МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
НАНОТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО РОССИИ
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИИ В ЭЛЕКТРОНИКЕ

Материалы XV Международной научно-технической конференции

2–7 июня 2025 г.

НАЛЬЧИК 2025

УДК 621: 531.91
ББК 31.21
М 33

Редакционная коллегия

А. М. Кармоков (ответственный редактор)
О. А. Молоканов (ответственный секретарь)

Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы XV Международной научно-технической конференции — Нальчик: Каб.-Балк. ун-т., 2025. − 361 с.

Публикуются материалы докладов, представленных на XV Международной научно-технической конференции «Микро- и нанотехнологии в электронике», проходившей в Эльбрусском учебно-научном комплексе Кабардино-Балкарского государственного университета 2−7 июня 2025 г.

Материалы докладов даны в авторской редакции.

ISBN

Кабардино-Балкарский
государственный университет
им. Х.М. Бербекова, 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Секция 1 Физико-химические свойства материалов и структур микро- и наноэлектроники..... 9

Нанонеоднородные структуры в твердых растворах антисегнетоэлектриков и их динамическая природа. *Филимонов А.В., Вахрушев С.Б.*..... 11

Влияние пространственной упорядоченности сферических частиц двумерного массива на поглощение света тонкоплёночными композитными наноструктурами. *Мискевич А.А., Лойко Н.А., Лойко В.А.* 16

Процессы памяти и переключения в тонкопленочных структурах на основе двух- и трехкомпонентных халькогенидов. *Троян Е.Ф., Смирнов А.Г., Степанов А.А., Жовнерик Н.В., Сун Хиао Вей, Лиу Женгбиао* 22

Исследование влияния различных факторов на механизмы протекания тока в пленках оксида цинка, легированного алюминием. *Свистова Т.В., Рембеза Е.С., Кошелева Н.Н., Белых М.А., Конев М.Д., Чурилов Д.В.*..... 27

Оптические характеристики кристаллов $CuInS_2$. *Qasimoglu I.Q., Hidiyev Kh.A., Mamedova I.A., Ragimov S.S., Abdullayev N.A.* 32

Оптические характеристики магнитных полупроводников $TlFeS_2$. *Badalova Z.I., Hidiyev Kh.A., Abdullayev Yu.A., Ragimov S.S., Abdullayev N.A.* 36

Диффузионные процессы в полупроводниковых соединениях. *Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.* 40

Свойства, применение и методы исследования характеристик слоистых перовскит-подобных соединений. *Ванеева Д.Д., Мустафаев М.Г.* 44

Закономерности роста островковых пленок: фрактальный анализ. *Анофриев В.А., Антонов А.С., Кузьмин Н.Б., Васильев С.А., Сдобняков Н.Ю.*..... 48

К вопросу оценки поверхностной энергии в многокомпонентных наночастицах. *Соколов Д.Н., Непша Н.И., Серов С.В., Вересов С.А., Савина К.Г., Колосов А.Ю., Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М.* 51

Частотные дисперсии оптических параметров сплава Zn-Ge-Sb. *Кязимова В.К., Захрабекова З.М., Джалалов Б.К., Исламзаде Е.М., Алекперов А.И.* 54

Возможности управления свойствами полупроводниковых материалов при отсутствии трансляционной симметрии. *Попов А.И., Мирошникова И.Н.*..... 60

Влияние температуры подложки и ионной бомбардировки на свойства тонких пленок ZnS. *Здравомыслов Д.М.* 65

Наночастицы, квантовые точки, нанокристаллы: сопоставление синтеза, свойств, применений. *Жуков Н.Д.* 68

Структура и свойства тонких пленок диоксида гафния, легированного алюминием. *Бобылев А.Н., Шулаев Н.А., Касеинов Р., Кирнев В., Удовиченко С.Ю.* 74

Определение положения уровней протекания в свинцово-силикатных стеклах. *Еремина А.Ф., Пухаева Н.Е., Арчегова О.Р., Гончаров И.Н., Касумов Ю.Н., Чулухадзе Г.Р., Тибилов В.В.* 79

Естественный размерный эффект на поверхности легированных III-нитридов в условиях самокомпенсации. *Филимонов А.В., Бондаренко В.Б.* 85

Изучение свойств родия при различных температурах и давлениях. *Магомедов М.Н.* 90

Динамика спинволнового магнитного спектра в проводящих гексагональных магнитных нанотрубках. *Тагиев В.С., Танрывердиев В.А., Ахундова Э.А., Ибрагимов И.Н.* 95

Магнитное поведение ситемы $BiFeO_3/TiO_2$(nt) при высоком давлении до 7 ГПа. *Курбанов А.З., Арсланов Т.Р.* 100

Изучение уравнения состояния и барических зависимостей свойств палладия. *Яхьяев М.Г.* 105

Термоэлектрические свойства $AgSbSe_2$. *Рагимов С.С., Алиева А.И., Саддинова А.А., Искендерова П.М.* 110

Перколяция в одномерной структуре наночастиц магнетита. *Ализаде Р.А.* . 113

Влияние аминных добавок на проводящие и электрические характеристики PEDOT:PSS. *Будник В.С., Лабунов В.А., Тучковский А.К.* 118

Исследование композиции газочувствительных наноструктур $ZnFe_2O_4$ методами сканирующей зондовой микроскопии. *Крюков Р.С., Бузовкин С.С., Рыбина А.А., Шомахов З.В., Гукетлов А.М., Кондратьев В.М., Налимова С.С., Мошников В.А.* 122

Измерение относительного световыхода жидкого органического сцинтиллятора на основе нафталина в растворе додекана. *Азизов И.К., Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н., Шогенова М.М., Ханукаева Е.И.* 125

Исследование люминесцентных свойств гибридных жидкоорганических сцинтилляторов с добавлением кристаллов нафталина. *Азизов И.К., Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н., Шогенова М.М., Ханукаева Е.И.* 130

Эволюция температурных зависимостей свойств платины с изменением размера и давления. *Крамынин С.П.* 134

Изучение упругооптического эффекта в кристаллах $KAl(SO_4)_2 12H_2O$. *Матиев А.Х., Успажиев Р.Т., Эсмурзиева А.А.* 139

Расчет концентраций электронов и дырок в зонах высокоомного полупроводника алмаза. *Матиев А.Х., Успажиев Р.Т., Гатиев Р.У.* 144

Анализ температурной зависимости обратного тока *p-n*-перехода. *Матиев А.Х., Успажиев Р.Т., Горбакова Х.К.* 149

Трение Казимира-Лифшица и нагрев наночастицы при движении вблизи металлической поверхности. *Дедков Г.В., Кунашев З.А.* 155

Оптимизация фотоэлектрических характеристик перовскитного солнечного элемента $ZnO/CH_3NH_3PbI_3/NiO$. *Кармоков А.М., Козырев Е.Н., Агоев А.З., Молоканов О.А., Кармокова Р.Ю., Хасанов А.И.* 159

Секция 3 Технологии наноматериалов и тонкопленочных структур для микро- и наноэлектроники. Приборы и устройства. 165

Твердотельный монолитно-интегрированный микродисплей светоизлучающего типа на основе сложных полупроводниковых соединений A^3B^5. *Смирнов А.Г., Степанов А.А., Корсак К.В., Шрамов И.И., Муха Е.В., Можаров А.М., Федоров В.В., Мухин И.С.* 167

Исследование конструкции и режимов наработки МЭМС-датчиков избыточного давления с повышенной механической прочностью и прецизионными характеристиками. *Басов М.В., Сысоев С.С.* 171

Осаждение слоев оксида в технологии микроэлектроники. *Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.* 177

Пленочная технология при создании элементов приборных структур. *Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.* 182

Элементы полупроводниковых интегральных микросхем. *Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.* 188

Эффективность пленок поликристаллического si и нитрида кремния Si_3N_4 для геттерирования дефектов в Si эпитаксиальных структурах. *Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г.* 193

Технология создания КМОП-структур с повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла. *Здравомыслов Д.М.* 197

Свойства и технология связанных нанокристаллов в межэлектродном нанозазоре. *Глуховской Е.Г., Жуков Н.Д., Гавриков М.В.* 201

Подходы к формированию селективных слоев солнечного элемента. *Козырев Е.Н., Гончаров И.Н., Березов А.В., Аскеров Р.О., Тлехугов А.М., Кабисов Г.С., Калаев А.Н., Тотикова Д.З.* 207

Исследование механизма осаждения металлов в поры наноструктурированного оксида алюминия. *Кодзасова Т.Л., Асланов М.А., Дзестелова А.А., Карданов А.Н., Тотиев С.Т.* 213

Газовые сенсоры на основе нанокристаллических пленок диоксида олова с аддитивами редкоземельных металлов. *Сарач О.Б., Баринов А.Д., Зезин Д.А., Котов В.А.* 218

Исследования особенностей влияния типа расфокусировки на процессы формирования поверхности титана при воздействии на нее сериями сдвоенных лазерных импульсов в атмосфере воздуха.
Ермалицкая К.Ф., Красноперов Н.Н., Воропай Е.С., Зажогин А.П. 223

Исследование возможности напыления нанопленок из оксидов титана, легированных алюминием,при распылении титана и алюминия сдвоенными лазерными импульсами в атмосфере воздуха.
Ермалицкая К.Ф., Красноперов Н.Н., Воропай Е.С., Зажогин А.П. 228

Исследование влияния междуимульсного интервала на эффективность процессов образования порошков при абляции титанового сплава ВТ1-0 сдвоенными лазерными импульсами.
Ермалицкая К.Ф., Красноперов Н.Н., Воропай Е.С., Зажогин А.П. 232

Влияние окислителей на параметры поликристаллических пленок сульфида свинца. *Мирошникова И.Н., Мирошников Б.Н., Маскаева Л.Н., Попов А.И., Макарук К.С., Горячев А.В., Едельбекова П.А.* 237

Синтез g-C_3N_4 и его композита с WS_2 для детектирования спиртов.
Буй К.Д., Налимова С.С., Шомахов З.В., Гукетлов А.М., Мошников В.А.. 242

Переключение доменных стенок под действием тока в структуре мультиферроик/полулупроводник: переход к мемристовному поведению.
Рамазанов Ш.М., Гаджием Г.М., Зейналов Р.З. 247

Технология подавления эффекта инжекции горячих носителей в МДП-структурах. *Черкесова Н.В.* 252

Совместное электровосстановление ионов гольмия и никеля в расплаве KCl-NaCl при 973 К. *Карданова Р.А., Кушхов Х.Б.* 258

Применение эффекта электрической формовки для создания переходных межсоединений в изолирующих диэлектрических слоях. *Гаев Д.С., Бойко А.Н., Рехвиашвили С.Ш., Тимошенков С.П., Ахкубекова С.Н.* 263

Термостимулированное газовыделение свинцово-силикатного стекла С87-2 после отжига в водороде. *Лосанов Х.Х., Шомахов З.В., Молоканов О.А., Сергеев И.Н., Кармоков А.М., Хасанов А.И.*..... 268

Взаимосвязь электропроводности и газовыделения в стекле С87-2 в процессе отжига. *Лосанов Х.Х., Шомахов З.В., Молоканов О.А., Сергеев И.Н., Кармоков А.М., Хасанов А.И.*..... 273

Секция 4 Информационные и цифровые интеллектуальные технологии и математическое моделирование в микро- и наноэлектронике 277

Критерии оценки информативности и эффективности устройств формирования видеоизображений на основе дискретных матричных микроэлектронных преобразователей оптического излучения.
Волхонский В.В., Калиберда И.В...... 279

Оптимизация параметров устройств формирования видеосигналов на основе матричных микроэлектронных преобразователей оптического излучения для контроля протяжённых зон.
Бакиров Р.М., Волхонский В.В., Калиберда И.В. 284
Реализация модели технологического процесса диффузии в кремний на языке программирования MS VISUAL C#.
Плотникова Е.Ю., Арсентьев А.В., Винокуров А.А. 289
Моделирование увеличения термоэлектрической эффективности теллурида сурьмы при легировании переходными металлами.
Кульбачинский В.А., Апрелева А.С., Кытин В.Г. 294
Реализация прототипа многоканального блока регистрации. *Бодин А.Ю.*. 299
Разработка ключевых узлов многоканального блока регистрации.
Бодин О.Н., Крамм М.Н., Бодин А.Ю. 304
Базовые квантовые логические вентили с нанокристаллами на топологическом чипе. *Жуков Н.Д., Сучков С.Г., Сучков Д.С.* 309
Теплофизические процессы при рождении и рекомбинации кислородных вакансий и ионов в металлооксидном мемристоре.
Габдулин Б.Н., Бусыгин А.Н., Удовиченко С.Ю. 314
Применение цифровых интеллектуальных технологий и моделирования в микро- и наноэлектронных системах. *Колесников С.Е., Донец М.А.* 320
Роль искусственного интеллекта и математического моделирования в цифровой трансформации микро- и наноэлектроники.
Колесников С.Е., Донец М.А. 324
Симбиоз искусственного интеллекта и математического моделирования в проектировании микро- и наноэлектронных систем.
Колесников С.Е., Донец М.А. 328
Применение интеллектуальных технологий и математического моделирования в микро- и наноэлектронике. *Воропаев С.Е. Коробова В.М.* 332
Математическое моделирование наноматериалов для электроники.
Воропаев С.Е., Коробова В.М. 336
Влияние квантовых эффектов на производительность наноэлектронных компонентов. *Воропаев С.Е., Коробова В.М.* 340
Сравнительный анализ ЭКГ-электродов из разных материалов для высокомобильных регистраторов ЭКГ.
Кабардова Д.М., Коков А.А., Коков З.А., Молоканов О.А., Дышеков А.Х.. 344
Геометрические модели зондов АСМ в измерениях динамических сил Ван-дер-Ваальса. *Канаметов А.А., Кажарова К.З., Бузуркиева М.М., Барагунова Э.А., Ховхаев И.Л.* 350

Высокомобильный программно-аппаратный комплекс регистрации на смартфоне физиологических параметров человека. *Молоканов О.А., Гуденко Ю.А., Гутов А.З., Курданов Х.А., Лосанов Х.Х., Курданова М.Х.* 354

Указатели 357

СЕКЦИЯ 1

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 538.913 25-01

НАНОНЕОДНОРОДНЫЕ СТРУКТУРЫ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ И ИХ ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРИРОДА

Филимонов А.В., Вахрушев С.Б.

[1]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург
[2]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

Твердые растворы антисегнетоэлектрик/сегнетоэлектрик (АСЭ/СЭ) демонстрируют большое количество различных нанонеоднородных состояний. В настоящей работе приводятся результаты комплексного исследования несоразмерных, модулированных и нанодоменных структур в кристаллах $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ (PZT) методами рассеяния рентгеновского (синхротронного) излучения. Прослежено формирование антифазных доменов АСЭ-фазы, антифазных доменных границ и влияние на них электрического поля.

Введение

Антисегнетоэлектрики и их твердые растворы известны почти 70 лет. Долгое время основное внимание привлекали твердые растворы типа $PbZr_xTi_{1-x}O_3$ (PZT) в области морфотропных составов, демонстрирующих при комнатной температуре сегнетоэлектрические свойства и высокие значения пьезоэлектрических коэффициентов. В последние два десятилетия большой интерес стали вызывать соединения, являющиеся антисегнетоэлектриками при комнатной температуре. Причина – широкие перспективы практического применения подобных материалов в качестве:

- материалов для быстрых систем хранения электрической энергии конденсаторного типа;
- перспективных материалов для создания электрокалорических устройств;
- основы для систем хранения информации на нанодоменах и, в первую очередь, на доменных стенках.

Основой всех этих применений является крайне высокая «податливость» указанных материалов относительно внешних воздействий, обусловленная сложной мезоскопической структурой этих материалов.

Как устроен антисегнетоэлектрик $PbZrO_3$

Уникальные свойства материала связаны с формированием модулированных наноразмерных структур. Сначала рассмотрим чистый цирконат свинца (рис. 1). Откуда берется антисегнетоэлектричество в $PbZrO_3$?

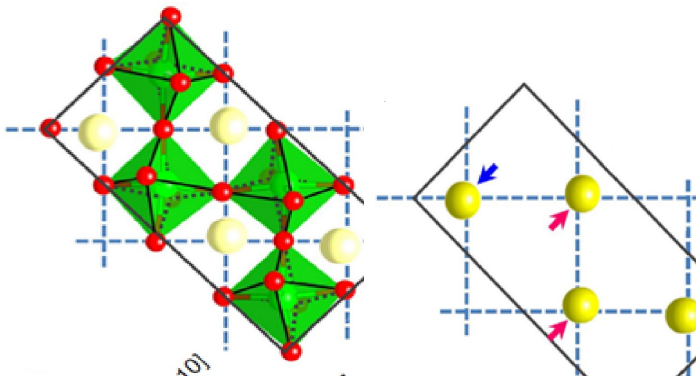


Рис. 1. В чистом $PbZrO_3$ возникает два параметра порядка – антисегнетоэлектрический и антиферродисторсионный

Нам удалось показать, что исходной неустойчивостью, как в большинстве перовскитов, является неустойчивость сегнетоэлектрической моды, которая, в свою очередь, за счет флексоэлектрического взаимодействия подавляет акустическую моду. В результате возникает неустойчивость в произвольной несоразмерной точке зоны Бриллюэна (рис. 2).

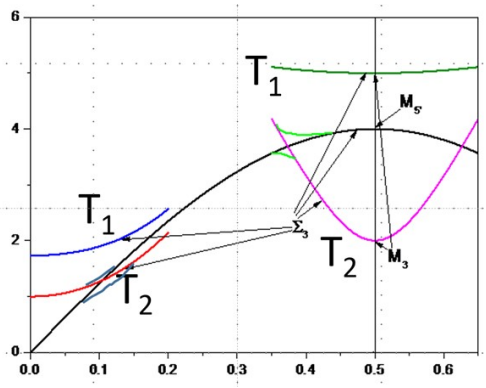


Рис. 2. Схема межмодового взаимодействия в $PbZrO_3$ и PZT. При температуре $T_2<T_1$ частота мягкой моды становится ниже частоты акустической ветви и неизбежно возникает межмодовое взаимодействие, приводящее к антикроссингу

Если мы напишем разложение термодинамического потенциала, то определяющим элементом является частота мягкой моды. Далее присутствует нормальный упругий вклад, а также два ключевых момента: дисперсия поперечных акустических ветвей и, самое главное, флексоэлектрическое взаимодействие, которое может привести к потере устойчивости и возникновению модулированной фазы.

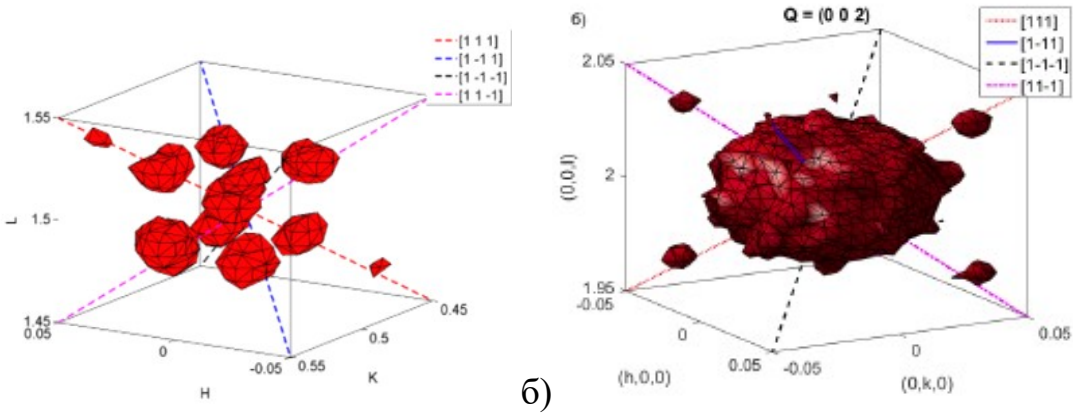
Ранее мы показали [1], что в антисегнетоэлектрике $PbZrO_3$ при нормальных условиях возникает учетверение в плоскости HK0. Если приложить высокое давление, то вместо этого сохраняются несоразмерные сверхструктурные отражения. Причем позиция динамической неустойчивости, как и должно быть при несоразмерном переходе, зависит от темпе-

ратуры. Таким образом, если фазовый переход в $PbZrO_3$ ранее рассматривался как нереализованный несоразмерный, то здесь реализуется истинный несоразмерный фазовый переход, и такая структура оказывается весьма лабильной ко всем внешним воздействиям.

В итоге, флексоэлектрическое взаимодействие сегнетоактивной ТО моды с поперечными акустическими колебаниями приводит к возникновению несоразмерной неустойчивости. В чистом $PbZrO_3$ umklapp-взаимодействие вызывает Lock-in-переход с формированием соразмерной АСЭ-структуры. В условиях приложения гидростатического давления реализуется несоразмерный переход [1].

Твердые растворы титаната-цирконата свинца (PZT)

Посмотрим теперь на цирконат-титанат свинца с малым содержанием титана. У этого соединения достаточно сложная фазовая диаграмма: между парафазой и антисегнетофазой существует промежуточная фаза, которая характеризуется иногда как сегнетоэлектрическая, а чаще как несоразмерная (ICM), в которой возникает набор сверхструктурных отражений. Образуется сложная модулированная структура, которая, как мы ожидаем, будет весьма лабильна к внешним воздействиям [2]. Сначала проявляется сложная система сателлитных отражений в районе M-точек, говорящая о существовании несоразмерной фазы (рис. 3), затем возникает антисегнетоэлектрическое состояние, которое тоже является не вполне однородным.



