на рис. 2. Моделирование проводилось для структуры, в которой ширины квантовых ям задавались $d_1=d_2=3,4$ нм, а ширины барьеров – $w_{b1}=w_{b2}=w_{b3}=1,3$ нм. Видно, что на рассчитанной ВАХ наблюдается несколько пиков, что характерно для многобарьерных структур.

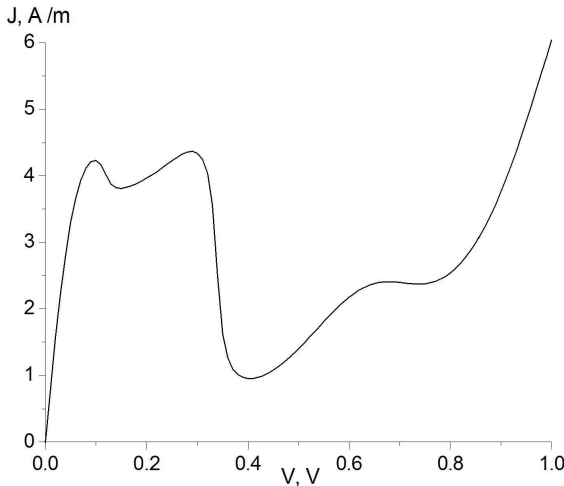


Рис. 2. ВАХ трехбарьерной гетероструктуры графен/h-BN

Fig. 2. IV-characteristics of triple-barrier heterostructure based on graphene/h-BN

Проведен сравнительный анализ ВАХ и двухбарьерных РТД (см. рис. 1 [5]) на основе гетероструктур графен/h-BN и графен/SiO₂. При моделировании обеих структур использовались следующие конструктивно-технологические параметры: 1) ширина квантовой ямы 3,4 нм; 2) толщины барьеров 1,3 нм; 3) толщины сильно легированных приконтактных областей 17 нм; 4) концентрация примеси в приконтактных областях $Nd=7,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$. Высота потенциальных барьеров H_b для РТД на основе графена на подложках h-BN и SiO₂ составляла 3,137 эВ [8] и 3,58 эВ [10] соответственно. Расчеты проведены для температуры окружающей среды 300 К. Эффективная масса двухслойного графена задавалась равной $0,041m_0$ (m_0 – масса покоя электрона) [11], а относительная диэлектрическая проницаемость графена ϵ_s меняется в зависимости от ширины слоя согласно данным работы [12].

На рис.3 приведены результаты моделирования ВАХ двухбарьерных структур на основе графена на подложках h-BN и SiO₂. Видно, что РТД на подложке h-BN (кривая 1) характеризуется большими значениями пиковых токов и отношения пикового тока к току долины, чем РТД на подложке SiO₂ (кривая 2). Это связано с меньшей высотой потенциальных барьеров для гетероструктуры графен/ h-BN.

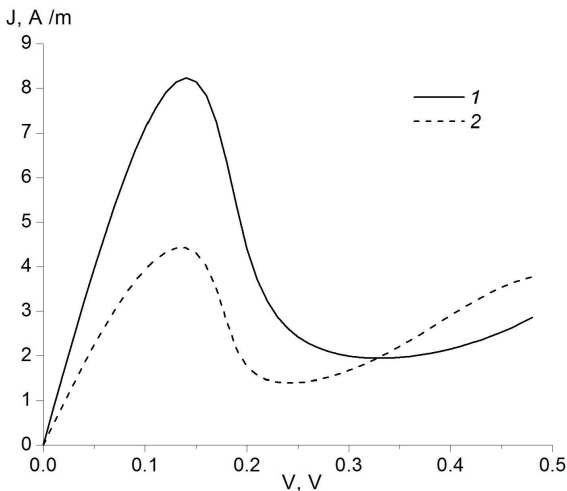


Рис. 3. ВАХ РТД на графене на подложках h-BN (кривая 1) и SiO₂ (кривая 2)

Fig. 3. IV-characteristics of graphene RTD based on h-BN substrate (curve 1) and on SiO₂ substrate (curve 2)

3. Заключение

В работе исследовано влияние материала подложки на ВАХ РТД на основе графена. Для двухбарьерного РТД на подложке h-BN получены более высокие значения пиковых токов и отношения пикового тока к току долины, чем для РТД на подложке SiO₂. Проиллюстрирована применимость разработанной численной самосогласованной модели для расчета ВАХ РТД и на основе трехбарьерной гетероструктуры графен/h-BN.

Источники финансирования и выражение признательности

Данные исследования проведены в рамках Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Функциональные и композиционные материалы, наноматериалы» («Нанотех»).

Список литературы

- [1] Novoselov K.S., Fal'ko V.I., Colombo L., Gellert P.R., Schwab M.G., Kim K. A roadmap for graphene // *Nature*. 2012. V. 490. No. 7419. P. 192-200.
- [2] Ferrari A.C., Bonaccorso F., Fal'ko V., Novoselov K.S., et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems // *Nanoscale*. 2015. V. 7. No. 11. P. 4598-4810.
- [3] Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomeitseva N.V., Romanova I.A. Simulation of devices based on carbon nanotubes and graphene // *Proc. of SPIE*. 2014. V. 9440. P. 944017-1-10.
- [4] Абрамов И.И., Лабунов В.А., Коломейцева Н.В., Романова И.А. Моделирование резонансно-туннельных приборных структур на основе графена // *Материалы 25-й Международной Крымской конференции "СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии"*. 2015. Т. 2. С. 711-712.
- [5] Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А. Моделирование резонансно-туннельных диодов на основе графена на подложках различного типа // *Нано- и микросистемная техника*. 2015. № 11. С. 3-10.
- [6] Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники V. Резонансно-туннельные структуры // *Нано- и микросистемная техника*. 2007. № 3. С. 57-70.
- [7] Абрамов И.И. Основы моделирования элементов микро- и наноэлектроники. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2016. 444 с.
- [8] Fiori G., Betti A., Bruzzone S., D'Amico P., Iannaccone G. Nanodevices in Flatland: Two-dimensional graphene-based transistors with high Ion/Ioff ratio // *2011 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 5-7 Dec. 2011. P. 11.4.1-11.4.4.
- [9] Nguyen V.H., Mazzamuto F., Bournel A., Dollfus P. Resonant tunneling diode based on graphene/h-BN heterostructure // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2012. V. 45. No. 32. P. 325104-1-5.
- [10] Xu K., Zeng C., Zhang Q., Yan R., Wang K., Seabaugh A.C., Xing H.G., Suehle J.S., Richter C.A., Gundlach D.J., Nguyen N.V. Direct measurement of Dirac point energy at the graphene/oxide interface // *Nano Lett.* 2013. V. 13. No. 1. P. 131-136.

[11] Zou K., Hong X., Zhu J. Effective mass of electrons and holes in bilayer graphene: Electron-hole asymmetry and electron-electron interaction // *Phys. Rev. B*. 2011. V. 84. No. 8. P. 085408-1-6.

[12] Santos Elton J.G., Kaxiras E. Electric-field dependence of the effective dielectric constant in graphene // *Nano Lett.* 2013. V. 13. No. 3. P. 898-902.

References

[1] Novoselov K.S., Fal'ko V.I., Colombo L., Gellert P.R., Schwab M.G., Kim K. A roadmap for graphene. *Nature*, 2012, vol. 490, no. 7419, pp. 192-200.

[2] Ferrari A.C., Bonaccorso F., Fal'ko V., Novoselov K.S., et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale*, 2015, vol. 7, no. 11, pp. 4598-4810.

[3] Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomejtseva N.V., Romanova I.A. Simulation of devices based on carbon nanotubes and graphene. *Proc. of SPIE*, 2014, vol. 9440, pp. 944017-1-10.

[4] Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomejtseva N.V., Romanova I.A. [Simulation of resonant tunneling devices and nanostructures based on graphene]. *Proceedings of the 25th International Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology"*, 6-12 Sept. 2015, vol. 2, pp. 711-712. (In Russian).

[5] Abramov I.I., Kolomejtseva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A. [Simulation of graphene resonant tunneling diodes on the substrates of various types]. *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2015, no 11. pp. 3–10. (In Russian).

[6] Abramov I.I. [Problems and principles of physics and simulation of micro- and nanoelectronics devices. V. Resonant-tunneling structures]. *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*, 2007, no 3. pp. 57–70. (In Russian).

[7] Abramov I.I. *Bases of micro- and nanoelectronic devices simulation*. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2016. 444 p. (In Russian).

[8] Fiori G., Betti A., Bruzzone S., D'Amico P., Iannaccone G. Nanodevices in Flatland: Two-dimensional graphene-based transistors with high Ion/Ioff ratio. *2011 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 5-7 Dec. 2011, pp. 11.4.1-11.4.4.

[9] Nguyen V. H., Mazzamuto F., Bourmel A., Dollfus P. Resonant tunneling diode based on graphene/h-BN heterostructure. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2012, vol. 45, no. 32, pp. 325104-1-5.

[10] Xu K., Zeng C., Zhang Q., Yan R., Wang K., Seabaugh A.C., Xing H.G., Suehle J.S., Richter C.A., Gundlach D.J., Nguyen N.V. Direct measurement of Dirac point energy at the graphene/oxide interface. *Nano Lett.*, 2013, vol. 13, no. 1, pp. 131-136.

[11] Zou K., Hong X., Zhu J. Effective mass of electrons and holes in bilayer graphene: Electron-hole asymmetry and electron-electron interaction. *Phys. Rev. B*, 2011, vol. 84, no. 8, pp. 085408-1-6.

[12] Santos Elton J.G., Kaxiras E. Electric-field dependence of the effective dielectric constant in graphene. *Nano Lett.*, 2013, vol. 13, no. 3, pp. 898-902.

Acknowledgements

The paper is based on the research results, which was performed in the framework of the State Programme of Scientific Research of the Republic of Belarus "Functional and composite materials, nanomaterials" ("Nanotech").

Electron transport in the channel of the transistor structure based on GaAs/AlAs quantum wire under the action of periodic longitudinal electric field

Andrei V. Borzdov, Vladimir M. Borzdov
Belarusian State University
Minsk, 220030, Belarus
borzdov@bsu.by

Abstract: By means of ensemble Monte Carlo method electron transport in the GaAs/AlAs quantum wire transistor structure is simulated under the action of longitudinal electric field with the strength varying harmonically in time. The response of electron drift velocity on the action of harmonic electric field is investigated with account of electron scattering by acoustic and polar optical phonons as well as GaAs/AlAs interface roughness including the effect of collisional broadening.

Keywords: quantum wire, GaAs, self-consistent calculation, Monte Carlo method, drift velocity.

Перенос электронов в канале транзисторной структуры на основе GaAs/AlAs квантовой проволоки при воздействии периодического продольного электрического поля

Борздов А.В., Борздов В.М.
Белорусский государственный университет
г. Минск, 220030, Республика Беларусь
borzdov@bsu.by

Аннотация: Многочастичным методом Монте-Карло моделируются процессы переноса электронов в транзисторной структуре на основе GaAs/AlAs-квантовой проволоки при воздействии продольного электрического поля, напряженность которого изменяется во времени по гармоническому закону. Исследован отклик дрейфовой скорости электронов на приложенное гармоническое электрическое поле с учетом рассеяния электронов на акустических и полярных оптических фононах, а также шероховатостях границы раздела GaAs/AlAs включая столкновительное уширение.

Ключевые слова: квантовая проволока, GaAs, самосогласованный расчет, метод Монте-Карло, дрейфовая скорость.

1. Введение

Современные нанотехнологии позволяют создавать полупроводниковые приборные структуры очень малых размеров различной геометрии. В последнее время большой интерес вызывают исследования транзисторов с квазиодномерным электронным газом на основе полупроводников A^3B^5 , являющихся перспективными элементами нанoeлектроники. Разработка новых приборов нанoeлектроники является непростой задачей, требующей численного моделирования их электрофизических свойств и электрических характеристик. В этом отношении одним из наиболее эффективных методов моделирования является метод Монте-Карло [1, 2]. С помощью данного метода возможно исследование процессов переноса носителей заряда в разных полупроводниковых структурах, а также изучение различных режимов работы приборов на основе таких структур. Применительно к квантовым проволокам метод Монте-Карло особенно эффективен, когда определяющее влияние на перенос оказывают процессы рассеяния, хотя применение данного метода возможно и для моделирования структур с баллистическим переносом носителей заряда. В этой связи необходимо отметить, что в тонких квантовых проволоках на основе GaAs наиболее важными механизмами рассеяния являются рассеяние на шероховатостях поверхности и границах раздела материалов, акустических и полярных оптических фононах. Ранее интенсивности рассеяния (вероятности рассеяния в единицу времени) электронов в GaAs-квантовых проволоках исследовались нами в работах [3–5]. В частности, в этих работах были получены выражения для интенсивностей рассеяния электронов на акустических и полярных оптических фононах в прямоугольных квантовых проволоках с учетом столкновительного уширения в приближении первого порядка. Рассеяние электронов на шероховатостях поверхности и границах раздела с учетом столкновительного уширения рассмотрено в [6].

В приборных структурах особый интерес представляет собой исследование не только стационарного переноса носителей заряда, но и переходных процессов, а также процессов, происходящих под воздействием периодического внешнего электрического поля [7–9]. Влияние на процессы переноса периодического внешнего поля или смещения на электродах субмикронных полупроводниковых диодных и транзисторных структур является важным, в частности, для исследования возможности создания

генераторов гармонических колебаний терагерцевого диапазона [10–12]. В связи с этим в данной работе исследуется влияние внешнего периодического электрического поля на дрейфовую скорость электронов в транзисторной структуре на основе тонкой GaAs/AlAs квантовой проволоки.

2. Моделируемая транзисторная структура

Рассматриваемая в данной работе транзисторная структура схематически представлена на рисунке 1. Она представляет собой GaAs-квантовую проволоку прямоугольного сечения размером $10 \times 10 \text{ нм}^2$ в матрице AlAs с алюминиевым затвором. Толщина барьерного слоя AlAs составляет 5 нм.

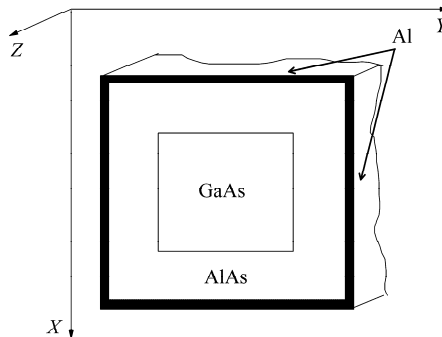


Рис. 1. Поперечное сечение моделируемой структуры.

Fig. 1. Cross-section of the simulated structure

Для расчета электронных состояний в структуре самосогласованно решается система двумерных уравнений Пуассона и Шредингера в плоскости квантования XY . Перенос электронов происходит в направлении Z под действием продольного электрического поля, направленного вдоль этой оси. При моделировании переноса учитывается рассеяние электронов на акустических и полярных оптических фононах, а также на шероховатостях границы раздела GaAs/AlAs с учетом столкновительного уширения [5, 6]. Для рассеяния на шероховатостях границы раздела были взяты следующие параметры: средняя амплитуда шероховатостей — 0,5 нм, длина корреляции — 6 нм. Температура моделирования — 300 К. Также в данной работе ввиду малых поперечных размеров исследуемой квантовой проволоки мы ограничились рассмотрением электрического квантового

предела, т. е. перенос электронов моделировался с учетом заселенности только основного квантового состояния.

3. Результаты расчетов

Одной из основных величин, характеризующих перенос электронов в канале транзисторной структуры, является их дрейфовая скорость. При заданной плотности заряда в канале плотность тока пропорциональна величине дрейфовой скорости электронов. Соответственно временная зависимость плотности тока в структуре будет определяться откликом дрейфовой скорости электронов на приложенное внешнее электрическое поле.

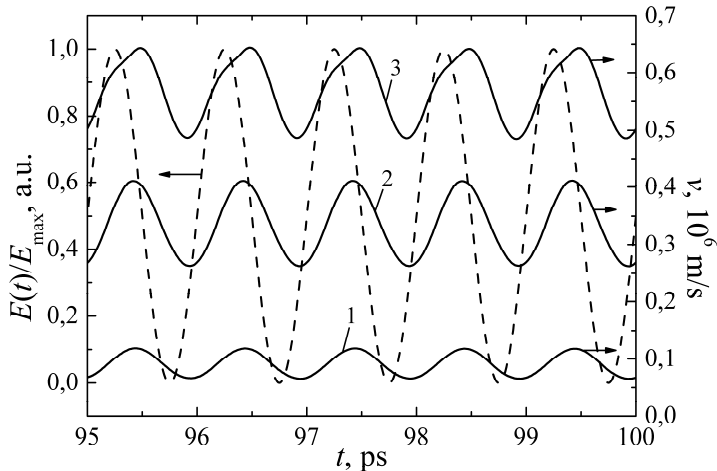


Рис. 2. Отклик дрейфовой скорости электронов на переменное электрическое поле (сплошная кривая 1 — $E_0 = 10^5$ В/м, 2 — $E_0 = 3 \cdot 10^5$ В/м, 3 — $E_0 = 5 \cdot 10^5$ В/м, пунктирная кривая — напряженность поля).

Fig. 2. Response of electron drift velocity on alternating electric field (solid curve 1 — $E_0 = 10^5$ V/m, 2 — $E_0 = 3 \cdot 10^5$ V/m, 3 — $E_0 = 5 \cdot 10^5$ V/m, dashed curve — field strength)

На рисунке 2 представлены результаты расчета дрейфовой скорости электронов v в структуре при воздействии переменного продольного электрического поля $E(t)$ вида

$$E(t) = E_0 + E_m \sin(2\pi ft),$$

где E_0 и E_m — постоянная составляющая и амплитуда переменной составляющей напряженности, соответственно, f — частота, t — время. В наших

расчетах частота f принята равной 1 ТГц, а также полагалось, что $E_0 = E_m$. Напряжение на затворе структуры — 0 В. Для наглядности на этом же рисунке приведена временная зависимость $E(t)/E_{\max}$, где $E_{\max}$ — максимальное значение напряженности электрического поля.

Как видно из рисунка 2, с ростом величины напряженности электрического поля E_0 от 10^5 В/м до $5 \cdot 10^5$ В/м наблюдается увеличение искажения и отличия от гармонической формы отклика дрейфовой скорости. Соответственно, в спектре осцилляций плотности тока в такой структуре с увеличением напряженности поля должен увеличиваться вклад гармоник более высокого порядка по отношению к основной. Данное обстоятельство может быть использовано для генерации колебаний терагерцевого диапазона с частотами, кратными основной гармонике. Нелинейность рассматриваемой транзисторной структуры связана с особенностями процессов рассеяния электронов. В этой связи следует отметить, что учет заселенности электронами более высоких подзон размерного квантования, которая может быть существенной в электрических полях с большей напряженностью, должен приводить к увеличению нелинейности параметров, характеризующих процессы переноса электронов в рассматриваемой структуре.

4. Заключение

В работе исследовано влияние переменного продольного электрического поля на перенос электронов в транзисторной структуре на основе тонкой GaAs/AlAs квантовой проволоки. Многочастичным методом Монте-Карло промоделирован отклик дрейфовой скорости электронов в структуре на приложенное переменное электрическое поле, изменяющееся во времени по гармоническому закону. Сделано предположение о возможности использования такого рода структур для генерации колебаний терагерцевого диапазона вследствие нелинейности параметров, характеризующих процессы переноса электронов в них.

Список литературы

- [1] Monte Carlo device simulation: full band and beyond; ed. K. Hess. Boston: Kluwer Academic publishers, 1991. 310 p.
- [2] Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo method for semiconductor device simulation. Wien: Springer-Verlag, 1989. 357 p.
- [3] Borzdov A.V., Pozdnyakov D.V., Galenchik V.O., Borzdov V.M., Komarov F.F. Self-consistent calculations of phonon scattering rates in the GaAs transistor structure with one-dimensional electron gas // phys. stat. sol. (b). 2005. V. 242. No. 15. P. R134-R136.

- [4] Pozdnyakov D.V., Galenchik V.O., Borzdov A.V. Electron Scattering in Thin GaAs Quantum Wires // *Phys. Low.-Dim. Struct.* 2006. No. 2. P. 87-90.
- [5] Борздов А.В., Поздняков Д.В. Рассеяние электронов в транзисторной структуре GaAs/AlAs // *ФТТ*. 2007. Т. 49. № 5. С. 913-916.
- [6] Pozdnyakov D. Influence of surface roughness scattering on electron low-field mobility in thin undoped GaAs-in-Al₂O₃ nanowires with rectangular cross-section // *phys. stat. sol. (b)*. 2010. V. 247. No. 1. P. 134-139.
- [7] Pozdnyakov D., Borzdov A., Borzdov V., Komarov F. Modelling of non-stationary electron transport in semiconductor nanowires and carbon nanotubes // *Proc. SPIE*. 2008. V. 7025. P. 70251S-1-70251S-9.
- [8] Pozdnyakov D., Borzdov A., Borzdov V., Labunov V. Calculation of electrophysical parameters of thin undoped GaAs-in-Al₂O₃ quantum nanowires and single-wall armchair carbon nanotubes // *Proc SPIE*. 2010. V. 7521. P. 75210S-1-75210S-9.
- [9] Борздов А.В., Поздняков Д.В., Борздов В.М., Орликовский А.А., Вьюрков В.В. Моделирование влияния поперечного электрического поля на дрейфовую скорость электронов в GaAs квантовой проволоке // *Микроэлектроника*. 2010. Т. 39. № 6. С. 436-442.
- [10] Fedichkin L. V'yurkov V. Quantum ballistic channel as an ultrahigh frequency generator // *Appl. Phys. Lett.* 1994. V. 64. No. 19. P. 2535-2536.
- [11] Varani L., Palermo C., Millithaler J.F., Vaissiere J.C., Starikov E., Shiktorov P., Gruzinskis V., Mateos J., Perez S., Pardo D., Gonzalez T. Numerical modeling of TeraHertz electronic devices // *J. Comput. Electron.* 2006. No. 5. P. 71-77.
- [12] Persano Adorno D., Capizzo M.C., Zarcone M. Monte Carlo simulation of harmonic generation in GaAs structures operating under large-signal conditions // *J. Comput. Electron.* 2007. No. 6. P. 27-30.

References

- [1] Monte Carlo device simulation: full band and beyond; ed. K. Hess. Boston: Kluwer Academic publishers, 1991. 310 p.
- [2] Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo method for semiconductor device simulation. Wien: Springer-Verlag, 1989. 357 p.
- [3] Borzdov A.V., Pozdnyakov D.V., Galenchik V.O., Borzdov V.M., Komarov F.F. Self-consistent calculations of phonon scattering rates in the GaAs transistor structure with one-dimensional electron gas // *phys. stat. sol. (b)*, 2005, vol. 242, no. 15, pp. R134 - R136.
- [4] Pozdnyakov D.V., Galenchik V.O., Borzdov A.V. Electron Scattering in Thin GaAs Quantum Wires // *Phys. Low.-Dim. Struct.* 2006, no. 2, pp. 87 - 90.
- [5] Borzdov A.V., Pozdnyakov D.V. Scattering of electrons in the GaAs/AlAs transistor structure // *Phys. Solid State*. 2007, vol. 49. no. 5. pp. 963 - 967.
- [6] Pozdnyakov D. Influence of surface roughness scattering on electron low-field mobility in thin undoped GaAs-in-Al₂O₃ nanowires with rectangular cross-section // *phys. stat. sol. (b)*. 2010, vol. 247, no. 1, pp. 134 - 139.
- [7] Pozdnyakov D., Borzdov A., Borzdov V., Komarov F. Modelling of non-stationary electron transport in semiconductor nanowires and carbon nanotubes // *Proc. SPIE*, 2008, vol. 7025, pp. 70251S-1 - 70251S-9.
- [8] Pozdnyakov D., Borzdov A., Borzdov V., Labunov V. Calculation of electrophysical parameters of thin undoped GaAs-in-Al₂O₃ quantum nanowires and single-wall armchair carbon nanotubes // *Proc SPIE*. 2010, vol. 7521, pp. 75210S-1 - 75210S-9.

- [9] Borzdov A.V., Pozdnyakov D.V., Borzdov V. M., Orlikovsky A. A., and V'yurkov V. V. Effect of a transverse applied electric field on electron drift velocity in a GaAs quantum wire: a Monte Carlo simulation // *Rus. Microelectronics*, 2010, vol. 39, no. 6, pp. 411 - 417.
- [10] Fedichkin L. V'yurkov V. Quantum ballistic channel as an ultrahigh frequency generator // *Appl. Phys. Lett.*, 1994, vol. 64, no. 19, pp. 2535 - 2536.
- [11] Varani L., Palermo C., Millithaler J.F., Vaissiere J.C., Starikov E., Shiktorov P., Gruzinskis V., Mateos J., Perez S., Pardo D., Gonzalez T. Numerical modeling of TeraHertz electronic devices // *J. Comput. Electron.*, 2006, no. 5, pp. 71 - 77.
- [12] Persano Adorno D., Capizzo M.C., Zarcone M. Monte Carlo simulation of harmonic generation in GaAs structures operating under large-signal conditions // *J. Comput. Electron.* 2007, no. 6, pp. 27 - 30.

Impedance properties of wire metal nanostructures in Landauer-Datta-Lundstrom model

Michael V. Davidovich¹

¹Saratov State University n.a. N.G. Chernyshevsky
Saratov, 410012, Russian Federation
davidovichmv@yandex.ru

Abstract: In the framework of the Landauer-Datta-Lundstrom model the approximate formulas are obtained for the conductivity of metallic nanowires of finite width and thickness, as well as films of finite thickness, turning into well-known limit cases. The ratio is useful for determining conductivity of nanoscale structures, taking into account both transverse dimensions. To assess the number of modes of the conductance of quantum wires with finite transverse dimensions the approximate forms of the potential distribution and functionals for the solution of the corresponding Schrödinger equation are proposed. Numerical estimation of the number of energy levels and the calculation of the dispersion of plasmons are performed.

Keywords: Landauer-Datta-Lundstrom model, quantum conductivity, nanowires, ballistic resistance, modes of conductivity, plasmon, dispersion equation.

Импедансные свойства проволочных металлических наноструктур в модели Ландауэра-Датты-Лундстрона

¹Давидович М.В.

¹Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского
г. Саратов, 410012, Российская Федерация
davidovichmv@yandex.ru

Аннотация: В рамках модели Ландауэра-Датты-Лундстрона получены приближенные формулы для проводимости металлических нанопроволок конечной ширины и толщины, а также пленок конечной толщины, переходящие в известные предельные случаи. Соотношения удобны для определения проводимости наноразмерных структур с учетом обоих поперечных размеров. Для оценки числа мод проводимости квантовых проволок с конечными поперечными размерами предложены приближенные формы распределения потенциала и функционалы для решения соответствующего уравнения Шредингера. Проведена численная оценка числа энергетических уровней а также расчет дисперсии плазмонов.

Ключевые слова: модель Ландауэра-Датты-Лундстрема, квантовая проводимость, нанопроволока, баллистические сопротивление, моды проводимости, плазмон, дисперсионное уравнение.

1. Введение

Для наноплазмоники, фотоники, создания и исследования свойств гиперболических метаматериалов в виде слоистых структур с тонкими металлическими и полупроводниковыми пленками, графеновыми листами, а также в виде фотонных кристаллов из металлических нанопроволок, графеновых нанолент и других проводящих структур важно знать их импедансные свойства. Это также важно для создания транзисторов и диодов в наноэлектронике [1]. Указанные задачи можно решать в рамках различных транспортных моделей, например, транспортного уравнения Больцмана в приближениях времени релаксации, Бхатнагара-Гросса-Крука [2], приближении формул Грина-Кубо [2–4], приближении Ландауэра-Датты-Лундстрема (ЛДЛ) [5–8]. Наиболее простая транспортная модель ЛДЛ основана на понятии числа мод проводимости, которое приближенно определяется как общее число длин волн де-Бройля, укладывающихся вдоль каждого размера, что приводит к ошибкам при размерах порядка нм. В работе произведено уточнение соотношений ЛДЛ с учетом квантовомеханического подхода к определению числа мод, а также получены формулы, пригодные для произвольных размеров проволоки прямоугольного сечения $w \times t$ от квантоворазмерных до классических.

2. Исследуемая модель

В модели ЛДЛ ток между контактами m и n определяется в виде

$$I_{m,n} = \frac{e}{h} \int \frac{D_k(E)}{2\tau(E)} (f_m(E) - f_n(E)) dE, \quad (1)$$

где плотность состояний $D_k(E) = 2\pi\tau(E)\Gamma_k(E)M_k(E)$, $\tau(E)$ – время релаксации импульса, $M_k(E)$ – число мод проводимости, $T_k(E) = \lambda_k(E)/(\lambda_k(E) + L_k)$ – коэффициент передачи канала k длины L_k , $\lambda_k(E)$ – длина свободного пробега. В (1) использованы функции $f_m(E) = [\exp((E - \mu_m)/(kT_m)) + 1]^{-1}$ Ферми-Дирака контактов, которые считаются равновесными. Для использованной модели в случае проводников прямоугольного сечения $w \times t$ получаем

$$R = R_B (L + \lambda) / \lambda = \rho_d (L + \lambda) \{1, w^{-1}, (wt)^{-1}\} \quad (2)$$

для сопротивления канала. Здесь результаты в фигурных скобках соответствуют размерностям структур $d=1, 2, 3$. Для удельного сопротивления

$$\rho_d = \sigma_d^{-1} = (G_B \lambda)^{-1} \{1, w, wt\}. \quad (3)$$

Обобщая на произвольные размеры, для ДСП и сопротивления имеем

$$\lambda = \lambda_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_0 + w} + \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + t} \right) \right\}, \quad (4)$$

$$R = R_B \frac{L + \lambda}{\lambda} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_0 + w} + \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + t} \right) + (2 - \exp(-w/\lambda_0) - \exp(-t/\lambda_0)) \right\}. \quad (5)$$

3. Число мод для проводников конечных размеров

Проводник конечного поперечного сечения представляет собой двумерную потенциальную яму рис. 1. Реально яма трехмерная, но условия периодичности для потенциала позволяют свести задачу к двумерной. В силу учета сил изображений боковые стенки ямы имеют прямоугольную форму. На рис. 2 приведены результаты решения уравнения Шредингера (УШ) в случае одномерной квазипериодической ямы с резкими прямоугольными стенками. В работе показано, что модель ямы с плоским дном весьма приближенная, также как и используемое приближение о равномерном распределении уровней. Реально следует использовать трехмерную яму (ящик) с неплоским дном. Число мод следует брать с учетом вырождения по спину. Распределение потенциала для ямы с плоским дном рис. 1, а имеет вид

$$V(x, t) = \begin{cases} -V_0 = -(W_0 + E_F - E_1), & x \leq t/2; \\ -e^2 / [16\pi\epsilon_0 (|x| - t/2 + a)], & x > t/2. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $E_F = E_n - E_1 > 0$, E_1 – уровень, отсчитываемый от дна ямы $-V_0$. На рис. 3 дано число мод проводимости прямоугольной ямы конечной глубины и ямы со стенками, определяемыми согласно (6). Решалось УШ методом матриц передачи. Использованы нормированная энергия $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$ и потенциал $v(x) = 2mV(x)/\hbar^2$.