а) б)

Рис. 3. Система сателлитных отражений в окрестности M-точки (а) и основного брэгговского пика (б)

Мы переходим из парафазы, где наблюдаются стержни диффузного рассеяния, связанные со смягченной акустикой, за счет флексоэлектрического взаимодействия [2], и теперь возникает набор сателлитов в окрестности M-точки. При дальнейшем охлаждении эти сателлиты постепенно исчезают, и вместо них возникают острые пики в позициях (¼¼0), происходит фазовый переход в антисегнетоэлектрическую фазу. Возникли новые сателлиты, но вокруг (что очень важно) возникают стержни диффузного рассеяния.

Мы произвели моделирование и подтвердили, что такая сложная структура сателлитов связана с возникновением несоразмерной структуры, которая может быть описана набором двух волновых векторов [3].

Что происходит в антисегнетоэлектрической фазе? В этой фазе, оказывается, тоже могут возникать антифазные домены, что приводит к наноразмерной модуляции решетки. Впервые это было показано в электронно-микроскопических исследованиях швейцарской группы из EPFL [4]. Но такие измерения весьма сложны и дают только локальную картину смещений и не позволяют проследить температурные и полевые зависимости формирующейся доменной структуры.

Нами были проведены исследования рассеяния в твердых растворах $PbZr_xTi_{1-x}O_3$, на рис. 4 приведены данные для PZT с 2.4 % титаната свинца. Видим, что могут возникать стержни диффузного рассеяния, которые можно однозначно соотнести с антифазными доменными стенками размером 4x40 нм. Их особенность заключается в том, что они полярны, и характерные размеры такого полярного объекта составляет порядка 4 нм.

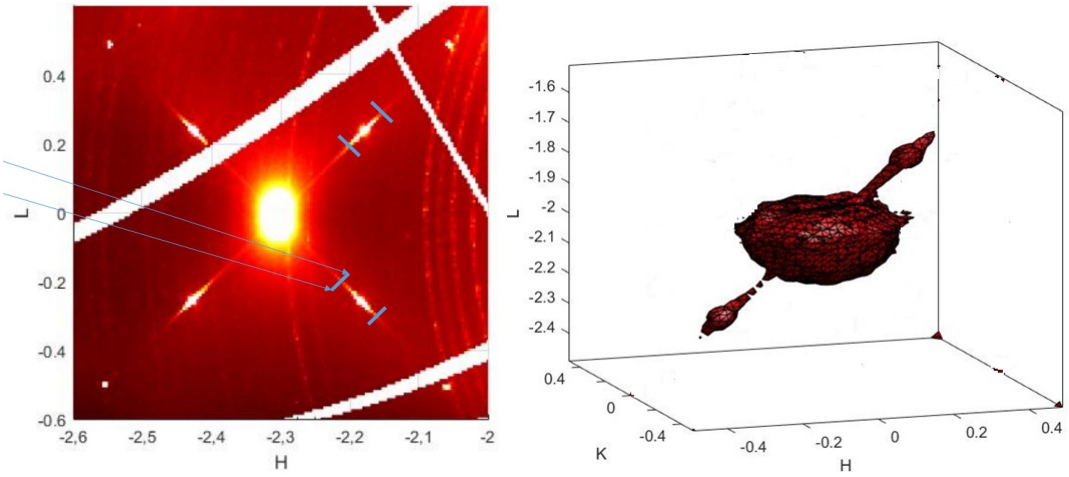
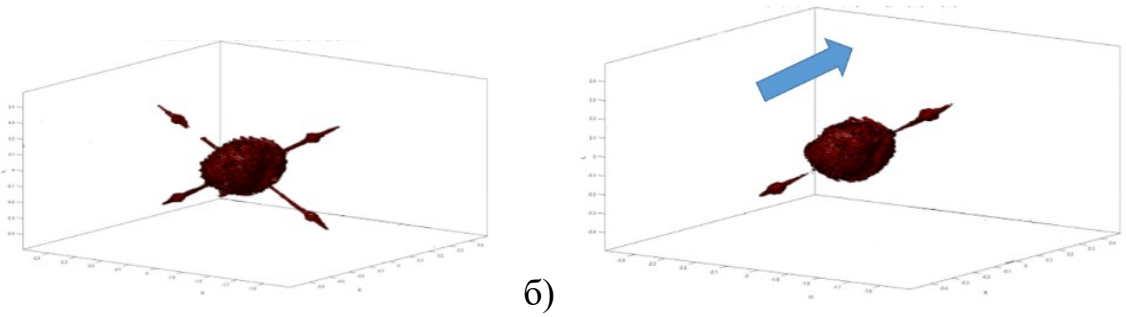


Рис. 4. Появление стержней диффузного рассеяния, объясняющих возникновение антифазных доменных стенок размером 4×40 нм

Нам удалось показать, что эти полярные антифазные доменные границы могут быть ориентированы в заданном направлении при охлаждении в приложенном электрическом поле. В отсутствие электрического поля мы имеем равномерное заселение антисегнетоэлектрических доменных состояний с равной вероятностью, что подтверждается приблизительно равным интенсивностями сверхструктурных отражений и стержней диффузного рассеяния (рис. 5а). В то же время охлаждение в поле всего 5 кВ/см (поле переключения 25 кВ/см) приводит к тому, что выживает только одно семейство антисегнетоэлектрических доменов и только одно семейство полярных доменных стенок (рис. 5б).



а) б)

Рис. 5. Возникновение ориентированной системы полярных нанообьектов в отсутствие эл. поля (а) и при охлаждении в эл. поле 5 кВ/см

Заключение

В твёрдых растворах PZT в антисегнетоэлектрической фазе формируются полярные антифазные доменные границы шириной порядка 4 нм, которые могут быть ориентированы в заданном направлении при охлаждении и приложении электрического поля. В твердых растворах антисегнетоэлектриков группы PZT возникает сложная система модулированных и несоразмерных структур, которые весьма лабильны относительно внешних воздействий, что и определяет их высокую перспективу для практического использования.

Литература

1. Burkovsky R.G., Bronwald Yu., Andronikova D. et al. Critical scattering and incommensurate phase transition in antiferroelectric $PbZrO_3$ under pressure // Scientific Reports. 2017. Vol. 7. P. 41512.
2. Andreeva N.V., Pertsev N.A., Andronikova D.A. et al. Domain structures and correlated out-of-plane and in-plane polarization reorientations in $Pb(Zr_{0.96}Ti_{0.04})O_3$ single crystal via piezoresponse force microscopy // AIP Advances. 2016. Vol. 6. P. 095211.
3. Vakhrushev S.B., Andronikova D., Bronwald Iu. et al. Electric field control of antiferroelectric domain pattern // Physical Review B. 2021. Vol. 103. P. 214108.
4. Wei X.K., Tagantsev A., Kvasov A. et al. Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials // Nature Communications. 2014. Vol. 5. P. 3031.

NANOHEMOGENEOUS STRUCTURES IN SOLID SOLUTIONS OF ANTIFERROELECTRICS AND THEIR DYNAMIC NATURE

Filimonov A.V., Vakhrushev S.B.

[1]Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg
[2]Ioffe Institute, St. Petersburg

Antiferroelectric/ferroelectric (AF/FE) solid solutions exhibit a large number of different nanoinhomogeneous states. This paper presents the results of a comprehensive study of incommensurate, modulated and nanodomain structures in PbZr1-xTixO3 (PZT) crystals by X-ray (synchrotron) radiation scattering. The formation of antiphase domains of the AF/FE phase and the effect of an electric field on them are traced.

УДК 535.36 25-10

ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ УПОРЯДОЧЕННОСТИ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ ДВУМЕРНОГО МАССИВА НА ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА ТОНКОПЛЁНОЧНЫМИ КОМПОЗИТНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Мискевич А.А., Лойко Н.А., Лойко В.А.

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск

Разработан полуаналитический метод определения поглощения света композитными структурами, содержащими двумерный массив (монослой) сферических частиц, учитывающий многократное рассеяние волн в рамках квазикристаллического приближения (ККП). Исследовано влияние пространственной упорядоченности частиц на коэффициенты поглощения структуры. Проведено сравнение результатов расчётов с данными моделирования в рамках численного метода конечных элементов (МКЭ).

В работах [1-3] предложен метод описания оптических свойств монослоя сферических частиц (светопоглощающих или непоглощающих) в *непоглощающей* среде. В [4] и [5] он развит на случай описания рассеивающих и поглощающих свойств системы «монослой сферических частиц в *поглощающей* среде» и коэффициентов поглощения частиц монослоя и матрицы, в которой они распределены, при падении под произвольным углом плоской волны с произвольной поляризацией (рис. 1). Метод учитывает многократное рассеяние в рамках квазикристаллического приближения (ККП). В данной работе метод [4, 5] использован для расчёта коэффициента поглощения A_p частиц массива и коэффициента поглощения A_h среды (матрицы), в которой они находится, и исследовано влияние пространственной упорядоченности частиц на эти коэффициенты. Схематическое изображение монослоя, находящегося в светопоглощающей среде, геометрии его освещения и рассеяния света приведены на рис. 1.

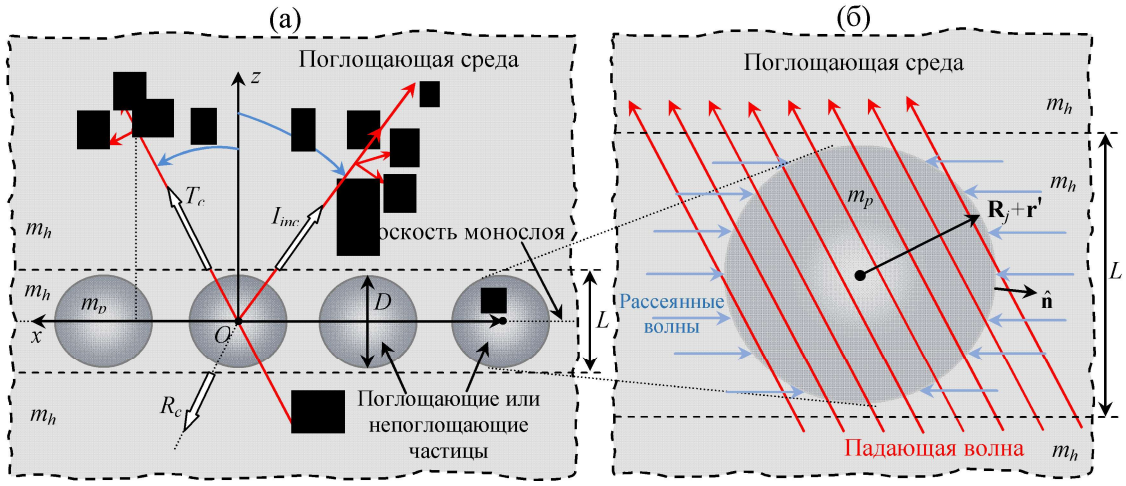


Рис. 1. (а) – монослой сферических частиц в поглощающей среде (матрице) и геометрия освещения и регистрации излучения, (б) – отдельная частица монослоя, находящаяся в «эффективном» поле, образованном падающей волной и волнами, рассеянными всеми частицами монослоя. m_h и m_p – комплексные показатели преломления среды и частиц, $\mathbf{R}_j$ и $\mathbf{R}_j+\mathbf{r}'$ – радиус-векторы центра и элементарной площадки на поверхности j-й частицы относительно начала координат O, находящегося в центре произвольно выбранной частицы, $\hat{\mathbf{r}}_0,\hat{\boldsymbol{\theta}}_0,\hat{\boldsymbol{\varphi}}_0$ и $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, $\hat{\boldsymbol{\varphi}}$ – единичные векторы в направлениях волнового вектора падающей, $k_h\hat{\mathbf{r}}_0$, и рассеянной, $k_h\hat{\mathbf{r}}$, волн, θ_0 и θ – полярные углы падения и рассеяния, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки наблюдения, T_c и R_c – коэффициенты когерентного пропускания и отражения системы, состоящей из монослоя частиц с диаметром D и слоя матрицы с толщиной L. I_{inc} – интенсивность некогерентно рассеянного излучения

С использованием этих коэффициентов получены описания углового распределения рассеянного излуче $I_{inc,0}^{rd}(\hat{\mathbf{r}})e^{-2xq\beta_h(1+1/|\mu|)}$, коэффициентов когерентного про $T_{c,0}\ e^{-4xq\beta_h}$ и отражения $R_c = R_{c,0}e^{-4xq\beta_h}$, некогерентного ра $\int \mathrm{d}\varphi \int I_{inc}^{rd}(\hat{\mathbf{r}}) \sin\theta \,\mathrm{d}\theta$, поглощения A=1–T_c–R_c–F_{inc} выделенн толщины L (Рис. 1), содержащего монослой, где

$$I_{inc,0}^{rd}(\theta,\varphi) = \frac{\eta\, S_2(\sin\theta)}{\pi x^2\left(1+\beta_h^2\right)} \times$$

$$\times \left\{ \left| \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l+1)}{l(l+1)} \left[\left(\varepsilon_x \cos\varphi + \varepsilon_y \sin\varphi\right) \left(\pi_l^{(1)}(\mu) d_{lM} + \tau_l^{(1)}(\mu) \right.\right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.\left. + \left| \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l+1)}{l(l+1)} \left[\left(\varepsilon_y \cos\varphi - \varepsilon_x \sin\varphi\right) \left(\tau_l^{(1)}(\mu) d_{lM} + \pi_l^{(1)}(\mu \right.\right.\right.\right.\right.\right.\right.$$

$$R_{c,0} = \left(\frac{\eta}{x^2(1+i\beta_h)^2}\right)^2 \left|\sum_{l=1}^{\infty}(-1)^l(2l+1)(d_{lM} - d_{l}\right.$$

а также коэффициента поглощения частиц A_p монослоя

$$A_p = \frac{2\eta n_h \mu_h e^{-2x\beta_h q}}{x^2 \mu_p} \times$$

$$\times \mathrm{Im}\left[\frac{1}{m_p}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{[l(l+1)]^2}{(2l+1)}\left(|d_{lM}|^2\left|b_{lM}^{-1}\right|^2\tilde{\Psi}_l\tilde{\Psi}_l^{*} - |d_{lE}|^2\left|b_{lE}^{-1}\right|^2\right.\right.$$

и среды (матрицы) A_h=A–A_p, в которой они расположены. В μ=cosθ, β_h=κ_h/n_h, η – фактор заполнения монослоя, x=πDn, дифракции частицы, λ и ε_x, ε_y – длина и компоненты вектор падающей волны, r=|**r**|, S_2 – структурный фактор монослоя

На рис. 2 показано влияние пространственной организации частиц в монослоях на спектры коэффициентов поглощения систем, состоящих из монослоёв частиц серебра (Ag), кристаллического кремния (c-Si) и оксида титана (TiO_2) в слабопоглощающей среде при разных факторах заполнения η монослоёв, рассчитанные с использованием разработанного подхода. Представлены результаты для частично упорядоченных монослоёв и монослоёв с неидеальной треугольной решёткой. РФР, описывающие распределение частиц в таких монослоях для рассмотренных η, показаны на рис. 2(г). Использование сильно упорядоченных монослоёв позволяет значительно увеличить коэффициенты A_h и отношения $\frac{A_h}{A_h^{et}}$ системы в узких интервалах решёточных резонансов (A_h^{et} – коэффициент поглощения матрицы той же толщины без частиц). Параметры упорядоченных монослоёв выбраны так, чтобы в диапазоне 0.6 мкм≤λ≤0.7 мкм был пик A_h. На рис. 2(в) показаны отношения коэффициентов A_h для рассмотренных упорядоченной (A_h^{tri}) и частично упорядоченной (A_h^{po}) систем: $\frac{A_h^{tri}}{A_h^{po}}$. Видно, что в областях резонансов в системах, содержащих сильно упорядоченные монослои, можно получить значительно большие значения коэффициентов A_h (более чем в 6 раз) и отношений $\frac{A_h}{A_h^{et}}$ ($\frac{A_h}{A_h^{et}} \approx 25$), чем в системах, содержащих частично упорядоченные монослои, а отношения $\frac{A_h^{tri}}{A_h^{po}}$ могут превышать 5 для разных материалов частиц. Это обусловлено резонансным

взаимодействием излучения с упорядоченными структурами, в которых наряду с резонансами на отдельных частицах реализуются и решёточные резонансы. В работах [1-6] показано, что, как правило, упорядоченный монослой частиц поглощает больше энергии падающего излучения, чем частично упорядоченный. Рис. 2 показывает, что в областях резонансов имеют место подобные закономерности для поглощения средой, в которой расположены упорядоченные монослои ($\frac{A_h^{tri}}{A_h^{po}} > 1$). Вне этих областей имеет место обратное соотношение: как правило, $\frac{A_h^{tri}}{A_h^{po}} < 1$. Этот результат коррелирует с данными работы [7].

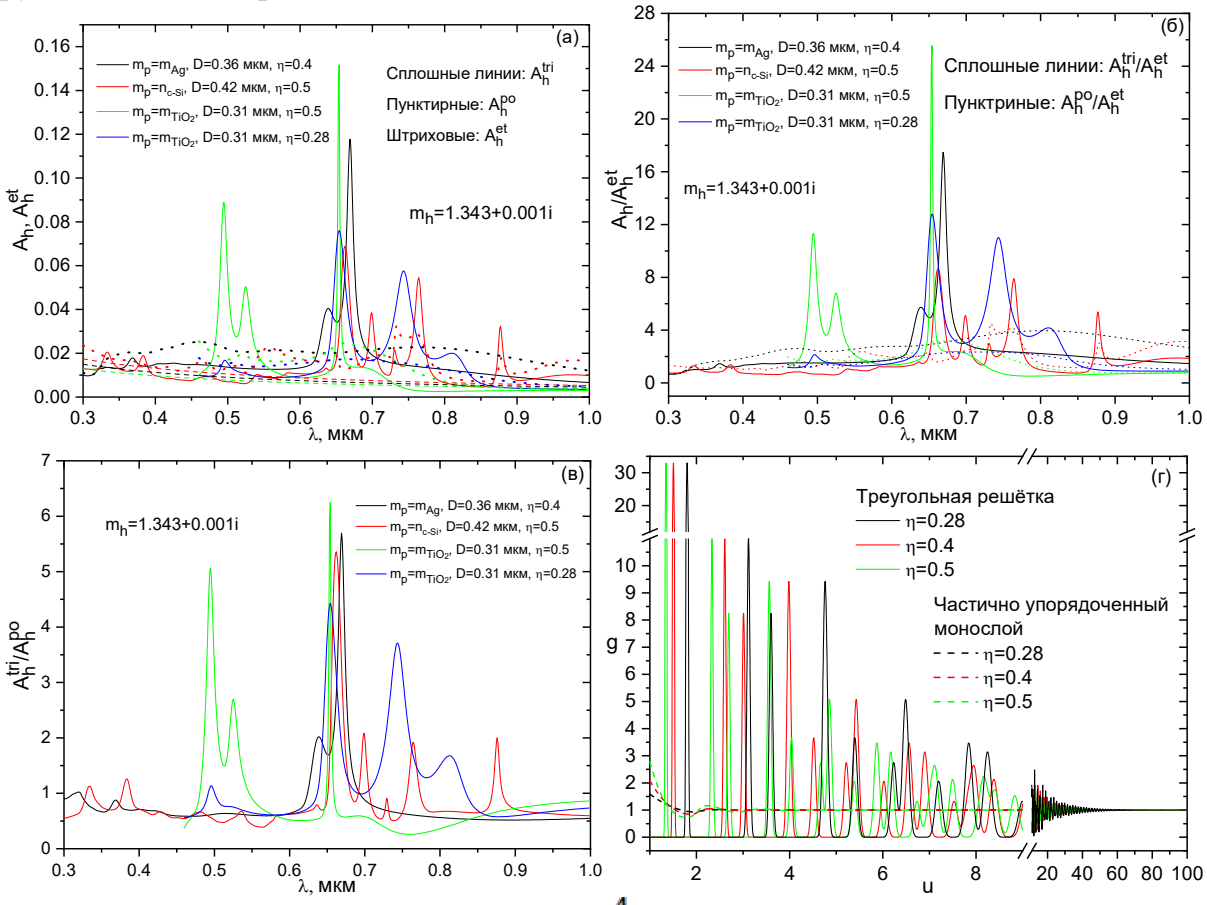


Рис. 2. Спектры (а) A_h, A_h^{et} и (б) $\frac{A_h}{A_h^{et}}$ системы, состоящей из монослоя в среде с m_h=1.343+0.001i, (в) $\frac{A_h^{tri}}{A_h^{po}}$. $m_p=m_{Ag}$, $m_p=m_{c\text{-}Si}$, $m_p=n_{TiO_2}$. θ_0=0°, $L=D$. (г) РФР рассмотренных монослоёв, η=0.28, 0.4, 0.5

Проведено сравнение результатов расчётов в рамках разработанного подхода коэффициента поглощения A_p^{tri} треугольной решётки из наночастиц Ag, находящегося в непоглощающей среде, с данными численного метода конечных элементов (МКЭ), рассчитанными в Comsol, и получено их отличное совпадение, в том числе в области решёточного резонанса (рис 3).