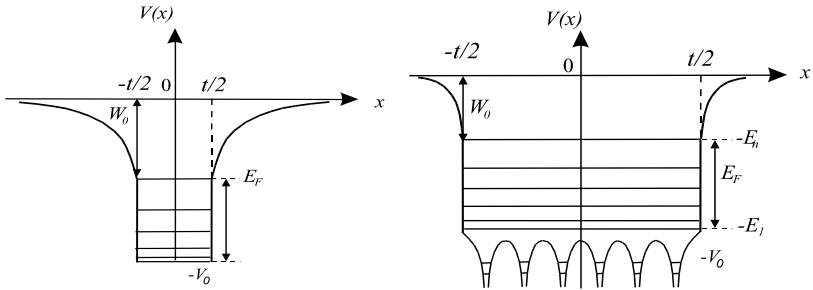


Рис. 1 Схематический вид энергетических уровней и потенциальной ямы с плоским дном для металлической пленки толщины t (слева) и аналогичной ямы с энергетическими уровнями с учетом квазипериодической структуры атомов (справа)

Fig. 1 Schematic view of energy levels and potential well with flat bottom for metal film thickness t (left) and the same pit with the energy levels, taking into account the quasi-periodic structure of atoms (right)

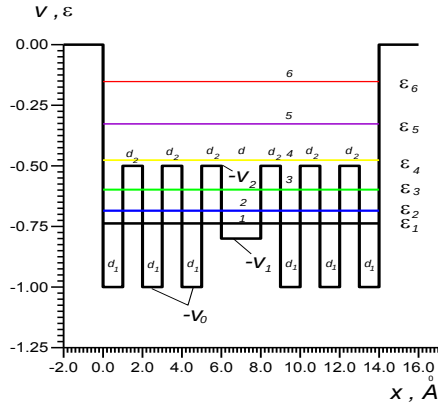


Рис. 2. Нормированные энергетические уровни и конфигурация потенциала для потенциальной ямы с пятью периодами слева и справа от центральной области с дислокацией $2d$ при $d_1=d_2=d_3=1 \text{ \AA}$, $-v_0=1$, $-v_1=0.8$, $-v_2=0.5$

Fig. 2. Normalized energy levels and configuration of potential for potential well with five periods at the left and right of the Central region with a dislocation in $2d$ when $d_1=d_2=d_3=1 \text{ \AA}$, $v_0=1$, $-v_1=0.8$, $v_2=0.5$

Для получения решений УШ в общем трехмерном случае использован стационарный функционал [9] и метод функции Грина УШ. В качестве базиса взяты функции вмещающего потенциал прямоугольного ящика и метод итераций. От числа уровней и числа мод зависит плазменная частота конечных структур. Указанная частота оценена для нанопроволоки, для

которой рассчитана дисперсия поверхностного плазмона (волны Зоммерфельда-Ценнека) рис. 4.

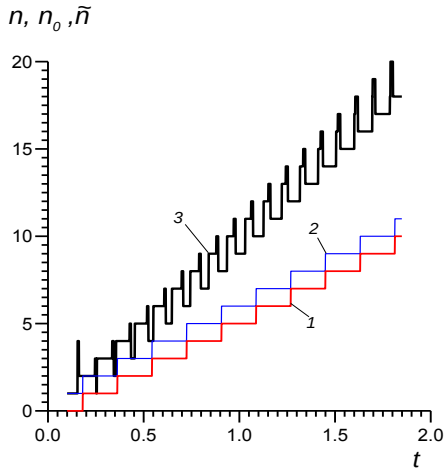


Рис. 3. Числа энергетических уровней n , n_0 и $\tilde{n}$ в двумерной яме с плоским дном в зависимости от ширины t (нм). Кривая 1 – расчет по модели ЛДЛ, 2 – яма с резкими стенками (n_0), 3 – яма с двумя барьерами ($\tilde{n}$) рис. 2. Глубина ямы $V_0=11.46$ эВ, работа выхода $W_0=4.36$ эВ

Fig. 3. The number of energy levels n , n_0 and $\tilde{n}$ in the two-dimensional pit with a flat bottom in dependence on the width of t (nm). Curve 1 – calculation according to the model of LDL, 2 – hole, with sharp walls (n_0), 3 – well with two barriers fig. 2. The depth of the well $V_0=11.46$ eV, the work function is $W_0=4.36$ eV

Для решения задачи в волне Зоммерфельда-Ценнека вдоль нанопровода использовался функционал, определенная на поперечных функциях двумерного поперечного сечения. Использована диэлектрическая проницаемость (ДП) металла модели Друде-Лоренца с учетом проницаемости решетки и межзонных переходов, в которой плазменная частота оценивалась с учетом числа мод и была несколько ниже, чем в сплошном материале. Пики замедления на низких частотах соответствуют увеличению втекания волны Ценнека в проволоку, когда часть энергии распространяется в металле, а ДП имеет большую мнимую часть. Пики на высоких частотах соответствуют плазмонам, когда мнимая частота ДП достаточно мала, а ее реальная отрицательная. Отметим совпадение формы УШ и волнового уравнения проволочного волновода, если взять ДП $\varepsilon(x, y) = 1 - \hbar^2 V(x, y) / (2m_e E)$.

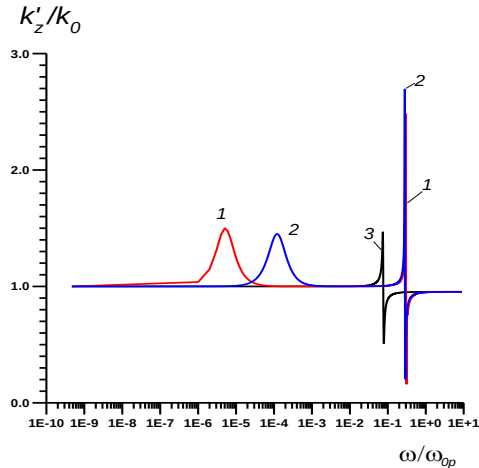


Рис. 4. Замедление плазмона $n'_z = k'_z/k_0$ для квадратного медного провода с $t=500$ нм (кривая 1), $t=100$ нм (2) и $t=5$ нм (3). Штрихи означают реальную часть

Fig. 4. Plasmon retardation of a square copper wire with $t=500$ nm (curve 1), $t=100$ nm (2) and $t=5$ nm (3). The bars indicate the real part

4. Заключение

В работе исследовано число мод проводимости в проводимость наноразмерных проволочных структур (квантовых нитей) в рамках модели ЛДЛ. Показано, что учет сложной конфигурации потенциальных ям приводит к существенному расхождению с моделью ЛДЛ, использующей равномерное распределение уровней. В частности, это имеет место для графеновых нанолент, число мод в которых зависит от конфигурации краев. Рассчитана дисперсия поверхностного плазмона вдоль нанопроволоки.

Источники финансирования

Доклад подготовлен по результатам исследования, проведенного в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности № 3.1155.2014/К Министерства образования и науки РФ, и гранта РФФИ № 16-19-10033.

Список литературы

- [1] Chen Z., Lin Yu-M., Rooks M.J., Avouris P. Graphene Nano-Ribbon Electronics // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2007. V. 40, No. 2. P. 228-232.
- [2] Lovat G., Hanson G.W., Araneo R., Burghignoli P. Semiclassical spatially dispersive intraband conductivity tensor and quantum capacitance of graphene // Phys. Rev. 2013. V. B 87, P. 115429(1-11).

- [3] Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene // *J. Applied Physics*. 2008. V. 103. P. 064302 (1–8).
- [4] Slepyan G.Ya., Maksimenko S.A., Lakhtakia L., Yevtushenko O., Gusakov A.V. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 60. P. 17136(1–14).
- [5] Lundstrom M., Jeong C. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013.
- [6] Кругляк Ю.А. Обобщённая модель электронного транспорта Ландауэра–Датты–Лундстрёма. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*. 2013. Т. 11, № 3. С. 519–549.
- [7] Kruglyak Yu. Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics // *Journal of Nanoscience*. 2014. Vol. 2014, Article ID 725420, 1–15.
- [8] Кругляк Ю.А.. Нанозлектроника «снизу – вверх»: возникновение тока, обобщенный закон Ома, упругий резистор, моды проводимости, термоэлектричество // *Scientific Journal «ScienceRise»*, Т. 7, № 2(12), 2015. С. 76–100.
- [9] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. М.: ГИФМЛ, 1963. 704 с.

References

- [1] Chen Z., Lin Yu-M., Rooks M.J., Avouris P. Graphene Nano-Ribbon Electronics. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2007, vol. 40, no. 2, pp. 228 – 232.
- [2] Lovat G., Hanson G.W., Araneo R., Burghignoli P. Semiclassical spatially dispersive intraband conductivity tensor and quantum capacitance of graphene, *Phys. Rev.*, 2013, vol. B 87, pp. 115429(1 – 11).
- [3] Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *J. Applied Physics*, 2008, vol. 103, pp. 064302 (1 – 8).
- [4] Slepyan G.Ya., Maksimenko S.A., Lakhtakia L., Yevtushenko O., Gusakov A.V. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation. *Phys. Rev.*, 1999, vol. B 60, pp. 17136(1 – 14).
- [5] Lundstrom M., Jeong C. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013.
- [6] Kruglyak Yu.A. Generalized Landauer–Datta–Lundstrom model of electron transport. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, 2013, vol. 11, no.3, pp. 519 – 549. (In Russian).
- [7] Kruglyak Yu. Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics. *Journal of Nanoscience*, 2014, vol. 2014, Article ID 725420, pp. 1–15.
- [8] Kruglyak Yu. A. Nanoelectronics from bottom to up: the emergence of the current the generalized Ohm's law, elastic resistor, modes of conductivity, thermoelectricity. *Scientific Journal “ScienceRise”*, 2015, vol. 7, no. 2(12), pp. 76 – 100. (In Russian).
- [9] Landau L.D., Lifshits E. M. *Course of Theoretical Physics*, vol. 3: Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, London-Paris, Pergamon Press Ltd, and Addison-Wesley Publ., 1982. 652 p.

Acknowledgements

The paper is based on results of a study conducted in the framework of the project part of state task in the sphere of scientific activity No. 3.1155.2014/K of the Ministry of education and science of the Russian Federation, and grant of RSF № 16-19-10033.

Diode on a base of silicon cathode with diamond like coating and non-resonant emission

Nina M. Goncharuk, Nicolay F. Karushkin

Research Institute "Orion"

Kiev, 03680, Ukraine

gonchnin@gmail.com, ningonch@ukr.net

Abstract: A diode on a base of diamond like coated cathode with non-resonant emission at cathode-coating width up to 20nm and close electron affinity energy in an emitter and the coating is investigated in the small-signal approach. It is shown that an increasing of the coating width and transit angle in vacuum leads to improvement of negative conductance spectrum of the diode due to a decreasing of operation electric field, an increasing of emission conductivity and rapprochement of emission and optimal transit in vacuum frequencies.

Keywords: terahertz diode, nanostructural cathode with diamond like coating, electron emission, tunneling, negative conductance.

Диод на основе кремниевого катода с алмазоподобным покрытием и нерезонансной эмиссией

Гончарук Н.М., Карушкин Н.Ф.

Научно исследовательский институт "Орион"

г. Киев, 410012, Украина

gonchnin@gmail.com, ningonch@ukr.net

Аннотация: В мало-сигнальном приближении исследуется диод на основе катода с алмазоподобным покрытием и нерезонансной эмиссией при ширине покрытия до 20 нм и близкой энергии сродства электрона в эмиттере и покрытии. Показано, что увеличение толщины покрытия и угла пролета в вакууме приводит к улучшению спектра отрицательной проводимости диода благодаря понижению электрического поля, увеличению эмиссионной проводимости и сближению частоты эмиссии и оптимальной частоты пролета в вакууме.

Ключевые слова: терагерцевый диод, наноструктурный катод с алмазоподобным покрытием, эмиссия электронов, туннелирование, отрицательная проводимость.

1. Введение

Малосигнальная модель микроволнового наноструктурного диода на основе кремниевого катода с алмазоподобным покрытием и нерезонансной электронной эмиссией была создана в [1] используя модель туннельного сопротивления одиночного барьера [2] и малосигнальную модель пролетного времени для полупроводникового инжекционно-пролетного диода [3]. Отрицательная проводимость исследуемого в [1] диода обусловлена не только конечной длительностью пролета электрона в вакууме, как в [3], но и задержкой процесса эмиссии, состоящего из баллистического пролета электроном слоя катодного покрытия и туннелирования под потенциальным барьером энергии сродства в этом слое. Из-за малой толщины (до 3.5 нм) слоя покрытия исследуемых в [1] диодов, время баллистического пролета для них было пренебрежимо меньшим времени туннелирования, поэтому его вклад в задержку эмиссии не учитывался. Отрицательная проводимость диода имела место при относительно небольших углах пролета в вакууме тем меньших, чем меньше ширина покрытия. Полученный спектр отрицательной проводимости диода состоял из полос вблизи частот четвертой суб-гармоники частоты туннелирования и ее n -ых ($n=5, 9, \dots$) гармоник, отличающихся на частоту туннелирования, при величине пика отрицательной проводимости в спектре тем большей, чем больше ширина покрытия. Поэтому в данной работе исследуется зависимость спектра диода от толщины покрытия и угла пролета в вакууме при достаточно больших их значениях, когда длительности баллистического пролета электрона в покрытии, туннелирования и пролета в пролетном слое вакуума сравнимы.

2. Исследуемая модель

Профиль потенциальной энергии электрона в слоях диода показан на Рис. 1 сплошной линией, а путь эмитирующего электрона пунктирной. Предполагается эмиссия электрона с энергией Ферми эмиттера E_F , его баллистический пролет над вершиной первого барьера разности энергии сродства в эмиттере и покрытии ϕ_0 , туннелирование через второй барьер энергии сродства в покрытии χ и пролет с ускорением $a = qF/m_0$ в пролетном слое вакуума. Такой профиль имеет место при $(\phi_0 - \phi_S) < E_F < (\chi + \phi_0 - \phi_S - qFb/\epsilon_b)$. Здесь и на Рис. 1 E_C и ϕ_S уровень зоны проводимости эмиттера вне аккумуляционного слоя и ее изгиб вблизи границы раздела с покрытием, q заряд электрона, F электрическое поле в вакууме, ϵ_b диэлектрическая проницаемость покрытия, w , b , δ и d ширина слоев аккумуляционного, покрытия, барьерного и пролетного в вакууме.

Эмиссионные характеристики диода, вычисляемые при не зависящих от времени величинах тока и напряжения, служат параметрами в модели мало-сигнального импеданса диода. Из них максимальная положительная эмиссионная проводимость σ равна максимальной производной от постоянного тока эмиссии $J = A \cdot T_2 \cdot \ln\{1 + \exp[(E_F - E)/k_B T]\} dx$ через второй барьер с проницаемостью T_2 [1] по напряженности постоянного электрического поля в вакууме и соответствующая ей напряженность электрического поля F . Время туннелирования τ_t равно произведению удельной емкости барьерного слоя и туннельного сопротивления [2]. В предположении постоянного электрического поля внутри каждого слоя диода $\tau_t = \epsilon_0/\sigma$ [1], где ϵ_0 диэлектрическая проницаемость вакуума. Время эмиссии τ_e равно сумме времени туннелирования и баллистического пролета в покрытии τ_c . Последнее вычислялось интегрированием по координате обратной скорости электрона в слое покрытия.

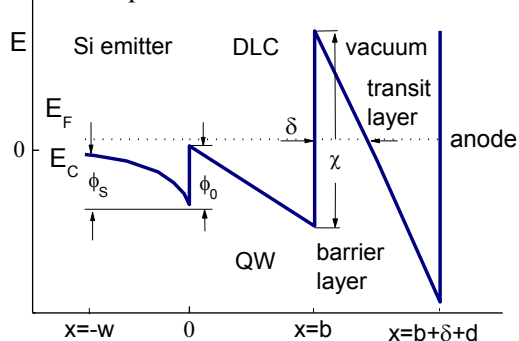


Рис. 1. Энергетическая диаграмма диода.

Fig. 1. Energy diagram of the diode

Микроволновой импеданс диода вычислялся в рамках модели [1], но вклад баллистического пролета в покрытие в задержку эмиссии обусловил дополнительный сдвиг фазы малосигнального тока проводимости в покрытии $\delta\phi = 2\pi f\tau_c$ относительно него в отсутствие покрытия $\phi = 2\pi f\tau_t$ [1].

3. Результаты численных расчетов

Расчеты проводились для диодов с температурой 300K, легированием эмиттера $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и паразитным сопротивлением таким же, как в [1]. В Таблице 1 приведены толщина катодного покрытия исследуемых диодов и вычисленные эмиссионные характеристики. Высота первого барьера ϕ_0 трех первых диодов равна нулю, последних близка но меньше, чем $E_F + \phi_S$.

Анализ Таблицы 1 показывает, что при увеличении толщины покрытия или понижении высоты первого барьера увеличивается максимальная эмиссионная проводимость из-за уменьшения соответствующего электрического поля. Обратно пропорциональное эмиссионной проводимости время туннелирования уменьшается. Время пролета в покрытии увеличивается, так как оно пропорционально корню квадратному из отношения толщины покрытия к оптимальной напряженности электрического поля в нем. При исследуемых толщинах покрытия время эмиссии уменьшается, но в меньшей степени при большей толщине покрытия из-за большего вклада пролета в покрытии в задержку эмиссии.

Табл. 1. Параметры диодов, эмиссионные и микроволновые их характеристики.

Table 1. Parameters of the diodes, emission and microwave their characteristics.

Параметры диода Diode parameters		Эмиссионные характеристики диода Diode emission characteristics				Границы области отрицательной проводимости Transit angle limits for negative conductance	
№	Толщина покрытия, нм Coating width, nm	Эмиссионная проводимость, 1/Ом·см Emission conductivity, 1/Ом·см	Электрическое поле, МВ/см Electric field, MV/cm	Время туннелирования, фс Tunneling time, fs	Время эмиссии, фс Emission time, fs	Нижний угол пролета Lower transit angle	Верхний угол пролета Upper transit angle
1	5	2.1	28.5	42.0	44.0	$< 0.1\pi$	50π
2	10	6.5	15.0	13.5	18.0	0.20π	120π
3	20	19.5	7.7	4.5	13.6	1.35π	450π
4	5	2.07	28.5	42.4	44.8	$< 0.1\pi$	50π
5	10	5.61	15.1	15.6	20.1	0.15π	100π
6	20	12.9	7.77	6.8	15.9	1.15π	400π

Увеличение эмиссионной проводимости диода при увеличении толщины покрытия, но неизменном угле пролета в вакууме, приводит к увеличению наибольшего пика в спектре отрицательной проводимости диода и его частоты из-за повышения частоты эмиссии. Это следует из анализа приведенных на Рис. 2 и Рис. 3 спектров диодов с различной толщиной покрытия. Именно частота эмиссии, а не туннелирования, как в [1], определяет частоту пиков в спектре отрицательной проводимости диода со сравнимой задержкой туннелирования и пролета в покрытии.

Спектр отрицательной проводимости помимо параметров катодного покрытия зависит от пролетного угла в вакууме θ . Проводимость диода отрицательна в интервале углов пролета (θ_{low} , θ_{up}), расположенном выше при большей толщине покрытия и меньшей высоте первого барьера (см.

Табл. 1). Спектр состоит из одной (Рис. 3а) или двух (Рис. 2, Рис. 3б) полос при углах пролета меньших или больших θ_{12} в этом интервале. При увеличении угла пролета от θ_{low} до θ_{12} отрицательная проводимость появляется на нижних частотах однополосного спектра, ее пик и верхняя частота спектра нарастают и, достигнув максимума, уменьшаются, отрицательная проводимость исчезает. Максимальный пик находится между четвертой и второй суб-гармониками частоты эмиссии. При увеличении угла пролета до θ_{12} описанный цикл изменений структуры спектра повторяется в каждом последующем 2π интервале углов пролета. Максимальный пик отрицательной проводимости, достигаемый при угле пролета близком к $2n\pi$, уменьшается, его частота приближается к четвертой суб-гармонике частоты эмиссии, максимальная верхняя частота спектра повышается.

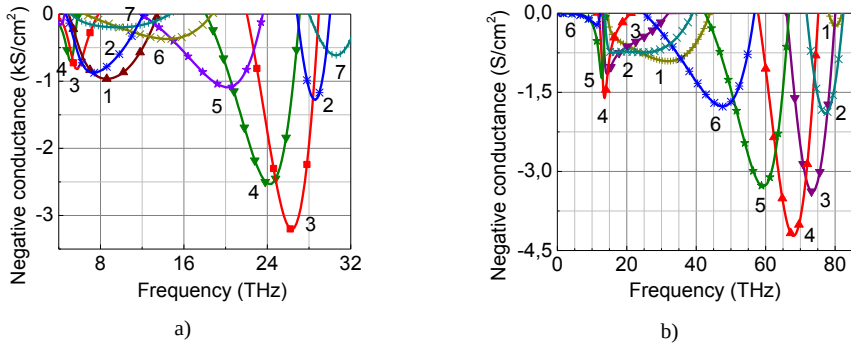


Рис. 2. Спектры отрицательной проводимости а) диода 1 при углах пролета от 2.65π до 4.6π и б) диода 2 при углах пролета от 100.4π до 102π .

Fig. 2. Negative conductance spectra of a) the diode 1 at transit angle from 2.65π to 4.6π and b) the diode 2 at transit angle from 100.4π to 102π

В интервале пролетных углов, близких к $(2n+1)\pi$, отрицательная проводимость в однополосном спектре второго и третьего диода с большей шириной покрытия отсутствует. Этот интервал уменьшается при уменьшении ширины покрытия, увеличении и приближении пролетного угла к θ_{12} и исчезает при достижении θ_{12} .

При приближении угла пролета к θ_{12} пик отрицательной проводимости раздваивается и появляется второй пик на более высоких частотах одиночной полосы. Он сдвигается вместе с верхней границей спектра вверх по частоте при повышении 2π интервала. Расстояние между пиками увеличивается и при достижении θ_{12} второй пик отделяется во вторую полосу вблизи верхней границы спектра при имеющейся в спектре нижней

полосе. Пик отрицательной проводимости в верхней полосе максимален при угле пролета вблизи $(2n+1)\pi$ на частоте немного ниже верхней частоты спектра. Его частота достигает частоты $f_{m2} = 5f_e/4$, полученной при малой толщине покрытия [1], при угле пролета тем больше, чем толще покрытие, и близком к 3π , 101π и 403π для диодов от первого до третьего, чьи спектры показаны на Рис. 2а, Рис. 2б, Рис. 3б.

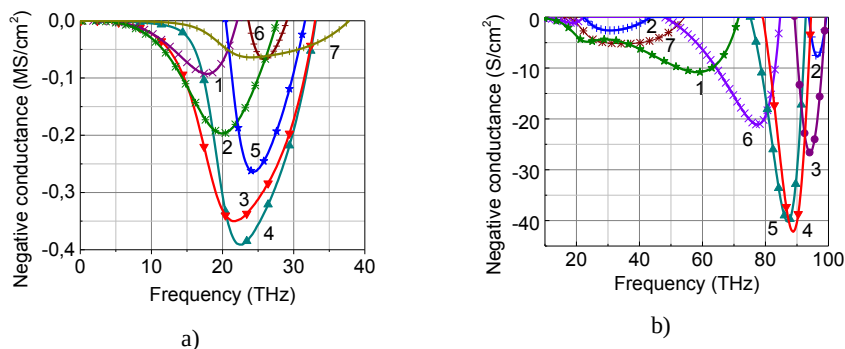


Рис. 3. Спектры отрицательной проводимости диода 3 при углах пролета а) от 1.6π до 2.6π (кривые 1-6), (кривой 7 соответствует угол пролета на 2π больше, чем кривой 4) и б) от 100π до 102.5π .

Fig. 3. Negative conductance spectra of the diode 3 at transit angle а) from 1.6π to 2.6π (curves 1-6) (transit angle corresponding with curve 7 is 2π more than corresponding with curve 4), б) from 100π to 102.5π

Верхняя частота спектра и частота максимального пика отрицательной проводимости во второй полосе при углах пролета в данном 2π интервале определяется этим интервалом. При повышении этого интервала они повышаются вследствие повышения оптимальной пролетной частоты диода, то есть частоты максимума огибающей спектра, который сдвигается вверх. При этом максимальные пики отрицательной проводимости в обеих полосах уменьшаются, но отношение их величин во второй полосе к таковой в первой увеличивается.

4. Заключение

Проведены исследования диода на основе наноструктурного катода с алмазоподобным покрытием и нерезонансной эмиссией при сравнимой длительности пролета электрона в покрытии, его туннелирования под потенциальным барьером энергии сродства в покрытии и пролета в вакууме. Показано, что при увеличении ширины покрытия увеличивается макси-

мальная эмиссионная проводимость вследствие понижения соответствующего электрического поля. Это приводит к увеличению частоты туннелирования и частоты эмиссии, но в меньшей степени из-за увеличения времени пролета в покрытия. Величина отрицательной проводимости диода возрастает. Отрицательная проводимость имеется при угле пролета электрона в вакууме в интервале, границы которого и угол перехода от одно- к двух-полосному спектру выше при большей ширине покрытия. При увеличении пролетного угла периодически с периодом 2π изменяется структура спектра отрицательной проводимости диода и достигается максимальный пик отрицательной проводимости в первой и второй полосе спектра. Частота максимального пика в обеих полосах спектра определяется частотой эмиссии, а не туннелирования, как в отсутствие покрытия. При повышении 2π интервала углов пролета она в первой полосе приближается к четвертой суб-гармонике частоты эмиссии, а во второй, будучи немного ниже, чем верхняя частота спектра, повышается вместе с ней. Величина максимальных пиков отрицательной проводимости в полосах спектра уменьшается, но в верхней полосе она возрастает относительно нижней, то есть максимум огибающей спектра сдвигается вверх. Приближение баллистического пролета электронов в покрытии неприменимо при большой его толщине из-за необходимости учета рассеяния электронов.

Список литературы

- [1] Goncharuk N.M., Karushkin N.F. Modeling of Microwave Diode on Diamond Like Coated Si Cathode//J. Vac. Sci. Technol. B May/Jun 2015. V. 33(3).
- [2] Luryi S. Frequency limit of double-barrier resonant-tunneling oscillators//Applied Physics Letters, 1985. V. 47(5), P. 490–492.
- [3] Sze S.M. Physics of Semiconductor Devices/2nd ed., V. 2. Chapter 10, Section 7. New York: J. Wiley & Sons.1981. 455c

References

- [1] Goncharuk N.M., Karushkin N.F. Modeling of microwave diode on diamond like coated Si cathode. J. Vac. Sci. Technol. B, 2015, vol. 33(3).
- [2] Luryi S. Frequency limit of double-barrier resonant-tunneling oscillators. Applied Physics Letters, 1985, vol. 47(5), pp. 490–492.
- [3] Sze S.M. Physics of Semiconductor Devices/2nd ed., V. 2, Chapter 10, Section 7. New York: J. Wiley & Sons, 1981, 455p.

The potential of the use of transfer matrices for calculation of nanostructured systems

Alim S. Mazinov^{1,2}, Vulf B. Orlenson¹, Alexey I. Shevchenko¹

¹Physics and Technology Institute of V.I. Vernadsky Crimean Federal University
Simferopol, 295007, Russian Federation
mas@crimea.edu

²Research and Education Centre for Noospherology and Sustainable Development State
of V.I. Vernadsky Crimean Federal University
Simferopol, 295007, Russian Federation
mas@crimea.edu

Abstract: Transfer matrix method has been applied to nanocrystalline, dopant and defective materials used in modern micro- and nanoelectronics. By carrying out the relevant calculations, it has been shown that the use of the transfer matrix method allows the calculation of a chain of several tens of quantum wells, obtaining transmittance for such structures. The influence of changes in the form of potential barriers and wells on the transmittance has been indicated.

Keywords: nanoscale objects, electronic wave, transfer matrix method, quantum well, potential barrier, de Broglie wave.

Возможность применения трансфер-матриц для расчёта наноструктурированных систем

^{1,2}Мазинов А.С., ¹Орленсон В.Б., ¹Шевченко А.И.

¹Физико-технический институт ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского»
г. Симферополь, 295007, Российская Федерация
mas@crimea.edu

²Научно-образовательный центр ноосферологии и устойчивого ноосферного развития ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского»
г. Симферополь, 295007, Российская Федерация
mas@crimea.edu

Аннотация: Метод трансфер-матриц был применён для нанокристаллических, легированных и дефектных материалов, используемых в современной микро- и нанoeлектронике. Путём проведения соответствующих вычислений показано,

что использование метода трансфер-матриц позволяет рассчитывать цепочку из нескольких десятков квантовых ям, получая коэффициент пропускания для таких структур. Обозначено влияние изменения вида потенциальных барьеров и ям на коэффициент пропускания.

Ключевые слова: наноразмерные объекты, электронная волна, метод трансфер-матриц, квантовая яма, потенциальный барьер, волна де Бройля.

1. Введение

Тонкоплёночная технология создания активных приборов, являясь одной из перспективнейших направлений современной электроники, уже сегодня работает с нанометрическим градиентом. Осаждая функциональные слои с точностью одного нанометра, возможно изменять физические свойства материала с прецизионностью в десятки атомов [1, 2]. Описание и модельное представление таких приборов требует квантовых подходов, в которых трёхмерные модели для бриллюэновских ячеек не смогут дать полной картины [3, 4]. В нашей работе посредством детерминации выделенного направления движения электрона рассматривается взаимодействие электрона с цепочкой атомов. При этом «история» взаимодействия осуществляется посредством метода трансфер-матриц [5].

2. Квантовое представление наноструктурной цепочки

Представление движения свободного электрона вдоль равномерной цепочки атомов определяется движением блоховской волны вдоль набора квантовых ям [6]. При этом взаимодействие с k -ым атомом можно описать матрицей [7]:

$$\begin{pmatrix} A_{k+1} \\ B_{k+1} \end{pmatrix} = T_{k,k+1} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix},$$

где $T_{k,k+1}$ – матрица передачи волны де Бройля из k в $k+1$ квантовую яму:

$$T_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1} - \gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1} + \gamma_k)z_k} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1} + \gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1} - \gamma_k)z_k} \end{pmatrix},$$

где γ_k и m_k – энергетический параметр и масса для k -й ямы.

Суммарный коэффициент прохождения электрона, полученный трансфер-матрицами [7], характеризует энергетический спектр рассматриваемой атомной цепочки и даёт общее представление о дисперсионной

картине функционального слоя и макропараметрах (ширина запрещенной зоны, проводимость и т.д.).

Первичная апробация данного подхода была выполнена на цепочке атомов кремния, представленных в виде двадцати трёх квантовых ям, заключённых между полубесконечными областями (рис. 1).

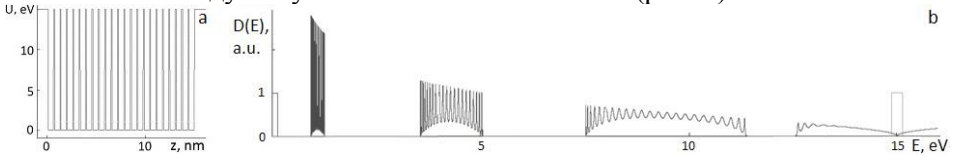


Рис. 1. Потенциальная энергия (a) и коэффициент прохождения (b) для двадцати трёх одномерных квантовых ям.

Fig. 1. The potential energy (a) and the transmission coefficient (b) for the twenty-three one-dimensional quantum wells

Спектр прохождения наноразмерной периодичности (рис. 2) представляется в виде чередующихся областей. Заметим, что при увеличении численности периодически расположенных квантовых ям, помимо возникновения разрешённых и запрещённых зон энергий, также увеличивается количество осцилляционных вершин в каждой разрешённой зоне, причём их число равно числу квантовых ям. Данный эффект подтверждается в теории распространения электрона вдоль периодической кристаллической решётки [6, 8].

К тому же чем больше квантовых ям, тем точнее будут очертания разрешённых зон. При этом параболическая асимптотика построения разрешённых зон является очень удобной для перехода из спектра коэффициента поглощения в закон дисперсии. Для нахождения волнового вектора требуется лишь умножить значения энергий из разрешённых зон на поправочный коэффициент, который можно получить из общей связи энергии и волнового вектора:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Для определения зоны проводимости увеличивались граничные потенциальные барьеры относительно остальных в глубине кристалла [9]. В результате разрешённые уровни энергии остались на прежних значениях, кроме последней зоны. Последняя разрешённая зона увеличилась до уровня вакуума, исходя из чего именно данный энергетический промежуток и был определён как зона проводимости, которая начинается с вершины квантовых ям и продолжается до уровня вакуума.

Одним из преимуществ последовательного расчёта взаимодействия блоховского электрона с каждым из наперёд заданных барьеров является то, что каждый из квантовых объектов может быть уникальным практически на всём промежутке взаимодействия. А это, в свою очередь, позволяет описать полупроводниковые приборы, базирующиеся на поликристаллических и аморфных материалах [10].

3. Описание неоднородностей

Так, наличие дефектности в наноструктурированной цепочке можно задать посредством увеличения ширины квантовой ямы (рис. 2), физический смысл которого может быть интерпретирован как наличие рекомбинационного центра [11].

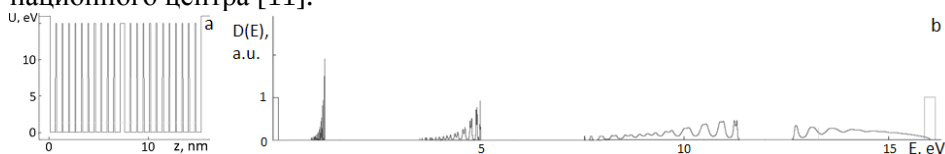


Рис. 2. Потенциальная энергия (а) и коэффициент прохождения (б) в случае четырёхкратного увеличения двенадцатого барьера.

Fig. 2. The potential energy (a) and the transmission coefficient (b), the case of the four-fold increase in the twelfth barrier

Введение четырёхкратного увеличения ширины ямы приводит к появлению более крупных осцилляций в разрешённых зонах.

Дальнейшее возрастание дефектности было рассмотрено посредством введения трёхкратного увеличения барьеров по ширине (рис. 3а).

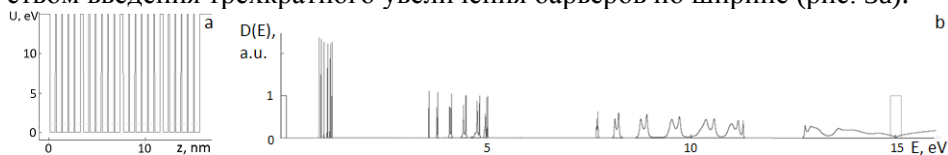


Рис. 3. Потенциальная энергия (а) и коэффициент прохождения (б) для трёхкратного увеличения шестого, двенадцатого и восемнадцатого барьеров.

Fig. 3. The potential energy (a) and the transmittance (b) for the three-time increase of the sixth, twelfth and eighteenth barriers

Данная встроенная подсимметрия, образованная увеличением количества уширенных барьеров, приводит к расщеплению разрешённых зон [12] с явным выделением подзон, которые при дальнейшем увеличении встроенной подсимметрии приводят к появлению локализации отдельных энергетических уровней (рис. 3б).

4. Заключение

В данной работе была рассмотрена возможность описания ограниченной атомной решётки посредством метода трансфер-матриц, позволяющего детерминировать каждое из взаимодействий свободного электрона с атомным остовом активного слоя полупроводникового прибора. Показано, что увеличение атомов в одной цепочке приводит к более плотному заполнению энергетических зон и более чётким границам разрешённых и запрещённых зон. Также данный метод позволяет описать отклонение от симметрии атомной решётки и вводит дефектные и примесные состояния в структуру полупроводникового прибора.

Источники финансирования и выражение признательности

Данная работа подготовлена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности, выполняемого Научно-образовательным центром ноосферологии и устойчивого ноосферного развития ФГАОУ ВО «КФУ им. В. И. Вернадского» (№ гос. регистрации: 115052150083).

Список литературы

- [1] Mayer B., Rudolph D., Schnell J., Morkötter S., Winnerl J., Treu J., Müller K., Bracher G., Abstreiter G., Koblmüller G., Finley J. Lasing from individual GaAs-AlGaAs core-shell nanowires up to room temperature // *Nat. Commun.* 2013. V. 4, No. 2931. P. 1-7.
- [2] Саченко А.В., Крюченко Ю.В., Бобыль А.В., Костылев В.П., Теруков Е.И., Богданов Д.А., Панайотти И.Е., Соколовский И.О., Орехов Д.Л. Анализ возможностей реализации высоких значений эффективности фотопреобразования в tandemных гетеропереходных тонкоплёночных солнечных элементах // *Письма в ЖТФ.* 2015. Т. 41. Вып. 10. С. 42-48.
- [3] Андриевский Б.В., Романюк Н.А., Романюк Н.Н., Мишишин О.Я., Яскульский М., Стадник В.И. Расчет зонной структуры и оптических свойств кристаллов GaS // *ФТТ.* 2012. Т. 54. Вып. 10, С. 1940-1945.
- [4] Дмитриев А.П., Евлахов Н.В., Фурман А.С. Расчет зонной структуры твердого раствора SiC-AlN методом псевдопотенциала // *ФТП.* 1996. Т. 30. Вып. 1. С. 106-117.
- [5] Hernandez-Herrejon J.C., Izrailev F.M., Tessieri L. Electronic states and transport properties in the Kronig-Penney model with correlated compositional and structural disorder // *Physica E.* 2010. V. 42. P. 2203-2210.
- [6] Цидильковский И.М. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика / М.: Наука, 1972. 640 с.
- [7] Biswas D., Kumar V. Improved transfer matrix methods for calculating quantum transmission coefficient // *Phys. Rev. E.* 2014. V. 90. 013301.
- [8] Kronig R. de L., Penney W.G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices // *Proc. Roy. Soc. A.* 1931. V. 130. P. 499-513.
- [9] Лифшиц И.М., Пикар С.И. Таммовские связанные состояния электронов на поверхности кристалла и поверхностные колебания атомов решётки // *УФН.* 1955. Т. 56. Вып. 4. С. 531-568.

[10] Mazinov A.S., Shevchenko A.I., Terukov E.I. The influence of defects on the energetic spectrum of noncrystalline semiconductors // *JNO*. 2014. V. 9. No. 6. P. 778-782.

[11] Mazinov A., Shevchenko A., Bahov V. Quantum interactions of optical radiation with the defect centres in the tails of the forbidden band of amorphous materials // *Opt. Appl.* 2014. V. 44. No. 2. P. 327-335.

[12] Mazinov A., Shevchenko A. The offset of the quantum interband transitions in non-crystalline semiconductors // *Opt. Quant. Electron.* 2015. V. 47. No. 7. P. 1659-1669.

References

[1] Mayer B., Rudolph D., Schnell J., Morkötter S., Winnerl J., Treu J., Müller K., Bracher G., Ab-streiter G., Koblmüller G., Finley J. Lasing from individual GaAs-AlGaAs core-shell nanowires up to room temperature. *Nat. Commun.*, 2013, vol. 4, no. 2931, pp. 1 - 7.

[2] Sachenko A.V., Kryuchenko Yu.V., Bobyl A.V., Kostilyev V.P., Terukov E.I., Bogdanov D.A., Panayotti I.E., Sokolovsky I.O., Orekhov D.L. [The analysis of the feasibility of high values of photoconversion efficiency in tandem thin-film heterojunction solar cells]. *Pisma v ZTF*, 2015, vol. 41, no. 10, pp. 42 - 48. (In Russian).

[3] Andriyevsky B.V., Romanyuk N.A., Romanyuk N.N., Mischishin O.Ya., Yaskulsky M., Stadnik V.I. [Calculation of band structure and optical properties of GASH crystals]. *FTT*, 2012, vol. 54, no. 10, pp. 1940 - 1945. (In Russian).

[4] Dmitriyev A.P., Yevlakhov N.V., Furman A.S., [Pseudopotential calculation of band structure of SiC-AlN solid solution], *FTP*, 1996, vol. 30, no. 1, pp. 106 - 117. (In Russian).

[5] Hernandez-Herrejon J.C., Izrailev F.M., Tessieri L. Electronic states and transport properties in the Kronig-Penney model with correlated compositional and structural disorder. *Physica E*, 2010, vol. 42, pp. 2203 - 2210.

[6] Tsidilkovsky I.M. *Electrons and holes in semiconductors. Energy spectrum and dynamics*. Moscow, Nauka, 1972. 640 p. (In Russian).

[7] Biswas D., Kumar V. Improved transfer matrix methods for calculating quantum transmission coefficient. *Phys. Rev. E*, 2014, vol. 90, 013301.

[8] Kronig R. de L., Penney W.G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proc. Roy. Soc. A*, 1931, vol. 130, pp. 499 - 513.

[9] Lifshits I.M., Pekar S.I. Tamm bound states of electrons on the crystal surface and the surface oscillations of the lattice atoms. *UFN*, 1955, vol. 56, no. 4, pp. 531 - 568. (In Russian).

[10] Mazinov A.S., Shevchenko A.I., Terukov E.I. The influence of defects on the energetic spectrum of noncrystalline semiconductors. *JNO*, 2014, vol. 9, no. 6, pp. 778 - 782.

[11] Mazinov A., Shevchenko A., Bahov V. Quantum interactions of optical radiation with the defect centres in the tails of the forbidden band of amorphous materials. *Opt. Appl.*, 2014, vol. 44, no. 2, pp. 327 - 335.

[12] Mazinov A., Shevchenko A. The offset of the quantum interband transitions in non-crystalline semiconductors, *Opt. Quant. Electron.*, 2015, vol. 47, no. 7, pp. 1659 - 1669.

Acknowledgements

This paper was prepared within the framework of the basic tasks of the state in the field of scientific work performed by the Research and Education Centre for Noospherology and Sustainable Development of V.I. Vernadsky Crimean Federal University (the number of the state registration: 115052150083).

Study of the possibility of the increase of power and frequency of the sub-THz radiation in the semiconductor sandwich heterostructure

Vladimir A. Maksimenko¹, Vladimir V. Makarov¹,
Alexey A. Koronovsky², Alexander E. Hramov¹

²Saratov State Technical University n.a. Yu.A. Gagarin
Saratov, 410054, Russian Federation
hramovae@gmail.com

¹Saratov State University n.a. N.G. Chernyshevsky
Saratov, 410012, Russian Federation
alexey.koronovskii@gmail.com

Abstract: We propose the model of the semiconductor sandwich heterostructure for the generation of sub-THz radiation due to non stationary electron transport. The proposed system consists of the miniband semiconductor superlattices, divided by the heavily doped semiconductor regions. Within the numerical simulation we demonstrate the significant increase of frequency (more than twice) and power (up to three times) of the produced current oscillations compared to the regular semiconductor superlattice of the same length and describe the features of collective charge transport, determining the observed effects.

Keywords: semiconductor superlattice, charge domain, miniband transport/

Исследование возможности повышения частоты и мощности суб-ТГц излучения в полупроводниковой сендвичной гетероструктуре

¹Максименко В.А., ¹Макаров В.В., ²Короновский А.А., ¹Храмов А.Е.

¹Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина
г. Саратов, 410054, Российская Федерация
hramovae@gmail.com

²Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского
г. Саратов, 410012, Российская Федерация
alexey.koronovskii@gmail.com

Аннотация: Предлагается модель полупроводниковой сендвичной гетероструктуры для генерации суб-ТГц излучения за счет нестационарного режима элек-

тронного транспорта. В качестве предлагаемой структуры рассматривается система минизонных сверхрешеток, разделенных областью сильнолегированного полупроводника. В рамках численного моделирования продемонстрировано увеличение частоты (более чем в 2 раза) и мощности (до 3 раз) колебаний тока по сравнению с обычной полупроводниковой сверхрешеткой соответствующей длины. Исследовано влияние положения сильнолегированной области на эффективность увеличения амплитудно-частотных характеристик колебаний и описаны особенности транспорта, заряда, определяющие наблюдаемые эффекты.

Ключевые слова: полупроводниковая сверхрешетка, домен заряда, минизонный транспорт.

1. Введение

Полупроводниковые наноструктуры являются перспективными элементами для разработки современных систем генерации и усиления сигналов суб-ТГц и ТГц частотных диапазонов. Среди них особое место занимают полупроводниковые сверхрешетки - гетероструктуры, состоящие из чередующихся слоев полупроводников с различными свойствами. Интерес к данным системам, прежде всего, связан с возможностью наблюдения терагерцевых блоховских колебаний, вместе с тем, режим нестационарного транспорта заряда (режим движущихся доменов), который препятствует реализации блоховского излучения, также представляет интерес в контексте генерации суб-ТГц сигналов [1, 2].

Известно, что в полупроводниковых сверхрешетках частота следования электронных доменов ограничена максимальной дрейфовой скоростью носителей заряда в энергетической минизоне. С учетом этого, наименьшее время прохождения домена и, как следствие, наибольшая частота ассоциирующихся с ним токовых колебаний может быть реализована в коротких образцах, удовлетворяющих NL-критерию [3]. В тоже самое время, мощность колебаний тока, обусловленных доменным транспортом, снимаемая с коротких сверхрешеток, оказывается малой и возникает необходимость использования систем, содержащих массивы полупроводниковых наноструктур [4]. Использование подобных систем также проблематично, что связано с возникновением паразитных низкочастотных резонаторов, обусловленных особенностями подключения сверхрешеток [5].

С учетом описанных выше особенностей возникает вопрос о разработке устройств, позволяющих достичь увеличение частоты и мощности колебаний, обусловленных доменным транспортом заряда в полупроводниковых сверхрешетках.

В настоящей работе предлагается модель полупроводниковой сендвичной гетероструктуры (Рис. 1, *a*) для улучшения характеристик доменной генерации. Подобные структуры были ранее исследованы как теоретически [6], так и экспериментально [4, 7] с точки зрения перспективных устройств для генерации Блоховского излучения. В тоже самое время, режим нестационарного транспорта заряда и ассоциирующиеся с ним токовые колебания ранее не рассматривались

2. Исследуемая модель

Предлагаемая математическая модель основана на принципах полуклассического подхода, в рамках которого коллективный транспорт носителей заряда описывается при помощи системы уравнений непрерывности и Пуассона, которые относительно безразмерных значений концентрации заряда $n(x,t)$ и электрического потенциала $\phi(x,t)$ могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= -\frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (n - n_0), \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= -\frac{1}{e} \frac{\partial J}{\partial x},\end{aligned}\tag{1}$$

где e — заряд электрона, ε_0 и ε_r — значения абсолютной и относительной диэлектрической проницаемости полупроводника. Уравнения (1) справедливы для описания транспорта заряда как в областях минизонных сверхрешеток (SL_i), так и сильнолегированных контактов (E, C), и областей полупроводника (H_i). Для этих областей значения равновесной концентрации носителей заряда n_0 выбирались, в соответствии с экспериментальной работой [2] как $n_0 = n_D = 3 \times 10^{22} \text{ м}^{-3}$ (для сверхрешеток) $n_0 = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ (для сильнолегированных областей).

В рамках дрейфового приближения [5], плотность тока в области минизонной сверхрешетки описывалась как

$$J_{SL} = en \frac{\delta \Delta d}{2\hbar} \frac{eFd\tau_{SL}/\hbar}{1 + (eFd\tau_{SL}/\hbar)^2},\tag{2}$$

где $\Delta = 19.1 \text{ meV}$ — ширина минизоны, $\tau_{SL} = 250 \text{ fs}$ — время рассеяния, $d = 8.3 \text{ nm}$ — период сверхрешетки, $\delta = 0.12$ — коэффициент, описывающий влияние рассеяния носителей заряда.

В области омических контактов эмиттера (E), коллектора (C) и слоев (H_i) плотность тока $J_{C,E,H}$ определялась согласно теории Друде как

$$J_{C,E,H} = \frac{e^2 n \tau_{C,E,H}}{m^*} F, \quad (3)$$

где $\tau_{C,E,H} = 90$ fs. В уравнениях (2) и (3) $F = -\partial\phi/\partial t$ — значение напряженности электрического поля. Уравнения (1)-(3) дополняются граничным условием $V = \phi(L) - \phi(0)$, которое соответствует напряжению, приложенному к структуре. в данном случае $L = n * L_{SL} + L_C + L_E + (n-1) * L_H$. где L_{SL} и L_H — длина области минизонного транспорта и слоя сильнолегированного полупроводника. L_E и L_C — длины эмиттера и коллектора.

3. Практические результаты

На основании предложенной математической модели (1)-(3) было проведено численное моделирование коллективной динамики заряда в сендвичной структуре при различных значениях приложенного напряжения, построены и проанализированы зависимости частоты и мощности колебаний тока. Результаты вычислений представлены на рисунке 1, *b*. для сендвичной структуры, состоящей из двух сверхрешеток, разделенных сильнолегированной областью ($n=2$). Для сопоставления на данном рисунке также представлена аналогичная характеристика полупроводниковой сверхрешетки, построенная при идентичных значениях приложенного напряжения. Можно видеть, что в данном случае использование сендвичной структуры позволяет одновременно увеличить частоту и мощность генерируемых колебаний. Анализ пространственно-временной динамики заряда показал, что обнаруженный эффект объясняется синхронизацией доменов заряда, распространяющихся в различных областях сендвичной структуры.

В рамках данной работы также было исследовано влияние конфигурации сендвичной структуры, а именно, соотношения длин областей минизонного транспорта $\gamma = L_{SL1}/L_{SL2}$ на синхронизацию движения доменов и, соответственно, на процессы увеличения частоты и мощности. Результаты исследования приведены на рисунке 2. Видно, что максимальное увеличение как мощности, так и частоты достигается в случае, когда области минизонного транспорта имеют одинаковую длину. Однако, по сравнению с полупроводниковой сверхрешеткой (значения частоты и мощности в полупроводниковой сверхрешетке показаны штриховыми линиями), увеличение частоты и мощности в сендвичной структуре остается значительным в широком диапазоне значений коэффициента γ

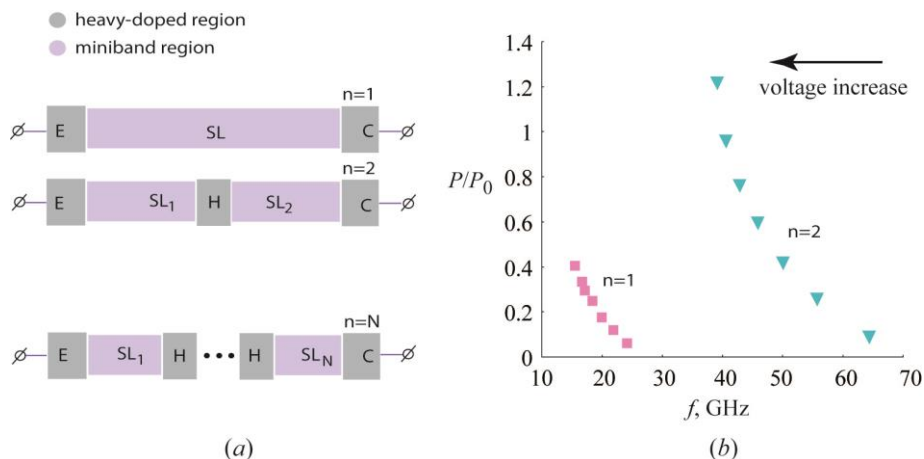


Рис. 1. (a) Схематическая иллюстрация полупроводниковой сэндвичной гетероструктуры. SL_i - области минизонного транспорта, E и C - области эмиттера и коллектора, H_i - слои сильнолегированного полупроводника. n - порядок структуры. (b) Характеристики частота-мощность, соответствующие сверхрешетке ($n=1$) и сэндвичной структуре ($n=2$), рассчитанные при одинаковых значениях приложенного напряжения.

Fig. 1. (a) The schematic illustration of the semiconductor sandwich heterostructure. SL_i - the areas of the miniband semiconductor, E and C - emitter and collector, respectively, H_i - heavy doped layers. n - the order of the structure. (b) The frequency-power characteristics of the regular SL (solid squares) and the sandwich structure ($n=2$) (solid triangles), obtained for the same range of the applied voltage

Закключение

Предложена модель полупроводниковой сэндвичной структуры и рассмотрены перспективы ее использования для улучшения характеристик генерации суб-ТГц излучения. При помощи численного моделирования продемонстрировано одновременное увеличение мощности (до 3х раз) и частоты (до 2х раз) колебаний тока по сравнению со сверхрешеткой, изготовленной из идентичных материалов. Показано, что обнаруженный эффект наблюдается в широких диапазонах соотношения длин областей минизонного транспорта, являющегося основным параметром исследуемой структуры.

Источники финансирования и выражение признательности

Доклад подготовлен по итогам исследования, проведенного в рамках проектов Российского фонда фундаментальных исследований № 16-32-00272 и 15-32-20299. Авторы выражают признательность А.Г. Баланову и К.Н. Алексею (Университет города Лафборо, Великобритания) за внимание к работе и ряд полезных советов.

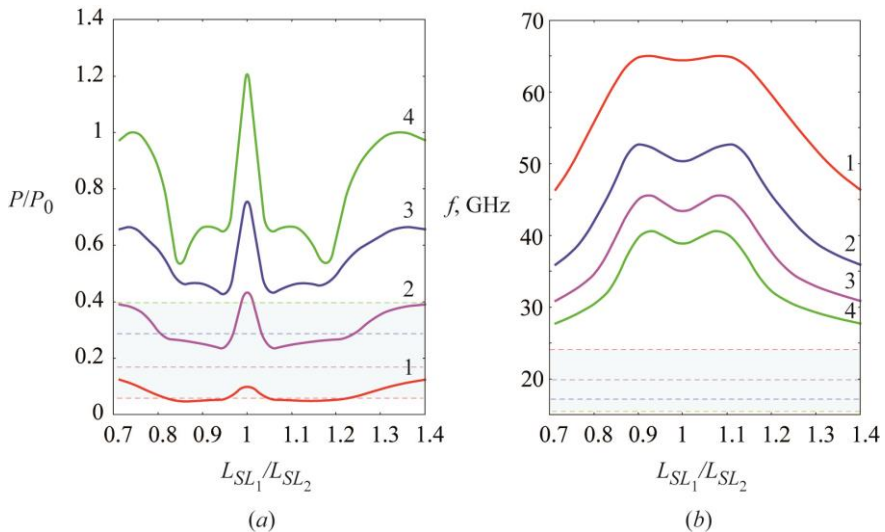


Рис. 2. Зависимость мощности (a) и частоты (b) колебаний тока, текущего через сендвичную гетероструктуру ($n=2$) при различных значениях приложенного напряжения от соотношения длин областей минизонного транспорта L_{SL1}/L_{SL2} . Штриховыми линиями показаны значения частоты и мощности полупроводниковой сверхрешетки ($n=1$) при рассматриваемых значениях напряжения.

Fig. 2. The dependences of power (a) and frequency (b) of the current oscillations in sandwich heterostructure ($n = 2$) for different values of the applied voltage on the ratio of the length SL_1 / SL_2 . Dashed lines correspond to the values of frequency and power of the regular semiconductor superlattice ($n = 1$), calculated for the considered values of the applied voltage

Список литературы

- [1] M. Büttiker and H. Thomas, "Current Instability and Domain Propagation Due to Bragg Scattering" Phys. Rev. Lett, vol. 38, p. 78, January 1977
- [2] A.E. Hramov, V.V. Makarov, A.A. Koronovskii, S.A. Kurkin, M.B. Gaifullin, N.V. Alexeeva, K.N. Alekseev, M.T. Greenaway, T.M. Fromhold, A. Patané, F.V. Kusmartsev, V.A. Maksimenko, O.I. Moskalenko, A.G. Balanov, "Subterahertz Chaos Generation by Coupling a Superlattice to a Linear Resonator" Phys. Rev. Lett, vol. 112, p. 116603, March 2014
- [3] P.G. Savvidis, B. Kolasa, G. Lee, and S.J. Allen, "Resonant Crossover of Terahertz Loss to the Gain of a Bloch Oscillating InAs/AlSb Superlattice" Phys. Rev. Lett., vol. 92, p. 196802, May 2004
- [4] J. C. Cao and X. L. Lei "Hydrodynamic balance-equation analysis of spatiotemporal domains and negative differential conductance in a voltage-biased GaAs superlattice" Phys. Rev. B, vol. 59, p. 2199, January 1999
- [5] A.G. Balanov, M.T. Greenaway, A.A. Koronovskii, O.I. Moskalenko, A.O. Sel'skii, T.M. Fromhold, A.E. Khramov, "The effect of temperature on the nonlinear dynamics of charge in a semiconductor superlattice in the presence of a magnetic field" JETP, vol. 114, p. 836, June 2012.

References

- [1] M. Büttiker and H. Thomas, “Current Instability and Domain Propagation Due to Bragg Scattering” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 38, p. 78, January 1977
- [2] A.E. Hramov, V.V. Makarov, A.A. Koronovskii, S.A. Kurkin, M.B. Gaifullin, N.V. Alexeeva, K.N. Alekseev, M.T. Greenaway, T.M. Fromhold, A. Patané, F.V. Kusmartsev, V.A. Maksimenko, O.I. Moskalenko, A.G. Balanov, “Subterahertz Chaos Generation by Coupling a Superlattice to a Linear Resonator” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 112, p. 116603, March 2014
- [3] P.G. Savvidis, B. Kolasa, G. Lee, and S.J. Allen, “Resonant Crossover of Terahertz Loss to the Gain of a Bloch Oscillating InAs/AlSb Superlattice” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, p. 196802, May 2004
- [4] J. C. Cao and X. L. Lei “Hydrodynamic balance-equation analysis of spatiotemporal domains and negative differential conductance in a voltage-biased GaAs superlattice” *Phys. Rev. B*, vol. 59, p. 2199, January 1999
- [5] A.G. Balanov, M.T. Greenaway, A.A. Koronovskii, O.I. Moskalenko, A.O. Sel’skii, T.M. Fromhold, A.E. Khramov, “The effect of temperature on the nonlinear dynamics of charge in a semiconductor superlattice in the presence of a magnetic field” *JETP*, vol. 114, p. 836, June 2012.

Acknowledgements

The paper is based on the research results, which was conducted in the framework of projects of the Russian Foundation for Basic Research No. 16-32-00272 and 15-32-20299. The authors are grateful to A.G. Balanov and K.N. Alekseev (Loughborough University, UK) for attention to the work and a number of useful tips.

Quantization of impulse of conduction electrons in thin semiconductor films

Ernest E. Asanov, Grigoriy V. Kilessa, Sergey A. Zuev
Crimean Federal University n.a. V.I. Vernadsky
Simferopol, 295007, Russian Federation
asanovernest23@gmail.com

Abstract: A method of current transport simulation in thin-film semiconductor devices is suggested that uses macroparticle Monte-Carlo model and accounts for quantization of impulse in potential well.

Keywords: quantization, thin semiconductor films, macroparticle method, Monte-Carlo method, MESFET.

Квантование импульса электронов проводимости в тонких полупроводниковых плёнках

¹ Асанов Э.Э., ¹ Килесса Г.В., ¹ Зуев С.А.
¹Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского,
г. Симферополь, 295007, Российская Федерация
asanovernest23@gmail.com

Аннотация: Предлагается методика моделирования токопереноса в тонкоплёночных полупроводниковых приборах макрочастичным методом Монте-Карло с учётом квантования импульса в потенциальной яме.

Ключевые слова: квантование, тонкие полупроводниковые плёнки, метод макрочастиц, метод Монте-Карло, ПТШ.

1. Введение

С целью повышения удельной мощности транзистора при его малых геометрических размерах необходимо добиваться большой плотности тока в канале. С одной стороны, увеличение потока электронов через канал повышает общий ток и способствует увеличению мощности, но в то же время с увеличением плотности потока возрастают силы межэлектронного взаимодействия, стремящиеся расширить этот поток и выйти за область канала. Это

приводит к выходу части электронов в область подложки, понижению общего потенциала на подложке и как итог – закрытию канала транзистора.

Для решения данной проблемы целесообразно ограничить возможность ухода электронов из канала, поместив канал в потенциальную яму. На практике такое решение возможно путем создания гетероструктуры, в которой канал n-типа транзистора был бы зажат с двух сторон слоями p-типа, как показано на рис. 1.

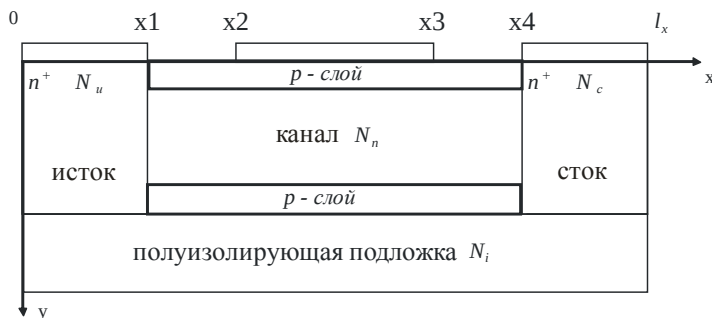


Рис.1. ПТШ с гетеропереходом.

Fig.1. Heterojunction MESFET

Моделированию процессов токопереноса в таких каналах посвящена данная работа. Для проведения вычислительных экспериментов была использована разработанная нами ранее модель ПТШ [1,2], модифицированная для учёта квантовых эффектов, оказывающих существенное влияние на движение электронов в тонких каналах, и как следствие, на характеристики транзисторов.

2. Квантование импульса

В случае, когда движение электронов вдоль одного из направлений ограничено («двумерный газ»), для корректного моделирования ансамбля квазиклассическим приближением [1,2,3] требуется внести поправки квантования, ограничивающие прежде непрерывный (в разрешённых зонах) энергетический спектр электронов.

Для расчёта поправок было использовано решение задачи о движении электрона в поле П-образной потенциальной ямы [4], изображённой на рис.2 (где $2a$ – ширина ямы, U_0 – величина потенциального барьера).

$$\text{Введем обозначения } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

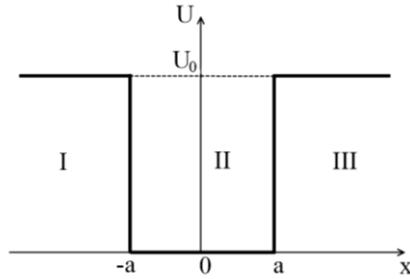


Рис.2. П-образная потенциальная яма.

Fig.2. U-shaped potential hole

Из условий сшивки решений и их производных в точках $x = a$ и $x = -a$ следуют условия, ограничивающие импульсный спектр:

$$\begin{aligned} k \cdot \operatorname{tg}(ka) &= \alpha, \\ k \cdot \operatorname{ctg}(ka) &= -\alpha \end{aligned} \quad (1)$$

Эти условия независимы и не могут выполняться одновременно. Решение уравнений относительно E дает два множества дискретных уровней энергии, представленных графически на рис. 3 (для случая $a = 10$ нм и $U_0 = 1$ В в Γ -долине GaAs с эффективной массой электрона $0,08 m_e$). Важно отметить, что нулевой уровень энергии не удовлетворяет условиям (1), а потому не является разрешённым.

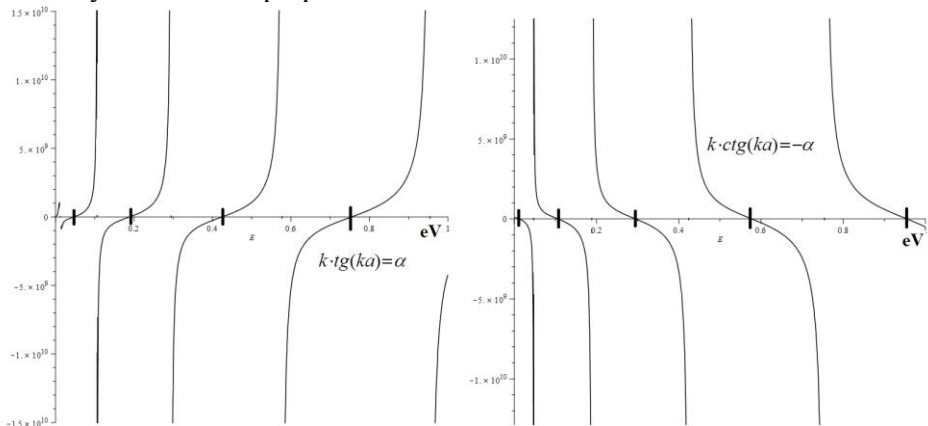


Рис.3. Решение уравнения энергетического спектра.

Fig.3. Solution of energy spectrum equation

В модели решение уравнений выполняется численно для каждой из долин полупроводника. Метод решения – бинарный поиск (метод Ньютона): каждый из корней k ищется в пределах интервалов непрерывности функций $tg(ka)$ и $ctg(ka)$.

3. Механизм коррекции

Для применения полученного одномерного решения в двумерной модели фиксируется направление, в котором существует потенциальная яма, например, по направлению k_y .

Новое значение вектора $\vec{k}$ (квазиимпульса частицы) после итерации алгоритма квазиклассического движения корректируется: проекция вектора в направлении, для которого спектр дискретен, приравняется максимальному разрешенному значению, меньшему данного. Остаток прибавляется к ортогональной проекции с сохранением модуля $\vec{k}$. Если новое значение модуля $\vec{k}'$ меньше минимального разрешённого уровня, старое значение остаётся неизменным. Механизм коррекции изображён на рис. 4.

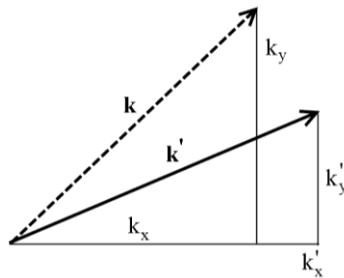


Рис. 4. Дискретизация проекции k_y

Fig. 4. Discretization of k_y projection

4. Практические результаты

Для верификации предложенного метода был проведён вычислительный эксперимент по расчёту дрейфовых характеристик электронов в канале полевого транзистора с затвором Шоттки на n-GaAs с учётом и без учёта квантовых поправок. Геометрия и параметры легирования рабочей области транзистора приведены на рис. 5.