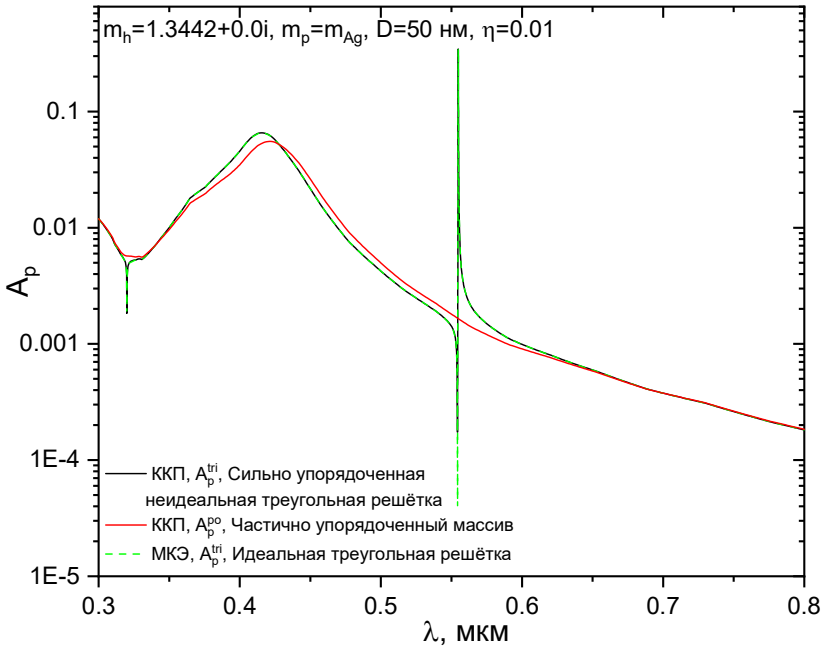


Рис. 3. Спектры коэффициентов поглощения A_p^{tri} и A_p^{po} массивов частиц Ag в среде с m_h=1.3442+0i, рассчитанные в рамках разработанного подхода (ККП) и МКЭ (для идеальной решётки). η=0.01, D=50 нм

Как видно из рис. 3, максимум решёточного резонанса (λ≈0,555 мкм) в спектрах поглощения сильно упорядоченных массивов наночастиц может быть значительно больше максимума плазмонного резонанса (λ≈0,415 мкм), слабо зависящего от упорядоченности слоя. С ростом степени разупорядоченности решётки пик решёточного резонанса (λ≈0,555 мкм) монотонно уменьшается и исчезает, а спектр приближается к спектру частично упорядоченного монослоя (красная линия на рис. 3).

Литература

1. N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Incoherent component of light scattered by a monolayer of spherical particles: analysis of angular distribution and absorption of light, JOSA A 35, 108–118 (2018).

2. N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Scattering and Absorption of Light by a Monolayer of Spherical Particles under Oblique Illumination, JETP 131, 227-243 (2020).

3. N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Polarization of light scattered by a two-dimensional array of dielectric spherical particles, JOSA B 38(9), C22-C32 (2021).

4. N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Optical characteristics of a monolayer of identical spherical particles in an absorbing host medium, JOSA A 40, 682-691 (2023).

5. N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Light absorption by a planar array of spherical particles and a matrix in which they are embedded: statistical approach, J. Opt. Soc. Am. A 41, 1-10 (2024).

6. Н.А. Лойко, А.А. Мискевич, В.А. Лойко, Оптический отклик композитной системы “монослой сферических частиц в поглощающей матрице” при падении плоской волны по нормали, ЖПС 90, 299-309 (2023).

7. K. Vynck, M. Burresi, F. Riboli, D. S. Wiersma, “Photon management in two-dimensional disordered media,” Nat. Mater. 11, 1017–1022 (2012).

INFLUENCE OF SPATIAL ORDERING OF SPHERICAL PARTICLES OF TWO-DIMENSIONAL ARRAY ON LIGHT ABSORPTION BY THIN-FILM COMPOSITE NANOSTRUCTURES

Miskevich A.A., Loiko N.A., Loiko V.A.

Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, Minsk

Semi-analytical method has been developed to determine light absorption by composite structures, containing the two-dimensional array (monolayer) of spherical particles, taking into account multiple scattering of waves in the framework of the quasi-crystalline approximation (QCA). The influence of spatial ordering of particles on the absorption coefficients of structure is studied. The comparison was made of calculation results with the simulation data of the numerical finite element method (FEM).

УДК 539.216.2:546.24 25-11

ПРОЦЕССЫ ПАМЯТИ И ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ДВУХ- И ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ

Троян Е.Ф.[1], Смирнов А.Г.[1], Степанов А.А.[1], Жовнерик Н.В.[1], Сун Хиао Вей[2], Лиу Женгбиао[2]

[1]Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск
[2]Южный университет науки и технологий, Шеньчжень
troevfe@gmail.com

В предлагаемой статье представлена теоретическая модель для анализа процессов памяти и переключения в тонкопленочных структурах на основе двух- и трехкомпонентных халькогенидов, представлены результаты экспериментального исследования влияния введения модифицирующего элемента, изоморфного с одним из основных компонентов халькогенидного полупроводника, с целью примесного замещения и изменения электрофизических свойств исследуемых материалов. Анализируется возможность создания тонкопленочных энергонезависимых элементов памяти на их основе.

Ключевые слова: *тонкопленочные структуры, теллур, халькогенидные соединения, PCM, процессы переключения и памяти.*

Введение

Тонкопленочные структуры на основе двух- и трехкомпонентных халькогенидов могут переключаются из состояния с высоким сопротивлением («OFF-state») в состояние с низким сопротивлением («ON-state») при определенном пороговом напряжении. При этом возможно: а) **пороговое переключение**, когда структура возвращается в «OFF-state» состояние сразу же после снятия приложенного напряжения; б) **переключение с памятью**, когда «ON-state» состояние сохраняется длительное время даже после снятия приложенного напряжения, т.е. реализуется так называемая энергонезависимая память (nonvolatile memory). Для этих целей широко используются халькогенидные материалы с фазовым переходом (PCM). Используемые PCM материалы, как правило, представляют собой стекла на основе теллура, к наиболее перспективным из которых можно отнести полупроводниковые соединения типа $Ge_2Sb_2Te_5$, $GeTe$, Sb_2Te_3, $GeSb_2Te_4$, $GeSbTe_7$ и др., лежащие на линии квазибинарного разреза $GeTe$ - Sb_2Te_3. Сегодня актуальной задачей, решение которой имеет важное научное и практическое значение, является переход от разработки и создания экспери-

ментальных образцов матриц элементов энергонезависимой памяти к их экономически обоснованному широкомасштабному производству.

Теоретическая модель эффектов переключения и памяти в тонкопленочных структурах халькогенидных полупроводников

Нами предложена теоретическая модель эффектов переключения и памяти в тонкопленочных структурах халькогенидных полупроводников [1], которая позволила установить оптимальные условия формирования элементов памяти с заданными электрическими параметрами. Эта модель базируется на предположении, что в момент переключения в открытое состояние «ON-state» в активной области тонкопленочных элементов формируется узкая кристаллическая зона из высокопроводящих метастабильных дихалькогенидных кластеров $AlTe_2$ с метавалентными связями, направленными вдоль линий внешнего электрического поля, в которых сохраняется остаточная внутренняя поляризация P_{in}:

$$P_{in} = -kU_{hold},$$

где, k – коэффициент пропорциональности, связанный с диэлектрической проницаемостью активного материала, U_{hold} – напряжение удержания элемента в низкоомном состоянии. Если эти предположения верны, то полученные метастабильные дихалькогенидные кластеры $AlTe_2$ могут быть «удержаны» и зафиксированы, как структурные образования при комнатной температуре не только внешним, но и внутренним полем той же или большей величины, но с противоположно направленным вектором. Это так называемый эффект фиксированной «**индуцированной поляризации**». В связи с этим мы пришли к выводу, что необходимо формировать дополнительные слои активного материала, окружающие данные метастабильные дихалькогенидные кластеры, в которых возможен эффект стабильно-фиксированной («индуцированной») поляризации с $P_{ind} \geq P_{in}$. Только в этом случае будет наблюдаться эффект памяти. И, наоборот, когда в слоях активного материала стабильно-фиксированная поляризация отсутствует или мала, то при уменьшении внешнего напряжения ($U \leq U_{hold}$) будет наблюдаться эффект переключения. Известно [2], что такими свойствами обладают сегнетоэлектрические пленки $SnTe$ и $GeTe$. Для проверки предлагаемой модели были проведена ЯМР-спектроскопия специально подготовленных для этого образцов элементов памяти (исследовалась многослойная тонкопленочная структура $Al - Te - SnTe - TeO_2 - SnTe - Me$, в которой Me – это *Ni*, *Cr* или *Mo*), находящаяся в «OFF- state» и «ON-state» состояниях. ^{27}Al ЯМР спектры с частотой вращения 14 кГц под магическим углом MAS были записаны с помощью широкоугольного спектрометра Brucer AVANCE III мощностью 16,4 T с использованием зондовой головки HXY диаметром 3,2 мм. Данные ЯМР спектры приведены на рис. a, b.

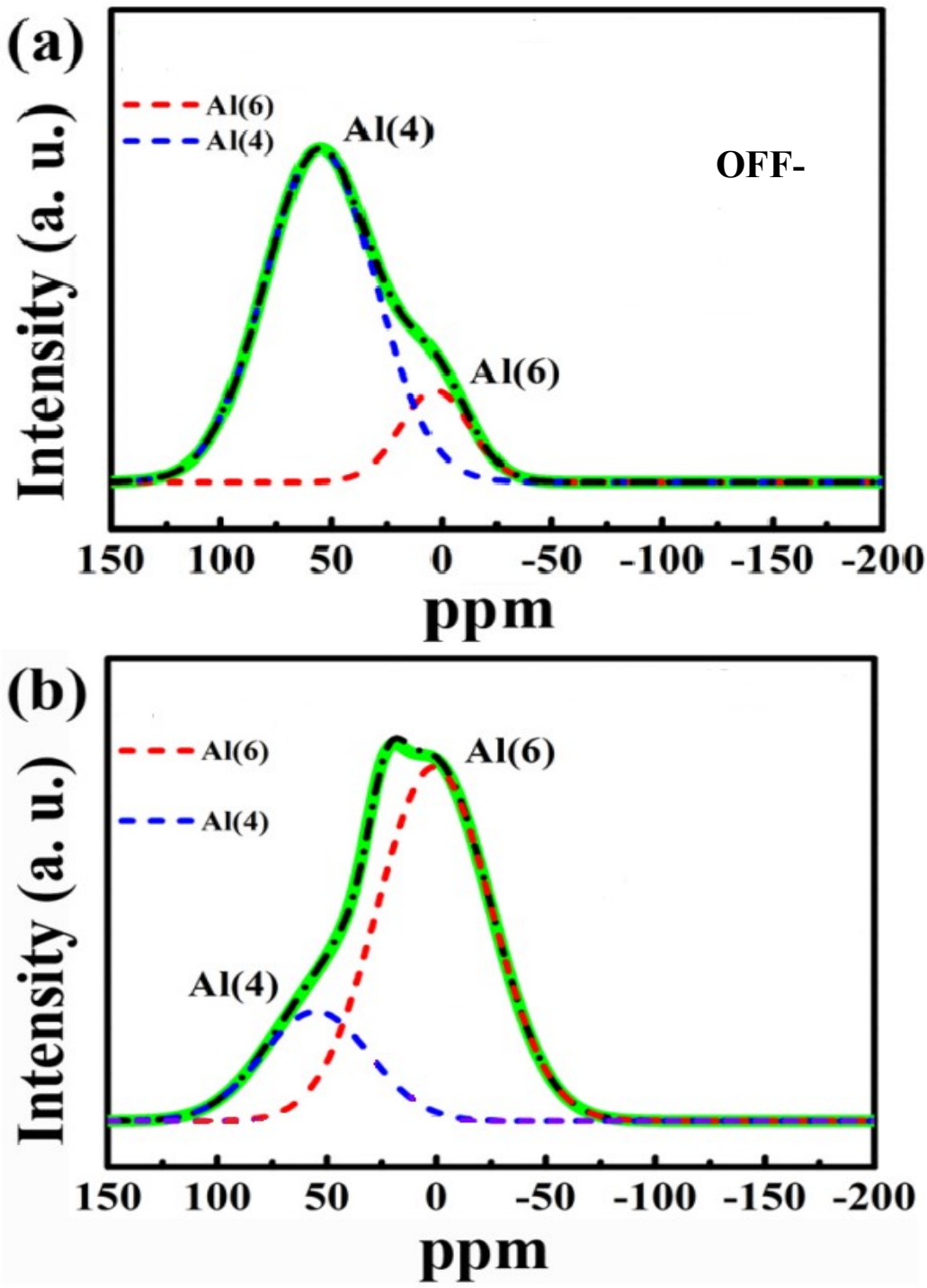


Рис. a, b. ^{27}Al ЯМР спектры образцов элементов памяти, находящихся в «OFF- state» (a) и «ON-state» состояниях (b)

Экспериментальные результаты

Экспериментально исследовано влияние введения модифицирующего элемента, изоморфного с одним из основных компонентов халькогенидного полупроводника, с целью примесного замещения и изменения электрофизических свойств исследуемых материалов. С этой точки зрения перспективной модифицирующей примесью является алюминий Al , изоморф-

ный со Sb [4, 5]. В связи с этим мы исследовали возможность управления электрофизическими свойствами указанных материалов путем введения различной концентрации модифицирующей примеси Al в пленки *Te*.

Первоначально была изготовлена многослойная тонкопленочная структура: $Al - Te\,(1) - TeO_2 - Te\,(2) - Me$ (где, Me – это *Ni*, *Cr* или *Mo*). Окисел теллура получали напуском воздуха в вакуумную камеру после осаждения первого слоя теллура *Te* (1). Известно [1], что материал нижнего электрода Al, диффундируя в пленки *Te* может модифицировать его электрофизические свойства.

Сразу же после изготовления ВАХ такой структуры была линейна и достаточно высокоомна (с удельным сопротивлением (80,0…120,0 Ом·см). Через 1,5–2 часа ВАХ превращалась в диодную (прямая ветвь – минус на нижнем электроде). Еще приблизительно через час структура при напряжении 3,5–4,0 В переходила в низкоомное состояние с участком отрицательного дифференциального сопротивления. Изготовленный тонкопленочный элемент имел следующие характеристики **порогового переключения**: напряжение переключения из высокоомного («OFF-state») в низкоомное состояние («ON-state») составляло 3,5…4,0 В, удерживающее напряжение 1,1…1,2 В, отношение сопротивлений элементов в высокоомном (R_{OFF}) и низкоомном (R_{ON}) состояниях $R_{OFF}/R_{ON} = 10^3 \ldots 10^4$.

Для достижения **эффекта памяти** мы дополнительно напыляли сегнетоэлектрические пленки $SnTe$. Для этих целей была изготовлена и исследована тонкопленочная структура $Al - Te - SnTe - TeO_2 - SnTe - Me$, в которой Me – это Ni, Cr или Mo). В результате, нами был получен тонкопленочный элемент памяти с рекордно низкими временами переключения $t_{\text{пер.}} \leq$ 1 мкс и достаточно высоким временем хранения записанной информации $t_{\text{хр.}} \geq 15$ лет.

Из ЯМР спектров, приведенных на рис. (a, b) видно, что атомы Al претерпевают обратимые тетраэдрическо-октаэдрические перегруппировки во время фазового перехода (переключения из «OFF- state» в «ON-state»). Известно [3], что октаэдрическая координация атомов переходных металлов является характерной чертой полиморфных структур с металлическим типом проводимости, наблюдающихся в **дихалькогенидах** $MoTe_2, WTe_2, PtTe_2, VTe_2$ и др. Мы также полагаем, что наблюдаемые спектры подтверждают существование в «ON-state» таких дихалькогенидных кластеров, как $AlTe_2$. Эти метастабильные кластеры образуются в кристаллической фазе (шнуре проводимости) элементов памяти под воздействием сильного внешнего электрического поля ($E > 10^6$ В/см) и фиксируются как структурные образования при комнатной температуре индуцированным внутренним полем в сегнетоэлектрической пленке $SnTe$ той же или большей величины, но с противоположно направленным вектором.

Заключение

Основные выводы: а). Эффект **переключения** связан с образованием в тонкопленочных халькогенидных полупроводниках высокопроводящих метастабильных дихалькогенидных кластеров с метавалентными связями (шнур проводимости); б). Эффект **памяти** обусловлен индуцированием поляризационной фазы в окружающем шнур проводимости халькогенидном материале. Наведенная внутренняя поляризация удерживает шнур проводимости при отсутствии внешнего напряжения (эффект памяти).

Список литературы

1. Колосницын Б.С., Троян Е.Ф. /Эффекты памяти и переключения в тонкопленочных неупорядоченных халькогенидных полупроводниках/ Доклады БГУИР, №2 (104), 2017, стр.25-30.
2. Квятковский О.Е., Максимов Е.Г. /Микроскопическая теория динамики решетки. Природа сегнетоэлектрической неустойчивости в кристаллах/, Усп. Физ.Наук, т. 154, в.1, 1998, стр.3÷48.
3. Saif Siddique et al., /Emerging two-dimensional tellurides/, 2021, Elsevier Ltd., 247 p.
4. D.Pumlianmunga, K. Ramesh /Electrical switching in Sb doped AlTe glasses/, Journal of Physical and Chemistry of Solids, v. 2, 2017, p.17-21.
5. S. Asokan /Electrical Switching and Other Properties of Chalcogenide Glasses/, Journal of the Indian Institute of Science, v. 91:2, 2011, p. 11-14.

MEMORY AND SWITCHING PROCESSES IN THIN FILM STRUCTURES BASED ON TWO- THREE COMPONENT CHALCOGENIDES

Troyan Eugeniy[1], Smirnov Aliaksandr[1], Stsiapanau Andrey[1], Zhauneryk Mikita[1], Sun Xiao Wei[2], Liu Zhengbiao[2]

[1]Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk
[2]Southern University of Science and Technology (SUSTech), Shenzhen
troevfe@gmail.com

The proposed article presents a theoretical model for analyzing memory and switching processes in thin-film structures based on two- and three-component chalcogenides, presents the results of an experimental study of the effect of introducing a modifying element isomorphic to one of the main components of a chalcogenide semiconductor in order to impurity replace and change the electrophysical properties of the materials under study. The possibility of creating thin-film non-volatile memory elements based on them is analyzed.

Keywords: thin film structures, tellurium, chalcogenide alloys, PCM, switching and memory effects.

УДК 538.975 25-14

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ФАКТОРОВ НА МЕХАНИЗМЫ ПРОТЕКАНИЯ ТОКА В ПЛЕНКАХ ОКСИДА ЦИНКА, ЛЕГИРОВАННОГО АЛЮМИНИЕМ

Свистова Т.В.[1], Рембеза Е.С.[2], Кошелева Н.Н.[1], Белых М.А.[1], Конев М.Д.[1], Чурилов Д.В.[1]

[1]Воронежский государственный технический университет, Воронеж
[2]Воронежский государственный университет, Воронеж

Работа посвящена исследованию влияния температуры и газовой среды на механизмы токопереноса в пленках оксида цинка, легированного алюминием, синтезированных методом спрей-пиролиза из золь-геля. Установлено, что преобладающим механизмом протекания тока является объемный механизм Пула-Френкеля. При повышении температуры основным механизмом становится закон Мотта-Генри. Пары аммиака практически не влияют на механизм протекания тока, а в парах этилового спирта основным механизмом токопереноса становятся токи, ограниченные пространственным зарядом.

Основными физическими механизмами переноса носителей заряда в твердых телах являются: омические токи; токи, ограниченные пространственным зарядом (ТОПЗ); токи, определяемые надбарьерной (Шоттковской) эмиссией; объемный механизм Пула-Френкеля – усиленная электрическим полем ионизация примесных центров; туннельное прохождение электронов через тонкие слои изоляторов и полупроводников [1].

Целью данной работы было исследование влияния температуры, и газовой среды на механизмы токопереноса в пленках оксида цинка, легированного алюминием, синтезированных жидкостными методами.

Пленки оксида цинка, легированного алюминием 0,5–1 мол. %, были изготовлены методом спрей-пиролиза из золь-геля. Для приготовления золя использовались: дигидрат ацетата цинка ($Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$), пропанол, диэтиламин и наногидрат нитрата алюминия ($Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$). Пропанол и диэтиламин выполняют роль растворителя и стабилизатора соответственно. Для нанесения раствора создавался аэрозоль при помощи аэрографа OPHIR AC004A, имеющего сопло диаметром 0,3 мм, давление воздуха для аэрографа создавалось безмасляным поршневым компрессором AS186. Нанесение растворов методом спрей-пиролиза производилось на предметное стекло для микропрепаратов (ГОСТ 9284-75) размером 26×76×1 мм. Стеклянная подложка нагревалась ИК керамическим нагревательным элементом размером 245×60 мм. Подложка располагалась вдоль нагревателя по центру для того, чтобы добиться равномерного нагрева. Температура поверхности измерялась пирометром HoldPeak hp-1500. Нанесение пленок производилось при температурах 150–400 °С. Пленки

ZnO:Al (20, 40, 100, 200 и 260 слоев; 1 слой предполагает 1 проход аэрографа) были нанесены при температуре 400 °С.