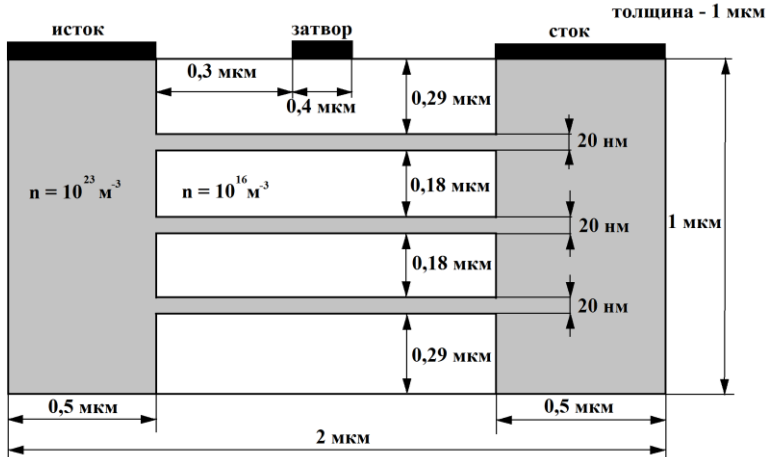


Рис.5. Геометрия моделируемого устройства.

Fig.5. Geometry of modeled device

Расчёт проводился с использованием разработанной ранее квазиклассической модели ПТШ методом макрочастиц [1,2]. Количество частиц – 10000, размеры сетки дискретизации – 100x33.

В тонких каналах данного транзистора движение частиц подвергалось квантовым поправкам. Расчётные уровни энергии для частиц Г- и L-долин приведены в табл. 1.

Табл. 1. Дискретные уровни энергии в Г- и L-долинах GaAs

Table 1. Discrete energy levels in Г- and L-valleys of GaAs

	Энергетические уровни в потенциальной яме, эВ ($U_0 = 0,2B$)						
Г-долина	0,0085		0,0348	0,0775	0,1347	0,1963	0,2
L-долина	0,0011		0,0051	0,0118	0,0212	0,0332	0,0478
	0,0651	0,0849	0,1071	0,1317	0,1583	0,1861	0,2

Для сравнения были сняты дрейфовые характеристики электронов в канале с учётом и без учёта квантовых поправок. На рис. 6 приведено распределение электронов в канале по Y-составляющей квазиимпульса без квантовых поправок.

Кардинально отличную картину демонстрирует распределение электронов по квазиимпульсу, полученное с учётом квантования, представленное на рис. 7.

Наблюдаем ожидаемый провал по центру распределения, обусловленный запретом нулевой проекции квазиимпульса. Асимметрия распределения обусловлена приложенным полем.

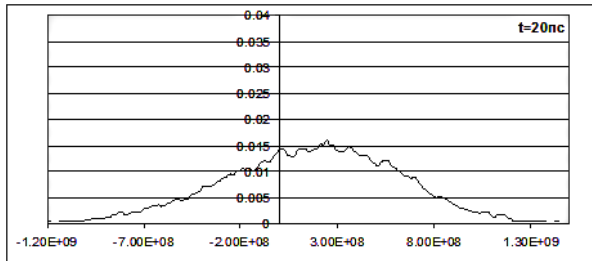


Рис. 6. Распределение по квазиимпульсу при $E=9$ кВ/см.

Fig. 6. Quasiimpulse distribution with $E=9$ кВ/см

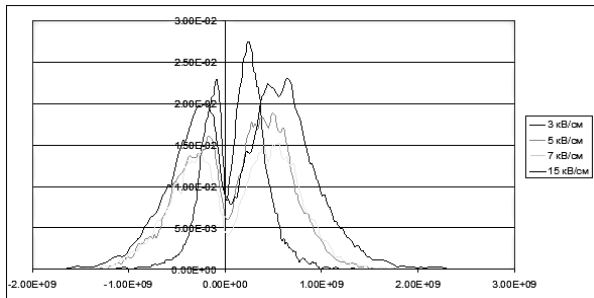


Рис. 7. Распределение по квазиимпульсу с квантованием.

Fig. 7. Quasiimpulse distribution with quantization

На рис. 8 изображены стоко-затворные характеристики транзистора, полученные в результате расчёта. Напряжение на стоке поддерживалось равным $-0,5$ В, а на затворе варьировалось от $-0,85$ В до $-0,05$ В с шагом $0,05$ В.

Как и следовало ожидать, наблюдается рост среднего значения тока для модели с поправками вследствие запрета нулевых значений поперечной проекции квазиимпульса в канале.

5. Заключение

В ходе проделанной работы были проанализированы возможности макрочастичного подхода при моделировании сложных многослойных гетероструктур с учетом квантования энергии свободных носителей в каналах. Были определены необходимые квантово-механические поправки, которые позволили использовать существующую модель ПТШ для моделирования гетероструктурных ПТШ и подобных ему полупроводниковых структур.

Для апробации разработанной модели проведены расчеты зависимости дрейфовой скорости электронов в арсениде галлия от величины напряженности электрического поля для объемного полупроводника и для

тонкой пленки с учетом квантования скорости по одному из направлений. Полученные результаты дают возможность сделать рекомендации по уточнению гидродинамических моделей СВЧ полупроводниковых приборов и по дальнейшим путям оптимизации мощных ПТШ.

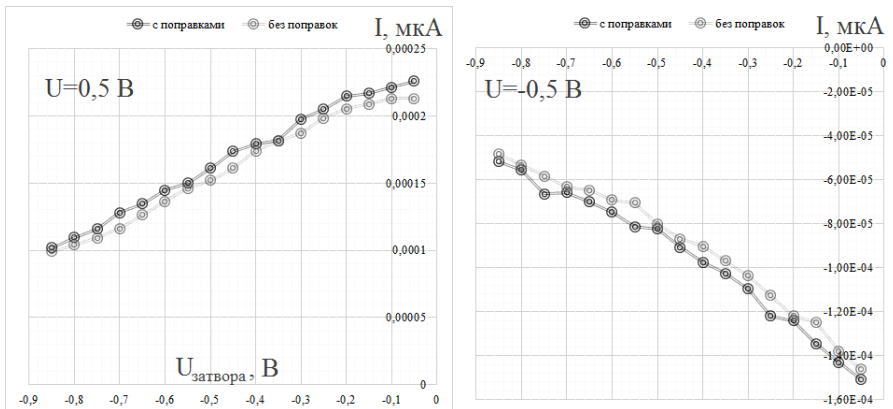


Рис. 8. Стоко-затворные характеристики.

Fig. 8. Drain-gate characteristics

Список литературы

- [1] Asanov E. E., Kilessa G. V., Slipchenko N. I., Starostenko V. V. Selection of kinetic parameters for the transfer current in GaAs // TELECOMMUNICATIONS AND RADIO ENGINEERING, 2014, № 14, V. 73, pp. 1273 – 1292.
- [2] Килесса Г.В., Асанов Э.Э., Зуев С.А., Слипенченко Н.И. Моделирование барьера Шоттки методом макрочастиц. Сборник научных трудов V Международной научной конференции "Функциональная база нанoeлектроники" – Харьков - Кацивели, 2012. – с. 341-344.
- [3] G.U. Jensen, B. Lund, T.A. Fjeldly, M. Shur. Monte Carlo simulation of semiconductor devices. Computer Physics Communications 67 (1991) p. 1-61.
- [4] П. С. Парфенов. Квантовая механика. Методическое пособие к практикуму по квантовой физике. — СПб: НИУ ИТМО, 2012.

References

- [1] Assanov E. E., Kilessa G. V., Slipchenko N. I., Starostenko V. V. Selection of kinetic parameters for the transfer current in GaAs // TELECOMMUNICATIONS AND RADIO ENGINEERING, 2014, № 14, V. 73, pp. 1273 – 1292.
- [2] Kilessa G.V, Asanov E.E., Suev S.A., Slipchenko N.I. Model of Schottky barrier by macroparticle method. (In Russian). Collection of scientific works of the VII International scientific conference "Functional base of nanoelectronics" – Kharkov - Katsiveli, 2012. – p. 341-344
- [3] G.U. Jensen, B. Lund, T.A. Fjeldly, M. Shur. Monte Carlo simulation of semiconductor devices. Computer Physics Communications 67 (1991) p. 1-61.
- [4] P.S. Parfenov. Quantum mechanics. – Saint-Petersburg: ITMO University, 2012.

Влияние поверхностного плазмонного резонанса на распределение вектора Пойнтинга внутри и вне золотого наноцилиндра

¹Каневский В.И., ¹Карушкин Н.Ф.

¹ Научно-исследовательский институт «Орион», г. Киев, Украина
vikanev@ukr.net

Аннотация: Выполнен расчет рассеяния плоских электромагнитных волн на наноцилиндре, используя конечно-элементный подход для решения трехмерного векторного уравнения Гельмгольца. Показано, что в резонансном режиме излучение активной энергии индуцированного электрического диполя в наноцилиндре в основном осуществляется через его боковые поверхности. В течение одного периода колебаний падающей плоской волны дважды осуществляется обмен электромагнитной энергией между индуцированным электрическим диполем и плоской волной. Пространственное распределение реактивной энергии электрического диполя носит явно выраженный локальный характер и в несколько раз превышает его активную энергию в ближней зоне рассеяния

Ключевые слова: плазмонный резонанс, рассеяние плоских электромагнитных волн, трехмерное векторное уравнение Гельмгольца,

1. Введение

Феномен поверхностного плазмонного резонанса (ППР) - локальных поверхностных мод колебаний свободных электронов на поверхности металлических наночастиц - представляет интерес, как с теоретической точки зрения, так и с практической. Электрическое поле E является важным параметром при описании указанного явления, но оно не раскрывает его сути, так как поток энергии при рассеянии на объекте определяется не только распределением напряженности электрического, но и магнитного поля. С помощью вектора Пойнтинга можно описать транспорт энергии при рассеянии света на исследуемом объекте. Концепция вектора Пойнтинга позволяет очертить процессы обмена электромагнитной энергией между наночастицей и падающим излучением.

В данной работе с помощью численного моделирования исследуются особенности транспорта энергии при рассеянии плоской электромагнитной волны на металлическом наноцилиндре конечных размеров в оптическом диапазоне в резонансном режиме.

2. Исследуемая модель

Рассмотрим золотой наноцилиндр, так как в этом случае явление ППР попадает в область оптического диапазона. Оптические константы для золота были взяты из работы [1].

Выберем параллельную поляризацию вектора электрических полей $\mathbf{E}^{in}$ данной волны относительно оси наноцилиндра и вектором Пойнтинга $\mathbf{P}$, направленным по нормали к оси наноцилиндра (см. левую вкладку на рис.1). Точный расчет напряженностей полных электрических полей $\mathbf{E}$ в расчетной области проводился путем решения векторного трехмерного уравнения Гельмгольца, используя конечно-элементный подход, включающий метод Галеркина и метод конечных элементов [2,3]. Численная реализация условий излучения Зоммерфельда осуществлялась путем применения локального приближения, в рамках которого был выбран метод абсолютно поглощающих слоев [4, 5].

Для описания явления ППР в золотом наноцилиндре выберем несколько параметров, первый из которых определим следующим образом:

$$RCS = 10 \cdot \lg(\delta / S),$$

где $\delta = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 |\mathbf{E}^s(\varphi, \theta) / \mathbf{E}^{in}(\varphi, \theta)|^2$ – собственно дифференциальное сечение рассеяния; $\mathbf{E}^s(\varphi, \theta)$ и $\mathbf{E}^{in}(\varphi, \theta)$ – электрические составляющие соответственно рассеянного и падающего поля в дальней зоне; φ, θ – азимутальный угол и угол рассеяния в сферической системе координат; $S = 1 \text{ м}^2$ – площадь, на которую нормировалось дифференциальное сечение рассеяния δ . В качестве второго параметра была выбрана напряженность полного электрического поля $\mathbf{E}$, являющегося алгебраической суммой полей $\mathbf{E}^s$ и $\mathbf{E}^{in}$. В качестве третьего параметра рассматривался вектор Пойнтинга $\mathbf{P}$, который можно представить следующим образом:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{av} + \mathbf{P}_{var}, \quad \mathbf{P}_{av} = \frac{1}{2}[\mathbf{E}_{re} \mathbf{H}_{re}] + \frac{1}{2}[\mathbf{E}_{im} \mathbf{H}_{im}],$$

$$\mathbf{P}_{\text{var}} = \frac{1}{2} \{ [\mathbf{E}_{re} \mathbf{H}_{re}] - [\mathbf{E}_{im} \mathbf{H}_{im}] \} \cos(2\omega t) - \frac{1}{2} \{ [\mathbf{E}_{re} \mathbf{H}_{im}] + [\mathbf{E}_{im} \mathbf{H}_{re}] \} \sin(2\omega t)$$

где $\mathbf{P}_{av}$ – среднее за период значение переносимой плотности энергии (активная мощность), $\mathbf{P}_{var}$ – переменная составляющая плотности энергии вектора Пойнтинга $\mathbf{P}$ (реактивная мощность); ω – циклическая частота падающей плоской волны, t – время; $\mathbf{E}_{re}, \mathbf{E}_{im}, \mathbf{H}_{re}, \mathbf{H}_{im}$ – действительные и мнимые части комплексных амплитуд векторов $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ соответственно.

3. Практические результаты

Будем интересоваться распределением вектора Пойнтинга $\mathbf{P}$ и его составляющих $\mathbf{P}_{av}$ и $\mathbf{P}_{var}$ в плоскости $\mathbf{YOZ}$ вдоль прямых, параллельных оси $\mathbf{Z}$ (см. левую вкладку на рис.1).

Длина падающей плоской волны λ_{in} , при которой имеет место явление ППР, определялась значением максимума кривой $RCS(\lambda_{in}, \theta)$ при рассеянии света вперед (см. левую вкладку на рис.2). Данный максимум соответствует $\lambda_{rez} = 550$ нм (в [6] был получен близкий результат, причем в случае, когда сечения рассеяния и поглощения соизмеримы).

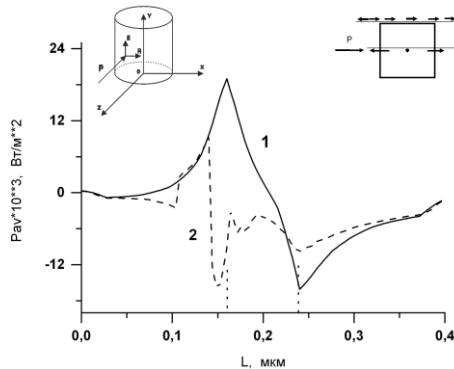


Рис. 1. Модифицированные функции P_{av} вектора Пойнтинга $\mathbf{P}_{av}$ в резонансном режиме. Кривая (1) получена вдоль срединной линии, кривая (2) – вдоль прямой над наноцилиндром на высоте 1 нм, причем направление потока вектора $\mathbf{P}_{av}$ вдоль этих прямых изображено на правой вкладке

Кривая (1) получена вдоль срединной линии, кривая (2) – вдоль прямой над наноцилиндром на высоте 1 нм, причем направление потока вектора $\mathbf{P}_{av}$ вдоль этих прямых изображено на правой вкладке.

Потоки вектора $\mathbf{P}_{av}$ вдоль срединной линии (Рис.1) выходят из наноцилиндра как с освещенной, так и с теневой стороны (кривая 1), причем их максимумы приблизительно равны и расположены в области пересечения с боковыми сторонами. Таким образом, в указанном режиме плазмон формируется и излучает в основном в области боковых поверхностей наноцилиндра, причем повышенное значение его потоков распространяется вдоль большей части зоны Френеля. Поток вектора $\mathbf{P}_{av}$ над наноцилиндром (кривая 2) с освещенной стороны направлен вдоль оси $\mathbf{Z}$, а с теневой стороны — в противоположном направлении, причем в этих областях наблюдаются его резкие всплески, обусловленные явлением ППР.

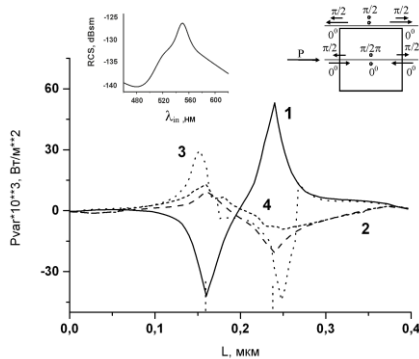


Рис. 2. Кривые (1, 2) получены вдоль срединной линии, кривые (3, 4) — вдоль прямой над наноцилиндром на высоте 1 нм (см. правую вкладку). Кривые (1, 3) соответствуют фазе колебаний вектора $\mathbf{P}_{var}$, равной $\varphi = 2\omega t = 0^\circ$, кривые (2, 4) — фазе колебаний

$\varphi = 2\omega t = \pi/2$. Направления потоков вектора $\mathbf{P}_{var}$ вдоль указанных

горизонтальных прямых изображены на правой вкладке. Дифференциальные сечения рассеяния RCS плоских электромагнитных волн на наноцилиндре в дальней зоне при угле рассеяния вперед ($\theta = 180^\circ$) представлены на левой вкладке

В течение одного периода колебаний падающей плоской волны (Рис.2) переменные значения вектора Пойнтинга $\mathbf{P}_{var}$ дважды обмениваются энергией с данной волной, причем носят явно выраженный локальный характер. Максимальная интенсивность вектора $\mathbf{P}_{var}$ рас-

положена в области пересечения срединной линии (кривые (1, 2)) с боковыми сторонами наноцилиндра. Таким образом, в области боковых поверхностей формируется переменная составляющая переносимой плотности энергии в наноцилиндре, которая имеет приблизительно равные значения как с освещенной, так и с теневой стороны. Поток вектора $\mathbf{P}_{\text{var}}$ над поверхностью цилиндра как с освещенной, так и с теневой стороны (кривые (3, 4)) характеризуется всплесками интенсивности, которые указывают на наличие ППР в этих областях

4. Заключение

Использование концепции вектора Пойнтинга позволяет описать процесс обмена электромагнитной энергией между золотым наноцилиндром и падающей плоской волной, причем данный обмен реализуется дважды в течение одного периода колебаний указанной волны. В данном режиме излучение активной энергии в основном осуществляется через боковые поверхности наноцилиндра. Пространственное распределение реактивной энергии возбужденного в наноцилиндре электрического диполя носит явно выраженный локальный характер и в несколько раз больше активной энергии в ближней зоне рассеяния.

Список литературы

- [1] Johnson P.W., Christy R.W. Optical constants of the noble metals // *Phys. Rev.* 1972. Vol. B 6. No 12. P. 4370-4379.
- [2] Volakis J.L., Chatterjee A., Kempel L.C. *Finite Element Method for Electromagnetics*. IEEE Press, 1998. 324 p.
- [3] Jin J. *The Finite Element Method in Electromagnetics. Second Edition*. New York: Wiley, 2002. 511 p.
- [4] Chew W.C., Weedon W.C. A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates // *Microwave Opt. Tech. Lett.* 1994. V. 7. P. 599-604.
- [5] Sacks Z.S., Kingsland D.M., Lee R., Lee J.F. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition // *IEEE Trans. Antennas Propagat.* 1995. V. 43. P. 1460-1463.
- [6] Jain P.K., Lee K.S., El-Sayed I.H., El-Sayed M.A. Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: Applications in biological imaging and biomedicine // *J. Phys. Chem.* 2006. B 110. P. 7238-7248.

Electrical characteristics of perspective nanoscale MOSFET structures

Artur M. Borovik, Victor R. Stempitsky
Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics
 Minsk, 220013, Belarus
 borovik@bsuir.by, vstem@bsuir.by

Abstract: The results of electrical characteristics simulation of fully depleted SOI MOSFET and FET based on molybdenum sulfide monolayer using different approaches (classical and with quantum-mechanical correction) and models that describe the processes of charge carriers transport in nanoscale device structures are presented. Comparison of the electrical characteristics obtained from computer simulation with results of experimental measurements is carried out.

Keywords: nanoscale MOSFET, simulation, quantum-mechanical correction, mobility model, two-dimensional crystal.

Электрические характеристики перспективных конструкций наноразмерных МДП-транзисторов

Боровик А.М., Стемпицкий В.Р.
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
 г. Минск, 220013, Республика Беларусь
 borovik@bsuir.by, vstem@bsuir.by

Аннотация: Представлены результаты моделирования электрических характеристик МДП-транзистора с полностью обедненным каналом на КНИ и полевого транзистора на основе монослоя сульфида молибдена в рамках использования различных подходов (классического и с применением квантово-механической коррекции) и моделей, описывающих процессы переноса носителей заряда в наноразмерных приборных структурах. Проведено сравнение электрических характеристик, полученных в результате компьютерного моделирования, с результатами экспериментальных измерений.

Ключевые слова: наноразмерный МДП-транзистор, моделирование, квантово-механическая коррекция, модель подвижности, двумерный кристалл.

1. Введение

Стандартные программные средства проектирования и моделирования в микро- и нанoeлектронике основаны на использовании многообразных физико-математических моделей процессов, имеющих место в приборных структурах. Уравнения, а также физические параметры этих моделей получены по результатам экспериментов с конкретными технологическими процессами, материалами и структурами. Очевидно, что использование таких моделей в других условиях, с другими технологическими нормами, материалами и структурами, может привести к неадекватным результатам моделирования и проектирования.

В связи с появлением новых физических эффектов модели для будущих поколений технологии КМОП будут только усложняться, более значимым станет учет разброса параметров. Существует общая тенденция предъявлять более жесткие требования к физической обоснованности и точности моделей, которые должны обладать большей предсказательной силой и в меньшей степени нуждаться в калибровке.

В настоящее время при производстве ИМС широко используются диэлектрики с высокой диэлектрической проницаемостью, напряженный кремний, МДП-структуры с полностью обедненным каналом на КНИ (FD-SOI FET), многозатворные МДП-транзисторы (например, FinFET). В долгосрочной перспективе для достижения адекватной величины тока МДП-транзисторов при уменьшении проектных норм требуется квазибаллистическое функционирование приборов. В конечном итоге необходимы материалы для канала с высокой проводимостью, например, соединения элементов III-V групп, тонкий слой германия на кремнии, углеродные нанотрубки, графен, дихалькогениды переходных металлов и другие материалы и структуры, которые обещают более высокую подвижность носителей заряда, чем кремний. С целью использования преимуществ хорошо освоенной кремниевой технологии предполагается, что новые, с высокой подвижностью, материалы будут сформированы на кремниевой подложке. Неклассические МДП-приборы должны быть физически и функционально интегрированы на базе существующей КМОП-технологии. Помимо внедрения этих материалов, будут разрабатываться совершенно новые транзисторы, работающие на новых принципах, использующие, например, туннелирование (туннельный полевой транзистор, TFET и др.) или спин. Структуры различных материалов должны быть совместно оптимизированы для достижения наилучших характеристик прибора (потребляемая мощность, быстродействие и др.) и приемлемой стоимости [1].

2. Результаты моделирования МДП-транзистора с полностью обедненным каналом на КНИ

С целью исследования эффективности применения для моделирования электрических характеристик наноразмерных МДП-транзисторов стандартных подходов и моделей, доступных в рамках современных программных комплексов приборно-технологического моделирования, рассматривался МДП-транзистор с полностью обедненным каналом на КНИ. Исследуемая структура с толщиной канала 4,9 нм, сформированная в среде программного комплекса компании Silvaco, представлена на рисунке 1. Толщина подзатворного диэлектрика равна 26 нм, длина канала – 8 мкм, концентрация примеси в подложке – $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, в поликремниевом затворе – $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, в областях истока и стока – $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [2].

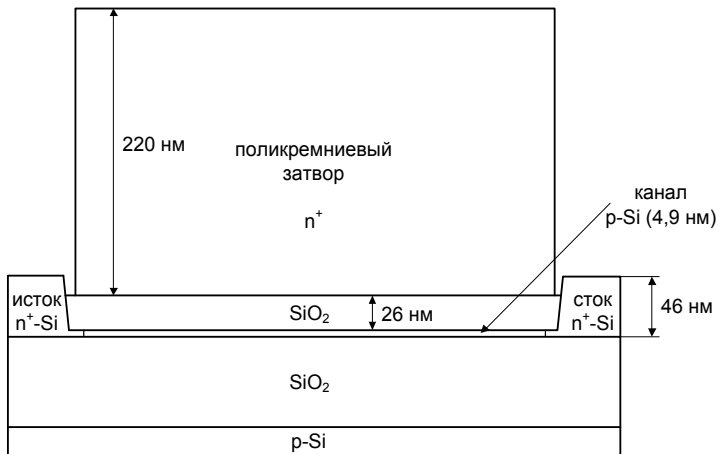


Рис. 1. Структура МДП-транзистор с полностью обедненным каналом на КНИ

Fig. 1. Fully depleted SOI MOSFET structure

Моделирование исследуемого МДП-транзистора осуществлялось посредством использования диффузионно-дрейфовой модели с коррекцией квантовым потенциалом Бома. При этом применялась модель рекомбинации Шокли-Рида-Холла, статистика Ферми-Дирака, модель, описывающей эффект сужения ширины запрещенной зоны при высоких концентрациях примеси. В качестве модели подвижности, имеющей ключевое значение при описании процессов переноса носителей заряд в полупроводниковых приборах, использовались модели Ломбарди, Ямагучи, Клаассена, Ширахата, Таша, Ватта [3].

На рисунке 2 представлены вольт-амперные характеристики (ВАХ) зависимости плотности тока стока I_C от напряжения на затворе $V_{зи}$ при напряжении на стоке $V_{си} = 0,1$ В, полученные с использованием перечисленных выше моделей, а также данные экспериментальных измерений [2].

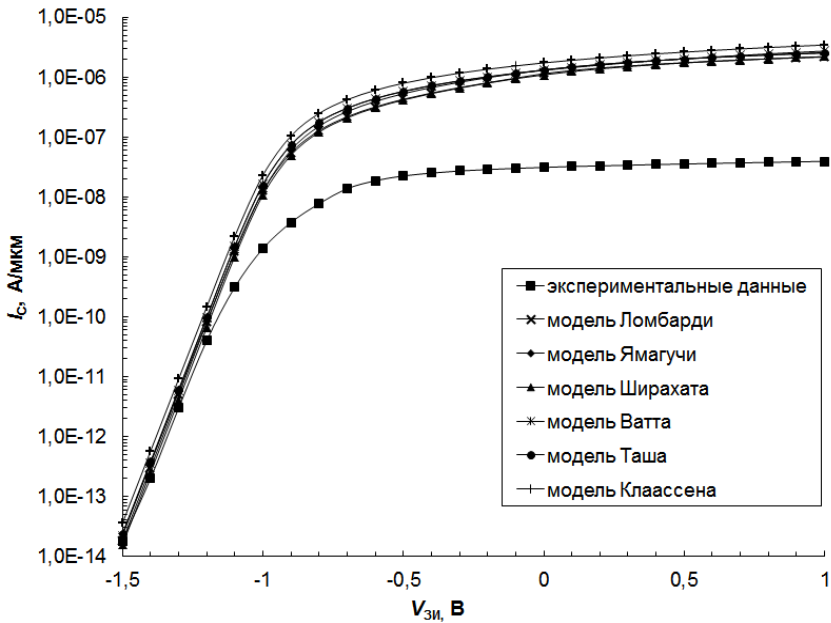


Рис. 2. Сравнение результатов моделирования и экспериментальных измерений МДП-транзистора с полностью обедненным каналом на КНИ

Fig. 2. Comparison of the simulation results and experimental measurements of the fully depleted SOI MOSFET

Очевидно, что результаты моделирования значительно отличаются от экспериментальных данных. Использование диффузионно-дрейфовой модели с коррекцией квантовым потенциалом Бома обеспечивает получение значений порогового напряжения, хорошо согласующихся с экспериментальными результатами, что является следствием квантово-механической коррекции энергии носителей заряда. Однако перенос носителей заряда, механизмы рассеяния описываются уравнениями классической физики, чем и объясняются несоответствия в величинах токов. Можно сделать вывод о важности выбора модели подвижности и необходимости пересмотра и коррекции уравнений и параметров моделей, описывающих перенос носителей заряда.

3. Результаты моделирования полевого транзистора на основе сульфида молибдена

При создании логических ИМС перспективными являются направления, связанные с применением МДП-транзисторов, использующих в качестве канала нанотруры, графен, углеродные нанотрубки, квазидвумерные кристаллы (MoS_2 , WS_2 , $NbSe_2$, BN и др.) [1]. Однако параметры, описывающие физические свойства графена, дихалькогенидов переходных металлов и других квазидвумерных кристаллов, не интегрированы в стандартные библиотеки программных комплексов приборно-технологического моделирования, в том числе компании Silvaco.

Суть предлагаемого подхода для моделирования таких структур состоит в задании значений для необходимого набора параметров, описывающих электрофизические свойства материалов и процессы переноса носителей заряда. Минимальный требуемый набор параметров включает ширину запрещенной зоны, плотность состояний для электронов и дырок, диэлектрическую проницаемость, подвижность для электронов и дырок [3]. Необходимые параметры могут быть получены на основе результатов экспериментальных измерений и моделирования из первых принципов.

Структура полевого транзистора, в качестве канала которого используется монослой сульфида молибдена [4, 5], представлена на рисунке 3. С использованием описанного подхода, а также классических и квантово-механических моделей, получены электрические характеристики исследуемой приборной структуры на основе MoS_2 . На рисунке 4 представлены вольт-амперные характеристики зависимости плотности тока стока I_C от напряжения на затворе $V_{ЗИ}$ при $V_{СИ} = 0,05$ В.

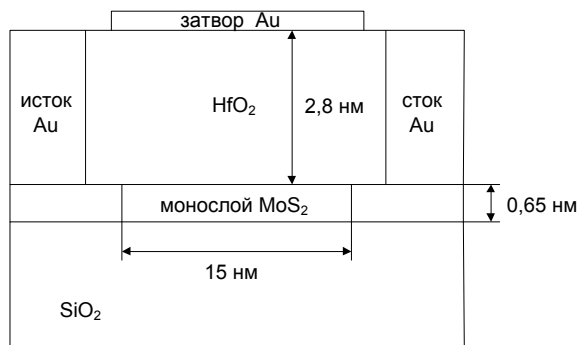


Рис. 3. Структура полевого транзистора на основе монослоя сульфида молибдена

Fig. 3. FET structure based on molybdenum sulfide monolayer

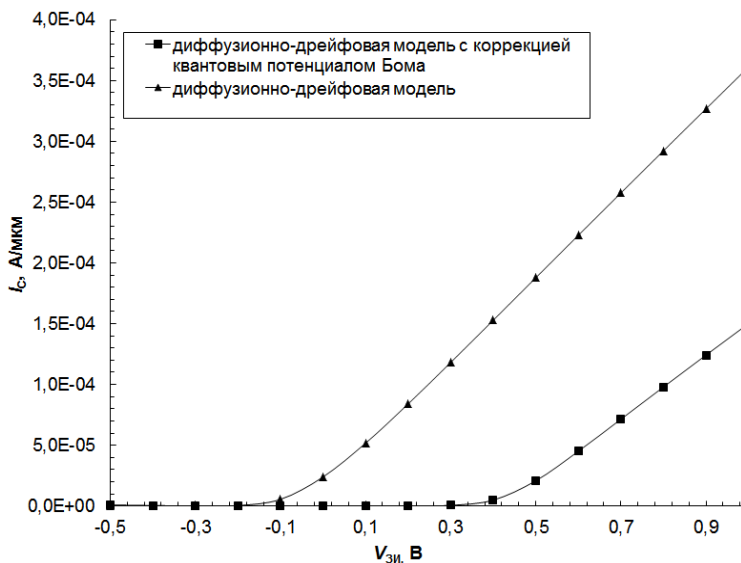


Рис. 4. Сравнение результатов моделирования полевого транзистора на основе сульфида молибдена при использовании различных подходов

Fig. 4. Comparison of the simulation results for FET structure based on molybdenum sulfide when using different approaches

Моделирование полевого транзистора осуществлялось посредством использования классической диффузионно-дрейфовой модели и диффузионно-дрейфовой модели с коррекцией квантовым потенциалом Бома.

4. Заключение

Значительное отличие результатов моделирования от данных экспериментальных измерений свидетельствует о неадекватности стандартных моделей для исследования наноразмерных МДП-структур.

Результаты моделирования полевого транзистора на основе MoS_2 свидетельствуют о принципиальной возможности использования программных комплексов приборно-технологического моделирования для исследования наноразмерных приборных структур на основе квазидвумерных кристаллов. ВАХ одного и того же прибора в зависимости от используемых подходов к моделированию значительно различаются, что свидетельствует о высокой степени проявления квантовых эффектов.

Таким образом, актуальной является задача разработки новых и адаптации существующих физико-математических моделей, оптимизации

их параметров для использования этих моделей в стандартных средствах проектирования изделий микроэлектроники при переходе к новым проектным нормам, конструктивным решениям и материалам. Также необходима разработка соответствующих подходов и методов в сфере современных программных средств проектирования в микроэлектронике.

Источники финансирования и выражение признательности

Исследования проводятся при финансовой поддержке государственных программ научных исследований Республики Беларусь «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии» (задание 2.54) и «Конвергенция» (задание 3.2).

Список литературы

- [1] International Technology Roadmap for Semiconductors: 2013 (ITRS) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.itrs2.net/reports.html. – Дата доступа: 15.07.2016.
- [2] Karsenty A., Chelly A. Modeling of the channel thickness influence on electrical characteristics and series resistance in gate-recessed nanoscale SOI MOSFETs // *Active and Passive Electronic Components*. 2013. V. 2013. Article ID 801634. 10 p.
- [3] Atlas User's manual. Device simulation software [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.silvaco.com. – Дата доступа: 15.07.2016.
- [4] Chang J. Ab-Initio electronic structure and quantum transport calculations on quasi-two-dimensional materials for beyond Si-CMOS Devices: dissertation for the degree of doctor of philosophy. Austin, 2013. 123 p.
- [5] Radisavljevic B., Radenovic A., Brivio1 J., Giacometti V., Kis A. Single-layer MoS₂ transistors // *Nature Nanotechnology*. 2011. V. 6. P. 147-150.

References

- [1] International Technology Roadmap for Semiconductors: 2013 (ITRS) [Electronic resource]. – Mode of access: www.itrs2.net/reports.html. – Date of access: 15.07.2016.
- [2] Karsenty A., Chelly A. Modeling of the channel thickness influence on electrical characteristics and series resistance in gate-recessed nanoscale SOI MOSFETs // *Active and Passive Electronic Components*. 2013. vol. 2013. Article ID 801634. 10 p.
- [3] Atlas User's manual. Device simulation software [Electronic resource]. – Mode of access: www.silvaco.com. – Date of access: 15.07.2016.
- [4] Chang J. Ab-Initio electronic structure and quantum transport calculations on quasi-two-dimensional materials for beyond Si-CMOS Devices: dissertation for the degree of doctor of philosophy. Austin, 2013. 123 p.
- [5] Radisavljevic B., Radenovic A., Brivio1 J., Giacometti V., Kis A. Single-layer MoS₂ transistors. *Nature Nanotechnology*. 2011. vol. 6. pp. 147 - 150.

Acknowledgements

This work was supported by the grant 2.54 of Belarusian national scientific research program “Nanotechnology” and grant 3.2 of Belarusian national scientific research program “Convergence”.

Optimization of high electron mobility transistor construction to suppress the self-heating effect

Vladislav S. Volchek, Viktor R. Stempitsky
Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics
 Minsk, 220013, Republic of Belarus
 vlattenham@gmail.com, vstem@bsuir.by

Abstract: The influence of diamond heat spreading layers on the current-voltage characteristics of AlGaIn/GaN high electron mobility transistors has been investigated. It is shown that the diamond layers can significantly decrease device temperature, thus improving its current-voltage characteristics.

Keywords: high electron mobility transistor, self-heating, heat spreading layer, optimization.

Оптимизация конструкции транзистора с высокой подвижностью электронов, обеспечивающей снижение влияния эффекта саморазогрева

Волчѣк В.С., Стемпицкий В.Р.
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
 г. Минск, 220013, Республика Беларусь
 vlattenham@gmail.com, vstem@bsuir.by

Аннотация: Исследуется влияние теплоотводящих элементов из слоев алмаза на вольт-амперные характеристики транзистора с высокой подвижностью электронов на основе гетероперехода AlGaIn/GaN. Внедрение в конструкцию транзистора подобных элементов приводит к существенному снижению рабочей температуры прибора и улучшению рабочих характеристик.

Ключевые слова: транзистор с высокой подвижностью электронов, саморазогрев, теплоотводящий элемент, оптимизация.

1. Введение

На протяжении длительного времени транзисторы с высокой подвижностью электронов (ТВИЭ) считаются многообещающими прибора-

ми мощной и сверхвысокочастотной электроники, а также перспективными элементами сенсорных устройств. Благодаря высоким значениям скорости насыщения электронов и напряжения электрического пробоя нитрида галлия, транзисторы на основе гетероперехода AlGaIn/GaN могут выдерживать значительные токи, приводящим к очень большим значениям рассеиваемой мощности и, следовательно, нежелательному эффекту саморазогрева. Чрезмерный нагрев рабочей области прибора вызывает ухудшение его вольт-амперных характеристик.

Для снижения температуры в области канала ТВПЭ предлагаются несколько решений, среди которых следует отметить использование алмазных подложек при формировании слоев приборной структуры [1], а также технологию перевернутого кристалла, используемой для присоединения теплоотводящего элемента [2].

В данной работе исследуется возможность уменьшения влияния эффекта саморазогрева AlGaIn/GaN-ТВПЭ, сформированного на кремниевой подложке, с помощью интеграции теплоотводящих элементов на основе слоев алмаза. Численное моделирование осуществлялось с использованием системы компьютерного проектирования компании Silvaco.

2. Структура транзистора и применяемые модели

Исследуемая структура ТВПЭ на основе гетероперехода AlGaIn/GaN с двумя внедренными теплоотводящими слоями из алмаза схематически изображена на рис. 1.

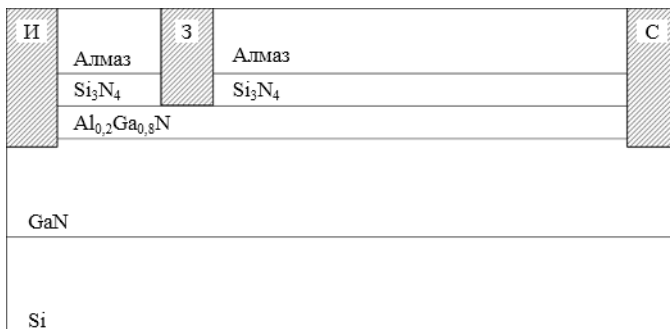


Рис. 1. Структура AlGaIn/GaN-ТВПЭ.

Fig. 1. AlGaIn/GaN HEMT structure

Структура прибора состоит из буферного слоя нитрида галлия толщиной 2,97 мкм, барьерного слоя $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ толщиной 30 нм и пассиви-

рующего слоя Si_3N_4 толщиной 50 нм. Толщина области моделирования кремниевой подложки равна 18 мкм. Расстояния исток-затвор и затвор-сток составляют 2 и 8 мкм соответственно. Длина затвора на основе барьера Шоттки равна 1 мкм. Буферный и барьерный слои легированы донорными примесями с концентрациями 10^{15} см^{-3} и 10^{17} см^{-3} соответственно.

При моделировании учитываются спонтанная и пьезоэлектрическая составляющие поляризации в слое AlGaIn . Предполагается, что относительно толстый слой нитрида галлия ненапряженный и, следовательно, имеет только спонтанную компоненту поляризации. Плотность заряда в слое двумерного электронного газа составляет $1,07 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

Численное моделирование эффекта саморазогрева выполняется с взаимодействием термодинамически строгой модели нагрева решетки (модели Вачутки) [3]. Уравнение теплового потока, которое решается одновременно с уравнениями непрерывности и уравнением Пуассона, имеет вид

$$C_V(\partial T/\partial t) = \nabla(\kappa \nabla T) + H, \quad (1)$$

где C_V — объемная теплоемкость, Дж/(см³·К); T — температура, К; κ — теплопроводность, Вт/(см·К); H — мощность выделения тепла на единицу объема, Вт/см³.

На границе между нижней поверхностью подложки и окружающей средой с температурой 300 К установлены изотермические граничные условия, т. е. окружающая среда выполняет роль идеального теплоотвода. На верхней и боковых поверхностях структуры транзистора установлены адиабатические граничные условия.

При моделировании задействуется диффузионно-дрейфовая модель переноса носителей вместе с моделью подвижности Фарахманда (модифицированной моделью Коэ-Томаса) для слабого электрического поля [4] применительно к электронам в канальном слое нитрида галлия. Эта модель учитывает зависимость подвижности от концентрации примесей и температуры.

3. Результаты моделирования

На рис. 2 представлено распределение температуры вдоль канала AlGaIn/GaN -ТВПЭ без внедренных теплоотводящих элементов для смещения на затворе $V_g = 0 \text{ В}$ и различных смещений на стоке V_d .

Результаты моделирования показывают, что при больших смещениях на стоке ($\sim 20 \text{ В}$) у границы затвора со стороны стока (границы затвора указаны вертикальными линиями) начинает формироваться область с по-

вышенной температурой. Максимальная температура прибора увеличивается на 63,64 % (со значения 385 К до значения 630 К) при увеличении смещения на стоке со значения 10 В до значения 40 В. Повышение температуры в некоторой области прибора вызывает в ней снижение подвижности электронов. Минимальное значение подвижности электронов в канале уменьшается на 67,84 % (со значения $370 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ при $V_d = 10 \text{ В}$ до значения $119 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ при $V_d = 40 \text{ В}$).

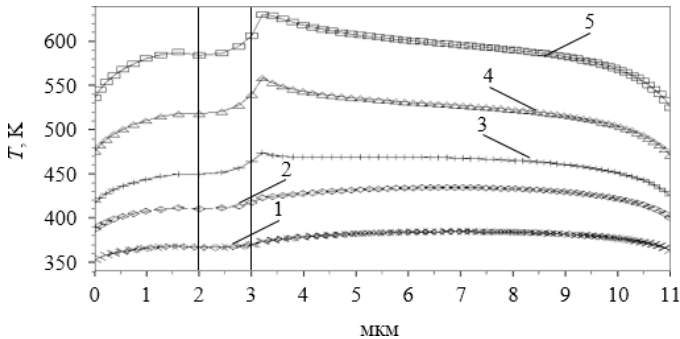


Рис. 2. Распределение температуры вдоль канала AlGaIn/GaN-ТВПЭ без внедренных теплоотводящих элементов
(распределение 1 соответствует $V_d = 10 \text{ В}$, 2 — 15 В, 3 — 20 В, 4 — 30 В, 5 — 40 В).

Fig. 2. Temperature distribution along the channel of the AlGaIn/GaN HEMT without the diamond heat spreading layers
(distribution 1 corresponds to $V_d = 10 \text{ В}$, 2 — 15 В, 3 — 20 В, 4 — 30 В, 5 — 40 В)

На рис. 3 представлено распределение температуры вдоль канала AlGaIn/GaN-ТВПЭ без и с теплоотводящими элементами, располагающимися в промежутках исток-затвор и затвор-сток, что осуществимо, т. к. алмаз является диэлектриком. Толщина слоя алмаза составляет 3 мкм. Смещения на затворе и стоке равны 0 В и 40 В соответственно.

Присутствие теплоотводящих слоев из алмаза позволяет снизить максимальную температуру на 6,03 % (со значения 630 К до 592 К) при смещении на стоке 40 В. Следует отметить, что при этом уменьшается температура в граничащей с затвором области, играющей важнейшую роль в функционировании ТВПЭ. Минимальное значение подвижности электронов увеличивается на 13,45 % (со значения $119 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ до значения $135 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$).

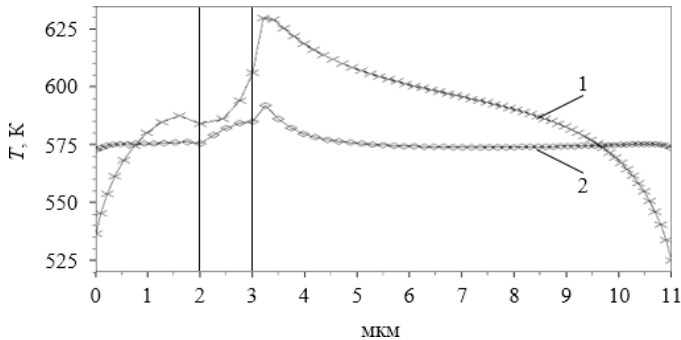


Рис. 3. Распределение температуры вдоль канала AlGaIn/GaN-ТВПЭ (распределение 1 соответствует структуре без теплоотводящих элементов, 2 — с теплоотводящими элементами).

Fig. 3. Temperature distribution in the channel of the AlGaIn/GaN HEMT (distribution 1 corresponds to the structure without the heat spreading layers, 2 — with the heat spreading layers)

На рис. 4 приведена для различных смещений на стоке зависимость от толщины слоя алмаза t эффективности теплоотводящих элементов η , определяемой выражением

$$\eta = (T_0 - T_s)/T_0, \quad (2)$$

где T_0 и T_s — максимальная температура структуры ТВПЭ без и с теплоотводящими элементами соответственно.

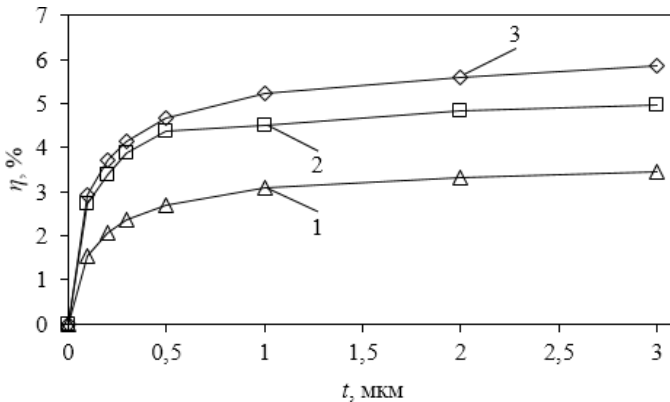


Рис. 4. Зависимость эффективности теплоотводящих элементов от толщины слоев алмаза (график 1 соответствует $V_d = 10$ В, 2 — 25 В, 3 — 40 В).

Fig. 4. Heat spreading layer efficiency dependence on the diamond layer thickness (plot 1 corresponds to $V_d = 10$ V, 2 — 25 V, 3 — 40 V)

При относительно малых (менее 1 мкм) толщинах теплоотводящего слоя алмаза эффективность характеризуется резким ростом при увеличении толщины слоя, но изменяется незначительно при дальнейшем утолщении. Так, при $V_d = 40$ В эффективность повышается на 78,50 % (со значения 2,93 % до значения 5,23 %), когда толщина алмазного слоя увеличивается со значения 0,1 мкм до значения 1 мкм. Если толщина слоя изменяется со значения 1 мкм до значения 3 мкм, эффективность теплоотводящих элементов возрастает только на 12,24 % (со значения 5,23 % до значения 5,87 %).

Сток-стоковые характеристики AlGaIn/GaN-ТВПЭ без и с теплоотводящими элементами на основе слоев алмаза толщиной 3 мкм приведены на рис. 5. Смещение на затворе — 0 В.

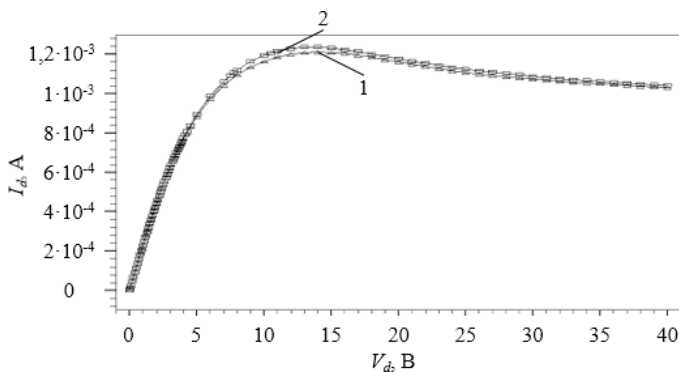


Рис. 5. Сток-стоковые характеристики AlGaIn/GaN-ТВПЭ (график 1 соответствует структуре без теплоотводящих элементов, 2 — с теплоотводящими элементами).

Fig. 5. Drain current vs drain voltage characteristics of the AlGaIn/GaN HEMT (plot 1 corresponds to the structure without the heat spreading layers, 2 — with the heat spreading layers)

Интеграция двух теплоотводящих слоев из алмаза на поверхность структуры AlGaIn/GaN-ТВПЭ улучшает вольт-амперные характеристики транзистора. Так, при толщине слоев алмаза равной 3 мкм максимальное значение тока стока увеличивается на 2,48 % (со значения $1,21 \cdot 10^{-3}$ А до значения $1,24 \cdot 10^{-3}$ А).

4. Заключение

Внедрение теплоотводящих элементов на основе слоев из алмаза позволяет уменьшить влияние эффекта саморазогрева ТВПЭ на его вольт-

амперные характеристики. Так, при использовании теплоотводящих элементов толщиной 3 мкм и эффективностью 5,87 % максимальный ток сток увеличивается на 2,48 % при нулевом смещении на затворе. Эффективность теплоотводящих элементов зависит от толщины слоев алмаза: резко повышается с утолщением слоев от 0,1 мкм до 1 мкм (на 78,50 %) и слабо изменяется при дальнейшем повышении толщины до 3 мкм (12,24 %).

Источники финансирования

Исследования проводятся при финансовой поддержке государственных программ научных исследований Республики Беларусь «Информатика, космос, безопасность» (задание 1.8.05) и «Фотоника, опто- и микроэлектроника» (задание 3.2.01).

Список литературы

- [1] Felbinger J.G. Comparison of GaN HEMTs on diamond and SiC substrates // *IEEE Electron Device Lett.* 2007. V. 28. No. 11. P. 948-950.
- [2] Das J. Improved thermal performance of AlGaIn/GaN HEMTs by an optimized flip-chip design // *IEEE Trans. Electron Devices.* 2006. V. 53. No. 11. P. 2696-2702.
- [3] Wachutka G.K. Rigorous thermodynamic treatment of heat generation in semiconductor device modeling // *IEEE Trans. Comput.-Aided Design Integr. Circuits Syst.* 1990. V. 9. No. 11. P. 1141-1149.
- [4] Farahmand M. Monte Carlo simulation of electron transport in the III-nitride wurtzite phase materials system: binaries and ternaries // *IEEE Trans. Electron Devices.* 2001. V. 48. No. 3. P. 535-542.

References

- [1] Felbinger J.G. Comparison of GaN HEMTs on diamond and SiC substrates. *IEEE Electron Device Lett.*, 2007, vol. 28, no. 11, pp. 948 - 950.
- [2] Das J. Improved thermal performance of AlGaIn/GaN HEMTs by an optimized flip-chip design. *IEEE Trans. Electron Devices*, 2006, vol. 53, no. 11, pp. 2696 - 2702.
- [3] Wachutka G.K. Rigorous thermodynamic treatment of heat generation in semiconductor device modeling. *IEEE Trans. Comput.-Aided Design Integr. Circuits Syst.*, 1990, vol. 9, no. 11, pp. 1141 - 1149.
- [4] Farahmand M. Monte Carlo simulation of electron transport in the III-nitride wurtzite phase materials system: binaries and ternaries. *IEEE Trans. Electron Devices*, 2001, vol. 48, no. 3, pp. 535 - 542.

Acknowledgements

This work was supported by the grants 1.8.05 of Belarusian National Scientific Research Program “Informatics, Space, Safety” and 3.2.01 of Belarusian National Scientific Research Program “Photonics, Opto- and Microelectronics”.

Получение и свойства нанокомпозитных материалов в дискретной среде

¹Хлопов Б.В., ²Самойлович М.И.

¹АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»

г. Москва, 105066, Российская Федерация

hlopovu@yandex.ru

²АО «ЦНИТИ «Техномаш»

г. Москва, 121108, Российская Федерация

samoylovich@cniitim.ru

Аннотация: Исследованы свойства образцов метаматериалов с заполнением их нанополостей кластерами различных магнитных и немагнитных металлов или соединений на их основе в форме магнитных кристаллитов. Приведены экспериментальные и расчетные результаты воздействия внешними электромагнитными полями на метаматериалы как на нанокомпозиты, представляющие собой наноструктурированную дискретную среду.

Ключевые слова: метаматериалы, внешние электромагнитные поля, межсферические полости, магнитная восприимчивость.

1. Введение

Опаловая матрица представляет собой плотно упакованную периодическую структуру субмикронных микросфер SiO_2 диаметром 190–350 нм [1, 2]. Нанокомпозиты на основе опаловых матриц, были получены методом пропитки с последующей термической обработкой. Степень заполнения межсферических нанополостей материалами, вводимыми пропиткой водными растворами солей, от числа пропиток (экспериментальные данные) изменяется от 15–25% при одной пропитке до ~60% (20–30 пропиток). Метод основан на заполнении нанополостей опаловой матрицы веществом-прекурсором с определенным химическим составом и предполагает проведение последующей термообработки. Термообработка проводится при температурах от 600 до 900⁰С. Объемные образцы опаловых матриц характеризуются монодисперсностью (разница диаметров микросфер <4%) и высокой механической прочностью [3]. Введение в межсферические полости различных веществ не снижает механической и термической прочности образцов.

На основе полученного нанокомпозита (опаловой матрицы с введенными в нанополости металлами) сформирована объемная (3D перио-

дически упорядоченная) и частотно зависимая (для электрических, диэлектрических и магнитных свойств) среда с пространственной (в диапазоне 200–300 нм) модуляцией указанных характеристик при размере активных областей (кластеров) в диапазоне 15–30 нм [2-3].

2. Метаматериалы как наноструктурированные среды

Метаматериалы с достаточно сильной пространственной дисперсией диэлектрических свойств имеют нелокальный диэлектрический отклик. Он выражается в зависимости обобщенного диэлектрического тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ от волнового вектора $\mathbf{k}$, индукция электрического поля $D_i = \epsilon_{ij}(\omega) E_j$ зависит не только от напряженности электрического поля E (локальный отклик), но и от электрического поля в некоторой окрестности. В обычном случае $D = \epsilon E$, где ϵ - диэлектрическая проницаемость, $D = E + 4\pi P$, где P - электрическая поляризация среды, которая определяет объемную и поверхностную плотность зарядов $P = \xi E$, где ξ - диэлектрическая восприимчивость. Аналогично, средняя напряженность магнитного поля (H) или магнитная индукция $B = H + 4\pi M$, где M - магнитный момент макроскопического тела, при этом $B = \mu H$ (μ - магнитная проницаемость) и $M = \chi H$ (χ - магнитная восприимчивость).

В общем случае $B_i = \mu_{ij}(\omega) H_j$. По существу, тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$ описывает как электрический, так и магнитный отклики среды для произвольных ω и $\mathbf{k}$. В таком случае, в пространственной дисперсии появляется параметр, описывающий «магнитный отклик», связанный с магнитной восприимчивостью, а в магнитной проницаемости – «электрический отклик» среды [3,4].

Условие применимости классического приближения (среда непрерывна и сплошная) $\lambda \gg a$, где a – параметр атомарных размеров, например постоянная решетки или длина свободного пробега электрона. В обычных материалах $\epsilon(\omega)$ и $\mu(\omega)$ слабо зависят от частоты, но когда любой из структурных параметров (a) становится сопоставим с длиной волны в среде, стандартное электродинамическое описание сплошных сред становится не применимым – необходимо учитывать, зависящий от координат отклик материала.

Последнее означает, что в $\mu(\omega)$ невозможно пренебречь вкладом от диэлектрической проницаемости (зависящей от времени), поскольку магнитный момент единицы объема определяется токами электрической по-

ляризации и, наоборот, для $\varepsilon(\omega)$ нельзя пренебречь вкладом от магнитной восприимчивости.

Существование нелокального диэлектрического отклика и выражается в зависимости обобщенного диэлектрического тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$ от волнового вектора $\mathbf{k}$. Следовательно, индукция электрического поля $D_i = \varepsilon_{ij}(\omega)E_j$ зависит не только от напряженности электрического поля E , но и от электрического поля в некоторой окрестности. Направление распространения волн определяется ее фазовой скоростью, тогда как энергия перемещается с групповой скоростью, ω зависит от модуля волнового вектора $\mathbf{k}$, а значит, знак групповой скорости определяется знаком производной ω по $\mathbf{k}$ и может быть как по $\mathbf{k}$, так и по $-\mathbf{k}$ [2,5]. Такие материалы можно охарактеризовать отрицательным показателем преломления, а триада волнового вектора, электрического и магнитного полей, характеризующая распространение электромагнитной волны, будет формировать не право, а левовинтовую систему.

3. Магнитная проницаемость нанокompозита на основе опаловой матрицы

Результаты электродинамического расчета действительной и мнимой частей диагональной μ^z и недиагональной μ_α^z компонент тензора эффективной магнитной проницаемости магнитного нанокompозита на основе опаловой матрицы, чьи нанополости частично заполнены кобальт-цинковым ферритом, в зависимости от напряженности постоянного магнитного поля H_0 на частоте, $f=16,4$ ГГц приведены на рис.1.

Зависимости коэффициента преломления нанокompозита с частицами металлического кобальта от напряженности магнитного поля для нескольких частот миллиметрового диапазона показаны на рис.2

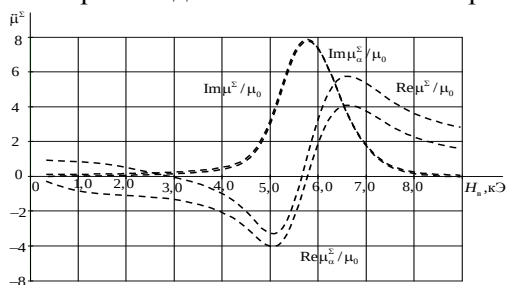


Рис.1. Расчетные зависимости действительной и мнимой частей диагональной μ^z и недиагональной μ_α^z компонент тензора

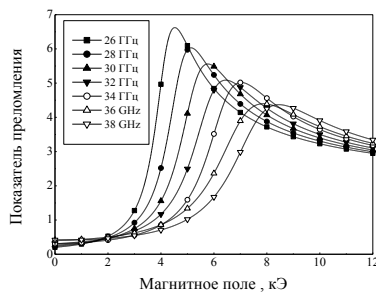


Рис.2. Зависимость показателя преломления нанокompозита с частицами металлического кобальта

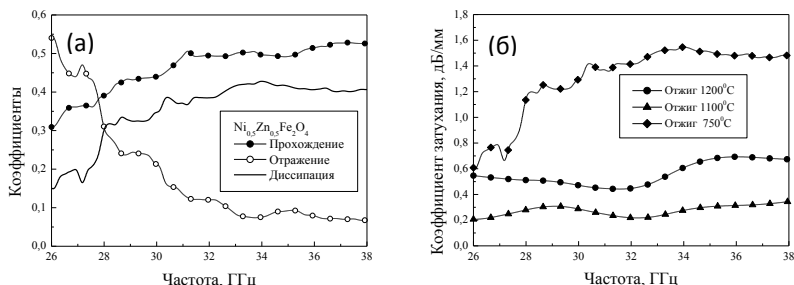


Рис.3. Частотные зависимости коэффициентов прохождения, отражения и диссипации мощности, для нанокompозита, содержащего $\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (а); частотные зависимости коэффициента затухания электромагнитных волн в нанокompозитах $\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (б)

Применение подобных метаматериалов – 3D-нанорешеток электрически активных или диэлектрических нанокластеров с управляемыми значениями диэлектрической или магнитной проницаемости, будет наиболее эффективен для разработки твердотельных оптических и СВЧ-устройств [6-7]. На рис. 3 приведены значения таких параметров при заполнении нанополостей матриц шпинелей.

4. Заключение

1. Материалы с периодичностью, существенно меньшей длины волны электромагнитного излучения, ведут себя как фотонные кристаллы в радиодиапазоне.

2. Возможны варианты, когда верхний край частотной полосы ограничивается пространственной периодичностью, а нижний край частотой, определяемой геометрическими факторами.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-07-00642А).

Список литературы

- [1] Ustinov V.V., Rinkevich A.B., Perov D.V., Samoylovich M.I., Klescheva S.M. Anomalous magnetic antiresonance and resonance in ferrite nanoparticles embedded in opal matrix // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2012. V. 324. P. 78–82.
- [2] Хлопов Б.В., Самойлович М.И., Митягин А.Ю. Использование метаматериалов на основе опаловых матриц в системах стирания информации на магнитных носителях // *Наноинженерия*. 2013. № 4. С. 29–34.
- [3] Самойлович М.И., Беянин А.Ф., Клещева С.М. Фазовые превращения кремнезема в межферрических нанополостях опаловых матриц // *Российский химический журнал*. 2012. Т. LVI. № 3–4. С. 155–162.
- [4] Хлопов Б.В., Самойлович М.И., Бовтун В. Исследование эффекта мультипликации электромагнитных полей в устройствах бесконтактного стирания информации с электронных носителей с использованием нанокомпозитов на основе опаловых матриц // *Нано и микросистемная техника*. 2013. №7. С. 6–13.
- [5] Хлопов Б.В., Самойлович М.И., Митягин А.Ю. Использование метаматериалов на основе опаловых матриц в системах стирания информации на магнитных носителях // *Наноинженерия*. 2013. № 4. С. 29–34.
- [6] Ринкевич А.Б., Бурханов А.М., Самойлович М.И., Беянин А.Ф., Клещева С.М., Кузнецов Е.А. 3D-нанокомпозитные металлodieлектрические материалы на основе опаловых матриц // *Российский химический журнал*. 2012. Т. LVI. № 1–2. С. 26–35.
- [7] Хлопов Б.В., Самойлович М.И., Митягин А.Ю. Исследование пространственного мультиплицирования импульсного магнитного поля образцами метаматериалов // *Телекоммуникации и транспорт*. 2013. № 1. С. 48–51.

Tribological characteristics of the dispersions of shungite carbon nanoparticles in cholesteric liquid crystal

Alexandr V. Kazak¹, Nadezhda V. Usol'tseva¹, Antonina I. Smirnova¹,
Natalia N. Rozhkova², Alexander A. Gvozdev³

¹Nanomaterials Research Institute, Ivanovo State University
Ivanovo, 153025, Russian Federation
alexkazak86@gmail.com

²Institute of Geology Karelian Research Center RAS
Petrozavodsk, 185910, Russian Federation
rozhkova@krc.karelia.ru

³Belyaev Ivanovo State Agricultural Academy
Ivanovo, 153012, Russian Federation
a.a.gvozdev@yandex.ru

Abstract: Method of preparation of homogeneous dispersions based on a cholesteric liquid crystal (CLC) and shungite carbon nanoparticles (Shu) is considered. Experimental results on tribotechnical characteristics of motor oil doped with the nanostructured additive (2 wt.%), which is based on CLC–Shu dispersions (the dispersions contain up to 0.02 wt. % of Shu nanoparticles) are presented. It is shown that the introduction of the additives into oil leads to the improvement of basic tribotechnical characteristics. The influence of the additive (including the synergistic effect of its components) is discussed.

Keywords: cholesteric mesogens, shungite carbon nanoparticles, resource, wear resistance, internal combustion engines.

Трибологические характеристики дисперсий наночастиц шунгитового углерода в холестерическом жидком кристалле

¹Казак А.В., ¹Усольцева Н.В., ¹Смирнова А.И., ²Рожкова Н.Н.,
³Гвоздев А.А.

¹НИИ Наноматериалов, Ивановский государственный университет
г. Иваново, 153025, Российская Федерация
alexkazak86@gmail.com

²Институт геологии Карельского научного центра РАН

г. Петрозаводск, 185910, Российская Федерация
 rozhkova@krc.karelia.ru

³ Ивановская государственная сельскохозяйственная академия
 им. акад. Д. К. Беляева
 г. Иваново, 153012, Российская Федерация
 a.a.gvozdev@yandex.ru

Аннотация: Приведена методика получения однородных дисперсий на основе холестерического жидкого кристалла (ХЖК) и наночастиц шунгитового углерода (ШУ). Представлены результаты экспериментальных исследований триботехнических характеристик моторного масла с наноструктурированными присадками (2 мас. %) на основе дисперсий холестерический жидкий кристалл – ШУ с содержанием наночастиц ШУ до 0,02 мас. %. Показано, что добавка данных присадок в масло приводит к улучшению основных триботехнических характеристик. Обсуждается механизм влияния присадки, включая синергетический эффект ее компонентов.

Ключевые слова: холестерические мезогены, наночастицы шунгитового углерода, ресурс, износостойкость, двигатели внутреннего сгорания.

1. Введение

Для материаловедения в области трибологии актуальна, прежде всего, задача оптимизации условий трения. Исследования смазок на основе мезогенов развивались в направлении замены различных активных присадок на материалы, смазочное действие которых основано на надмолекулярной самоорганизации присадок в граничном смазочном слое. Предложена теория формирования граничного смазочного слоя и установлены закономерности влияния молекулярного строения мезогенов на их физико-химические свойства [1].

Известно, что ХЖК проявляют себя как эффективные присадки к смазочным маслам, поскольку оказывают структурирующее воздействие на граничный слой трибосопряженных деталей [2, 3]. Способность ХЖК адсорбироваться на поверхностях в процессе динамического контакта и послойное упорядочение, при котором наблюдается легкое течение одного слоя относительно другого, лежат в основе механизма смазочного действия как самого ХЖК, так и ХЖК-присадок [2, 4].