Исследовались вольт-амперные характеристики (ВАХ) пленок оксида цинка, легированного алюминием (ZnO:Al). Вольт-амперные характеристики измерялись стандартным методом по точкам. Для измерения ВАХ использовалось следующее оборудование: два источника питания DC Power Supply HY 3005, мультиметр MASTECHMY64, а также стандартная измерительная ячейка [2].

Исследовались ВАХ пленки ZnO:Al (260 слоев) в атмосфере воздуха в интервале температур 20–200 °С в диапазоне напряжений от 0 до +30 В, измерения проводились с шагом напряжения 1 В (рис. 1).

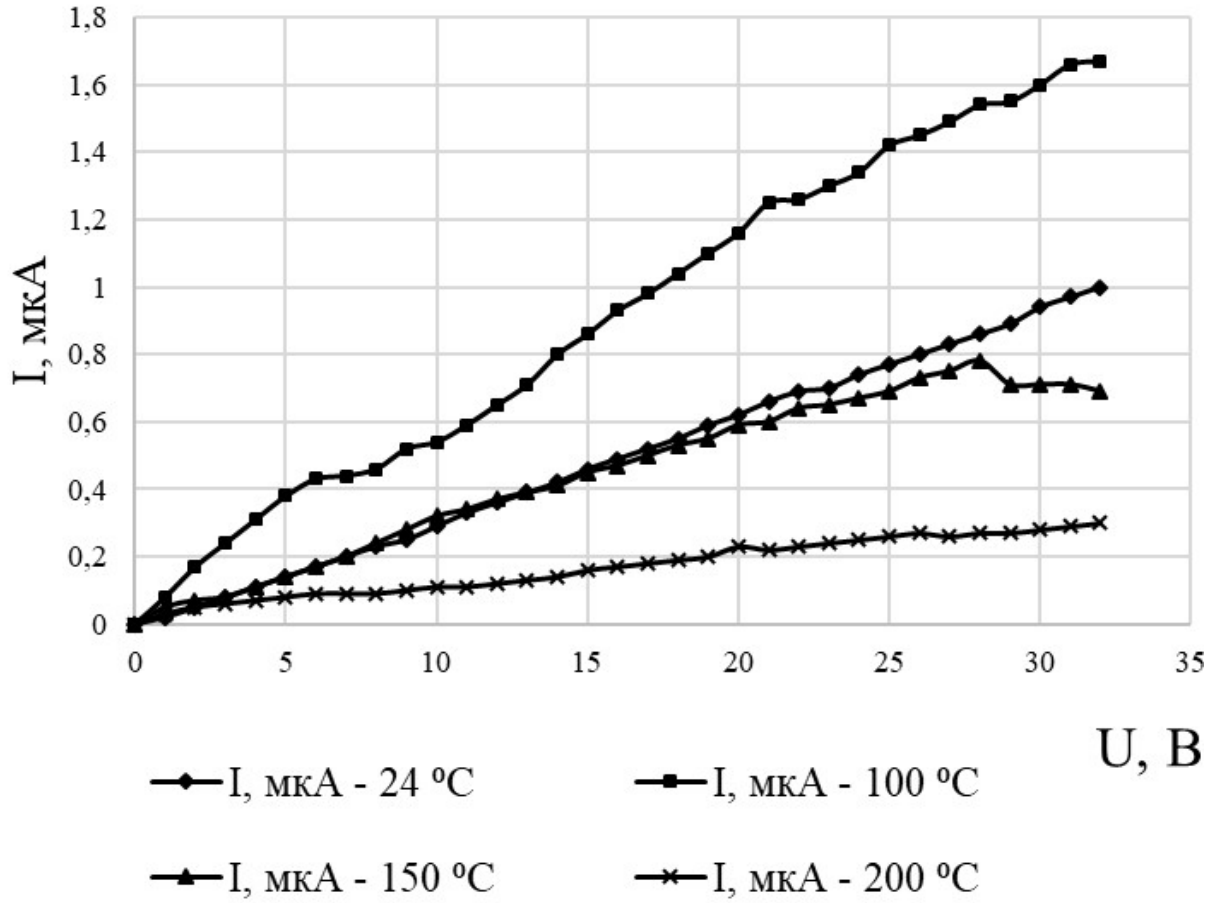


Рис. 1. Влияние температуры на вольт-амперные характеристики пленки ZnO:Al (260 слоев)

Исследовано влияние температуры на ВАХ пленки ZnO:Al (260 слоев). Установлено, что при комнатной температуре ВАХ имеет линейный характер. Наклон кривых изменяется с ростом температуры. При постоянном напряжении в атмосфере воздуха сила тока почти линейно увеличивается с ростом температуры от 20 до 100 °С, а в диапазоне от 100 до 200 °С нелинейно уменьшается (рис. 2).

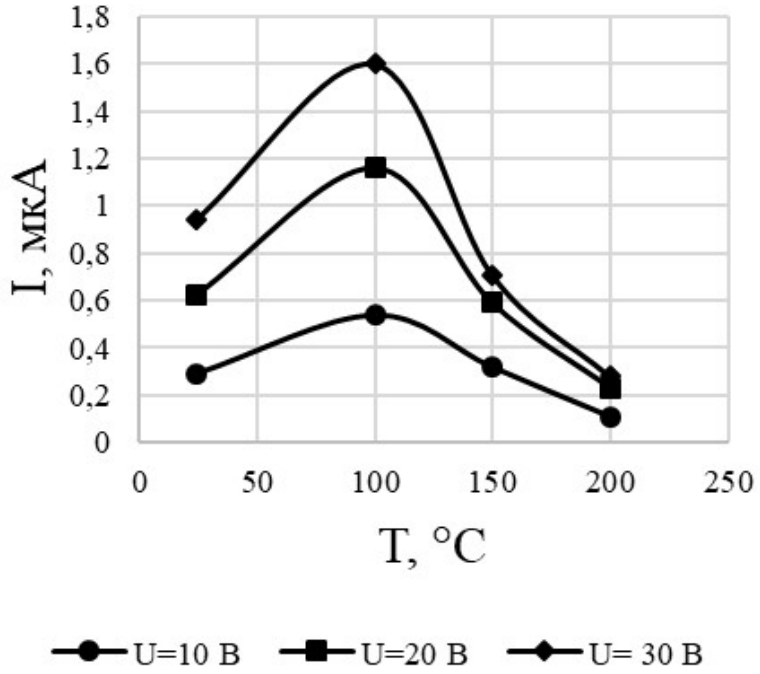


Рис. 2. Зависимость силы тока ВАХ
от температуры при постоянном напряжении

Для исследования влияния газовой среды на ВАХ пленок ZnO:Al, были измерены ВАХ на воздухе и в парах аммиака ($5{,}69 \cdot 10^3$ ppm) и этилового спирта ($3{,}47 \cdot 10^3$ ppm) в воздухе при 24 °С (рис. 3) [2].

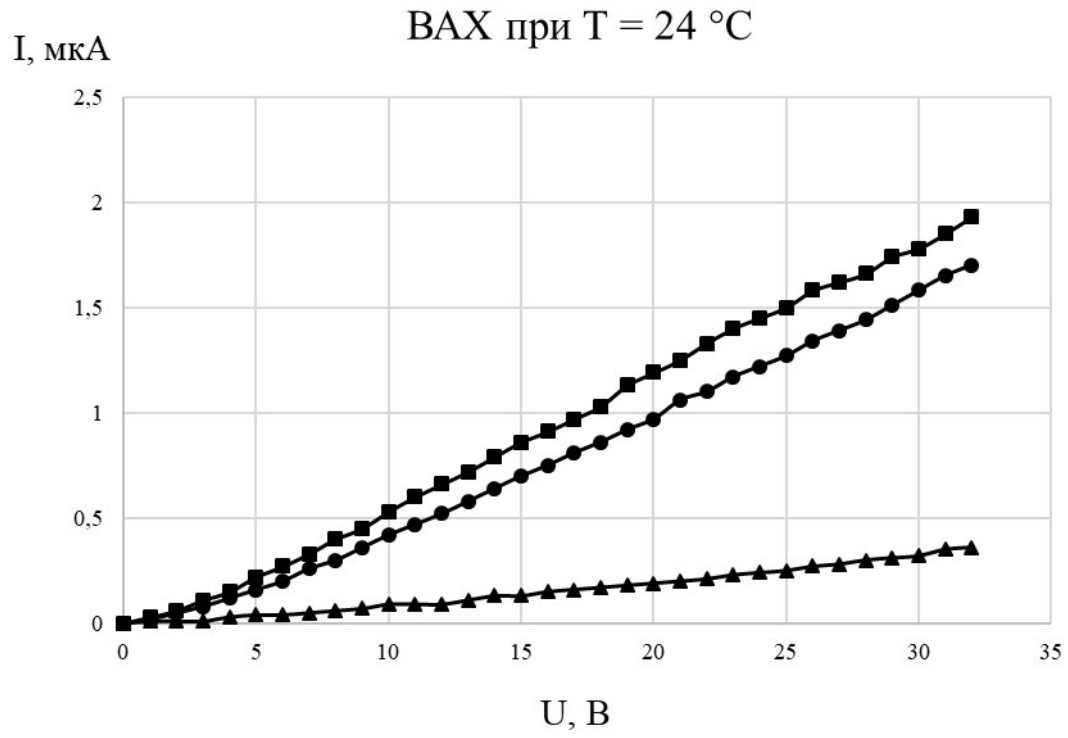


Рис. 3. ВАХ пленки ZnO:Al (260 слоев) на воздухе и в парах
различных веществ в воздухе при температуре 24 °С

Из рисунка видно, ВАХ пленок на воздухе и в парах этилового спирта и аммиака имеют различный угол наклона, что позволяет определить наличие газа в воздухе по ВАХ при комнатной температуре, величина газовой чувствительности по току составляет 1,14 отн. ед. для паров аммиака в воздухе и 5,36 отн. ед. для паров этилового спирта в воздухе. Величина газовой чувствительности по сопротивлению при температуре 100 °С для паров аммиака ($5{,}69 \cdot 10^3$ ppm) в воздухе 3,16 отн. ед., для паров этилового спирта ($3{,}47 \cdot 10^3$ ppm) в воздухе $S_g = 4{,}25$ отн.ед.

Для определения механизмов токопереноса в пленках ZnO:Al (260 слоёв) ВАХ были перестроены в координатах, соответствующих следующим механизмам токопереноса: закон Ома ($I/U = f(U)$); токи, ограниченные пространственным зарядом (ТОПЗ) ($\lg(I) = f(\lg(U))$; закон Мотта-Генри ($I/U^2 = f(U^2)$); токи, определяемые надбарьерной (Шоттковской) эмиссией ($\ln(I) = f(U^{1/2})$); объемный механизм Пула-Френкеля ($I/U^{1/2} = f(U^{1/2})$); туннельный механизм Фаулера-Нордгейма ($\ln(I/U^2) = f(1/U)$).

Анализ механизмов токопереноса в пленках ZnO:Al в атмосфере воздуха при различных температурах показал, что:

- при комнатной температуре (24 °С) основным механизмом токопереноса является объемный механизм Пула-Френкеля, при 100, 150 и 200 °С основным механизмом становится закон Мотта-Генри;

- с ростом температуры диапазон напряжений объемного механизма Пула-Френкеля уменьшается и переходит в область низких напряжений (от 0 до 3 В), а диапазон действия закона Мотта-Генри не изменяется, стабильно находится в интервале напряжений от 14 до 32 В и с ростом температуры становится основным за счёт уменьшения влияния объемного механизма Пула-Френкеля;

- при температуре 200 °С основным механизмом токопереноса в области низких напряжений (от 0 до 3 В) становятся токи, определяемые надбарьерной (Шоттковской) эмиссией; также при 200 °С они вносят вклад в диапазоне напряжений от 6 до 14 В.

Исследовано влияние газовой среды на механизмы токопереноса. Было установлено, что при комнатной температуре (24 °С) в воздухе и парах аммиака основной механизм токопереноса – объемный механизм Пула-Френкеля. В парах спирта при комнатной температуре действие объемного механизма Пула-Френкеля значительно уменьшилось (действует только в области малых напряжений) и основным механизмом токопереноса стали ТОПЗ.

Таким образом, установлено, что преобладающим механизмом протекания тока является объемный механизм Пула-Френкеля. При повышении температуры основным механизмом становится закон Мотта-Генри. Пары аммиака практически не влияют на механизм протекания тока, а в

парах этилового спирта основным механизмом токопереноса становятся токи, ограниченные пространственным зарядом (ТОПЗ).

Результаты исследования могут быть использованы в газовой сенсорике для определения рабочей температуры датчиков, при которой возможно распознавание сорта газа. Установлено, что наклон ВАХ с ростом температуры изменяется, что свидетельствует об изменении сопротивления ЧЭ и, что угол наклона ВАХ в парах различных веществ отличается от угла наклона ВАХ, измеренных на воздухе. Следовательно, по ВАХ можно судить о величине газовой чувствительности пленок, что позволяет изготовить датчики для определения этанола и аммиака в воздухе, работающие при комнатной температуре.

Литература

1. Тутов Е. А. Твердотельные сенсорные структуры на кремнии / Е.А. Тутов, С.В. Рябцев, А.В. Шапошник, Э.П. Домашевская. - Воронеж: ВГУ, 2010. - 231 с.

2. Свистова Т.В. Влияние различных факторов на механизмы токопереноса в пленках оксида цинка / Свистова Т.В., Конев М.Д., Чурилов Д.В., Белых М.А. // Твердотельная электроника, микроэлектроника и наноэлектроника: межвуз. сб. науч. тр. Воронеж: ВГТУ, 2024. Вып. 21. С. 7–14.

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF VARIOUS FACTORS ON THE MECHANISMS OF CURRENT FLOW IN FILMS ZINC OXIDE ALLOYED WITH ALUMINUM

Svistova T.V.[1], Rembeza E.S.[2], Kosheleva N.N.[1], Belykh M.A.[1], Konev M.D.[1], Churilov D. V.[1]

[1]Voronezh State Technical University (VSTU), Voronezh
[2]Voronezh State University (VSU), Voronezh

The work is devoted to the study of the influence of temperature and a gaseous medium on the mechanisms of current transfer in aluminum-doped zinc oxide films synthesized by spray pyrolysis from sol gel. It has been established that the predominant mechanism of current flow is the volumetric Poole-Frenkel mechanism. As the temperature increases, the Mott-Henry law becomes the main mechanism. Ammonia vapors have practically no effect on the mechanism of current flow, and in ethyl alcohol vapors, currents limited by spatial charge become the main mechanism of current transfer.

УДК 538.958 25-15

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КРИСТАЛЛОВ $CuInS_2$

Qasimoglu I.Q.[1], Hidiyev Kh.A.[1], Mamedova I.A.[1], Ragimov S.S.[1,2], Abdullayev N.A.[1,2]

[1]Институт физики Мин. науки и обр., Баку
[2]Бакинский государственный университет, Баку

Ряд характерных оптических параметров кристаллов $CuInS_2$ определены экспериментально методом спектральной эллипсометрии. Из эллипсометрических исследований в интервале энергий 0.7−6.5 eV оценены значения глубины скин слоя, энергии Урбаха, плазменной частоты и нелинейных оптических параметров кристаллов $CuInS_2$. В рамках модели одноэффективного осциллятора вычислены также энергия одиночного осциллятора и дисперсионная энергия.

Соединения I-III-VI_2 являются тройными аналогами известных соединений ZnS и CdS. $CuInS_2$, кристаллизуются в тетрагональную, халькопиритную структуру с пространственной группой $I\bar{4}2d$. С одной стороны, кристаллы $CuInS_2$ привлекают внимание исследователей в связи с высоким двупреломлением (large birefringence) и потому они потенциально интересны как нелинейные оптические материалы. С другой стороны, величина ширины запрещенной зоны $CuInS_2$ позволяет использовать эти кристаллы в качестве элементов эффективных солнечных фотоэлектрических преобразователей.

Для экспериментальных исследований был использован метод спектральной эллипсометрии, основанный на определении изменения состояния поляризации света при отражении от кристалла и являющийся одним из наиболее точных неразрушающих методов определения оптических характеристик кристаллов [1]. Из эллипсометрических исследований в интервале энергий 0.7−6.5 eV ранее нами были определены энергетические зависимости действительных и мнимых частей диэлектрической функции и оптической проводимости, дисперсия показателя преломления, коэффициентов экстинкции и поглощения [2]. В настоящей статье представлены результаты вычислений ряда других актуальных оптических параметров кристаллов $CuInS_2$.

Например, из спектральной зависимости коэффициента поглощения можно определить глубину скин слоя δ (глубину проникновения электромагнитного излучения вглубь образца), являющейся обратной величиной коэффициента поглощения α (рис. 1а). Как видно, в изучаемой области энергий величина δ уменьшается по мере возрастания энергии квантов от 1 до 0.01 мкм.

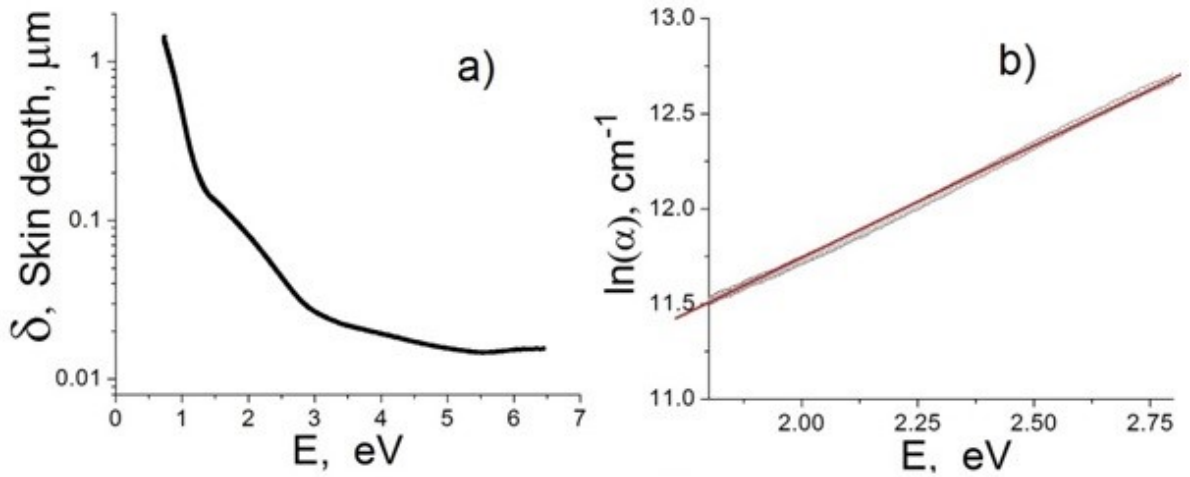


Рисунок 1. Спектральные зависимости: a) глубины скин слоя δ (a), b) ln(*α)*

Воспользовавшись зависимостью коэффициента поглощения от энергии фотонов, можно получить значение энергии Урбаха (Eu), которая обусловлена структурными нарушениями и возможными несовершенствами в $CuInS_2$. Связь между α и Eu определяется соотношением:

$$\alpha(h\nu)=\alpha_0 \exp(h\nu/E_u) \qquad (1)$$

На рис. 1b представлен соответствующий график ln(*α) vs. (hν)* и из угла наклона прямой была найдена энергия Урбаха, равная 0,85 eV.

Спектр показателя преломления анализировался нами с помощью модели одноэффективного осциллятора (single-effective-oscillator model), описанного в [3]:

$$n^2(h\upsilon)=1+\frac{E_{SO}\cdot E_d}{E_{SO}^2-(h\upsilon)^2}, \qquad (2)$$

где E_{SO} и E_d - энергия одиночного осциллятора и дисперсионная энергия, соответственно. Иначе (2) можно написать как

$$\left[n^2(h\upsilon)-1\right]^{-1}=\frac{E_{SO}^2-(h\upsilon)^2}{E_{SO}E_d}=\frac{E_{SO}}{E_d}-\frac{1}{E_{SO}E_d}(h\upsilon)^2 . \qquad (3)$$

Построение зависимости $(n^2-1)^{-1}$ vs. $(h\nu)^2$ (рис. 2a) позволит нам найти параметры осциллятора E_{SO} и E_d. Расчёты показали, что энергия одиночного осциллятора E_{SO}=8.1 eV, а дисперсионная энергия E_d=47 eV.