В то же время, в последние годы для улучшения триботехнических характеристик разнообразных материалов и пар трения в качестве перспективных материалов начали активно изучаться наноуглероды [5, 6].

Несмотря на интенсивное изучение как ХЖК, так и нанougлеродов в качестве активных компонентов смазочных составов, отдельные исследования композиций на основе дисперсий нанougлеродов в ХЖК ограничены нанотрубками или фуллеренами. Поэтому, в настоящей работе в качестве активных трибоприсадок авторы исследовали дисперсии ХЖК с наночастицами шунгитового углерода.

2. Материалы и методы

В качестве компонентов присадки применялись химически чистый тридецилат холестерина (заводская маркировка Х-20) и наночастицы шунгитового углерода (ШУ), полученные из высокоуглеродистой шунгитовой породы Шунгит I-разновидности (месторождение Шуньга). Для одновременной реализации процесса дезагрегирования наноматериала и его равномерного распределения, ШУ вводился в ХЖК-матрицу путем ультразвукового диспергирования соответствующей навески в ЖК-среде. Сначала диспергирование проводилось в течение 2 мин. при температурах, на 5–6 °С превышающих температуру перехода в изотропное состояние, затем – в течение 30 мин. при температуре мезоморфного состояния. Этот процесс повторялся трижды [7]. Диспергирование системы выполнялось при помощи ультразвуковой бани Sonorex Digital фирмы Bandelin.

Триботехнические испытания проводились на машине трения модели 2070 СМТ-1 по схеме скольжения “ролик — колодка” в условиях граничного трения, где в качестве подвижного образца применяли ролик Ø 50 мм из стали 40Х (HRC 48...50), в качестве колодки — чугун специальный для гильз цилиндров двигателей Д-240 Минского моторного завода (Республика Беларусь). Сравнительные испытания проводились с использованием следующих смазочных материалов:

1. Масло М-10Г2К;

2. Масло М-10Г2К с трибоприсадками на основе холестерического жидкого кристалла и наночастиц шунгитового углерода.

Состав №1: масло с концентрацией присадки 2 мас.%, при содержании наночастиц шунгитового углерода в составе присадки 0.005 мас.%.

Состав №2: масло с концентрацией присадки 2 мас.%, при содержании наночастиц шунгитового углерода в составе присадки 0.02 мас.%.

3. Результаты и их обсуждение

Исследование влияния присадки на основные триботехнические характеристики проводилось при концентрации присадки 2 мас.% в масле и

концентрациях наночастиц шунгитового углерода в общей массе присадки от 0,005 мас.% до 0,02 мас.%. Установлено, что при постоянной концентрации присадки 2 мас.% увеличение содержания наночастиц шунгитового углерода приводит к снижению основных триботехнических характеристик по сравнению с маслом без присадки: момента трения в системе от 142 Н·см до 127 Н·см (10,6%, рис. 1), температуры в зоне трения от 111 °С до 105 °С (5,4%, рис. 2), коэффициента трения от 0,115 до 0,103 (10,4%, рис. 3) и износа от 1,85 мм. до 1,65 мм. (10,8%, рис. 4).

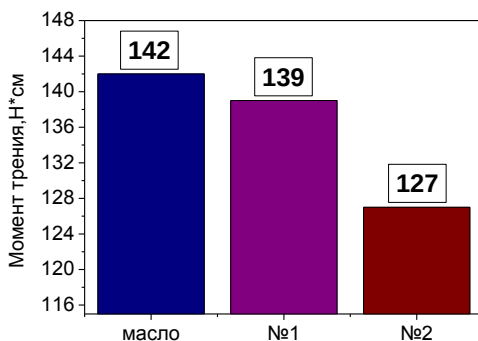


Рис. 1. Зависимость момента трения от концентрации наночастиц шунгитового углерода в присадке, где №1 и №2 – составы присадок.

Fig. 1. The dependence of friction torque on concentration of shungite carbon nanoparticles in the additive, where №1 and №2 – compositions of the additives.

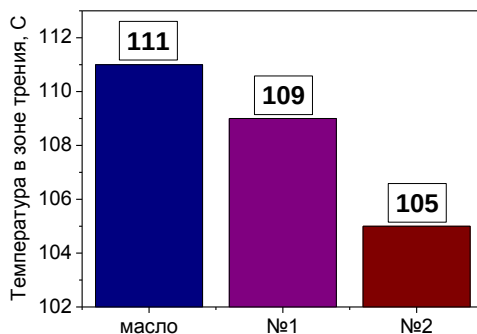


Рис. 2. Зависимость температуры в зоне трения от концентрации наночастиц шунгитового углерода в присадке, где №1 и №2 – составы присадок.

Fig. 2. The dependence of temperature in the friction zone on concentration of shungite carbon nanoparticles in the additive, where №1 and №2 – compositions of the additives.

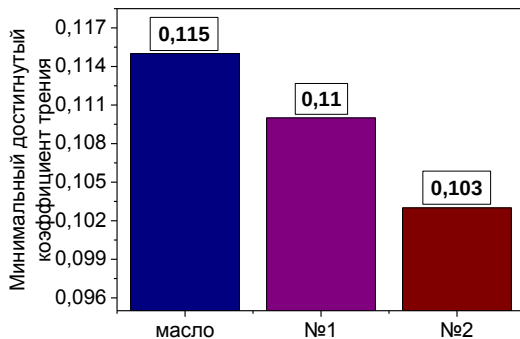


Рис. 3. Зависимость коэффициента трения от концентрации наночастиц шунгитового углерода в присадке, где №1 и №2 – составы присадок.

Fig. 3. The dependence of friction coefficient on concentration of shungite carbon nanoparticles in the additive, where №1 and №2 – compositions of the additives.

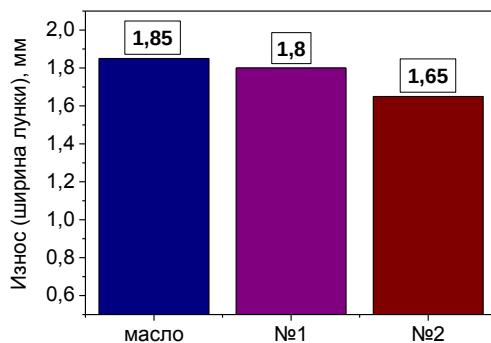


Рис. 4. Зависимость износа от концентрации наночастиц шунгитового углерода в присадке, где №1 и №2 – составы присадок.

Fig. 4. The dependence of wear on concentration of shungite carbon nanoparticles in the additive, where №1 and №2 – compositions of the additives.

Такое снижение всех основных триботехнических характеристик вызвано тем, что холестерические жидкие кристаллы оказывают структурирующее воздействие на граничный слой как эффективные присадки трибосопряженных деталей за счет адсорбирования на поверхностях в процессе динамического контакта. Углеродные наночастицы, в свою очередь, выдерживают значительные механические нагрузки и обладают вы-

сокой теплопроводностью. Объединение этих компонентов в композиции, вероятно, приводит к синергетическому эффекту, что делает подобные системы особенно перспективными для практического применения в трибологии.

4. Заключение

С использованием эффективного метода получения однородных дисперсий – присадок на основе холестерического жидкого кристалла и наночастиц шунгитового углерода, исследовано их влияние на основные триботехнические характеристики моторного масла. Показано, что добавка данных присадок в масло приводит к существенному улучшению основных триботехнических характеристик. Так, в случае 0,02 мас. % наночастиц ШУ, снижение этих значений по сравнению с чистым маслом составляет: момента трения – на 10,6 %, температуры в зоне трения – на 5,4 %, коэффициента трения – на 10,4 % и износа – на 10,8 %, что может быть результатом синергетического эффекта компонентов присадки.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа поддержана программой Минобрнауки РФ в рамках государственного задания Ивановскому государственному университету для выполнения научно-исследовательских работ на 2014-2016 гг, грант № 4.106.2014/К, и частично выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-7359.2016.9.

Список литературы

- [1] Березина Е.В. Производные фталоцианина как присадки к смазочным композициям / Иваново: Иван. гос. ун-т, 2007. 240 с.
- [2] Годлевский В.А., Усольцева Н.В. Поверхностные явления и мезоморфизм / Иваново: Иван. гос. ун-т, 2011. 179 с.
- [3] Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применения / Москва: «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2006. 290 с.
- [4] Ермаков С.Ф. Трибология жидкокристаллических наноматериалов и систем / Минск: Беларус. навука, 2012. 380 с.
- [5] Liu T., Li B., Lively B., Eyler A., Zhong W.-H. Enhanced wear resistance of high-density polyethylene composites reinforced by organosilane-graphitic nanoplatelets // *Wear*. 2014. V. 309. No. 1-2. P. 43-51.
- [6] Zhai W., Shi X., Wang M., Xu Z., Yao J., Song S., Wang Y. Grain refinement: A mechanism for graphene nanoplatelets to reduce friction and wear of Ni₃Al matrix self-lubricating composites // *Wear*. 2014. V. 310, No. 1-2. P. 33-40.
- [7] Усольцева Н.В., Смирнова М.В., Казак А.В., Смирнова А.И., Бумбина Н.В., Ильин С.О., Рожкова Н.Н. Реологические характеристики дисперсий различных углеродных наночастиц в холестерических мезогенах как присадок к СОТС // *Трение и износ*. 2015. Т. 36. № 5. С. 499-505.

References

- [1] Berezina E.V. *Phthalocyanine derivatives as additives for lubricating compositions*. Ivanovo, Ivanovo State University, 2007. 240 p. (In Russian).
- [2] Godlevsky V.A., Usol'tseva N.V. *Surface phenomena and mesomorphism*. Ivanovo, Ivanovo State University, 2011. 179 p. (In Russian).
- [3] Dyachkov P.N. *Carbon nanotubes. Structure, properties, application*. Moscow, "BINOM. Knowledge Laboratory", 2006. 290 p. (In Russian).
- [4] Ermakov S.F. *Tribology of liquid crystal nanomaterials and systems*. Minsk, Belarus science, 2011. 380 p. (In Russian).
- [5] Liu T., Li B., Lively B., Eyler A., Zhong W.-H. Enhanced wear resistance of high-density polyethylene composites reinforced by organosilane-graphitic nanoplatelets. *Wear*, 2014, vol. 309, no. 1 - 2, pp. 43 - 51.
- [6] Zhai W., Shi X., Wang M., Xu Z., Yao J., Song S., Wang Y. Grain refinement: A mechanism for graphene nanoplatelets to reduce friction and wear of Ni₃Al matrix self-lubricating composites. *Wear*, 2014, vol. 310, no. 1 - 2, pp. 33 - 40.
- [7] Usol'tseva N. V., Smirnova M.V., Kazak A.V., Smirnova A.I., Bumbina N.V., Ilyin S.O., Rozhkova N.N. Rheological characteristics of different carbon nanoparticles in cholesteric mesogen dispersions as lubricant coolant additives. *Journal of Friction and Wear*, 2015, vol. 36, no. 5, pp. 380 - 385.

Acknowledgements

The work was supported by the Program of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of the state task for Ivanovo State University to carry out research work in 2014-2016 (Grant No 4.106.2014/K) and partially supported by the Grant of the President of the Russian Federation (MK-7359.2016.9)

Star-shaped nanomaterials based on polybasic acids with heterocyclic and chiral fragments. Design, modeling and mesomorphism prediction

Olga B. Akopova¹, Maria I. Kovaleva¹, Natal'ya V. Bumbina¹,
Nataliia V. Zharnikova¹, Antonina I. Smirnova¹,
Alexandr V. Kazak¹, Nadezhda V. Usol'tseva¹,
Tatyana S. Kapralova², Lyudmila A. Onuchak²

¹Ivanovo State University
Ivanovo, 153025, Russian Federation
akopova@dsn.ru

²Samara State University,
Samara, 443011, Russian Federation
burta86@mail.ru

Abstract: We studied a series of 252 star-shaped discotic compounds (nanomaterials) based on the polybasic acids: trimesic, trimellitic, cyanuric, pyromellitic, mellitic, naphthalene tetracarboxylic, azobenzene tetracarboxylic acid and its equivalent with a heterocyclic and chiral fragments. The HyperChem software package was used for design and modeling. The calculated values of the molecular parameters were performed by the original CMP ChemCard program. The results allowed to predict mesomorphism inherent to discotic mesogens.

Keywords: polybasic acids, star-shaped nanomaterials, disc-like mesogens, molecular parameters, mesomorphism prediction.

Звездообразные наноматериалы на основе многоосновных кислот с гетероциклическими и хиральными фрагментами. Конструирование, моделирование и прогноз мезоморфизма

Акопова О.Б.¹, Ковалева М.И.¹, Бумбина Н.В.¹,
Жарникова Н.В.¹, Смирнова А.И.¹, Казак А.В.¹,
Усолицева Н.В.¹, Капралова Т.С.², Онучак Л.А.²

¹Ивановский государственный университет
Иваново, 153025, Россия
akopova@dsn.ru

²Самарский государственный университет
Самара, 443011, Россия
burta86@mail.ru

Аннотация: Изучена серия из 252 звездообразных дискотических соединений (наноматериалов) на основе многоосновных кислот (тримезиновой, тримеллитовой, циануровой, пиромеллитовой, меллитовой, нафталинтетракарбоновой, диизофталевой и ее аналога) с гетероциклическими и хиральными фрагментами. В пакете программ HyperChem проведено их конструирование, моделирование. На основе анализа расчетных значений молекулярных параметров с помощью оригинальной программы CMP ChemCard выполнен прогноз мезоморфизма, характерного для дискотических мезогенов.

Ключевые слова: многоосновные кислоты, звездообразные наноматериалы, дискотические мезогены, молекулярные параметры, прогноз мезоморфизма.

1. Введение

Звездообразные жидкокристаллические соединения с колончатой структурой мезофазы (звездообразные наноматериалы – ЗОН) востребованы как наноматериалы для создания различных оптико-электронных приборов нового поколения, оптических переключателей, гибридных мезогенных наносистем и др. Особый интерес вызывают мезогенные ЗОН с гетероциклами, которые характеризуются повышенной подвижностью электронов, что важно для светоизлучающих устройств и фотолюминесценции [1]. Синтез подобных соединений является непростой задачей и требует больших затрат времени и ресурсов, поэтому в последние годы интенсивно развиваются исследования, связанные с предсказательным описанием мезоморфизма [2—8], в их числе и метод прогнозирования мезоморфизма дискотических соединений с привлечением моделей единичных молекул и расчета их молекулярных параметров (MP) [6—8]. Достоверность такого прогноза составляет ~ 80 – 90%.

Задачей данного исследования является конструирование, моделирование и прогнозирование мезоморфизма новой серии ЗОН на основе многоосновных кислот с оксадиазольными и тетразольными фрагментами, выявление по данным прогноза влияния строения кислоты, ее основности, числа и природы заместителей на проявление мезоморфизма, характерного для дискотических мезогенов (ДМ).

2. Объекты и методы исследования

Для исследований были выбраны производные многоосновных кислот: тримезиновой, тримеллитовой, циануровой, пиромеллитовой, нафталинтетракарбоновой, диизофталевой и ее аналога (1–8), которые отличались строением центральной части

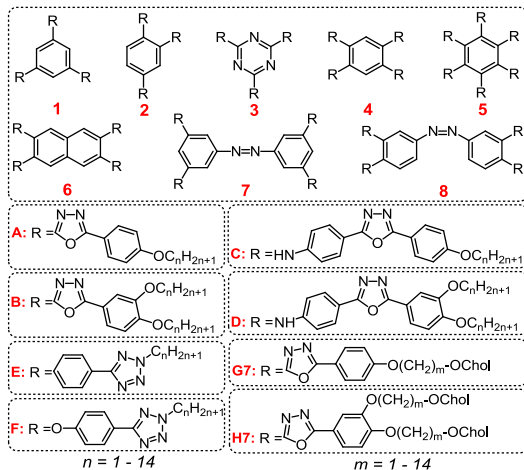


Рис. 1. Звездообразные производные многоосновных кислот с гетероциклическими и хиральными фрагментами.

Fig. 1. Star-shaped polybasic acids with heterocyclic and chiral fragments

молекулы, гетероциклического фрагмента, а также природой мостиковых групп (спейсеров) (рис. 1). Серия состояла из 500 соединений, но в представленной работе анализируются данные только для четных дизай-
мещенных гомологов от второго до двенадцатого (252 соединения), часть из которых была отобрана для дальнейшего синтеза.

Основной метод, исполь-

зуемый нами для расчетов, это метод моделирования и прогнозирования мезоморфизма у дискотических соединений с помощью молекулярных параметров (MP) единичных молекул, рассчитываемых по программе *CMP ChemCard* (рис. 2), где L_m – максимальная длина молекулы; N – число периферийных заместителей; N_{max} – максимально число периферийных заместителей [7]. Построение и оптимизацию геометрии молекул проводили с использованием пакета программ *HyperChem*.

Библиография	Тип	Мезоморфизм:
Название соединения		Да
Краткое обозначение	Тримез-оксидиазол-10_2	Общий
Брутто формула	C ₃₀ H ₁₃₈ N ₆ O ₉	Неатрический
	E = 119.79 ккал/моль	
Брутто формула ядра	C ₃₀ H ₁₂ N ₆ O ₉	
Брутто периферия	C ₆ H ₁₂	
Длина центра - Ic	17.79	Mc 600.4511
Ширина центра - bc	17.54	Mr 847.6424
Длина периферии - lp	13.54	Mn 0.7084
Толщина молекулы - t	7.36	Mt 0.2834
	Lm 43.97	Ka 0.4000
	N 6	Kc 1.0143
	Nmax 15	Kp 0.6569
	N(r+1)c	K 5.9742
	N(r+1)p	Ka 0.1396
		Ke

Рис. 2. Пример расчёта MP с помощью *CMP ChemCard* и результаты прогноза мезоморфизма для соединения **1B** ($n = 12$).

Fig. 2. Example of calculation of MP using *CMP ChemCard* and results of mesomorphism prediction for compound **1B** ($n = 12$).

3. Результаты и их обсуждение

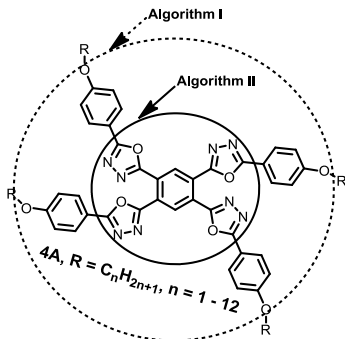


Рис. 3. Алгоритм I и II для 4A.

Fig. 3. Algorithms I and II for 4A.

Расчет выполняли с использованием двух алгоритмов деления молекулы на центральную и периферийную части (рис. 3). По условиям используемого нами метода [9] существенное отклонение хотя бы одного из расчетных значений MP от граничных значений классификационного ряда {1} свидетельствует о неспособности сконструированного соединения к формированию мезофаз, характерных для ДМ. В случае незначительного отклонения расчетных значений MP можно ожидать появления латентной (скрытой) мезофазы.

$$\begin{aligned} K &= 2,0-8,5; K_c = 1,0-2,6; K_p = 0,2-0,75; K_s = 0,25-1,0; \\ M_m &= 0,2-0,8; M_r = 0,15-0,8; K_{ar} = 0,08-0,3 \end{aligned} \quad \{1\}$$

Расчеты MP показали, что прогноз мезоморфизма для соединений с гетероциклическими фрагментами: оксадиазольными и тетразольными (1A,C,E,F – 8A,C,E,F) по I-алгоритму оказался отрицательным. По II-алгоритму имеются данные с положительным и равновероятным прогнозом. Полученные результаты свидетельствуют, что из монозамещенных производных многоосновных кислот (1A,C,E,F – 8A,C,E,F), производные циануровой кислоты с $n = 10, 12$ (3C), диизофталевой (8A) и ее аналоги (7A) наиболее склонны к формированию мезофаз с колончатой надмолекулярной структурой. Монозамещенные производные тримезиновой (1A) и тримеллитовой (2A) кислот по результатам прогноза не способны проявлять мезоморфизм, характерный для ДМ.

Увеличивая число гидрофобных периферийных заместителей, удалось увеличить число потенциально мезогенных соединений с оксадиазольными фрагментами 1B – 8B, 3D (рис. 1) с вероятным проявлением мезоморфизма, характерным для ДМ (табл. 1). Причем в этом случае лучшие показатели по прогнозу получены для производных кислот строения (1B – 6B), в отличие от монозамещенных производных (7A, 8A).

Поскольку монозамещенные азо-кислоты (7, 8) более склонны к формированию мезофаз, на основе одной из них были сконструированы моно- и дизамещенные молекулы, содержащие одновременно как оксадиазольный, так и хиральный фрагменты (G7 и H7, соответственно) (рис. 1) и

осуществлен прогноз мезоморфизма, характерного для *ДМ*, в том числе и хирального (табл. 2).

Табл. 1. Дизамещенные производные с оксадиазольными фрагментами (**1B** – **8B**, **3D**)

Table 1. Disubstituted derivatives with oxadiazole fragments (**1B** – **8B**, **3D**)

Гомолог (n) Homologue (n)	Номер соединения Number of compound																	
	1B		2B		3B		3D		4B		5B		6B		7B		8B	
	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II
2	–	+	–	+	–	–	–	–	–	+	–	+	–	+	–	±	–	–
4	–	+	–	+	–	±	–	±	–	+	–	+	–	+	–	±	–	+
6	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	±	–	+
8	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	±	–	±
10	+	±	+	±	–	+	–	+	+	±	+	±	+	+	–	±	–	–
12	+	±	+	±	+	+	–	+	+	–	+	–	+	±	–	–	+	–

Примечание: римскими цифрами указаны алгоритмы **I** и **II**. «+» – положительный прогноз мезоморфизма; «–» – отрицательный прогноз; «±» – прогноз равновероятный.

Notes: roman numerals are indicating algorithms **I** and **II**. «+», «–», «±» – positive, negative or equal probability of mesomorphism prediction, correspondingly.

Табл. 2. Моно (**G7**) и дизамещенные (**H7**) производные азо-кислоты **7** с оксадиазольными и хиральными фрагментами

Table 2. Mono (**G7**) and disubstituted (**H7**) azo-acid derivatives **7** with oxadiazole and chiral fragments

Число атомов углерода в спейсере (m) Number of carbon atoms in spacer (m)	G7		H7	
	<i>P</i>	<i>P_{Ch}</i>	<i>P</i>	<i>P_{Ch}</i>
2	–	–	–	–
4	–	–	–	–
6	–	–	+	+
8	+	+	±	±
10	+	+	–	–
12	–	–	–	–

Примечание: см. табл. 1. Гибкие спейсеры в соединениях **G** и **H** отнесены к периферии;

P – прогноз мезоморфизма, характерного для *ДМ*; *P_{Ch}* – прогноз хирального мезоморфизма.

Notes: see Table 1. Flexible spacers in compounds **G** and **H** assigned to the periphery.

P – prediction of discotic mesomorphism. *P_{Ch}* – prediction of chiral mesomorphism.

У монозамещенных производных серии **G7** по прогнозу *восьмой* и *десятой* гомологи способны проявлять колончатый мезоморфизм геликоидального типа. В серии **H7** положительный прогноз колончатого/геликоидального мезоморфизма выявлен только для *шестого* гомолога, для *восьмого* – прогноз равновероятный.

4. Заключение

Проведенный анализ показал, что из исследуемой серии соединений, производные с тетразольными фрагментами не способны к проявлению мезоморфизма, характерного для ДМ.

Установлено, что использование алгоритма II позволяет выявить больше соединений с положительным прогнозом мезоморфизма. Однако, это требует дополнительной проверки экспериментальным путем. Чтобы определиться, какой из алгоритмов более достоверен, необходимо синтезировать ряд представителей этой серии.

Из монозамещенных многоосновных кислот к проявлению колончатого мезоморфизма более склонны производные диизофталевой кислоты и ее изомерного аналога, в отличие от дизамещенных этих кислот, из которых только два производных с достаточной степенью вероятности способны формировать мезофазу.

Только для трех из приведенных двенадцати соединений (звездообразных производных диизофталевой кислоты с оксадиазольными фрагментами и хиральной периферией) установлена возможность формирования геликоидальных структур в мезофазе.

Выявлено, что введение гибких спейсеров и хиральной периферии уменьшает вероятность образования жидкокристаллической фазы исследуемого типа.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа поддержана программой Минобрнауки РФ в рамках государственного задания Ивановскому государственному университету для выполнения научно-исследовательских работ на 2014-2016 гг., грант № 4.106.2014/К и частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 16-33-50069 мол_нр.

Список литературы

- [1]. Wöhrle T., Wurzbach I., Kirres J., Kostidou A., Kapernaum N., Litterscheidt J., Hanle J.C., Staffeld P., Baro A., Giesselmann F., Laschat S. Discotic Liquid Crystals // Chem. Rev. 2016. V. 116. No 3. P. 1139-1241.
- [2]. Pappalardo M., Milardi D., La Rosa C., Zannoni C., Rizzarelli E., Grasso D. A molecular dynamics study on the conformational stability of PrP 180–193 helix II prion fragment // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 390, No 4-6. P. 511-516.
- [3]. Metere A., Sarman S., Oppelstrup T. and Dzugutov M. Formation of a columnar liquid crystal in a simple one-component system of particles // Soft Matter. 2015. P. 4606-4613.
- [4]. Muccioli L., Berardi R., Orlandi S., Ricci M., Zannoni C. Molecular properties and stacking of 1-substituted hexaalkoxy triphenylenes // Theor. Chem. Acc. 2007. V. 117. P. 1085-1092.

- [5]. Шестакова Р.Г., Просочкина Т.Р., Токунова Э.Ф., Тюрина Л.А., Кантор Е.А. Зависимость строение – жидкокристаллическая активность в ряду азотсодержащих гетероциклических соединений // ЖОХ. 2006. Т. 76. Вып. 4. С. 648-653.
- [6]. Аكوпова О.Б., Пестов С.М. Успехи в конструировании и синтезе хиральных дискотических мезогенов // Жидк. крист. и их практич. использ. 2012. Вып. 4. С. 20-33.
- [7]. Аكوпова О.Б., Аковов Д.А. Программа для ЭВМ «СМР ChemCard». № Гос. Рег. 2012610165, 10.01.2012.
- [8]. Аكوпова О.Б., Ковалева М.И. Молекулярный дизайн и синтез звездообразных дискотических мезогенов гетероциклической природы // Жидк. крист. и их практич. использ. 2014. Т. 14. № 2. С. 21-57.
- [9]. Усольцева Н.В., Аكوпова О.Б., Быкова В.В., Смирнова А.И., Пикин С.А. Жидкие кристаллы: дискотические мезогены / Под ред. Н.В. Усольцевой. Иваново: «ИВГУ», 2004. 546 с.

References

- [1]. Wöhrle T., Wurzbach I., Kirres J., Kostidou A., Kapernaum N., Litterscheidt J., Hanenle J. C., Sraffeld P., Baro A., Giesselmann F., Laschat S. Discotic Liquid Crystals. *Chem. Rev.*, 2016, vol. 116, no 3, pp. 1139 - 1241.
- [2]. Pappalardo M., Milardi D., La Rosa C., Zannoni C., Rizzarelli E., Grasso D. A molecular dynamics study on the conformational stability of PrP 180–193 helix II prion fragment. *Chem. Phys. Lett.*, 2004, vol. 390, no 4-6, pp. 511 - 516.
- [3]. Metere A., Sarman S., Oppelstrup T. and Dzugutov M. Formation of a columnar liquid crystal in a simple one-component system of particles. *Soft Matter*, 2015, pp. 4606 - 4613.
- [4]. Muccioli L., Berardi R., Orlandi S., Ricci M., Zannoni C. Molecular properties and stacking of 1-substituted hexaalkoxy triphenylenes. *Theor. Chem. Acc.*, 2007, vol. 117, pp. 1085 - 1092.
- [5]. Shestakova R.G., Prosochkina T.R., Tokunova A.F., Tyurina L.A., Kantor E.A. Structure-mesomorphic activity relationship in the series of nitrogen-containing heterocyclic compounds. *Rus. J. General Chem.*, 2006, vol. 76, no 4, pp. 615 - 620. (In Russian)
- [6]. Akopova O.B., Pestov S.M. Progress in the Design and Synthesis of Chiral Discotic Mesogens. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2012, issue 4, pp. 20 - 33. (In Russian).
- [7]. Akopova O.B., Akopov D.A. Software product “СМР ChemCard”. No 2012610165, 2012. (In Russian).
- [8]. Akopova O.B., Kovaleva M.I. Molecular Design and Synthesis of Heterocyclic Star-Shaped Discotic Mesogens. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2014, vol. 14, no 2, pp. 21 - 57. (In Russian).
- [9]. Usol'tseva N.V., Akopova O.B., Bykova V.V., Smirnova A.I., Pikin S.A. *Liquid crystals: discotic mesogens* (ed. by N.V. Usol'tseva. Ivanovo: Ivanovo State University, 2004. 546 p. (In Russian).

Acknowledgements

The work was supported by the Program of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of the state task for Ivanovo State University to carry out research work in 2014–2016 (Grant No 4.106.2014/K) and the Russian Foundation for Basic Research (Grant No 16-33-50069).

Theoretical investigation of resonant absorbing diffraction grating in optical wavelength range

Irina I. Ivanova, Anatoliy B. Kleshchenkov, Alexander M. Lerer,
Victoria V. Makhno, Pavel V. Makhno.
Southern Federal University
Rostov-on-Don, 344090, Russian Federation
lerer@sfedu.ru

Abstract: The boundary problem of diffraction of optical electromagnetic wave on single and doubly-periodic gratings, formed by metal-dielectric inhomogeneities, deposited on multilayer substrate, was solved. Specific properties of metals and dielectrics on optical range were taken into account. Grating, which contain layers of materials with negative real part of dielectric permittivity (Au, Ag, Cu, AZO GZO, ZrN), were investigated. Results of investigation of structures, which demonstrate the effect of total resonant absorption at the plasmonic resonance (non-reflecting gratings) are presented.

Keywords: integral equations, plasmonics, plasmon polariton, diffraction grating, plasmonic resonance, absorption

Теоретическое исследование резонансно поглощающих оптических дифракционных решеток

Иванова И.Н., Клещенко А. Б., Лерер А.М., Махно В. В.,
Махно П.В.

Южный федеральный университет, физический факультет
г. Ростов-на-Дону, 344090, Российская Федерация
lerer@sfedu.ru

Аннотация: Решена краевая задача о дифракции электромагнитной волны оптического диапазона на одномерно- и двумерно-периодических решетках, образованных металлодиэлектрическими неоднородностями, расположенными на многослойной подложке. Учтены свойства металлов и диэлектриков в оптическом диапазоне. Исследованы решетки, содержащие слои, у которых в оптическом диапазоне $\text{Re}\epsilon < 0$ (Au, Ag, Cu, AZO, GZO, ZrN). Приведены конструкции и результаты исследований неотражающих решеток, у которых при плазмонном резонансе наблюдается эффект полного резонансного поглощения.

Ключевые слова: интегральные уравнения, плазмоника, плазмон-поляритон, дифракционная решетка, плазмонный резонанс, потери.

1. Введение

Металл в оптическом диапазоне не является идеальным проводником, а имеет свойства плазмы твердого тела, обусловленные существованием газа из свободных электронов. Наличие поверхностной волны (поверхностного плазмона – поляритона), распространяющейся на границе металл (плазма твердого тела) – диэлектрик приводит к появлению новых свойств дифракционных решеток (ДР), в частности, существованию резонансов АЧХ при длинах волн много больших размеров ячейки решетки. Распространение поверхностного плазмона – поляритона в металлах наиболее результативно в видимом диапазоне. Поэтому плазмонные резонансы в основном проявляются в видимом диапазоне. В последние годы появились новые плазмонные материалы - ZnO, допированный Al (AZO), ZnO, допированный Ga (GZO), ZrN и др., которые можно применять в nano-устройствах ближнего ИК диапазона [1].

В работе [2] предложена и теоретически исследована неотражающая ДР, которая при резонансе поглощает почти 100% падающей на нее энергии. В данной работе с помощью численного моделирования исследуются как новые резонансно поглощающие ДР, так и ДР содержащие новые плазмонные материалы.

2. Объекты исследования

Исследуются три типа ДР – одномерно-периодическая и две двумерно-периодических:

- одномерно-периодическая ДР (рис. 1), с периодом d_y , шириной зубцов w , высотой зубцов h_2 , размещённая на тонкой серебряной плёнке толщиной h_3 , нанесённой на подложку из SiO_2 ;
- двумерно-периодическая ДР (рис. 2) из наностержней ZnO, покрытых слоем из материала с $\text{Re}\varepsilon < 0$, в частности GZO;
- двумерно-периодическая ДР из наностержней ZnO без покрытия.