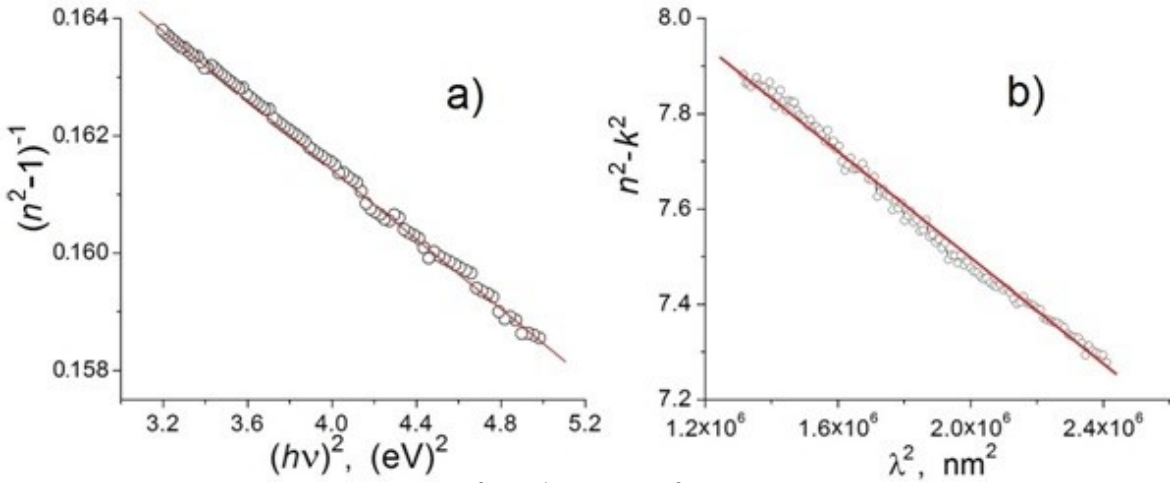


Рисунок 2. a) зависимость $(n^2\text{-}1)^{-1}$ vs. $(h\nu)^2$ для определения параметров осциллятора в рамках модели одноэффективного осциллятора, b) зависимость $(n^2–k^2)$ vs. λ^2 для определения плазменной частоты

При больших длинах волн ($n^2>>k^2$) действительная часть диэлектрической функции $\varepsilon_1=n^2–k^2$ описывается как [4]:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2 \cdot \lambda^2}{4\pi^2 c^2} = \varepsilon_\infty - a\lambda^2 \quad , \tag{4}$$

здесь ε_∞ - высокочастотная диэлектрическая постоянная, c – скорость света, ω_p – плазменная частота, определяемая выражением

$$\omega_p^2 = \frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{N}{m_e^*} \quad , \tag{5}$$

здесь e – элементарный заряд, ε_0 – диэлектрическая постоянная, равная $8.854\cdot10^{-12}$ F/m, N – плотность носителей заряда, m_e* - эффективная масса.

Из построенной зависимости $n^2 – k^2$ vs. λ^2 (рис. 2 b) линейной аппроксимацией из соотношения (4) определяются ε_∞=8.7, плазменная частота $\omega_p=1.5\cdot10^{15}$ rad/s и с учётом (5) $N/m_e^*=7.24\cdot10^{57}m^{-3}kg^{-1}$. Кроме того, величина высокочастотного показателя преломления ($n_0=\sqrt{\varepsilon_\infty}$) равна 2.95.

Выше было отмечено, что исследованные халькопириты являются перспективными материалами для использования в нелинейной оптике и поэтому вызывает интерес изучение нелинейных оптических свойств кристаллов $CuInS_2$. Нелинейный показатель преломления n_2, нелинейные восприимчивости первого порядка $\chi^{(1)}$ и третьего порядка $\chi^{(3)}$ могут быть вычислены из соотношений [5]:

$$\chi^{(1)} = \frac{n_0^2-1}{4\pi} \quad , \quad \chi^{(3)} = \frac{1.7\cdot10^{-10}}{(4\pi)^4}\left[n_0^2-1\right]^4 \quad , \quad n_2 = \frac{12\pi\chi^{(3)}}{n_0} \quad . \tag{6}$$

Выше было показано, что показатель преломления n_0=2.95, а n_0^2=8.7 и потому вычисления (6) дают значения $\chi^{(1)}$=0.61 *esu*, $\chi^{(3)}$=2.4·10^{-11} *esu* и n_2=3.1·10^{-10} *esu*.

Литература

1. Mamedova I.A., Jahangirli Z.A., and Abdullayev. N.A. Electronic Properties of $CdGa_2S_4$: Ab Initio Calculations and Experimental Studies by Spectral Ellipsometry. // Physics of the Solid State. – 2024. - Vol. 66, No. 10. - P. 365–374. https://link.springer.com/article/10.1134/S1063783424601310
2. Jahangirli Z.A., Qasimoglu I.Q., Hidiyev Kh.A., Mamedova I.A., Guliyev J.A., Ragimov S.S., Mammadov T.G., and Abdullayev N.A. Ab Initio Calculations and Experimental Spectral Ellipsometry Study of the Electronic Properties of $CuInS_2$ Crystals. // Physics of Wave Phenomena. - 2025. – Vol. 33, No. 1 - P. 36–45. https://doi.org/10.3103/S1541308X24700511.
3. Wemple S.H., DiDomenico M. Behavior of the electronic dielectric constant in covalent and ionic materials. // Phys. Rev. B. – 1971. - Vol. 3. – P. 1338–1351. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.3.1338.
4. Belgacem S., Bennaceur R. Propriétés optiques des couches minces de SnO_2 et $CuInS_2$ airless spray. // Rev. Phys. Appl. (Paris). – 1990. – Vol. 25. – P. 1245-1258. DOI: 10.1051/rphysap:0199000250120124500.
5. Banfi G., Degiorgio V. and Ricard D. Nonlinear optical properties of semiconductor nanocrystals. // Advances in Physics. 1998. – Vol. 45, No. 3. – P. 447-510. https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/000187398243537.

OPTICAL CHARACTERISTICS OF $CuInS_2$ CRYSTALS

Qasimoglu I.Q.[1], *Hidiyev Kh.A.*[1], *Mamedova I.A.*[1], *Ragimov S.S.*[2,1], *Abdullayev N.A.*[1,2]

[1]Institute of Physics, Ministry of Science and Education, Baku

[2]Baku State University, Baku

A number of characteristic optical parameters of $CuInS_2$ crystals were determined experimentally by the method of spectral ellipsometry. The values of the skin depth, Urbach energy, plasma frequency and nonlinear optical parameters of $CuInS_2$ crystals were estimated from ellipsometric studies in the energy range of 0.7−6.5 eV. Within the framework of the single-effective oscillator model, the energy of a single oscillator and the dispersion energy were also calculated.

УДК 538.958 25-16

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $TlFeS_2$

Badalova Z.I.[1], Hidiyev Kh.A.[1], Abdullayev Yu.A.[1], Ragimov S.S.[2,1], Abdullayev N.A.[1,2]

[1]Институт физики Мин. науки и обр., Баку
[2]Бакинский государственный университет, Баку

Методом спектральной эллипсометрии экспериментально определены ряд характерных оптических параметров кристаллов $TlFeS_2$. В интервале энергий 0.7−6.5 eV оценены значения глубины скин слоя, энергии Урбаха, плазменной частоты и нелинейных оптических параметров кристаллов $TlFeS_2$. В рамках модели одноэффективного осциллятора вычислены также энергия одиночного осциллятора и дисперсионная энергия.

Для магнитных полупроводников характерна сильная взаимосвязь магнитных, электрических и оптических свойств, и магнитное взаимодействие осуществляется с участием электронов проводимости. Магнитное поле не только меняет проводимость, но ещё возникает возможность контроля квантового спинового состояния носителей заряда, что является перспективным для использования в новой области электроники – спинтронике.

Для экспериментальных исследований был использован метод спектральной эллипсометрии, основанный на определении изменения состояния поляризации света при отражении от кристалла и являющийся одним из наиболее точных неразрушающих методов определения оптических характеристик кристаллов [1]. Из эллипсометрических исследований в интервале энергий 0.7−6.5 eV ранее нами были определены энергетические зависимости мнимых и действительных частей диэлектрической функции и оптической проводимости, дисперсия показателя преломления, коэффициентов экстинкции и поглощения [2]. В настоящей статье представлены результаты вычислений ряда других актуальных оптических параметров кристаллов $TlFeS_2$.

Например, из спектральной зависимости коэффициента поглощения можно определить глубину скин слоя δ (глубину проникновения электромагнитного излучения вглубь образца), являющейся обратной величиной коэффициента поглощения α (рис. 1а). Как видно, в изучаемой области энергий величина δ уменьшается по мере возрастания энергии квантов от 1 мкм до 0.01 мкм.

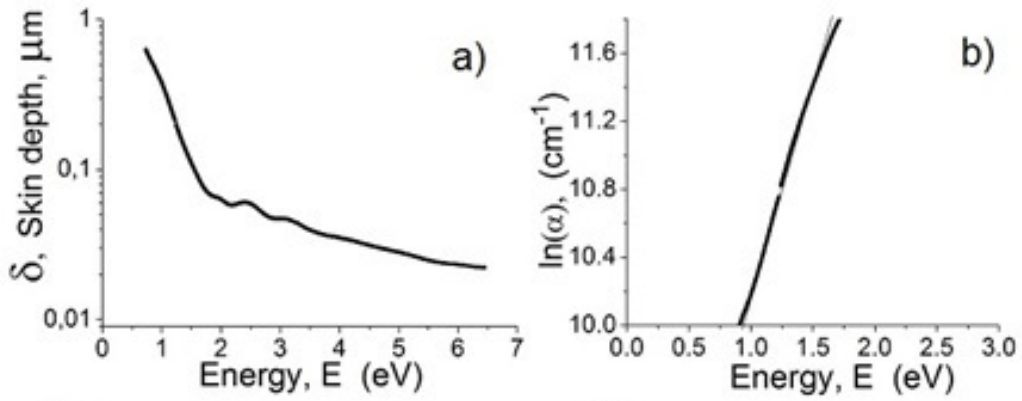


Рисунок 1. Спектральные зависимости: a) глубины скин слоя δ (a), b) ln(*α)*

Воспользовавшись зависимостью коэффициента поглощения от энергии фотонов, можно получить значение энергии Урбаха (E_u), которая обусловлена структурными нарушениями и возможными несовершенствами в $TlFeS_2$. Связь между α и Eu определяется соотношением:

$$\alpha(h\nu)=\alpha_0 \exp(h\nu/E_u). \quad (1)$$

На рис. 1b представлен соответствующий график ln(*α) vs. (hν)* и из угла наклона прямой была найдена энергия Урбаха, равная 0,38 eV.

Спектр показателя преломления анализировался нами с помощью модели одноэффективного осциллятора (single-effective-oscillator model), описанного в [3]:

$$n^2(h\upsilon) = 1 + \frac{E_{SO} \cdot E_d}{E_{SO}^2 - (h\upsilon)^2}, \quad (2)$$

где E_{SO} и E_d - энергия одиночного осциллятора и дисперсионная энергия, соответственно. Иначе (2) можно написать как

$$\left[n^2(h\upsilon)-1\right]^{-1} = \frac{E_{SO}^2-(h\upsilon)^2}{E_{SO}E_d} = \frac{E_{SO}}{E_d} - \frac{1}{E_{SO}E_d}(h\upsilon)^2 . \quad (3)$$

Построение зависимости $(n^2\text{-}1)^{-1}$ vs. $(h\nu)^2$ (рис. 2a) позволит нам найти параметры осциллятора E_{SO} и E_d . Расчёты показали, что энергия одиночного осциллятора E_{SO}=3.2 eV, а дисперсионная энергия E_d=14.6 eV.

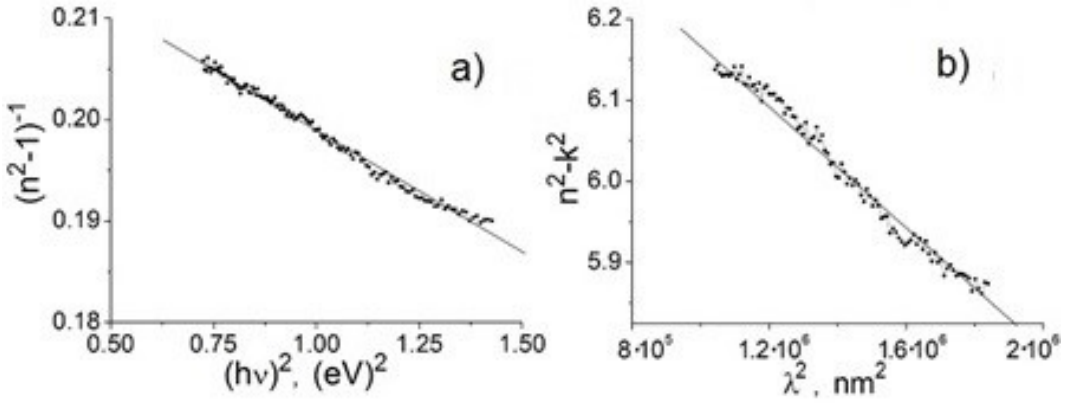


Рисунок 2. a) зависимость $(n^2–1)^{-1}$ vs. $(h\nu)^2$ для определения параметров осциллятора в рамках модели одноэффективного осциллятора, b) зависимость $(n^2–k^2)$ vs. λ^2 для определения плазменной частоты

При больших длинах волн ($n^2>>k^2$) действительная часть диэлектрической функции $\varepsilon_1=n^2-k^2$ описывается как [4]:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2 \cdot \lambda^2}{4\pi^2 c^2} = \varepsilon_\infty - a\lambda^2 \quad , \tag{4}$$

здесь ε_∞ - высокочастотная диэлектрическая постоянная, c – скорость света, ω_p – плазменная частота, определяемая выражением

$$\omega_p^2 = \frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{N}{m_e^*} \quad , \tag{5}$$

здесь e – элементарный заряд, ε_0 – диэлектрическая постоянная, равная $8.854\cdot10^{-12}$ F/m, N – плотность носителей заряда, m_e* - эффективная масса.

Из построенной зависимости $n^2 - k^2$ vs. λ^2 (рис. 2 b) линейной аппроксимацией из соотношения (4) определяются ε_∞=6.5, плазменная частота ω_p=$1.1\cdot10^{15}$ rad/s и с учётом (5) N/m_e*=$4.24\cdot10^{56}$m^{-3}kg^{-1}. Кроме того, величина высокочастотного показателя преломления ($n_0=\sqrt{\varepsilon_\infty}$) равна 2.6.

Выше было отмечено, что исследованные халькопириты являются перспективными материалами для использования в нелинейной оптике и поэтому вызывает интерес изучение нелинейных оптических свойств кристаллов $TlFeS_2$. Нелинейный показатель преломления n_2, нелинейные восприимчивости первого порядка $\chi^{(1)}$ и третьего порядка $\chi^{(3)}$ могут быть вычислены из соотношений [5]:

$$\chi^{(1)} = \frac{n_0^2-1}{4\pi} \quad , \quad \chi^{(3)} = \frac{1.7\cdot10^{-10}}{(4\pi)^4}\left[n_0^2-1\right]^4 \quad , \quad n_2 = \frac{12\pi\chi^{(3)}}{n_0} \quad . \tag{6}$$

Выше было показано, что показатель преломления n_0=2.6, а n_0^2=8.7 и потому вычисления (6) дают значения $\chi^{(1)}$=0.46 *esu*, $\chi^{(3)}$=7.5·10^{-12} *esu* и n_2=1.1·10^{-10} *esu*.

Литература

1. Mamedova I.A., Jahangirli Z.A., and Abdullayev. N.A. Electronic Properties of CdGa2S4: Ab Initio Calculations and Experimental Studies by Spectral Ellipsometry. // Physics of the Solid State. – 2024. - Vol. 66, No. 10. - P. 365–374. https://link.springer.com/article/10.1134/S1063783424601310.
2. Jahangirli Z.A., Veliyev R.G., Badalova Z.I., Seyidov R.G., Alizade E.H., Mammadov T.G., and Abdullayev N.A. Electronic Properties of Magnetic Semiconductor Compounds $TlFeS_2$ and $TlFeSe_2$. // Physics of Wave Phenomena. - 2023. - Vol. 31, No. 2. – P.. 84–91. DOI: 10.3103/S1541308X2302005X.
3. Wemple S.H., DiDomenico M. Behavior of the electronic dielectric constant in covalent and ionic materials. // Phys. Rev. B. – 1971. - Vol. 3. – P. 1338–1351. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.3.1338.
4. Belgacem S., Bennaceur R. Propriétés optiques des couches minces de SnO_2 et $CuInS_2$ airless spray. // Rev. Phys. Appl. (Paris). – 1990. – Vol. 25. – P. 1245-1258. DOI: 10.1051/rphysap:0199000250120124500.
5. Banfi G., Degiorgio V. and Ricard D. Nonlinear optical properties of semiconductor nanocrystals. // Advances in Physics. 1998. – Vol. 45, No. 3. – P. 447-510. https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/000187398243537.

OPTICAL CHARACTERISTICS OF MAGNETIC SEMICONDUCTORS $TlFeS_2$

Badalova Z.I.[1], Hidiyev Kh.A.[1], Abdullayev Yu.A.[1], Ragimov S.S.[1,2], Abdullayev N.A.[1,2]

[1]Institute of Physics, Ministry of Science and Education, Baku
[2]Baku State University, Baku

A number of characteristic optical parameters of $TlFeS_2$ crystals were experimentally determined using the spectral ellipsometry method. The values of the skin layer depth, Urbach energy, plasma frequency, and nonlinear optical parameters of $TlFeS_2$ crystals were estimated in the energy range of 0.7−6.5 eV. The energy of a single oscillator and the dispersion energy were also calculated within the framework of the single-effective oscillator model.

УДК 621.315 25-19

ДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.

Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ

Характер процессов диффузии в полупроводниковых материалах обусловлен большим спектром собственных дефектов и значительной зависимостью концентрации электрически активных дефектов от положения уровня Ферми. Особенностью диффузии примесей в арсениде галлия является существенная зависимость процесса от давления паров мышьяка, что связано с изменением равновесия собственных точечных дефектов в решетке. В полупроводниковых соединениях, вследствие высокого парциального давления элементов пятой группы приводит к образованию высокой концентрации собственных точечных дефектов.

Арсенид галлия является одним из базовых материалов микроэлектроники. При создании структур для полупроводниковых приборов легирование GaAs традиционно осуществляется примесями с мелкими энергетическими уровнями, которые в интервале рабочих температур находятся в ионизованном состоянии. К числу важных свойств GaAs относится большая ширина запрещенной зоны, высокая подвижностью носителей заряда, широкий диапазон изменения параметров при легировании различными примесями. Легирующие добавки эффективно влияют на состояние собственных точечных дефектов в кристаллах [1-3].

Благодаря достаточно протяженной области гомогенности GaAs в его кристаллической решетке возможно образование большой концентрации собственных точечных дефектов – до 10^{18}–10^{19} см$^{-3}$. При отклонении от стехиометрии избыточные компоненты GaAs растворяются в его решетке по типу вычитания, одними из основных типов дефектов являются вакансии в той или иной подрешетке.

Описание процессов диффузии в полупроводниковых материалах усложнено. Это обусловлено большим спектром собственных дефектов и значительной зависимостью концентрации электрически активных дефектов от положения уровня Ферми. В полупроводниковых соединениях III–V (к которым относится GaAs) вариативность диффузионных процессов еще увеличивается вследствие высокого парциального давления элементов V группы, что может приводить к большому отклонению от стехиометрии и образованию высокой концентрации собственных точечных дефектов на этапе выращивания материала.

Отличительной особенностью диффузии примесей в арсениде галлия является существенная зависимость процесса от давления паров мышьяка, что связано с изменением равновесия собственных точечных дефектов в

решетке. Даже при фиксированной температуре диффузии в арсениде галлия коэффициент диффузии для конкретной примеси может иметь разброс в несколько порядков.

При пониженном давлении пара над кристаллом происходит инжекция неравновесных вакансий с поверхности в объем и их миграция вглубь кристалла. В результате образуются протяженные профили неравновесных вакансий, которые коагулируют с образованием пор. Смыкание пор приводит к перемещению межфазной границы.

Скорость установления равновесия дефектов в кристалле арсенида галлия в процессе отжига при различных давлениях паров мышьяка определяется коэффициентами диффузии собственных точечных дефектов решетки в GaAs.

Скорость диффузии примесных атомов в GaAs существенно зависит от концентрации собственных точечных дефектов, таких как вакансии и межузельные атомы. Концентрация точечных дефектов определяется областью фазовой диаграммы Ga–As.

Собственными точечными дефектами в решетке арсенида галлия являются вакансии галлия и мышьяка (V_{Ga} и V_{As}), межузельные атомы галлия и мышьяка (Ga_i и As_i), антиструктурные дефекты (GaAs и AsGa). В процессе термообработки арсенида галлия происходит образование собственных дефектов и комплексов собственных дефектов с остаточными и легирующими примесями.

Концентрация и тип собственных точечных дефектов определяется условиями получения кристалла, которые задаются тройной диаграммой состояния GaAs.

Скорость установления равновесия дефектов в кристалле арсенида галлия в процессе отжига при различных давлениях паров мышьяка определяется коэффициентами диффузии собственных точечных дефектов решетки в GaAs.

Основными акцепторными примесями с мелкими энергетическими уровнями в GaAs являются элементы II группы Периодической системы элементов Менделеева, занимающие узлы галлия.

Бериллий широко используется в качестве легирующей акцепторной примеси в GaAs для создания слоев p-типа проводимости преимущественно методом эпитаксии и ионного легирования. Ионная имплантация бериллия используется для получения p-слоев в GaAs благодаря его высокой электрической активности и большой глубине проникновения. Скорость диффузии Be, имплантированного в GaAs, зависит типа проводимости и степени легирования GaAs.

Скорость диффузии имплантированного бериллия зависит от времени отжига. Наибольшие значения наблюдаются при малых временах отжига, что обусловлено большим количеством межузельных атомов, образованных в процессе имплантации.

Диффузия Be в GaAs из имплантированных слоев хорошо описывается моделью диффузии в предположении, что в процессе диффузии участвуют однократно ионизованные межузельные донорные атомы Be и двукратно ионизованные межузельные донорные атомы Ga.

Основными донорными примесями в GaAs являются элементы IV (кремний, германий, олово) и VI (сера, селен, теллур) групп Периодической системы.

Легирование GaAs кремнием в процессе диффузии из источников, богатых галлием, приводит к образованию слоев p-типа проводимости, из источников, богатых мышьяком, – n-типа проводимости.

Наиболее существенное влияние на электрическую активность германия в арсениде галлия оказывает давление паров мышьяка при легировании.

На скорость диффузии оказывают влияние такие факторы, как температура; тип примесных атомов и среда, в которой они диффундируют; наличие дефектов кристаллической решетки; концентрация вводимой примеси и концентрация примеси, уже имеющейся в материале. С повышением температуры скорость диффузии возрастает, поскольку увеличивается вероятность перескока примесного атома из одного положения в другое, причем зависимость эта примерно экспоненциальная.

Тип атомов также влияет на скорость диффузии, поскольку для разных атомов различны энергия активации диффузии, может быть различен и сам механизм диффузии. Примесные атомы, диффундирующие по вакансионному механизму, имеют значительно более низкий коэффициент диффузии, чем атомы, диффундирующие по междоузлиям.

Влияние дефектов кристаллической структуры на скорость диффузии примесных атомов обусловлено тем, что дефекты создают вокруг себя механические напряжения, способствующие образованию вакансий. Это, в свою очередь, увеличивает скорость диффузии атомов, перемещающихся по вакансионному механизму.

Влияние концентрации примесных атомов обусловлено тем, что при высоких температурах практически все они находятся в ионизированном состоянии: доноры становятся положительно заряженными ионами, акцепторы – отрицательно заряженными.

На скорость диффузии влияет и концентрация самой вводимой примеси, влияние существенно при концентрации вводимой примеси превышает собственную концентрацию свободных носителей заряда в полупроводнике.

На скорость диффузии оказывают влияние температура, тип примесных атомов и среда, в которой они диффундируют, наличие дефектов кристаллической решетки; концентрация вводимой примеси. С повышением температуры скорость диффузии возрастает при этом увеличивается вероятность перескока примесного атома из одного положения в другое. Примесные атомы, диффундирующие по вакансионному механизму, имеют значительно более низкий коэффициент диффузии, чем атомы, диффунди-

рующие по междоузлиям. Влияние дефектов кристаллической структуры на скорость диффузии примесных атомов обусловлено тем, что дефекты создают вокруг себя механические напряжения, способствующие образованию вакансий.

Литература

1. Марков А.В. Монокристаллы полупроводниковых соединений III-V: современное производство и перспективы его развития. // Известия ВУЗов. Физика. – 2003. – №6. – С. 5–11.

2. Толбанов О.П. Электронные свойства структур на основе арсенида галлия, компенсированная примесями с глубокими уровнями. // Электронная промышленность. – 2014. – № 1. – С. 108-122.

3. Кесаманлы Ф.П., Наследов Д.Н. Арсенид галлия. Получение и свойства. – М.: Наука, 1973. – 471 с.

DIFFUSION PROCESSES IN SEMICONDUCTOR COMPOUNDS

Mustafaev M.G., Mustafaeva D.G., Mustafaev G.A.

North Caucasus Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz

The nature of diffusion processes in semiconductor materials is due to a large spectrum of intrinsic defects and a significant dependence of the concentration of electrically active defects on the position of the Fermi level. A feature of the diffusion of impurities in gallium arsenide is a significant dependence of the process on the arsenic vapor pressure, which is associated with a change in the equilibrium of intrinsic point defects in the lattice. In semiconductor compounds, due to the high partial pressure of elements of the fifth group, it leads to the formation of a high concentration of intrinsic point defects.

УДК 621.315 25-20

СВОЙСТВА, ПРИМЕНЕНИЕ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТ-ПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Ванеева Д.Д., Мустафаев М.Г.

Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ

Материалы на основе соединений ABO_3 располагают хорошими электрофизическими свойствами, имеют смешанный тип проводимости, высокую химическую стойкость, что обуславливает формирование новых материалов с перовскитовой структурой, перспективных в использовании для создания различных элементов и устройств на их основе.

Соединения со структурой перовскита находят широкое применение в качестве элементов различных преобразователей, твердо оксидных топливных элементов, катализаторов в различных реакциях газоочистки, кислородных датчиках, электролизерах для получения чистого кислорода и водорода, а также в установках пьезоэлектрических и резистивных элементов в высокотемпературных печах. Перовскит-подобные соединения могут быть применимы для решения практических и прикладных задач, благодаря наличию у них многочисленных физических свойств [1-8].

Перовскиты обладают рядом электрических свойств, что определяет их применение в технике. Электрическая проводимость перовскитов варьируется в широких пределах. Некоторые вещества используются в качестве диэлектриков, в то время как другие обладают металлической проводимостью, однако большая часть перовскитов являются полупроводниками. Как и для других типов соединений, электрические свойства перовскитов зависят от внешних электронов их ионов, которые могут быть локализованы в отдельных атомных позициях или могут быть коллективными. Локализованные электроны могут обладать спонтанным магнитным моментом, имеет место сильная корреляция между электрическими и магнитными свойствами перовскитов.

Соединения с перовскитовой структурой ABO_3 используются в качестве модельных систем для спектроскопических исследований в инфракрасном, видимом и ультрафиолетовом диапазонах. Магнитное упорядочение переходных металлов в позиции B может быть изучено дополнительно к упорядочению редкоземельных ионов в позиции A.

Важной характеристикой структуры перовскитов является их способность к многочисленным изоморфным замещениям как в A – Ca и Sr, так и в B-позициях (Ni, Fe, Co). В структуре перовскита может аккумулировать большое количество типов элементов в различной валентности, что приводит к возможности химического дизайна данных материалов.

Особый интерес представляют слоистые сегнетоэлектрики, описан-

ные Ауривиллиусом. Свойства фаз Ауривиллиуса находятся в существенной зависимости от состава и структуры соединений. Выявление зависимости состав – свойства дает возможность контролировать свойства материала, варьируя его состав.

Фазы Ауривиллиуса могут быть получены как высокотемпературными твердофазными реакциями, так и гидротермальным методом синтеза. Элементный анализ образцов проводится с помощью рентген флуоресцентного спектрометра.

Рентгеновская флуоресценция позволяет проводить элементный анализ твердых и жидких образцов. Анализ соединений основан на детектировании испускаемых характеристических рентгеновских лучей возбужденными атомами, входящими в состав образца, при попадании на соединение рентгеновского излучения. Различия в энергиях генерируемого характеристического излучения для каждого элемента составляет основу качественного анализа.

Частота фотонов характеристического излучения пропорциональна концентрации элемента, содержащегося в анализируемом образце, что позволяет оценить количественные соотношения обнаруженных элементов.

Рентгенография – метод определения кристаллографических характеристик структуры веществ, основанных на отражении ими рентгеновских лучей. Среди рентгеновских методов исследования можно выделить:

- рентгеноструктурный анализ, позволяющий изучить кристаллическую структуру;

- рентгенофазовый анализ, для идентификации веществ, определения их относительных концентраций, косвенного определения и оценки размера частиц. Для фазовой идентификации проведения структурных исследований применяют метод порошковой рентгенографии.

Вычисление параметров кристаллической решетки, осуществляется с применением статистических моделей. Метод Ритвельда – описание профиля рентгенограммы; уточнение структурных параметров по интегральным интенсивностям. Для описания профиля пиков используют аналитические функции Войта, Пирсона и др.

Метод высокотемпературной и низкотемпературной рентгенографии позволяет изучать качественный и количественный анализ поликристаллических образцов соединений, а также их поведение при нагреве и охлаждении. Настоящий метод используют в совокупности с методами термического анализа для регистрации полиморфных переходов, процессов упорядочения – разупорядочения, окисления, восстановления, распада, а также изучения диаграмм состояния систем.

Рентгенография в интервале температур позволяет оценить тепловое расширение вещества вдоль различных кристаллографических направлений. Параметры термических деформаций, интегрированная термодинамическая функция, позволяют оценить термические деформации кристалли-

ческой решетки.

К термическому анализу относят методы исследования, основанные на непрерывном измерении определенного физико-химического параметра образца в зависимости от температуры (термический анализ). Эти методы находят применение для построения фазовых диаграмм, установления механизма химических превращений в твердом теле, регистрации фазовых переходов и изучения термической устойчивости различных веществ. К методу термического анализа относится дифференциальная сканирующая калориметрия, которая предоставляет возможность определять характер протекающих процессов при нагревании и оценить свойства изучаемого материала.

Калориметрические методы являются надежными в определении термодинамических функций соединений и процессов с их участием. Методом измерения тепловых эффектов, сопровождающих физические, химические или биологические процессы, является калориметрия. Калориметрические исследования позволяют использовать результаты измерения для решения различных задач – возможности использования полученных данных для определения химической стабильности, реакционной способности материалов и для выявления особенностей их строения.

При структурном и функциональном анализе, микроанализе и анализе поверхности применяют методы колебательной спектроскопии, ИК-спектроскопии, спектроскопия комбинационного рассеяния, электронной растровой микроскопии.

Литература

1. Herz L.M. Charge-Carrier Mobilities in Metal Halide Perovskites: Fundamental Mechanisms and Limits // ACS Energy Lett. – 2017. – V. 2. – P. 1539-1548.

2. Shi D., Adinolfi V., Comin R., et al. Low trap-state density and long carrier diffusion in organolead trihalide perovskite single crystals/ // Science – 2015. – V. 347. – P. 519-522.

3. Xiao Z., Yuan Y., Shao Y., et al. Giant switchable photovoltaic effect in organometal trihalide perovskite devices. // Nat. Materials – 2014 – V. 14. – P. 193-198.

4. Dualeh A., Gao P., et al. Thermal Behavior of Methylammonium Lead-Trihalide Perovskite Photovoltaic Light Harvesters. // Chem. Mater. – 2014. – V. 26. – P.6160-6164.

5. Ванеева Д.Д., Мустафаев М.Г. Некоторые подходы повышения стабильности перовскитных преобразователей и надежности их функционирования. // Материалы XIV Международной научно-технической конференции Микро- и нанотехнологии в электронике. – Нальчик. – 2024. – С. 312-315.

6. Ванеева Д.Д., Мустафаев М.Г. Элементы преобразовательные на основе соединений со структурой перовскита. // Материалы XIII Международной научно-технической конференции Микро- и нанотехнологии в электронике. – Нальчик. – 2023 – С. 251-253.

7. Yuzyuk Yu.I., Simon P., Gagarina E., et al. Modulated phases in $NaNbO_3$: Raman scattering, synchrotron x-ray diffraction, and dielectric investigations // Journal of Physics Condensed Matter, 2005. – V. 17. – 33. – pp.4977-4990.

8. Jones G.O., Thomas P.A. Investigation of the structure and phase transitions in the novel A–site substituted distorted perovskite compound $Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$ // Acta Crystallogr. B-Struct. Sci., 2002. – V. 58. – pp.168-178.

PROPERTIES, APPLICATIONS AND METHODS FOR STUDYING THE CHARACTERISTICS OF LAYERED PEROVSKITE-LIKE COMPOUNDS

Vaneeva D.D., Mustafaev M.G.

North Caucasus Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz

Materials based on ABO_3 compounds have good electrophysical properties, have a mixed type of conductivity, high chemical resistance, which determines the formation of new materials with a perovskite structure, promising for use in creating various elements and devices based on them.

УДК 539.216.2 25-24

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РОСТА ОСТРОВКОВЫХ ПЛЕНОК: ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Анофриев В.А., Антонов А.С., Кузьмин Н.Б., Васильев С.А., Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственный университет, Тверь
nsdobnyakov@mail.ru

Моделирование процесса молекулярно-лучевой эпитаксии в рамках компьютерного эксперимента проводилось методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи. В работе на основе фрактального анализа установлены некоторые закономерности роста островковых металлических пленок (Ag, Au, Cu) на поверхности более тугоплавкого металла (Rh).

Известно, что фрактальный анализ может быть применен к исследованию поверхностей материалов, в том числе как эффективный способ универсального описания морфологических характеристик поверхности [1-6] и соответственно их физических свойств. Целью работы является дальнейшая апробации программного комплекса по определению фрактальной размерности [3-4] на примере островковых металлических пленок (Ag, Au, Cu) на поверхности более тугоплавкого металла (Rh), т.е. в качестве подложки используется пленка родия (толщиной 1,2 нм), пучок частиц формируется из атомов серебра, золота или меди. Параметры молекулярно-динамического эксперимента указаны в таблице 1. Для описания межатомного взаимодействия используется потенциал сильной связи [7]. На рис. представлен результат формирования островковых металлических пленок Ag, Au и Cu на поверхности Rh при различных условиях моделирования (первый столбец – Ag, второй – Au, третий – Cu).

Таблица 1. Параметры молекулярно-динамического эксперимента процесса молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ).

Панель рис. 1	Число частиц	Диаметр пучка, Å	Энергия пучка, эВ	Задержка вылета, нс	Число шагов	Максимальная температура, K
А, Б, В	1000	25	1,0	10	100000	4000
Г, Д, Е	2000	25	1,5	10	100000	4000
Ж, З, И	3000	50	3,0	15	100000	4000

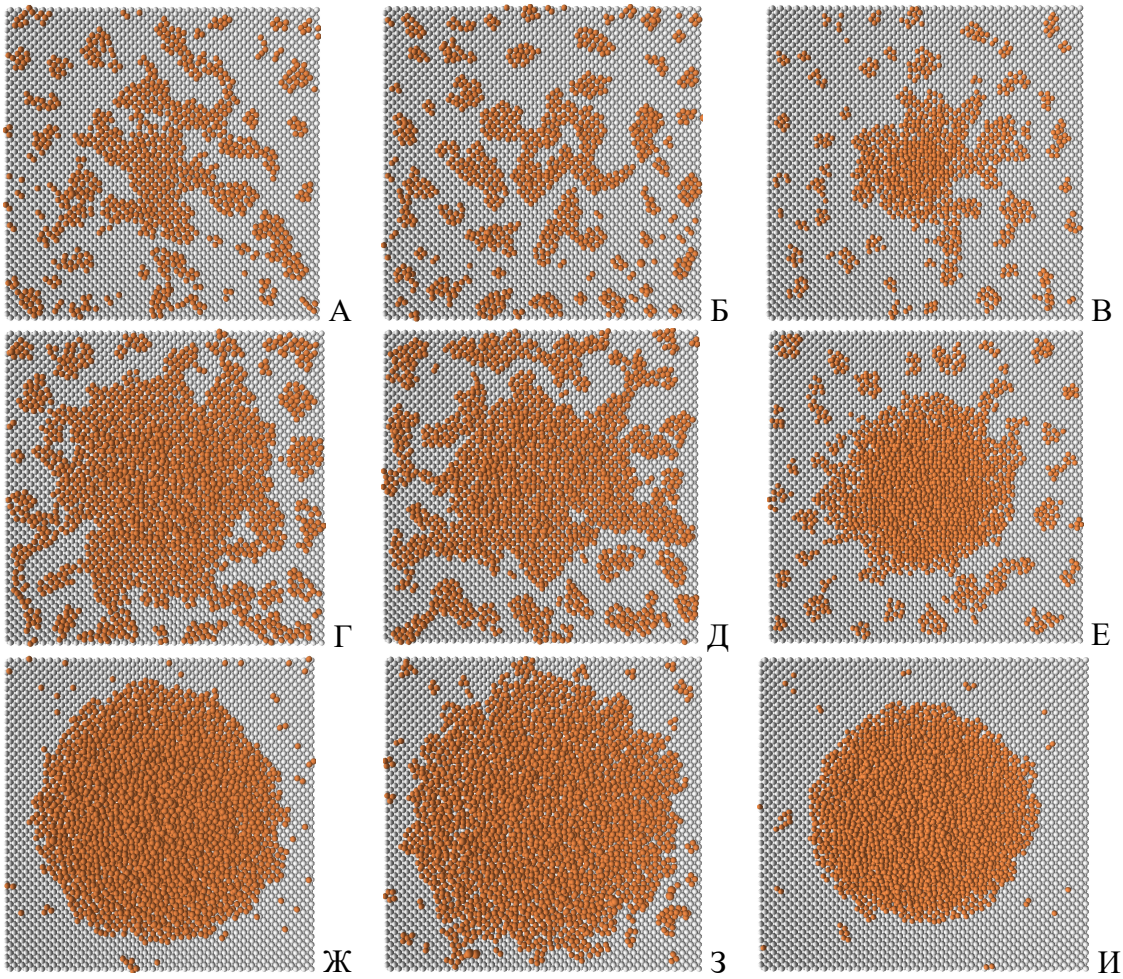


Рис. Изображения (вид сверху) конечных конфигураций островковых металлических пленок Ag, Au и Cu на поверхности Rh.

Анализируя конечные конфигурации, представленные на рис., можно сделать следующие выводы:

1. Для Ag и Cu при увеличении числа частиц (диаметра пучка) и при энергии пучка 3,0 эВ характерно образования сплошной пленки округлой формы с четкими границами, в то время как для Au рельеф границ более сложный, а сама пленка не является сплошной.

2. Количество элементарных островков в процессе МЛЭ для всех трех исследованных металлов различно, хотя уже при энергии пучка в 1,5 эВ наблюдается формирование сплошной островковой пленки, но при этом при энергии в 1,0 эВ этот процесс начинается лишь для Cu.

3. Анализ данных, представленных в таблице 2, показал, что фрактальная размерность (ФР) изображений морфологии островковых пленок сохраняет устойчивость в диапазоне от 2,49 до 2,58 даже при увеличении числа частиц. Это свидетельствует о том, что морфология островковых пленок не претерпевает значительных изменений при росте «плотности системы», что может быть связано с самоорганизацией структур, а также балансом между процессами агрегации и фрагментации. Полученные значения в целом хорошо согласуются с результатами [3, 4].

Таблица 2. Фрактальная размерность итоговых изображений

Панель рис. 1	А	Б	В	Г	Д	Е	Ж	З	И
ФР	2,51	2,54	2,54	2,58	2,54	2,49	2,55	2,58	2,51

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственной программы в области научно-исследовательской деятельности (0817-2023-0006).

Литература

1. Сдобняков Н.Ю., Антонов А.С., Иванов Д.В. Морфологические характеристики и фрактальный анализ металлических пленок на диэлектрических поверхностях: монография. – Тверь: ТвГУ, 2019. – 168 с.

2. Иванов Д.В., Антонов А.С., Кузьмин Н.Б., Сдобняков Н.Ю., Афанасьев М.С. О закономерностях формирования фрактальных структур на поверхности металлических пленок разной толщины // Известия РАН. Серия физическая. – 2023. – Т. 87. – № 10. – С. 1389-1396.

3. Иванов Д.В., Васильев С.А., Сдобняков Н.Ю. и др. Моделирование процесса формирования фрактальных металлических пленок // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 424-437.

4. Иванов Д.В., Анофриев В.А., Кошелев В.А. и др. Моделирование послойного роста фрактальных металлических пленок Pt-Rh // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 682-692.

5. Анофриев В.А., Низенко А.В., Иванов Д.В., Антонов А.С., Сдобняков Н.Ю. К проблеме автоматизации процесса определения фрактальной размерности // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 264-276.

6. Бембель А.Г., Самсонов В.М., Пушкарь М.Ю., Самсонов М.В. Компьютерное моделирование роста субмикронных островковых пленок с учетом атомистической структуры твердой поверхности // Вестник ТвГУ, серия «Физика. – 2009. – Вып. 6. – С. 98-106.

7. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33.

GROWTH PATTERNS OF ISLAND FILMS: FRACTAL ANALYSIS

Anofriev V.A., Antonov A.S., Kuz'min N.B., Vasyliev S.A., Sdobnyakov N.Yu.

Tver State University, Tver
nsdobnyakov@mail.ru

The molecular beam epitaxy process was simulated in a computer experiment using the molecular dynamics method with the use of the tight-binding potential. The application of fractal analysis to describe the growth patterns of island metal films (Ag, Au, Cu) on the surface of a more refractory metal (Rh) is discussed.

УДК 536.42 +536.912 + 544.722.23 25-25

К ВОПРОСУ ОЦЕНКИ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ

Соколов Д.Н., Непша Н.И., Серов С.В., Вересов С.А., Савина К.Г., Колосов А.Ю., Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М.

Тверской государственный университет, Тверь
nsdobnyakov@mail.ru

В работе рассматриваются две оригинальные методики оценки удельной поверхностной энергии для многокомпонентных наночастиц на примере наносистемы (Cu_{200}-Au_{600}-Pt_{800})@Pd_{2400}.