3. Метод исследования

В работе [3] задача дифракции электромагнитных волн на двумерно периодических метало-диэлектрических решетках решена с учётом конечной диэлектрической проницаемости металла в оптическом диапазоне.

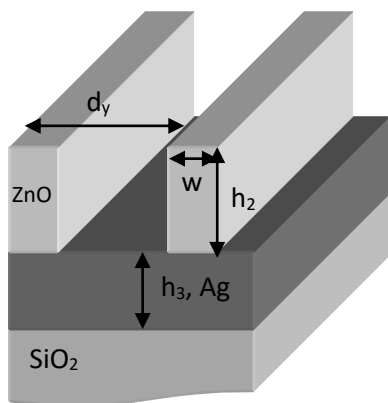


Рис. 1. Дифракционная решетка из нанополосок.

Fig. 1. Diffraction grating of nanoribbons.

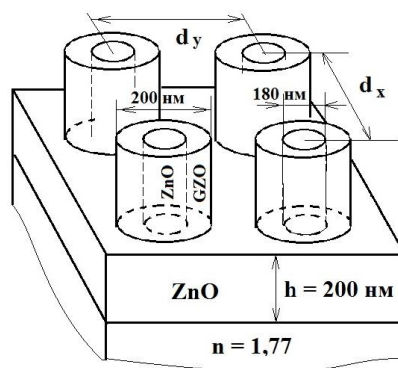


Рис. 2. Дифракционная решетка из наностержней.

Fig. 2. Diffraction grating of nanorods.

Поперечные сечения периодических неоднородностей – эллипсы в [3], а в настоящей работе прямоугольники и многослойные эллипсы (рис.2) размеры которых зависят от вертикальной координаты Z . Число неоднородностей в элементарной ячейке решетки – произвольное. Диэлектрическая проницаемость неоднородностей, зависят от координат. Диэлектрические проницаемости слоев и неоднородностей комплексные, что позволяет моделировать в оптическом диапазоне металлические слои. Разработанная электродинамическая модель основана на решении методом Галеркина векторного объемного интегро-дифференциального уравнения (ОИДУ) дифракции на трехмерных диэлектрических телах. Неизвестные в ОИДУ компоненты вектора напряженности электрического поля внутри неоднородностей. Базисные функции (БФ) в методе Галеркина: по вертикальной координате также, как и в [3] сплайны первого порядка; по поперечным координатам – полиномы Лежандра и функции Бесселя для прямоугольного и эллиптического сечения, соответственно. Полиномы Лежандра также используются в качестве БФ для одномерно-периодических дифракционных решеток [4,5].

Для расчетов с погрешностью (по внутренней сходимости) не более 0,1% достаточно взять 5-6 БФ по каждой из поперечных координат. Количество БФ по координате Z определяется профилем и отношением общей высоты неоднородности к длине волны. Для достижения указанной точности достаточно 6-8 функций на одну длину волны вдоль неоднородности. Благодаря оптимальной организации вычислений время счета, к

примеру, для бочкообразной неоднородности в трех слоях высотой в четыре длины волны около 10 с при использовании процессора i3-2100 CPU.

4. Практические результаты

На рис. 3 приведены характеристики одномерно-периодической ДР (рис. 1) при оптимальных параметрах, определённых с помощью численного эксперимента. Установлено, что наибольший эффект (95% поглощение, 5% прохождение) наблюдается при использовании в качестве материала металлической плёнки серебра толщиной 20 нм, соотношение ширины зубца к периоду – 0,75, высота зубцов ZnO – 200 нм. Плоскость падения перпендикулярна образующим ДР. Как известно, поверхностный плазмон-поляритон (ППП) это ТМ-волна. Поэтому при s-поляризации (вектор $\vec{E}$ перпендикулярен плоскости падения) он не возбуждается, резонансы в исследуемом диапазоне отсутствуют. Коэффициент замедления ППП в металлической пленке, расположенной между диэлектриками, увеличивается с уменьшением ее толщины t . Поэтому резонансная длина волны при р-поляризации уменьшается при увеличении t .

На рис. 4 представлены характеристики дифракционной решетки, изображенной на рис. 2. Диаметр наностержней ZnO - 180 нм, покрытие - слоем GZO толщиной 10 нм. Полубесконечная подложка имеет показатель преломления $n=1,77$. Наностержни расположены на пленке из ZnO толщиной 200 нм. Видно, что при резонансе коэффициенты прохождения T и отражения R (по мощности) стремятся к нулю. Эффект резонансного поглощения наблюдается в ИК диапазоне, при котором реальная часть диэлектрической проницаемости GZO меняет знак.

Характеристики второй двумерно-периодической ДР приведены на рис. 5. Конструкция этой ДР близка к ДР, изображенной на рис. 2 – на подложку с $n=1,77$ нанесена пленка толщиной 500 нм из ZrN, далее расположена периодическая структура наностержней ZnO без покрытия.

Эффект полного резонансного поглощения наблюдается в видимом диапазоне, в котором у ZrN действительная часть диэлектрической проницаемости отрицательна. При увеличении периодов ДР резонансная частота, естественно, увеличивается. При их дальнейшем увеличении возможно добиться резонанса и в ИК диапазоне.

5. Заключение

Таким образом, почти 100%-е поглощение энергии при плазмонном резонансе говорит о сильной локализации электромагнитного поля вблизи

металлической пленки. Это свойство может быть использовано в солнечных батареях. Кроме того, неотражающие оптические решетки на новых плазмонных материалах в перспективе можно использовать в создании радиопоглощающих материалов в оптическом диапазоне частот.

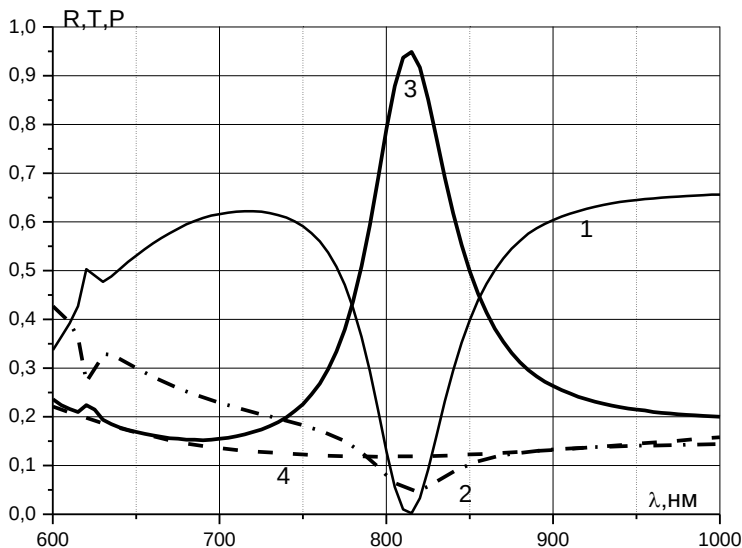


Рис. 3. Характеристики 1d решётки; период $d_y=400$ нм, ширина зубцов $w=300$ нм, высота зубцов $h_2=200$ нм, толщина серебряной плёнки $h_3=20$ нм, подложка из SiO_2 . Кривые: 1,2,3- коэффициенты отражения R, прохождения T и поглощения P для p-поляризованной волны, кривая 4 – коэффициент P для s-поляризованной волны.

Fig. 3. The properties of nanoribbons grating with period $d_y=400$ нм, width of ribbons $w=300$ нм, height $h_2=200$ нм, silver film thickness $h_3=20$ нм, the substrate is SiO_2 . Curves: 1,2,3- reflection R, transmission T and absorption P for p-polarized wave, curve 4 – absorption P for s-polarized wave.

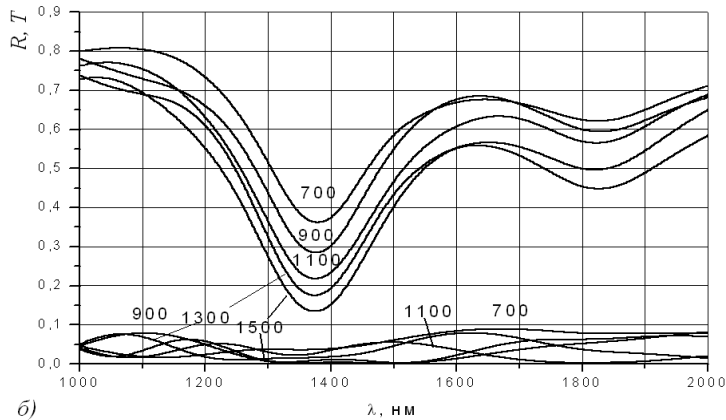


Рис. 4. Характеристики дифракционной решетки из наностержней (рис.2), покрытых GZO.

$d_x=d_y=300$ нм, высота стержней указана в нм.

Fig. 4. The properties of diffraction grating of nanorods, coated with GZO. $d_x=d_y=300$ nm, the height of the nanorods is in nanometers

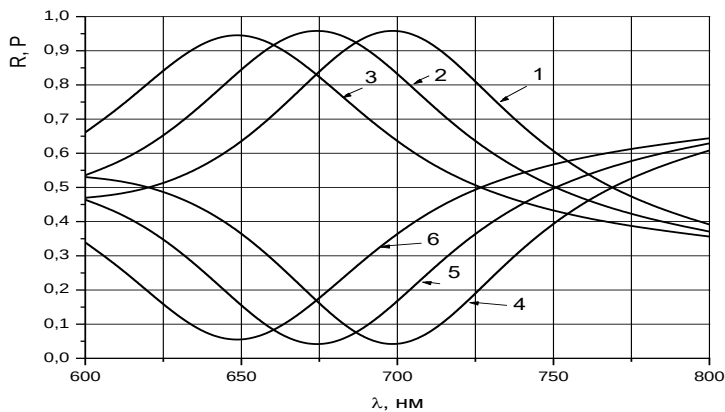


Рис. 5. Зависимость коэффициентов отражения и поглощения решетки наностержней (рис. 2) высотой 200 нм с пленкой ZrN при изменении периода $d_x=d_y$: кривая 1,4 - 500нм, 2,5 - 450 нм, 3,6 - 400 нм. Кривые 1-3 коэффициент поглощения $P= 1-R-T$, 4-6 - R.

Fig. 4. The dependencies of reflection and absorption coefficients of grating of nanorods with 200 nm height and ZrN film at different periods $d_x=d_y$: curves 1,4 - 500nm, 2,5 - 450nm, 3,6 - 400nm. Curves 1-3 absorption coefficient $P= 1-R-T$, 4-6 - R.

Источник финансирования и выражение признательности

Доклад подготовлен по итогам исследования, проведенного в рамках проектной части внутренних грантов ЮФУ 2014 – 2016 г.г., № 213.01.-07.2014/08ПЧВГ. Авторы выражают признательность Тимошенко П.Е. (ЮФУ) за предоставленные базы данных для новых плазмонных материалов.

Список литературы

- [1] Jia-Yu Lin, Kun-Da Zhong, and Po-Tsung Lee. Plasmonic behaviors of metallic AZO thin film and AZO nanodisk array // *Optics Express*, Vol. 24, Issue 5, pp. 5125-5135 (2016).
- [2] Лерер А.М., Цветянский Е.А.. Теоретическое исследование резонансно поглощающих дифракционных решеток // *Письма в ЖТФ*. 2012. Т.38. №21. С. 77-86.
- [3] Лерер А.М. Теоретическое исследование двумерно-периодических наноплазмонных структур. // *Радиотехника и электроника*. 2012. Т. 57. №11. С.1160-1169.
- [4] Лерер А.М, Донец И.В., Калинин Г.А., Махно П.В. Теоретическое исследование наноплазмонных волноводных структур // *Электромагнитные волны и электронные системы*. 2013. Т. 18. № 9. С. 5-13.
- [5] Lerer A. M., Donets I. V., Kalinchenko G. A., Makhno P. V. Volume integral method for investigation of plasmonic nanowaveguide structures and photonic crystals // *Photon. Res.* 2014. V. 2. No. 1. P. 31-37.

References

- [1] Jia-Yu Lin, Kun-Da Zhong, and Po-Tsung Lee. Plasmonic behaviors of metallic AZO thin film and AZO nanodisk array. *Optics Express* Vol. 24, Issue 5, pp. 5125-5135 (2016)
- [2] Lerer A. M., Tsvetyanskii E. A. A Theoretical Study of Resonance_Absorbing Diffraction Gratings. *Technical Physics Letters*, 2012, vol. 38, no. 11, pp. 995–999.
- [3] Lerer A. M. Theoretical Investigation of 2D Periodic Nanoplasmon Structures. *Journal of Communications Technology and Electronics*, 2012, vol. 57, no. 11, pp. 1151–1159.
- [4] Lerer A. M., Donets I. V., Kalinchenko G. A., Makhno P. V. Theoretical investigation of nanoplasmonic waveguide structure. *Elektromagnitnye volny I elektronnye sistemy*. 2013, vol. 18, no. 9, pp. 5-13. (In Russian)
- [5] Lerer A. M., Donets I. V., Kalinchenko G. A., Makhno P. V. Volume integral method for investigation of plasmonic nanowaveguide structures and photonic crystals. *Photon. Res.*, 2014, vol. 2, no. 1, pp. 31-37.

Acknowledgements

The paper is based on the research results, which were conducted in the framework of project part of internal grants of Southern Federal University (sfedu.ru) in 2014-2016, No.213.01-07.2014/08PCHVG. The authors are grateful to doctor Pavel .E. Timoshenko (SFEDU) for compiling the database of dielectric constants in optical range for new plasmonic materials.

Electron-hole plasma with zero enthalpy

Ilya A. Obukhov

Research & Development Company "System Recourses",

Moscow Region, 142717, Russian Federation

i_obukhov@systemres.ru

Abstract: It is shown that in intrinsic semiconductor at a certain temperature T_d , electroneutral self-consistent non-equilibrium state of electrons, holes, and random electromagnetic field may be formed. This state is characterized by zero density of enthalpy and entropy. The energy density and pressure of this material medium are equal in absolute value and have opposite signs. They don't depend on the choice of the inertial frame of reference. The formula relating the temperature T_d with the Fermi momentum of electrons and holes is obtained. Possible applications of the obtained results in electronics are discussed.

Keywords: electron-hole plasma, random electromagnetic field, nonequilibrium state, zero enthalpy, microwave radiation.

Электронно-дырочная плазма с нулевой энтальпией

Обухов И.А.

НПП «Системные Ресурсы»

Московская обл., 142717, Российская Федерация

i_obukhov@systemres.ru

Аннотация: Показано, что в собственном полупроводнике при определенной температуре T_d возможно образование неравновесного электронейтрального самосогласованного состояния электронов, дырок и случайного электромагнитного поля. Это состояние характеризуется нулевыми плотностями энтальпии и энтропии. Плотность энергии и давление образованной таким образом материальной среды равны по абсолютной величине и имеют противоположные знаки. Они не зависят от выбора инерциальной системы отсчета. Получена формула, связывающая T_d с импульсом Ферми электронов и дырок p_d . Обсуждаются возможные применения полученных результатов в электронике.

Ключевые слова: электроны, дырки, плазма, случайное электромагнитное поле, неравновесное состояние, нулевая энтальпия, СВЧ-излучение.

1. Введение

В полупроводниках взаимодействие квазичастиц может приводить к возникновению специфических объектов таких, как газ экситонов [1], электронно-дырочные жидкость и капли [2,3], электронно-дырочная плазма [4] и т.п. Они описываются различными термодинамическими соотношениями, во многом определяющими их свойства и возможности применения в технике.

В настоящей работе исследуются условия, при которых в полупроводнике возможно образование электронно-дырочной плазмы, имеющей нулевую плотность энthalпии

$$h = p + \varepsilon = 0 \Rightarrow p = -\varepsilon. \quad (1)$$

Плотность энергии ε и давление p такой плазмы релятивистски инвариантны и не изменяются при любой допустимой скорости ее движения как целого [5]. В частности, эта скорость, оставаясь меньше скорости света в вакууме c , может превышать скорость света в полупроводнике c_s . В результате, при протекании тока через полупроводник возможна генерация электромагнитного излучения Вавилова-Черенкова [6].

Если условие (1) дополнить требованием электронейтральности, то такая электронно-дырочная плазма будет представлять собой вакуумоподобную среду [5,7]. Построением моделей аналогичных сред активно занимаются в последние десятилетия исследователи в области космологии и астрофизики [8].

2. Тензор плотности энергии-импульса случайного электромагнитного поля

В статье [9] показано, что случайные переходы между допустимыми состояниями электронов и позитронов могут приводить к возникновению случайного электромагнитного поля. Оно характеризуется равенством нулю средних напряженности электрического поля, магнитной индукции и вектора-потенциала при отличных от нуля средних значениях компонент тензора плотности энергии импульса.

Случайные переходы между состояниями заряженных квазичастиц в полупроводнике также могут порождать случайное электромагнитное поле с аналогичными свойствами. Для средней суммы тензора плотности энергии-импульса этого поля и взаимодействия этого поля с заряженными квазичастицами $T^{(s)\mu\nu}(x)$ в системе отсчета, связанной с кристаллической решеткой, получим

$$T^{(s)\mu\nu}(x) = T^{(e,e)\mu\nu}(x) + T^{(h,h)\mu\nu}(x) + T^{(h,e)\mu\nu}(x), \quad (2.1)$$

$$T^{(a,b)\mu\nu}(x) = -(\alpha/2\pi^2\varepsilon_s)(2\pi\hbar)^{-3} \sum_r \sum_{r'} \int d^3p' \int d^3p T^{(a,b)\mu\nu}(p', r'; p, r), \quad a, b=e, h, \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} T^{(e,e)\mu\nu}(p', r'; p, r) = & \theta(E^{(e)}(p') - E^{(e)}(p)) / \Delta f(s_e(E^{(e)}(p'), F^{(e)}(\Theta))) (1 - f(s_e(E^{(e)}(p), F^{(e)}(\Theta)))) \\ & (n^\mu n^\nu - 1/2) \eta^{\mu\nu} n^\beta n_\beta (n^\beta n_\beta)^{-2} w^{*(e,e)}_{(r,r')}{}^\beta(p, p') w^{(e,e)}_{(r,r')\beta}(p, p'), \\ n^\mu = & ((E^{(e)}(p') - E^{(e)}(p)) / c, \mathbf{p}' - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} T^{(h,h)\mu\nu}(p', r'; p, r) = & \theta(E^{(h)}(p) - E^{(h)}(p')) / \Delta f(s_h(E^{(h)}(p), F^{(h)}(\Theta))) (1 - f(s_h(E^{(h)}(p'), F^{(h)}(\Theta)))) \\ & (n^\mu n^\nu - 1/2) \eta^{\mu\nu} n^\beta n_\beta (n^\beta n_\beta)^{-2} w^{*(h,h)}_{(r,r')}{}^\beta(p, p') w^{(h,h)}_{(r,r')\beta}(p, p'), \\ n^\mu = & ((E^{(h)}(p') - E^{(h)}(p)) / c, \mathbf{p}' - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} T^{(h,e)\mu\nu}(p', r'; p, r) = & f(s_e(E^{(e)}(p'), F^{(e)}(\Theta))) f(s_h(E^{(h)}(p), F^{(h)}(\Theta))) \\ & (n^\mu n^\nu - 1/2) \eta^{\mu\nu} n^\beta n_\beta (n^\beta n_\beta)^{-2} w^{*(h,e)}_{(r,r')}{}^\beta(p, p') w^{(h,e)}_{(r,r')\beta}(p, p'), \\ n^\mu = & ((E^{(e)}(p') + E^{(h)}(p)) / c, \mathbf{p}' + \mathbf{p}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь индексы e и h относятся к электронам и дыркам; компоненты $T^{(e,e)\mu\nu}(x)$, $T^{(h,h)\mu\nu}(x)$, $T^{(h,e)\mu\nu}(x)$ соответствуют переходам электрон-электрон, дырка-дырка и электрон-дырка; $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, приблизительно равная $1/137$; $\hbar$ – постоянная Планка, деленная на 2π ; ε_s – диэлектрическая проницаемость полупроводника; r, r' и $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ – спинорные индексы и квазиимпульсы электронов и дырок; $E^{(e)}(p)$ и $E^{(h)}(p)$ – энергии электронов и дырок; Δ – ширина запрещенной зоны полупроводника;

$$f(s) = (\exp\{s\} + 1)^{-1} \quad (3.1)$$

- функция распределения Ферми-Дирака;

$$s_e(E^{(e)}, F^{(e)}, \Theta) = (E^{(e)} - F^{(e)})/\Theta, \quad s_h(E^{(h)}, F^{(h)}, \Theta) = (E^{(h)} - F^{(h)})/\Theta, \quad \Theta = k_B T, \quad (3.2)$$

$F^{(e)}$ и $F^{(h)}$ – химические потенциалы электронов и дырок; k_B – постоянная Больцмана, а T – температура, которая здесь считается одинаковой для электронов, дырок и кристаллической решетки; $w^{(e,e)}_{(r,r')\beta}(p, p')$, $w^{(h,h)}_{(r,r')\beta}(p, p')$, $w^{(h,e)}_{(r,r')\beta}(p, p')$ – Фурье-компоненты плотностей потоков переходов электрон-электрон, дырка-дырка и электрон-дырка соответственно.

3. Плотность энергии и давление электронно-дырочной плазмы

Зная $T^{(s)\mu\nu}$, можно вычислить плотность энергии $\varepsilon^{(s)}$ и давление $p^{(s)}$, создаваемые случайным электромагнитным полем

$$\varepsilon^{(s)} = c T^{(s)0}_0, \quad p^{(s)} = -(c/3) (T^{(s)\mu}_\mu - T^{(s)0}_0). \quad (4)$$

Как показано в работе [9], эти величины в большинстве случаев много меньше, чем плотность энергии и давление заряженных квазичастиц. Однако существует область температур и химических потенциалов, в которой $\varepsilon^{(s)}$ и $p^{(s)}$ оказываются одного порядка с аналогичными характеристиками газов квазичастиц. В этой области газы электронов и дырок должны быть вырожденными

$$F^{(e)} > \Delta/2, F^{(h)} < -\Delta/2, \quad (5.1)$$

и дополнительно должны выполняться неравенства

$$p^{(e)}_F^2/m_e \ll \Theta \ll \Delta(\Delta/m_e c_s^2), p^{(h)}_F^2/m_h \ll \Theta \ll \Delta(\Delta/m_h c_s^2). \quad (5.2)$$

Здесь m_e и m_h – эффективные массы электронов и дырок;

$$p^{(e)}_F = (2m_e(F^{(e)} - \Delta/2))^{1/2}, p^{(h)}_F = (2m_h E^{(h)}_F(-\Delta/2 - F^{(h)}))^{1/2} \quad (6)$$

- их импульсы Ферми.

Для случайного электромагнитного поля из выражений (2) и (4) получим

$$\varepsilon^{(s)} \approx -4\pi(e^2/\hbar)(2\pi\hbar)^{-3}(4/\pi - 1)\Theta^2(m_e^2 + m_h^2), p^{(s)} \approx -\varepsilon^{(s)}/3. \quad (7)$$

Основной вклад в $\varepsilon^{(s)}$ и $p^{(s)}$ дают случайные переходы электрон-электрон и дырка-дырка. Вклад переходов электрон-дырка оказывается незначительным.

В рассматриваемом приближении концентрации, плотности энергии и давление газов электронов и дырок даются формулами

$$n^{(e)} \approx (8\pi/3)(p^{(e)}_F/2\pi\hbar)^3, n^{(h)} \approx (8\pi/3)(p^{(h)}_F/2\pi\hbar)^3, \quad (8.1)$$

$$\varepsilon^{(e)} \approx (\Delta/2)(1 + (3/5)(p^{(e)}_F^2/\Delta m_e))n^{(e)}, \varepsilon^{(h)} \approx (\Delta/2)(1 + (3/5)(p^{(h)}_F^2/\Delta m_h))n^{(h)}, \quad (8.2)$$

$$p^{(e)} \approx (2/5)(p^{(e)}_F^2/2m_e)n^{(e)}, p^{(h)} \approx (2/5)(p^{(h)}_F^2/2m_h)n^{(h)}. \quad (8.3)$$

С учетом требований (5.2) для системы электронов, дырок и случайного электромагнитного поля получим соотношения

$$\varepsilon = \varepsilon^{(e)} + \varepsilon^{(h)} + \varepsilon^{(s)} \approx (4\pi/3)(2\pi\hbar)^{-3}[\Delta(p^{(e)}_F^3 + p^{(h)}_F^3) - 3(e^2/\hbar)(4/\pi - 1)\Theta^2(m_e^2 + m_h^2)], \quad (9.1)$$

$$p = p^{(e)} + p^{(h)} + p^{(s)} \approx (4\pi/3)(e^2/\hbar)(2\pi\hbar)^{-3}(4/\pi - 1)\Theta^2(m_e^2 + m_h^2). \quad (9.2)$$

Рассмотрим собственный полупроводник, в котором выполнено условие электронейтральности. Тогда справедливы равенства

$$F^{(e)} + F^{(h)} = 0 \Rightarrow p^{(e)}_F = p^{(h)}_F = p_F. \quad (10)$$

Потребуем дополнительно выполнение условия (1) и из соотношений (9.1), (9.2) и (10) получим уравнение

$$p_d^3 = (e^2/\hbar)(4/\pi - 1)(k_B T_d)^2(m_e^2 + m_h^2)/\Delta, \quad (11)$$

связывающее p_d и T_d . Легко убедиться, что для p_d и T_d , удовлетворяющих уравнению (11), справедливы условия (5.2).

Для концентраций квазичастиц, плотности энергии и давления электронейтральной электронно-дырочной плазмы с нулевой энтальпией (ЭЭДПНЭ) справедливы соотношения

$$n^{(e)} = n^{(h)} = n^{(d)} = (8\pi/3)(e^2/\hbar)(2\pi\hbar)^{-3}(4/\pi - 1)(k_B T_d)^2(m_e^2 + m_h^2)/\Delta = \\ = (8\pi/3)(p_d/2\pi\hbar)^3, \quad (12.1)$$

$$\varepsilon^{(d)} = -(4\pi/3)(e^2/\hbar)(2\pi\hbar)^{-3}(4/\pi - 1)\Theta_d^2(m_e^2 + m_h^2) = \\ = -(4\pi/3)\Delta(p_d/2\pi\hbar)^3 = -(\Delta/2)n^{(d)} = -p^{(d)}. \quad (12.2)$$

Из неравенств (5.2) нетрудно вычислить максимальную температуру, при которой рассматриваемое состояние электронно-дырочной плазмы может существовать, а из формулы (12.1) соответствующую максимальную концентрацию квазичастиц

$$T_{\max} = \Delta/(\hbar^2(k_B(m_e^2 + m_h^2)^{1/2}c_s^2)), \quad n_{\max} = (8\pi/3)\alpha(c/c_s)(4/\pi - 1)(\Delta/2\pi\hbar c_s)^3. \quad (13)$$

Для кремния $T_{\max} \approx 1,68^\circ\text{K}$, $n_{\max} \approx 2,33 \cdot 10^{+12} \text{ см}^{-3}$; для арсенида галлия $T_{\max} \approx 3,00^\circ\text{K}$, $n_{\max} \approx 2,11 \cdot 10^{+12} \text{ см}^{-3}$, для антимонида индия $T_{\max} \approx 0,021^\circ\text{K}$, $n_{\max} \approx 1,44 \cdot 10^{+10} \text{ см}^{-3}$.

В заключение этого параграфа отметим, что благодаря выполнению условия электронейтральности равна нулю не только плотность энтальпии, но и плотность энтропии

$$s^{(\Lambda)} = T_{\Lambda}^{-1}(\varepsilon^{(\Lambda)} + p^{(\Lambda)} - n^{(\Lambda)}(F^{(e)} + F^{(h)})) = 0$$

рассматриваемого состояния электронно-дырочной плазмы.

4. Заключение

Исследование влияния случайного электромагнитного поля на термодинамические характеристики электронно-дырочной плазмы в полупроводнике показало, что в собственном полупроводнике в области низких температур возможно существование электронейтрального состояния этой плазмы с нулевыми плотностями энтальпии и энтропии. Это состоя-

ние является неравновесным, разность химических потенциалов электронов и дырок определяется выражением

$$F^{(e)} - F^{(h)} = \Delta [1 + (((e^2/h)(4/\pi - 1)(m_e^2 + m_h^2))^2/\Delta)^{1/3} (k_B T_d/\Delta)^{4/3} ((m_e + m_h)/2m_e m_h)].$$

Плотность энергии случайного электромагнитного поля при этом равняется

$$\varepsilon^{(s)} = -(3\Delta/2)n^{(d)},$$

то есть в полтора раза превышает по абсолютной величине суммарную плотность энергии электронов и дырок. Такой плотности энергии, в принципе, достаточно, чтобы электронейтральное состояние электронно-дырочной плазмы с нулевой энтальпией было самоподдерживающимся. Однако выяснить, так ли это, можно только проведя дополнительное исследование кинетики переходов квазичастиц между различными состояниями.

Важнейшим свойством ЭЭДПНЭ является независимость её плотности энергии и давления от равномерно движущейся системы отсчета. На основании полученных здесь соотношений можно утверждать, что инвариантность этих величин приводит к инвариантности температуры.

Если бы исследуемая плазма занимала все пространство, то была бы практически ненаблюдаемой. Но в случае, если она пространственно ограничена, указанная инвариантность должна проявляться в неизменности её свойств при прохождении через неё любой плотности тока, вплоть до предельной

$$J^{\text{lim}} = en^{(d)}c.$$

При этом средняя скорость квазичастиц может превысить c_s , что должно сопровождаться генерацией излучения Вавилова-Черенкова. В том числе и в СВЧ диапазоне.

В соответствии с приведенными в оценках, для кремния и арсенида галлия J^{lim} порядка 10^4 А/см², а для антимонида индия – 10^2 А/см². Такие плотности токов могут быть легко получены при использовании металлических контактов к полупроводнику, содержащему ЭЭДПНЭ. Скорости света в перечисленных полупроводниках 3,2 – 4 раза меньше, чем скорость света в вакууме. То есть плотности токов, необходимые для генерации излучения Вавилова-Черенкова, в несколько раз меньше предельных.

Как следует из формулы (13), максимальная температура образования ЭЭДПНЭ пропорциональна квадрату ширины запрещенной зоны по-

лупроводника. Поэтому в одномерных наноструктурах $T_{\max}$ может регулироваться их поперечными размерами, и может оказаться существенно выше, чем в объемных материалах.

Список литературы

- [1] Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников / Москва: Наука, 1990. 388 с.
- [2] Keldish L.V. // Proc. Int. Conf. Phys. Semicond. 9th, Moscow, 1968. P. 1303.
- [3] Rice T.M., Hensel J.C., Phillips T.G., Thomas G.A. The Electron-Hole Liquid in Semiconductors / Academic Press, Inc., 1977.
- [4] Владимиров В.В., Волков А.Ф., Мейлихов Е.З. Плазма полупроводников / Москва: Атомиздат, 1979. 260 с.
- [5] Зельдович Я.Б. Космологическая постоянная и теория элементарных частиц // УФН. 1968. Т. 95. Вып. 2. С. 209–230.
- [6] Черенков П.А. Видимое свечение чистых жидкостей под действием γ -радиации // Докл. АН СССР. 1934. Т. 2. С. 451.
- [7] Gliner E.B. Algebraic Properties of the Energy-Momentum Tensor and Vacuum-Like States of Matter // Sov. Phys. JETP. 1966. V. 22. No 2. P. 378-382.
- [8] Чернин А.Д. Темная энергия в системах галактик // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т.98. Вып. 6. С. 394 -407.
- [9] Obukhov I.A. Cosmological Constant and Energy Density of Random Electromagnetic Field // Journal of High Energy Physics, Gravitation and Cosmology. 2016. Vol. 2. No. 3.