Поверхностная энергия является одним из факторов обеспечивающих стабильность наночастиц [1, 2], а также определяет закономерности химической сегрегации [3]. Данная работа является продолжением исследований [4-6] с использованием методов атомистического моделирования и потенциала сильной связи [7] по установлению закономерностей структурообразования, а также исследования термической стабильности четырехкомпонентных наночастиц Pd-Pt-Au-Cu, но с позиции расчета поверхностной энергии.

В данной работе развиты две методики оценки площади поверхности наночастиц для определения поверхностной энергии:

1. Использование ПО OVITO [8] для анализа атомистических моделей наночастиц, в частности, для определения их поверхностей, например, методом альфа-форм (alpha-shape) [9] с алгоритмом сглаживания [10].

2. Использование ПО Voro++ [11], которое производит трехмерное замощение пространства выпуклыми многогранниками методом Вороного. Управляющим параметром для выделения поверхностных атомов служит количество атомарных слоёв (в данной работе это один атомный слой).

Следующей задачей является непосредственное вычисление удельной поверхностной энергии. Для этого использована модифицированная формула [12], которая учитывает многокомпонентность наночастицы:

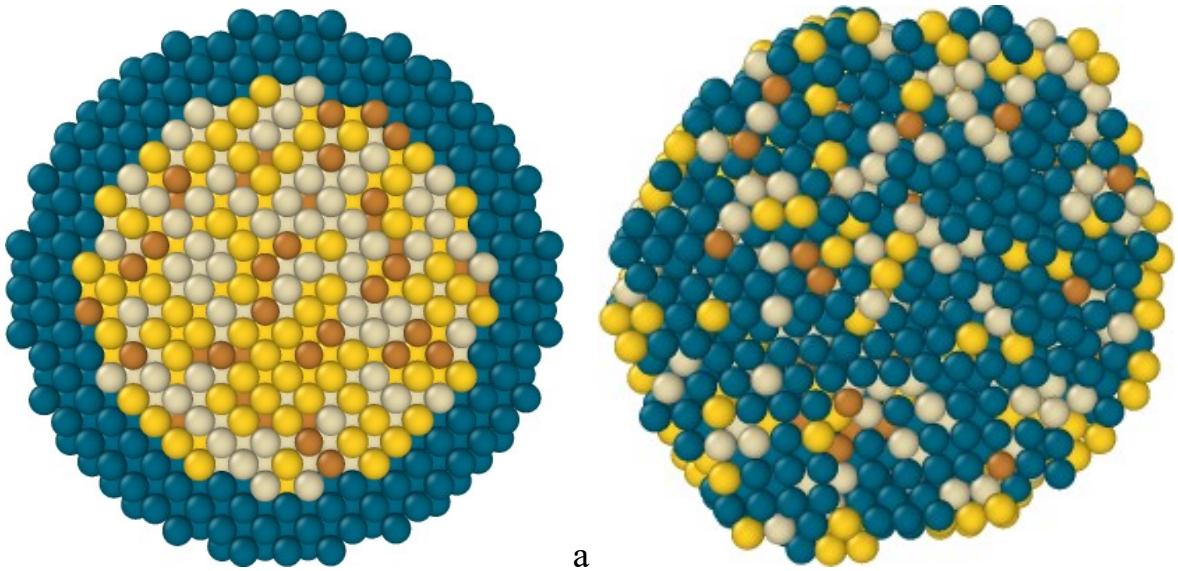
$$\gamma = \frac{1}{A_0}\sum_{\alpha=1}^{N_c}\sum_{i=1}^{N_\alpha}(E_i - E_{0\alpha}),$$

где A_0 – площадь разделяющей поверхности, индекс α нумерует компоненты наночастицы, N_c – количество компонент (в случае одной компоненты данная формула перейдёт в формулу (4) статьи, индекс i пробегает значения от 1 до N_α и нумерует индекс атома α компоненты поверхностной фазы, N_α – количество атомов α компоненты в поверхностной фазе, $E_{0\alpha}$ – средняя энергия α компоненты массивной фазы. В Таблице представлены результаты оценок удельной поверхностной энергии для конечной конфи-

гурации наночастицы $(Cu_{200}\text{-}Au_{600}\text{-}Pt_{800})@Pd_{2400}$, полученной в цикле термического воздействия (нагревания выше температуры плавления и охлаждение до исходной) со скоростью 0,25 К/пс (начальная и конечные конфигурации представлены на рис.). Очевидно, что как методика оценки площади поверхности является важным фактором, определяющим значение удельной поверхностной энергии, так и оценка величины $E_{0\alpha}$.

Таблица. Результаты расчетов удельной поверхностной энергии

Методика оценки поверхности	Площадь поверхности, $нм^2$	Удельная поверхностная энергия, $Дж/м^2$
Методика 1	69,74	1,418
Методика 2	61,74	1,074



а б

Рис. Сечение начальной (а) и конечной (б) конфигурации наночастицы $(Cu_{200}\text{-}Au_{600}\text{-}Pt_{800})@Pd_{2400}$. Цветовое обозначение: желтые атомы – золото, коричневые – медь, синие атомы – палладий, серые – платина

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

Литература

1. Ferrando R., Jellinek J., Johnston R.L.Nanoalloys: From theory to applications of alloy clusters and nanoparticles // Chemical Reviews. – 2008. – V. 108. – I. 3. – P. 845-910.

2. Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu.. A Thermodynamic approach to mechanical stability of nanosized particles // Central European Journal of Physics. 2003. V. 1. I. 2. P. 344-354.

3. Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., Bazulev A.N. On thermodynamic

stability conditions for nanosized particles // Surface Science. 2003. V. 532-535. P. 526-530.

4. Вересов С.А., Савина К.Г., Веселов А.Д. и др. К вопросу изучения процессов структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. Вып. 14. С. 371-382.

5. Колосов А.Ю., Савина К.Г., Вересов С.А. и др. Сценарии структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах: атомистическое моделирование // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. Вып. 15. С. 432-443.

5. Колосов А.Ю., Вересов С.А., Серов С.В. и др. Размерный эффект в четырехкомпонентных наночастицах Au-Cu-Pd-Pt и их стабильность // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 361-372.

7. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.

8. Stukowski A**.** Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18. I. 1. P. 015012-1-015012-7.

9. Foley J., Edelsbrunner H., Mücke E.P. Three-dimensional alpha shapes // ACM Transactions on Graphics (TOG). 1994. V. 13. I. 1. P. 43-72.

10. Taubin G. A signal processing approach to fair surface design // SIGGRAPH '95: Proceedings of the 22nd annual conference on Computer graphics and interactive techniques. 1995. P. 351-358.

11. https://math.lbl.gov/voro++/. Режим доступа: 21.04.2025.

12. Tang, Z.; Chen, Y.; Ye, W. Calculation of surface properties of cubic and hexagonal crystals through molecular statics simulations // Crystals. 2020. V. 10. I. 4. Art. № 329. 14 p.

TO THE QUESTION OF ASSESSING SURFACE ENERGY IN MULTICOMPONENT NANOPARTICLES

Sokolov D.N., Nepsha N.I., Serov S.V., Veresov S.A., Savina K.G., Kolosov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M.

Tver State University, Tver
nsdobnyakov@mail.ru

The paper examines two original methods for estimating the specific surface energy for multicomponent nanoparticles using the example of a nanosystem $(Cu_{200}\text{-}Au_{600}\text{-}Pt_{800})@Pd_{2400}$.

УДК: 535.341.08 25-28

ЧАСТОТНЫЕ ДИСПЕРСИИ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СПЛАВА Zn-Ge-Sb

Кязимова В.К., Захрабекова З.М., Джалалов Б.К., Исламзаде Е.М., Алекперов А.И.

Институт Физики при Министерстве Науки и Образования Азербайджана, Баку

zaura.zohrabbekova@gmail.com, (+994 55) 676 23 49

Методом сплавления составных элементов в Бридменовской печи и последующей закалке в воде при комнатной температуре синтезирован интерметаллический сплав Zn-Ge-Sb. Методом порошковой рентгеновской дифрактометрии определен фазовый состав полученных образцов. На основании эллипсометрических измерений в диапазоне частот от 180 до 1580 ТГц расчитаны частотные дисперсии таких характеристик полученного материала, как действительная и мнимая часть комплексного показателя преломления, коэффициент поглощения, коэффициент отражения и диэлектрическая проницаемость среды. В исследуемых образцах наблюдалась отрицательная диэлектрическая проницаемость. Оценена плазменная частота и параметр затухания плазменных волн. Анализ полученных результатов дает возможность предположить, что синтезированный нами сплав сможет найти свое прикладное применение в качестве подходящего материала для микро- и наноэлектроники.

Потребность в качественных оптоэлектронных материалах с новыми интересными свойствами, необходимыми для конкретного применения в оптоэлектронных приборах, требует создания новых, а также интенсивного исследования оптических свойств уже известных электрических материалов.

На данный момент в научных публикациях практически нет работ связанных с исследованиями, посвященными изучению интерметаллических сплавов Zn-Sb-Ge. Как нам кажется, потенциал материалов на их основе может быть многообещающим и заслуживает фокусировки внимания на изучении как их оптических, так и любых других электро-физических параметров.

В нашей работе путем расплавления составных элементов в Бриджменовской печи (LOBA 1200-45-560-2) при температуре 1000 °C в течение 12 часов синтезирован сплав Zn(17.3%)-Ge(19.4%)-Sb(63.3%), а также эллипсометрическими методами исследованы частотные дисперсии таких оптических параметров у полученных образцов как оптических констант (n и k), коэффициента абсорбции, коэффициента отражения света и диэлектрической проницаемости сред.

Полученные образы были подвергнуты рентгенодифракционному анализу с помощью порошковой рентгенодифрактометрической спектроскопии. Результаты показали наличие 3-х фаз в полученном сплаве: анти-

монида цинка - ZnSb, твердого расвора германий-сурьма с содержанием стибиума 0.66 ат. % – $Ge_{0.34}Sb_{0.66}$, и чистого германия.

Эллипсометрическую спектроскопию образца проводили на эллипсометре J.A. Woollam M2000DI. Направление падения луча было выбранно равным 75°, спектр частот электромагнитного излучения изменялся от инфрактасного до ультрафиолетового С диапазона (~180÷1580 ТГц).

Эллипсометрические методы сводятся к измерению разности фаз Δ между s и p компонентами отраженной эллиптически поляризованной световой волны и азимута поляризации ψ, определяющего поворот большой оси эллипса относительно плоскости падения [1].

На рис. 1 представлены полученные на эллипсометре зависимости Δ и ψ отраженного от образца эллиптически поляризованного луча от энергии кванта падающего на образец излучения.

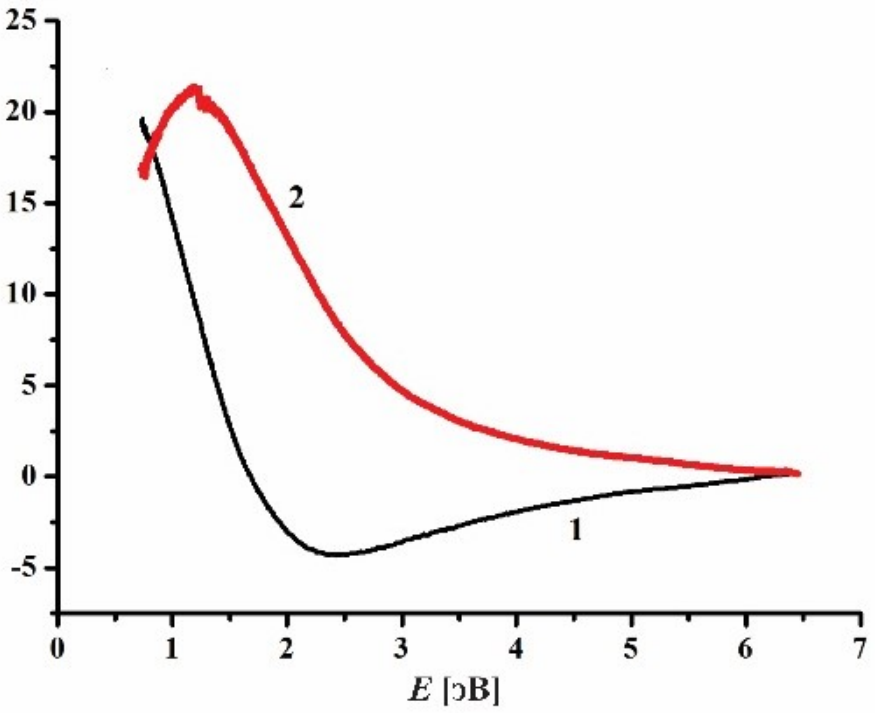


Рис.1. Зависимость Δ(линия 1) и ψ(линия 2) от энергии фотона для сплава Zn(17.3%)-Ge(19.4%)-Sb(63.3%).

Эти данные дают возможность вычислить оптические константы *n* и *k*.

На рис. 2 представлены зависимости оптических постоянных *n* и *k* для исследуемого нами сплава от энергии фотона падающего излучения.

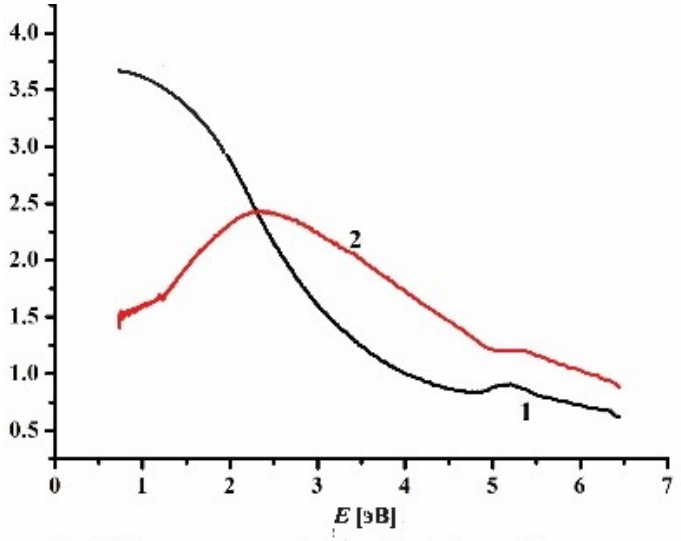


Рис.1. Зависимость n (линия 1) и k (линия 2) от энергии фотона для сплава Zn(17.3%)-Ge(19.4%)-Sb(63.3%).

Коэффициент поглощения света связан с постоянной k, отвечающей за поглощательную способность материала следущим выражением [2].

$$\alpha = \frac{2\omega k}{c} = \frac{2Ek}{\hbar c}, \qquad (1)$$

где ω – угловая частота излучения, c – скорость света, $\hbar$ — постоянная Планка.

На рис. 3 даны частотные дисперсии коэффициента поглощения исследуемого материала, вычисленные по формуле (1). Как видно из графика, поглощение мало в области инфракрасного излучения. В интервале частот ~от $1.13\cdot10^{15}$ до $5.27\cdot10^{15}$ рад/с (~180÷840 ТГц) электромагнитное излучение прозрачно для пленок толщиной ~ от 4.6 до 0.7 нм. В интервале ~$5.27\cdot10^{15}$÷$9.92\cdot10^{15}$ рад/с (~840÷1580 ТГц) это значение возрастает до ~0.9 нм.

Коэффициент отражения света R , равный доле отраженного излучения, также зависит от оптических констант n и k и при малых углах падения равен [2]

$$R = \left|\frac{n-1}{n+1}\right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}. \qquad (2)$$

Диэлектрическая проницаемость для не намагничивающихся изотропных материалов определяется следующим выражением [2]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) = (n - ik)^2,\ \varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2,\ \varepsilon_2(\omega) = -2nk\ . \qquad (3)$$

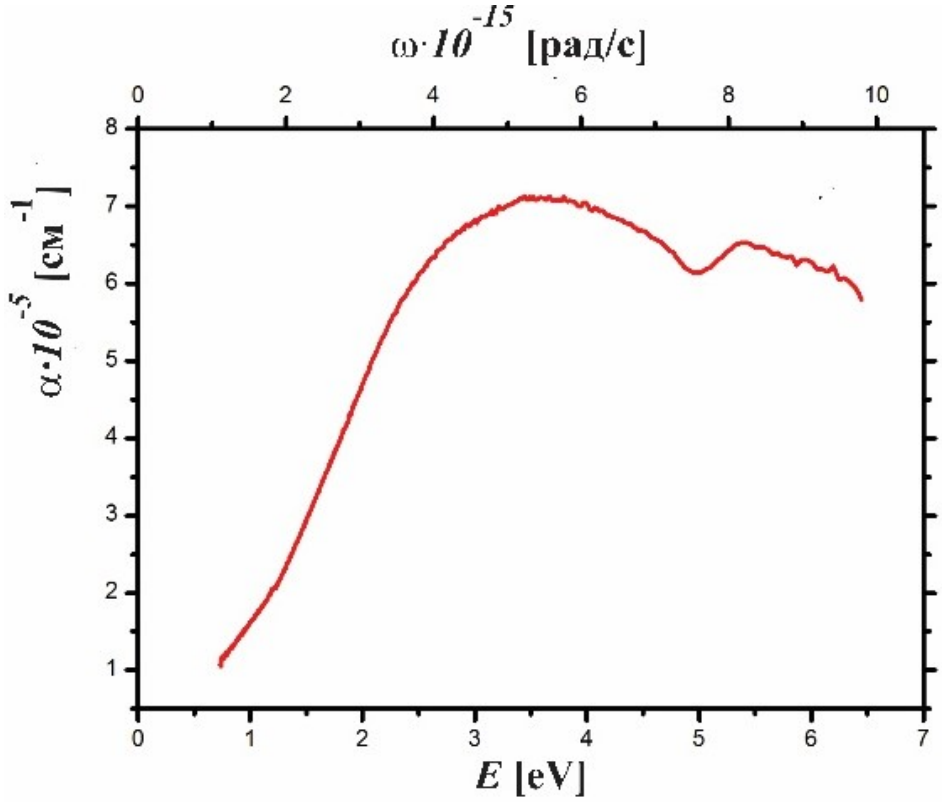


Рис.3. Зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона и частоты волны падающего излучения для сплава Zn(17.3%)-Ge(19.4%)-Sb(63.3%).

На рис. 4 приведены расчитанные по формулам (2) и (3) частотные зависимости коэффициента отражения R и диэлектрической проницаемости ε_1 исследуемого нами сплава. Как видно из графика $\varepsilon_1(\omega)$ диэлектрическая проницаемость имеет отрицательное значение в диапазоне частот от $3.5\cdot10^{15}$ (560 ТГц) до $9.8\cdot10^{15}$ рад/с (1560 ТГц). Такую дисперсию обычно считают плазмоподобной, которая описывается с помощью модели Друде [3]

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \omega_\tau^2}, \qquad (4)$$

где ω – угловая частота измерительного электромагнитного поля, ω_p – угловая плазменная частота собственных колебаний электронного газа, ω_τ – параметр затухания плазменных волн, $\varepsilon_1(\omega)$ – частотная зависимость действительной части комплексной диэлектрической проницаемости.

Интересно отметить тот факт, что при частотах ~$3.3\cdot10^{15}$÷$3.5\cdot10^{15}$ рад/с (525÷557 ТГц, желто-зеленый диапазон) диэлектрическая проницаемость сплава имеет значение меньше единицы, что можно рассматривать как усиление поля падающего излучения в исследуемых сплавах на этих частотах. Осмелимся предположить, что вероятно при этих частотах большая часть поглощенного излучения не уходит в тепло, а возвращается в виде вынужденных испусканий фотонов той же частоты с возбужденных уровней, приводящих к усилению внешнего поля. Это обстоятельство может найти свое прикладное применение в лазерной технике.