References

- [1] Bonch-Bruevich V.L., Kalashnikov S.G. *The Physics of Semiconductors*. Moscow, Nauka, 1990, 388 p. (In Russian).
- [2] Keldish L.V. *Proc. Int. Conf. Phys. Semicond. 9th, Moscow*, 1968, p. 1303.
- [3] Rice T.M., Hensel J.C., Phillips T.G., Thomas G.A. *The Electron-Hole Liquid in Semiconductors. Academic Press, Inc.*, 1977.
- [4] Vladimirov V.V., Volkov A.F., Meilikhov E.Z. *Plasma of Semiconductors*. Moscow, Atomizdat, 1979, 260 p. (In Russian).
- [5] Zel'dovich Ya.B. The cosmological constant and the theory of elementary particles. *Sov. Phys. Usp.*, 1968, 11, pp. 381–393.
- [6] Cherenkov P.A. [Visible emission of clean liquids by action of γ radiation]. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 1934, vol. 2, p. 451. (In Russian).
- [7] Gliner E.B. Algebraic Properties of the Energy-Momentum Tensor and Vacuum-Like States of Matter. *Sov. Phys. JETP*, 1966, 22, No 2, pp. 378-382.
- [8] Chernin A.D. [Dark Energy in Systems of Galaxies]. *JETP Letters*, 2013, vol. 98, No. 6, pp. 394 -407. (In Russian).
- [9] Obukhov I.A. Cosmological Constant and Energy Density of Random Electromagnetic Field. *Journal of High Energy Physics, Gravitation and Cosmology*, 2016, Vol. 2, No. 3.

Thermal shielding by anodic alumina films with nanoporous structure

Igor A. Vrublevsky, Katsiaryna V. Chernykova, Yahya T.A. Al-Ademi,
Dmitri V. Gorbachev

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics
Minsk, 220013, Belarus
vrublevsky@bsuir.edu.by

Abstract: *In the present study nanoporous anodic alumina films were applied as thermal shields to smooth contrast of thermal radiation from bioobjects and surroundings. It was shown that anodic alumina films possess good thermal isolating and shielding properties in the wavelength range of 6–14 μm and can be utilized as thermal shields.*

Keywords: *anodic alumina, nanoporous structure, thermal shielding, IR radiation.*

Тепловое экранирование пленками анодного оксида алюминия с нанопористой структурой

Врублевский И.А., Чернякова Е.В., Аль-Адеми Я.Т.А.,
Горбачев Д.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, 220013, Республика Беларусь
vrublevsky@bsuir.edu.by

Аннотация: *В настоящей работе пленки нанопористого анодного оксида алюминия применяли в качестве теплозащитных экранов для сглаживания контраста тепловых излучений биологических объектов и окружающего фона. Показано, что пленки нанопористого анодного оксида алюминия имеют хорошие теплоизоляционные и экранирующие свойства в области длин волн 6–14 мкм и могут быть использованы в качестве тепловых экранов.*

Ключевые слова: *анодный оксид алюминия, нанопористая структура, тепловое экранирование, ИК излучение.*

1. Введение

В настоящее время активно развиваются методы создания наноструктурированных материалов, основанные на использовании процессов шаблонного формирования и самоформирования [1-3]. Одним из материалов, вызывающих большой практический интерес, является пористый анодный оксид алюминия, упорядоченная наноразмерная структура которого образуется в результате процессов самоформирования [4]. Выбирая параметры анодирования на стадии роста анодной пленки возможно в широких пределах управлять структурными свойствами (размер пор, пористость, межпористое расстояние) и, таким образом, физическими и оптическими свойствами пленок нанопористого оксида алюминия [5,6]. Следует отметить, что пленки на основе нанопористого оксида алюминия характеризуются высокой механической прочностью, термической стабильностью и химической стойкостью и поэтому находят применение в нанотехнологии, микробиологии и сенсорики [7,8].

Процесс передачи тепловой энергии, выделение или поглощение тепла в объекте приводит к тому, что его температура изменяется относительно окружающей среды. Основной вклад в наблюдаемый тепловой контраст вносят собственные излучения наблюдаемого объекта и фона. В настоящее время для визуализации теплового изображения объектов используются два типа тепловизоров: охлаждаемые тепловизоры, работающие в коротковолновом диапазоне (3–5 мкм), и неохлаждаемые тепловизоры в средневолновом диапазоне (8–14 мкм). Для обнаружения и идентификации тепловых объектов, таких как человек, спектральная длина волны теплового излучения которого составляет 9,3 мкм, применяются неохлаждаемые тепловизоры. Наряду с развитием технологий теплового сканирования ведется интенсивный поиск новых материалов, позволяющих рассеивать и поглощать тепловое излучение и, таким образом, обеспечить скрытность объектов от наблюдения в ИК-диапазоне.

В данной работе представлены результаты исследований по использованию пленок нанопористого анодного оксида алюминия для снижения тепловой контрастности излучения человека на экране неохлаждаемого тепловизора.

2. Экспериментальная часть

Для исследования картины теплового поля при проведении экспериментов использовали неохлаждаемый тепловизор (Infrared imaging camera system MobIR 4). Тепловые пятна с температурой человека создавались

с использованием пластины фторопласта толщиной 5 мм с двумя одинаковыми отверстиями диаметром 14 мм. Пластина фторопласта размещалась над ладонью человека, блокируя основное тепловое излучение и пропуская его только через специальные отверстия. В экспериментах пленки нанопористого анодного оксида алюминия помещались на пластине фторопласта над одним из отверстий (рабочим). Пластина располагалась таким образом, чтобы пленка нанопористого анодного оксида алюминия была удалена на расстоянии 3–5 мм от биообъекта. Второе отверстие (контрольное), через которое тепловое излучение проходило без препятствий, служило для оценки результатов теплового маскирования.

Используемые в экспериментах пленки нанопористого анодного оксида алюминия получали методом анодирования алюминия. В качестве исходного материала применяли Al-фольгу толщиной 80 мкм марки А95 (содержание алюминия 99,95%). Окисление проводили методом одностороннего анодирования алюминия в двухэлектродной электрохимической ячейке в 0,4 М водном растворе щавелевой кислоты $(\text{COOH})_2$ в гальваностатическом режиме ($j = 8,0 \text{ мА/см}^2$) при напряжении около 60 В на участке стационарного роста оксида. В качестве катода использовали платиновую пластину. Процесс проводили при постоянной температуре $(20 \pm 1)^\circ\text{C}$, электролит интенсивно перемешивали. В качестве источника тока использовали потенциостат П5827М. Анодирования продолжалось до достижения анодной пленкой толщины 60,0 мкм. Анодную оксидную пленку от остаточного слоя алюминия отделяли в 10 % растворе Br_2 в CH_3OH , затем образцы тщательно промывали и высушивали на воздухе.

Морфологию поверхности и поперечное сечение пленок пористого оксида алюминия, сформированных в растворе щавелевой кислоты, исследовали с помощью сканирующего электронного микроскопа JOEL 840A (SEM).

3. Практические результаты

На рис. 1 представлен электронный снимок поперечного сечения пленки пористого анодного оксида алюминия. Результаты СЭМ-исследований показывают, что анодный оксид алюминия обладают упорядоченной пористой структурой с размером пор приблизительно 38-39 нм и расстоянием между ними около 100 нм. Поры ориентированы параллельно друг другу, расположены перпендикулярно поверхности роста и имеют одинаковую цилиндрическую форму.

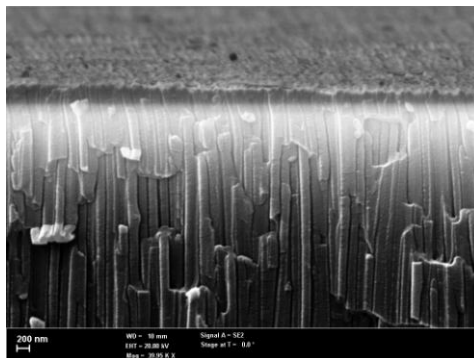


Рис. 1. СЭМ изображение поперечного сечения пленки пористого оксида алюминия, сформированной в 0,4 М водном растворе щавелевой кислоты при постоянной плотности тока 8,0 мА/см²

Fig. 1. SEM image of cross-section of porous anodic alumina film formed in 0.4 M oxalic acid at constant current density of 8,0 mA/cm²

Исследования показали, что температура ладони, измеренная снаружи, и через отверстие на пластине фторопласта практически одинаковая ($\Delta T \sim 0,6^\circ\text{C}$). Небольшая разница в значениях объясняется неоднородностью распределения тепла по всей ладони. Результаты исследований для теплового экранирования излучения с помощью пленки нанопористого анодного оксида алюминия представлены на рисунке 2.

Температура на поверхности пластины фторопласта составляла около $30,7^\circ\text{C}$, а в сквозном отверстии с тепловым излучением от ладони – $35,7^\circ\text{C}$. Применение пленок пористого оксида алюминия в качестве маски резко снижало прохождение теплового излучения от источника тепла. Результаты тепловизионных исследований показывают, что пленка нанопористого оксида алюминия толщиной 60 мкм обеспечивает эффективное экранирование теплового излучения тела человека. При этом регистрируемое изменение разницы температур от биообъекта при наличии и отсутствии анодной пленки составляет не менее 4–5 градусов. Несмотря на оптическую прозрачность в видимом диапазоне, пленки нанопористого анодного оксида алюминия заметно ослабляют пропускание излучения в среднем ИК диапазоне ($\lambda = 8\text{--}14$ мкм), что может позволить использовать их в качестве фильтров для рассеивания излучения от биообъектов.

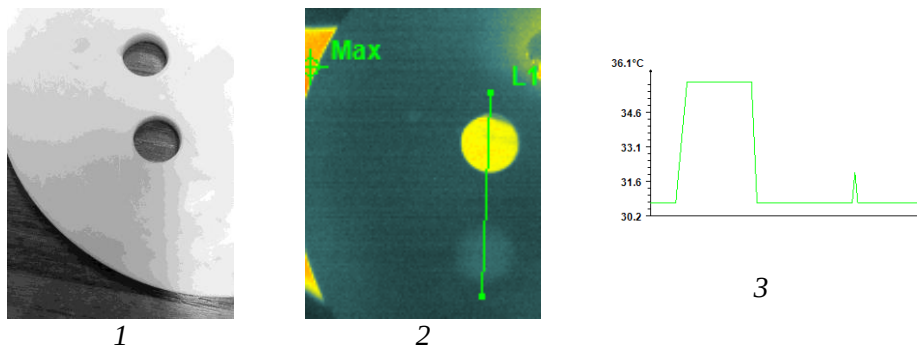


Рис. 2. Результаты тепловых исследований:

- 1 - фторопластовая пластина в видимом свете;
 2 - вид на биообъект через объектив тепловой камеры для случая маскирования рабочего отверстия пленкой нанопористого анодного оксида алюминия;
 3 - температурный профиль для линии, проходящий через контрольное и рабочее отверстие

Fig. 2. Results of thermal investigations:

- 1 – fluoroplastic plate in visible light;
 2 - bioobject in the monitor of IR imaging camera in case of masking of working aperture by nanoporous anodic alumina film;
 3 – thermal profile for line intersecting reference and operating holes

4. Заключение

Для создания одинаковых тепловых пятен с температурой человека использовалась пластина фторопласта с двумя сквозными отверстиями. Пластина размещалась над ладонью человека, блокируя основное тепловое излучение и пропуская его только через специальные отверстия. Регистрация теплового излучения проводилась с помощью тепловизионной камеры MobIR M4 со встроенной камерой визуального контроля.

Применение пленок пористого анодного оксида алюминия для маскирования резко снижало прохождение теплового излучения от источников тепла и уменьшало температуру тепловых пятен, излучаемых биообъектом (ладонь человека) с 35,7 до 30,7 °С. Получены профили распределения температур от биообъекта в сквозных отверстиях пластины фторопласта для случая без маски и с применением маски из пленки пористого анодного оксида алюминия.

Проведенные исследования показали, что пленки нанопористого анодного оксида алюминия имеют хорошие теплоизоляционные и экрани-

рующие свойства в области длин волн 8 -14 мкм и могут быть использованы в качестве теплозащитных экранов для сглаживания контраста тепловых излучений объекта и окружающего фона и для повышения эффективности тепловой маскировки объектов.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф15-М100).

Список литературы

- [1] Kikuchi T., Nishinaga O., Natsui S., Suzuki R.O. Polymer nanoimprinting using an anodized aluminum mold for structural coloration. *Appl. Surf. Sci.*, 2015. vol. 341. pp. 19–27.
- [2] Mozalev A., Mozaleva I., Sakairi M., Takahashi H. Anodic film growth on Al layers and Ta-Al metal bilayers in citric acid electrolytes. *Electrochim. Acta.*, 2005. vol. 50. pp. 5065–5075.
- [3] Shingubara S., Okino O., Sayama Y., Sakaue H., Takahagi T. Ordered two-dimensional nanowire array formation using self-organized nanoholes of anodically oxidized aluminum. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1997. vol. 36. pp. 7791–7795.
- [4] Vrublevsky I., Parkoun V., Sokol V., Schreckenbach J., Marx G. The study of the volume expansion of aluminum during porous oxide formation at galvanostatic regime. *Appl. Surf. Sci.* 2004. vol. 222. pp. 215–225.
- [5] Jagminas, A., Kurtinaitiene M., Angelucci R., Valinčius, G. Modification of alumina barrier-layer through re-anodization in an oxalic acid solution with fluoride additives. *Appl. Surf. Sci.* 2004. vol. 252. pp. 2360–2367.
- [6] Stepniowski W., Norek M., Michalska-Domańska M., Bojar Z. Ultra-small nanopores obtained by self-organized anodization of aluminum in oxalic acid at low voltages. *Mater Lett.* 2013. vol. 111. pp. 20–23.
- [7] Lee W., Park S.-J. Porous anodic aluminum oxide: anodization and templated synthesis of functional nanostructures. *Chem. Rev.*, 2014. vol. 114. pp. 7487–7556.
- [8] Sulka G.D. Highly ordered anodic porous alumina formation by self-organised anodizing and template-assisted fabrication of nanostructured materials. *Nanostructured materials in electrochemistry*. 2008. pp. 1–116.

References

- [1] Kikuchi T., Nishinaga O., Natsui S., Suzuki R.O. Polymer nanoimprinting using an anodized aluminum mold for structural coloration. *Appl. Surf. Sci.*, 2015. vol. 341. pp. 19–27.
- [2] Mozalev A., Mozaleva I., Sakairi M., Takahashi H. Anodic film growth on Al layers and Ta-Al metal bilayers in citric acid electrolytes. *Electrochim. Acta.*, 2005. vol. 50. pp. 5065–5075.
- [3] Shingubara S., Okino O., Sayama Y., Sakaue H., Takahagi T. Ordered two-dimensional nanowire array formation using self-organized nanoholes of anodically oxidized aluminum. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1997. vol. 36. pp. 7791–7795.

- [4] Vrublevsky I., Parkoun V., Sokol V., Schreckenbach J., Marx G. The study of the volume expansion of aluminum during porous oxide formation at galvanostatic regime. *Appl. Surf. Sci.* 2004. vol. 222. pp. 215–225.
- [5] Jagminas, A., Kurtinaitiene M, Angelucci R., Valinčius, G. Modification of alumina barrier-layer through re-anodization in an oxalic acid solution with fluoride additives. *Appl. Surf. Sci.* 2004. vol. 252. pp. 2360–2367.
- [6] Stępniewski W., Norek M., Michalska-Domańska M., Bojar Z. Ultra-small nanopores obtained by self-organized anodization of aluminum in oxalic acid at low voltages. *Mater Lett.* 2013. vol. 111. pp. 20–23.
- [7] Lee W., Park S.-J. Porous anodic aluminum oxide: anodization and templated synthesis of functional nanostructures. *Chem. Rev.*, 2014. vol. 114. pp. 7487–7556.
- [8] Sulka G.D. Highly ordered anodic porous alumina formation by self-organised anodizing and template-assisted fabrication of nanostructured materials. *Nanostructured materials in electrochemistry*. 2008. pp. 1–116.

Acknowledgements

This research was partly supported by the grant of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research No. F15-M100.

Development and research three-axis micro- and nanomechanical accelerometer

¹Igor E. Lysenko, ¹Olga A. Ezhova, ¹Ludmila F. Molchanova

¹Southern Federal University
Taganrog, 347900, Russian Federation
ingvarlys@gmail.com

Аннотация: In the report the linear acceleration sensor design with three axis of sensitivity is researched. Parameterized geometry and finite element model for modal analysis are developed in the ANSYS program. Behavioral description of the study design is developed with language VHDL-AMS to simulate the sensor operation under the influence of linear acceleration along three axis of sensitivity. On the basis of research results three-axis device sensitivity, cross-sensitivity, duration transients are specified. As part of the work the experimental sensor prototypes are fabricated.

Ключевые слова: microelectromechanical systems, nanosystems, accelerometer, design, model, research, prototype.

Разработка и исследование микро- и наномеханических сенсоров линейных ускорений с тремя осями чувствительности

¹Лысенко И.Е., ¹Ежова О.А., ¹Молчанова Л.Ф.

¹Южный федеральный университет
г. Таганрог, 347900, Российская Федерация
ingvarlys@gmail.com

Аннотация: В докладе рассмотрена конструкция сенсора линейных ускорений с тремя осями чувствительности. Разработаны параметризуемые геометрические и конечно-элементные модели для проведения модального анализа в программе ANSYS. Разработано поведенческое описание исследуемой конструкции на языке VHDL-AMS для проведения моделирования работы сенсора под действием линейных ускорений по трем осям чувствительности. На основе результатов исследований определены чувствительность устройства по трем осям, перекрестная чувствительность, время действия переходных процессов. В рамках работы изготовлены экспериментальные образцы сенсора.

Ключевые слова: микроэлектромеханические системы, наносистемы, акселерометр, конструкция, модель, моделирование, экспериментальный образец.

1. Введение

Одним из наиболее динамично развивающихся научно-технических направлений является микросистемная техника (МСТ), возникшая на стыке электроники, механики и оптики, включающая в себя сверхминиатюрные механизмы, приборы, машины с ранее недостижимыми массогабаритами, энергетическими показателями и функциональными параметрами, создаваемые интегрально-групповыми экономически эффективными процессами микро- и нанотехнологий. Одним из основных направлений развития микросистемной техники является разработка, исследование и применение микромеханических сенсоров линейных ускорений [1-3].

Микромеханические акселерометры находят широкое применение в современных технических средствах различного назначения: от специализированных изделий аэрокосмической техники до бытовых приборов, таких как сотовых телефонов и игровых платформ нового поколения [1-3]. Для регистрации линейных ускорений изготавливают двухосные и одноосные микромеханические устройства на одной подложке, расположенные по трем взаимно ортогональным осям чувствительности, что приводит к увеличению занимаемой ими площади подложки [4, 5].

Решить данную проблему – улучшить массогабаритные характеристики микросистем, обеспечить возможность регистрации линейного ускорения подвижного объекта по трем осям чувствительности можно применением интегральных многоосевых микромеханических акселерометров, изготавливаемых на одной подложке в одном технологическом цикле [1, 6-9].

2. Исследуемая модель

В данной работе исследуется конструкция сенсора линейных ускорений с тремя осями чувствительности, представленная на рис.1.

Разработанный микромеханический сенсор содержит инерционную массу (1), подвес чувствительного элемента (2), емкостные преобразователи перемещений (3, 4), электростатические приводы (5).

Достоинство рассматриваемой конструкции микромеханического сенсора заключается в возможности его работы как акселерометра прямого преобразования, так и компенсационного.

В предложенной конструкции сенсора линейных ускорений имеется шестнадцать последовательно-параллельных соединений упругих балок, т.е. подвесов. Данные подвесы можно условно разделить на три типа, в зависимости от конфигурации балок.

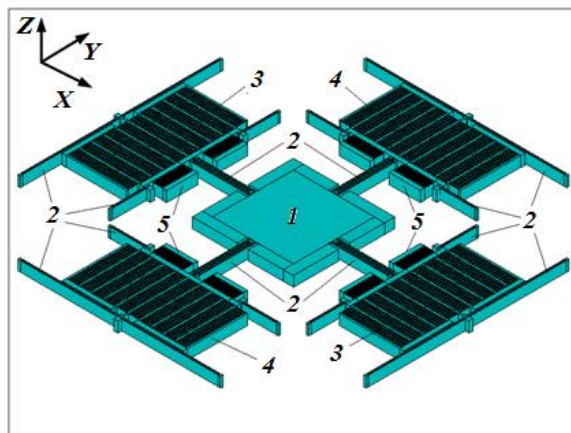


Рис. 1. Микромеханический сенсор линейных ускорений с тремя осями чувствительности

Собственная частота зависит от массы и коэффициента жесткости конструкции, зависящего от многих параметров, в том числе и от длины, ширины, толщины упругих балок в подвесах. При исследовании рассматривается изменение коэффициента жесткости конструкции при изменении длины упругих балок в подвесах.

При исследовании конструкции было разработано параметризуемое описание для анализа динамического поведения конструкции под действием динамических нагрузок в программной системе ANSYS (<http://www.ansys.com/>), в которой были посчитаны собственные частоты и соответствующие им формы колебаний.

На рис. 2 представлены разработанные параметризуемые геометрическая и конечно-элементная модели интегрального микромеханического акселерометра.

3. Экспериментальный образец

Технологический маршрут изготовления предложенного микромеханического акселерометра был адаптирован к MUMPs-технологии [10].

Для проведения исследований была изготовлена серия экспериментальных образцов. В качестве подложки использовали пластины кремния КЭФ (100) п-типа диаметром 100 мм.

На рис. 3 представлена топология и фрагмент экспериментального образца микромеханического акселерометра.

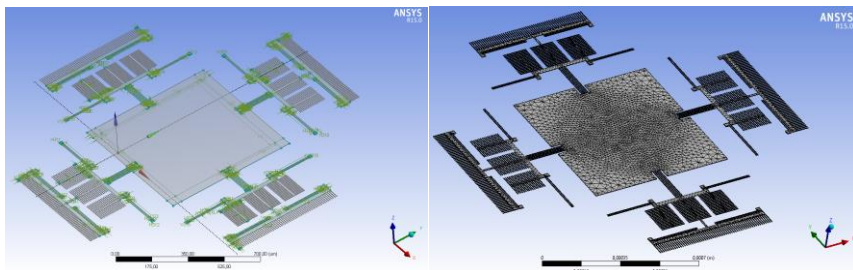


Рис. 2. Параметризуемые геометрическая и конечно-элементная модели интегрального микромеханического акселерометра

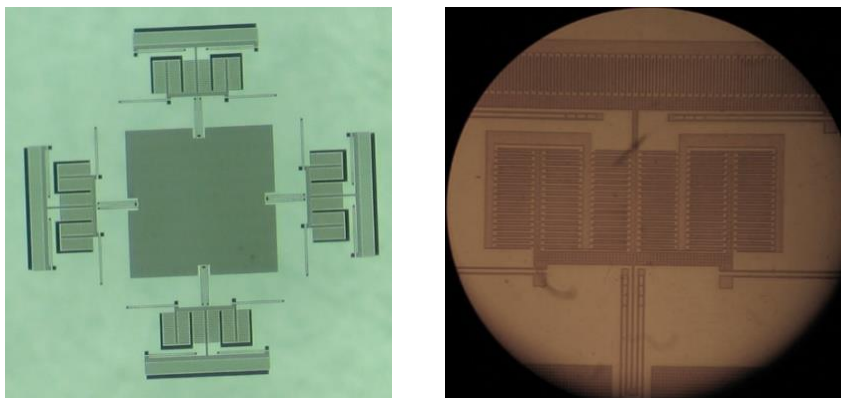


Рис. 3. Топология и фрагмент экспериментального образца и результаты исследований микромеханического акселерометра

4. Практические результаты

На рис. 4 представлены зависимости коэффициента жесткости всей конструкции $K_{\text{общ}}$ от длины балок в подвесах каждого типа. График, изображенный пунктиром, показывает зависимость $K_{\text{общ}}$ от длины балок при изменении длины балок в диапазоне 20-300 мкм одновременно для каждого подвеса. График подвеса I-го типа демонстрирует изменение $K_{\text{общ}}$ при изменении длины балок отдельно в данном подвесе, при этом длина балок в остальных подвесах остаётся неизменной ($l = 100$ мкм), графики подвесов II-го и III-го типа также показывают зависимость $K_{\text{общ}}$ от длины балок в каждом типе подвесов соответственно. При расчетах остальные параметры имели следующие значения: модуль Юнга $E=169$ ГПа и одинаковые для всех балок толщина $h=1.5$ мкм и ширина $w=4$ мкм.

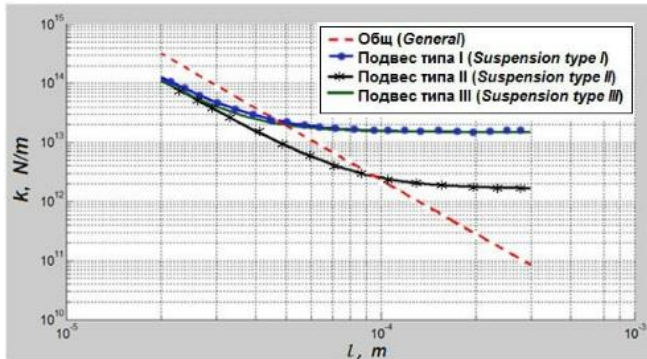


Рис. 4. Зависимость коэффициента жесткости конструкции от изменения длины балок в подвесах каждого типа

В работе был выполнен модальный анализ предложенного микромеханического акселерометра с использованием пакета программ ANSYS.

На рис. 5 представлены результаты моделирования работы микромеханического акселерометра под действием линейных ускорений. Моделирование проведено на основе разработанного параметризуемого описания на языке высокого уровня VHDL-AMS.

Как следует из результатов моделирования, при действии линейных ускорений a_x , a_y , a_z чувствительный элемент совершает синхронные перемещения вдоль осей действия внешнего воздействия. Направление действия линейных ускорений будет определять фазу перемещений инерционных масс. Длительность перехода по осям чувствительности X, Y – 9 мс, а оси Z – 11 мс.

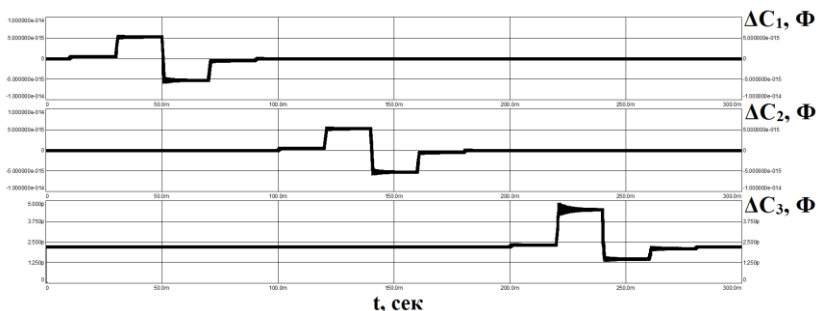


Рис. 5. Изменения емкостей преобразователей перемещений акселерометра

Как показали результаты моделирования, начальная емкость преобразователей перемещений по осям X и Y составляет 90 фФ, и по оси Z –

2,2 пФ. При действии линейного ускорения изменения дифференциальных емкостей по осям X и Y составляет 0,51 фФ при g и 5,1 фФ при 10g, по оси Z – 0,1 пФ при g и 1,8 пФ при 10g.

Из результатов проведенных исследований видно, что конструкция упругого подвеса чувствительного элемента микромеханического акселерометра обеспечивает равенство частот по двум осям чувствительности. С целью получения равенства собственных частот по трем осям чувствительности необходимо увеличить на 20% длину балок в подвесе II-го типа, и уменьшить длину балок в подвесе III-го типа.

5. Заключение

В результате использований были подтверждены параметры микромеханического акселерометра, заложенные на этапе проектирования: количество осей чувствительности – 3; диапазон измеряемых ускорений – ± 10 g; уровень подавления перекрестных помех – не менее 50 дБ; чувствительность емкостного микромеханического преобразователя – не менее 0,5 фФ/g, свыше 800 кГц/фФ при использовании разработанных устройств первичной обработки сигналов емкостных микромеханических преобразователей на основе разностного принципа формирования выходного сигнала.

Источники финансирования и выражение признательности

Результаты получены с использованием оборудования Центра коллективного пользования и научно-образовательного центра «Нанотехнологии» Института нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета (г. Таганрог) при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект №213.01–11/2014–12 в рамках базовой части государственного задания).

Список литературы

- [1] Распопов, В.Я. Микромеханические приборы: учебное пособие. Тула: Тульский государственный университет, 2007, 400 с.
- [2] Ramadoss, R., 2013. MEMS devices for biomedical applications // Solid State Technology, no.10: pp.10-13.
- [3] Аравин В.В., Вернер В.Д., Сауров А.Н., Мальцев П.П. МЭМС высокого уровня – возможный путь развития МЭМС в России // Нано- и микросистемная техника. 2011, №6, С. 28-31.
- [4] С.П. Тимошенко, В.В. Калугин, Е.С. Кочурина, С.А. Анчутин, В.А. Калинин, К.А. Строганов. Микроакселерометры на различные диапазоны измерения линейных ускорений для систем инерциальной навигации // Нано- и микросистемная техника, 2012, №8, С. 32-35.

- [5] Прокофьев И.В., Тихонов Р.Д. Нано- и микросистемы для мониторинга параметров движения транспортных средств // Нано- и микросистемная техника. 2011, №12. С. 48-50.
- [6] Лысенко И.Е., Ежова О.А. Исследование влияния параметров элементов подвесов на собственную частоту конструкции микромеханического сенсора линейных ускорений // Нано- и микросистемная техника, 2016, №6, С. 386-390.
- [7] Лысенко И.Е. Интегральные микромеханические сенсоры угловых скоростей и линейных ускорений. Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2013, 180 с.
- [8] Lysenko I.E. Modeling of the micromachined angular rate and linear acceleration sensors LL-type with redirect of drive and sense axis // World Applied Sciences Journal, 2013, no.27 (6), p.759-762.
- [9] Лысенко И.Е. Функционально интегрированные микро- и наномеханические сенсоры угловых скоростей и линейных ускорений. Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2013, 167 с.
- [10] J.Carter, A.Cowen, B.Hardy, R.Mahadevan, M.Stonefield, S.Wilcenski. MUMPs design handbook. MEMSCAP, Revision 11.0, 2008, 44 p.

References

- [1] Raspopov, V.Ja. *Micromechanical devices: textbook*. Tula: Tul'skij gosudarstvennyj universitet, 2007, 400 p. (In Russian).
- [2] Ramadoss, R., 2013. MEMS devices for biomedical applications. *Solid State Technology*, no.10: pp.10-13.
- [3] Aravin V.V., Verner V.D., Saurov A.N., Mal'cev P.P. [MEMS of high level – eventual ways of MEMS development in Russia]. *Nano- and microsystem technique*, 2011, no. 6, pp. 28-31. (In Russian).
- [4] S.P. Timoshenkov, B.V. Kalugin, E.S. Kochurina, C.A. Anchutin, V.A. Kalinin, K.A. Stroganov. [Microaccelerometer for different range of dimension of linear acceleration for inertial navigation system] *Nano- and microsystem technique*, , 2012, no.8, pp. 32-35. (In Russian).
- [5] Prokof'ev I.V., Tihonov R.D. [Nano- and microsystems to monitor motion variables of vehicles]. *Nano- and microsystem technique*, 2011, no.12, pp. 48-50. (In Russian).
- [6] Lysenko I.E., Ezhova O.A. [Research of influence of suspension parameters and elements upon free frequency of design of micromechanical linear acceleration sensor]. *Nano- and microsystem technique*, 2016, no.6, pp. 386-390. (In Russian).
- [7] Lysenko I.E. *Integrated micromechanical sensors of angular velocity and linear acceleration*. Taganrog: Izd-vo JuFU, 2013, 180 p. (In Russian).
- [8] Lysenko I.E. Modeling of the micromachined angular rate and linear acceleration sensors LL-type with redirect of drive and sense axis. *World Applied Sciences Journal*, 2013, vol.27, no.6, pp.759-762.
- [9] Lysenko I.E. *Functionally integrated micromechanical sensors of angular velocity and linear acceleration*.– Taganrog: Izd-vo JuFU, 2013.– 167 p. (In Russian).
- [10] J.Carter, A.Cowen, B.Hardy, R.Mahadevan, M.Stonefield, S.Wilcenski. *MUMPs design handbook*. MEMSCAP, Revision 11.0, 2008, 44 p.

Научное издание

26-я Международная
Крымская конференция
«СВЧ-техника
и телекоммуникационные
технологии»:
Материалы конференции
(на русском и английском языках)

Том 7

Ответственный за издание
П. П. Ермолов

Компьютерная верстка
Н. А. Морозович

Редактирование текста
на английском языке
С. В. Павлов

Подписано в печать 24.05.2016
Формат 32×45/4
Условн. печ. л. 14,94
Уч.-изд. л. 14,7
Зак. 4565/7. Тир. 100

Отпечатано в типогр. Printex
ул. Кулакова, 59, оф. А
Севастополь, 299011
Тел.:
+7 978 704 51 11
+7 8692 464 744
+7 8692 455 678