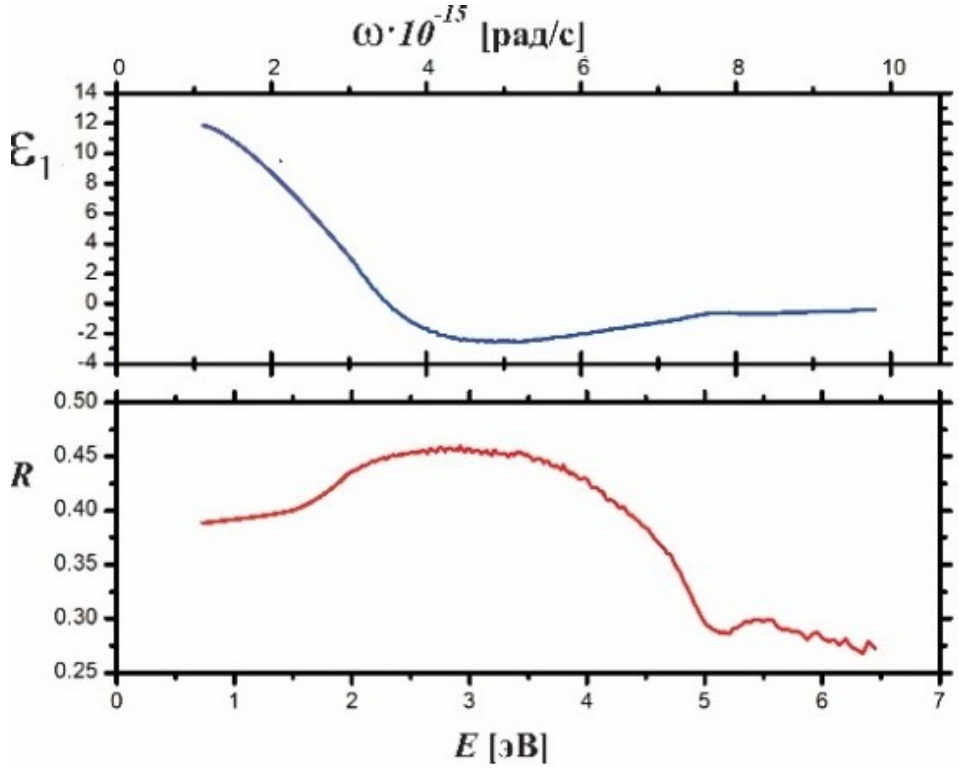


Рис.4. Частотные дисперсии коэффициента отражения R(ω) и диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1(\omega)$ для сплава Zn(17.3%)-Ge(19.4%)-Sb(63.3%)

Анализ графика зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1(\omega)$ (рис. 4) дает возможность вычислить оценочные значения плазменной частоты собственных колебаний электронного газа, а также параметра затухания плазменных волн при различных значениях частоты падающего излучения. Линейно экстраполируя график $\varepsilon_1(\omega)$ до значения 0 в правой части ультрафиолетового излучения и принимая во внимание, что параметром затухания на этих частотах можно пренебречь получены следующие значения плазменной чатоты и параметра затухания при частоте 1560 ТГц: $\omega_{pGe}=11.9\cdot10^{15}$рад/с, $\omega_\tau(1560\ \text{ТГц})=2.289\cdot10^{15}$рад/с.

Материалы с отрицательной диэлектрической проницаемостью имеют уникальные свойства и могут быть применены в различных высоких технологиях. Они могут быть использованы в частности: для создания «невидимых» плащей, позволяющих скрывать объекты от наблюдения; для улучшения характеристик антенн, включая уменьшение их размеров и повышение эффективности; для создания новых типов линз и других оптических элементов, которые способны фокусировать свет по необычным законам; в области квантовых вычислений и хранения информации; для создания высокочувствительных сенсоров и.т.д.

Полученные нами сплавы имеют ряд преимуществ по сравнению с материалами, имеющими аналогичные свойства. К примеру, у золота, серебра, а также у сплавов Au-Ag, Au-Ag-Cu также наблюдается отрицатель-

ная диэлектрическая проницаемость, связанная с плазмонными эффектами. Однако, не говоря уже о дороговизне этих материалов, диапазон частот в которых наблюдается это явление составляет 430÷750 ТГц, что гораздо меньше полученных нами результатов.Такие материалы, как $GdFeO_3$, ферромагнитые сплавы, сплавы на основе титана, метаматериалы также демонстрируют отрицательную диэлектрическую проницаемость. Но для этого требуются определенные внешние условия, например определенная температура и напряженность подаваемого магнитного поля или, как в случае с метаматериалами, конструирование упорядоченной системы на микроуровне. Все это говорит в пользу сплавов Zn-Ge(Si)-Sb и как мы думаем они смогут найти свое применение в оптоэлектроной технике.

Литература

1. Милославский В. К., Агеев Л. А., Спектроскопия твердого тела / Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина, 2013, 273 с.
2. Ансельм А.И., Введение в теорию полупроводников / Москва: «Наука» 1978, 615 с.
3. Гинзбург В.Л., Распространение электромагнитных волн в плазме / Москва: «Наука» 1967, 683 с.

FREQUENCY DISPERSIONS OF OPTICAL PARAMETERS OF Zn-Ge-Sb ALLOY

Kyazimova V.K., Zakhrabekova Z.M., Jalalov B.K., Islamzade E.M., Alekperov A.I.

Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan Republic, Baku

The Zn-Ge-Sb alloy was synthesized using the method of melting in a Bridgman furnace followed by quenching at room temperature. The phase composition of the obtained samples was determined using powder X-ray diffraction. Based on ellipsometric measurements in the frequency range from 180 to 1580 THz, frequency dispersions were calculated for characteristics of the obtained materials such as the real and imaginary parts of the complex refractive index, absorption coefficient, reflection coefficient, and dielectric permittivity of the medium. Negative dielectric permittivity was observed in the studied samples. The plasma frequency and the damping parameter of plasma waves were evaluated. The analysis of the obtained results suggests that the alloy synthesized by us could find practical applications as a suitable material for micro- and nanoelectronics.

УДК 621.315.592 25-29

ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ СВОЙСТВАМИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ОТСУТСТВИИ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ СИММЕТРИИ

Попов А.И., Мирошникова И.Н.

Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва

Потеря трансляционной симметрии в расположении атомов приводит к отсутствию чувствительности свойств материала к примесям замещения и требует разработки новых методов управления свойствами. В работе анализируются альтернативные методы управления свойствами некристаллических полупроводников. Рассмотрены возможные подходы при использовании методов химической модификации свойств, методы структурной, структурно-химической и фазовой модификации свойств. Проведена оценка эффективности перечисленных методов.

Перспективность применения любого материала определяется не только его свойствами, но и возможностями их целенаправленного изменения. Так, успехи твердотельной электроники, включая микро- и наноэлектронику, в основном обязаны наличием эффективного метода управления свойствами кристаллического полупроводника путем легирования материала. При этом вводимые в полупроводник донорные или акцепторные примеси замещают атомы основного материала в узлах кристаллической решетки, то есть не изменяют атомную структуру материала, но оказывают существенное воздействие на его электронную структуру и физиические свойства. Из сказанного следует, что наличие кристаллической решетки или трансляционной симметрии является необходимым условием успешного применения данного метода управления свойствами материала.

Открытие в 1955 году халькогенидных стеклообразных полупроводников [1] показало, что некристаллические материалы, как и кристаллы, могут обладать полупроводниковыми свойствами, несмотря на отсутствие периодической кристаллической решетки. При этом потеря трансляционной симметрии в расположении атомов в этих материалах приводит к отсутствию чувствительности их свойств к примесям замещения. В связи с этим остро встал вопрос о разработке для некристаллических полупроводников новых методов управления свойствами.

Первым шагом в решении этой задачи стала разработка методов химической модификации свойств. В отличие от легирования кристаллов (когда количество вводимой примеси лежит в пределах сотых или тысячных долей процента) при химической модификации вводятся единицы (до десятков) атомных процентов примеси. При этом с физической точки зрения существует несколько различных путей химической модификации свойств.

В первом из них модифицирующая примесь вводится в некристаллический полупроводник при условиях, когда релаксация атомной структуры материала невозможна. В результате примесные атомы находятся в электрически активном состоянии и определяют положение уровня Ферми, а, следовательно, и все электрофизические свойства. Данный подход был предложен и реализован С. Овшинским путем совместного ионно-плазменного осаждения пленок многокомпонентного халькогенидного стеклообразного полупроводника и модифицирующего металла (никеля) на холодную подложку [2]. Изменения температурных зависимостей электропроводимости в зависимости от концентрации модифицирующего элемента приведены на рис. 1.

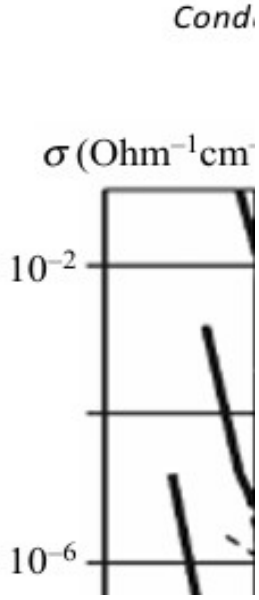


Рис. 1. Химическая модификация пленок $(Ge_{32}Te_{32}Se_{32}As_4)_{1-x}Ni_x$

Второй путь реализации метода химической модификации заключается во введении примеси, слабо влияющей на атомную структуру, но изменяющей электронную структуру таким образом, чтобы материал становился чувствительным к введению примесей замещения (подобно кристаллическому полупроводнику). Результатом реализации такого подхода является создание В. Спиром фактически нового полупроводникового материала – гидрогенизированного аморфного кремния (а – Si:H) с содержанием нескольких атомных процентов водорода [3]. В а – Si:H электроны атомов водорода создают ковалентные связи с электронами на разорванных связях атомов кремния. Благодаря этому резко снижается плотность локализованных состояний в запрещенной зоне материала. Поэтому введение атомов донорной или акцепторной примесей позволяет изменять как абсолютные значения электропроводимости на порядки величины, так и тип проводимости материала. Зависимости электропроводности а – Si:H при

300 К от количества примесных атомов в исходной газовой смеси приведено на рис. 2 [4]:

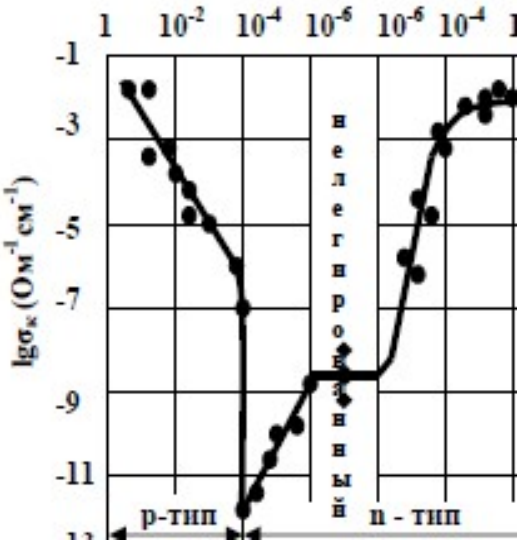
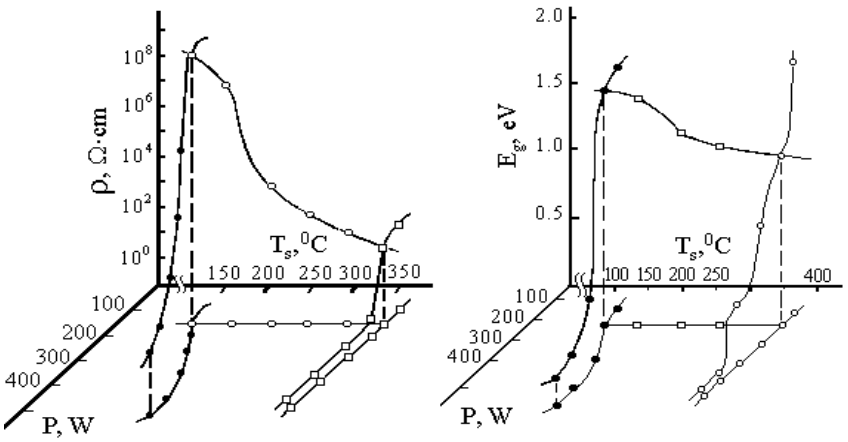


Рис. 2. Зависимости электропроводности a – Si:H
от количества примесных атомов в исходной газовой смеси

Создание гидрогенизированного аморфного кремния позволило развить ещё одно направление химической модификации, заключающееся в создании некристаллических твердых растворов $A^{IV}B^{IV}$ (например, a-Si_XGe_{1-X}:H и a–Si_XC_{1-X}:H), которое, наряду с чувствительностью к примесям замещения, позволяют изменять ширину запрещенной зоны некристаллического полупроводника в широком диапазоне (от 1,1 до 2,6 эВ), что широко используется для совершенствования параметров фотоэлектрических преобразователей энергии.

Следует отметить, что методы химической модификации свойств некристаллических полупроводников, при всех их особенностях, описанных выше, по сути являются попыткой распространения метода легирования примесями замещения на некристаллические полупроводники. Однако, в случае некристаллических полупроводников имеется и другой, принципиально отличный от предыдущих, метод управления их свойствами. Отсутствие трансляционной симметрии в этих материалах открывает возможность управлять свойствами путем изменения атомной структуры некристаллического полупроводника при неизменном химическом составе. Метод получил название структурной модификации свойств [5]. Анализ возможностей метода [6] показал, что существуют, по крайней мере, четыре уровня структурной модификации, отличающиеся различными изменениями структуры (на уровнях ближнего или среднего порядка в расположении атомов – 1 и 2 уровни; на уровне морфологии – 3 уровень и на уровне подсистемы дефектов – 4 уровень) и приводящие к изменению различных групп свойств. Так, воздействие на структуру на 1 уровне приво-

дит к значительным изменениям всех фундаментальных свойств материала. На рис.3 приведены зависимости удельного сопротивления и оптической ширины запрещенной зоны пленок a-C:H, от температуры подложки (а) и мощности ВЧ-разряда (б) при получении их методом высокочастотного ионно-плазменного распыления.



a b

Рис. 3. Зависимость свойств пленок a-C:H от режимов изготовления

Изменения на 2 уровне при неизменном ближнем порядке приводят к изменению макросвойств (вязкость, микротвердость, модуль Юнга, энергии активации фазовых переходов). Изменения на третьем уровне влияют на свойства, чувствительные к макронеоднородностям, в то время как изменения на 4 уровне приводят к модификации спектра локализованных состояний в щели подвижности и сдвигу уровня Ферми.

Развитие методов химической и структурной модификации свойств некристаллических полупроводников показало, что ряд экспериментальных результатов не удается объяснить в рамках изложенных выше моделей. Например, уменьшение удельного сопротивления некристаллического селена до 6 порядков величины при введении малого количества (до $5\cdot10^{-3}$ ат. %) кислорода. Анализ этого и подобных эффектов позволил развить ещё один метод управления свойствами – структурно-химическая модификация свойств некристаллических полупроводников. Суть метода заключается в том, что вводимая примесь изменяет атомную структуру материала, что в свою очередь приводит к наблюдаемому изменению свойств [7].

Ещё одним методом управления свойствами некристаллических полупроводников является фазовая модификация, заключающаяся в создании в материале новых, как правило, кристаллических фаз и в изменении соотношения различных фаз. Различие оптических свойств кристаллической и аморфной фаз материала позволило создать устройства записи оптической информации (компакт диски). А существенное различие электропроводности упомянутых фаз стало основой интегральных схем энергонезависимой памяти на фазовых переходах [8].

В заключение следует отметить, что в реальных технологических процессах часто происходит комплексное воздействие на свойства материала нескольких из перечисленных выше факторов. Так, при химической модификации аморфных алмазоподобных кремний-углеродных плёнок атомами переходных металлов, последние образуют нанокристаллы проводящей фазы карбидов металла. При этом углерод для создания этой фазы изымается из кремний - углеродной матрицы, благодаря чему изменяется как химический состав, так и атомная структура последней. Таким образом, изменения свойств происходят как за счет образования новой фазы (химическая и фазовая модификации), так и за счет структурно-химической модификации исходной кремний - углеродной матрицы.

Литература

1. Н. Горюнова, Б. Коломиец. Доклады АН СССР, Физика, 20, 1496 (1956).
2. S. Ovshinsky. Proceeding of the XVII-th Intern. Conf. on Amorthous and Liquid Semiconductors, Edinburgh, 519 (1977).
3. W. Spear, P. Le Comber. Solid State Communication, 17, 1193 (1975).
4. А. Попов. Физика и технология неупорядоченных полупроводников. М. Изд. дом МЭИ. 272 с (2008).
5. А. Попов, Н. Михалев, В. Шеметова. Philosophical Magazine B, 47, 73 (1983).
6. А. Попов, В. Воронцов, И. Попов. Физика и техника полупроводников, 35, 665 (2001).
7. А. Баринов, А. Попов, И. Мирошникова, Т. Чуканова. Аморфные и микрокристаллические полупроводники: сб. тр. Междун. конф. СПб, 2021, с. 29-30.
8. С. Козюхин, П. Лазаренко, А. Попов, И. Еременко. Успехи химии, 91, **RCR** 5033 (2022).

POSSIBILITIES OF SEMICONDUCTOR MATERIAL PROPERTIES CONTROLLING IN THE ABSENCE OF TRANSLATION SYMMETRY

Popov A. I., Miroshnikova I. N.

National Research University "MPEI", Moscow

The loss of translational symmetry in the arrangement of atoms leads to the lack of material properties sensitivity to substitution impurities and requires the development of new methods for controlling the properties. The paper analyzes alternative methods for controlling the properties of non-crystalline semiconductors. Possible approaches are considered when using methods of chemical modification of properties, methods of structural, structural-chemical and phase modification of properties. The effectiveness of the listed methods is assessed.

УДК 546.221 25-32

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДЛОЖКИ И ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКИ НА СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ZnS

Здравомыслов Д.М.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В работе проведено исследование свойств пленок ZnS при изменении температуры подложек и ионной бомбардировки растущих пленок. Показано, что при отсутствии дополнительной ионной бомбардировки наблюдается резкое уменьшение показателя преломления n и размера кристаллитов в области низких температур. Установлено, что при понижении температуры подложек происходит некоторое обогащение пленок ZnS серой.

Известно, что изменяя температуру подложек во время осаждения тонких пленок, можно в широких пределах регулировать величину и знак внутренних механических напряжений [1-4]. Однако, при уменьшении температуры подложек снижается плотность пленок, с которой связаны их оптические свойства. С другой стороны, ионная бомбардировка растущих пленок обычно приводит к повышению плотности слоев [5]. Поэтому изучение совместного влияния этих двух факторов представляет определенный интерес.

В работе в качестве объекта исследований были выбраны пленки ZnS, которые имеют высокий показатель преломления (n= 2,35), широкую полосу пропускания (0,4-13 мкм), большой коэффициент нелинейности и находят широкое применение в технике[6,7].

Пленки наносились в вакуумной системе в рабочей камере при давлении $3\cdot10^{-4}$ Па. Температура подложек регулировалась от –60 до +50 °С. Охлаждение подложек обеспечивалось прокачкой жидкого азота через пустотелый медный держатель подложек. Для улучшения адгезии, непосредственно перед нанесением проводилась ионная очистка подложек в течение 1 мин ионами Ar^+ с энергией 600 эВ при давлении $7\cdot10^3$ Па и плотности тока 200 мкА/см^2. В качестве подложек использовались окисленные пластины Si или пластины кварца. Испарение ZnS-гранул осуществлялось из Al_2O_3-тиглей с резистивным разогревом. Скорость нанесения составляла 0,45 нм/с, толщина пленок регистрировалась кварцевым датчиком.

Для определения состава пленок был использован метод обратного резерфордовского рассеяния. В этом случае пленки ZnS наносили на угольные подложки. Кристаллическая структура, ориентация и размеры зерен определялись при помощи рентгеновского дифрактометра, внутренние напряжения - по измерению прогиба кварцевых подложек на интерферометре до и после нанесения пленок. Показатель преломления, толщина слоев и величина диэлектрических потерь измерялись методом волновода с использованием He-Ne- лазера (λ=633 нм).

Установлено, что при понижении температуры подложек $T_п$ происходит некоторое обогащение пленок серой в пленках ZnS.

На рис. 1 приведены зависимости показателя преломления *n*, а на рис. 2 - зависимость размеров зерен в пленках ZnS от температуры подложек $T_п$.

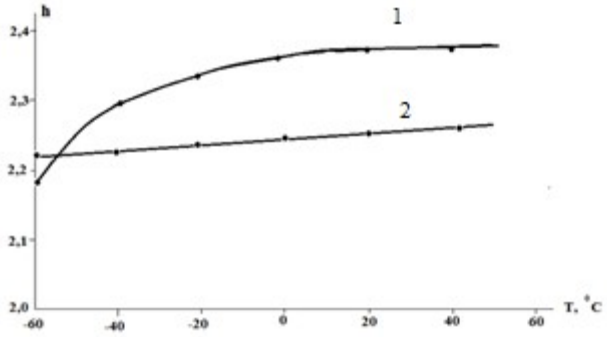


Рис. 1. Зависимость показателя преломления *n* в пленках ZnS от температуры подложек $T_п$: 1 – в отсутствие дополнительной ионной бомбардировки, 2 – после ионной бомбардировки

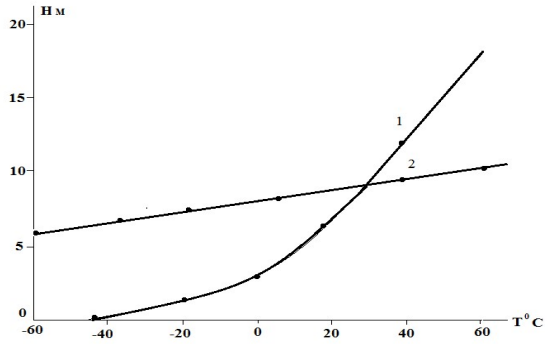


Рис. 2. Зависимость размеров зерен в пленках ZnS от температуры подложек $T_п$: 1 – в отсутствие дополнительной ионной бомбардировки, 2 – после ионной бомбардировок

Видно, что при отсутствии дополнительной ионной бомбардировки наблюдается резкое уменьшение показателя преломления п и размера кристаллитов в области низких температур подложки.

Литература

1. Tonkikh A.A., Dubrovskii V.G., Cirlin G.E., Egorov V.A., Ustinov V.M., P.Werner. Temperature dependence of the quantum dot lateral size in the Ge/Si(100) system // Phys. Stat. Sol (b). 2003. V. 236, №. 1. P.1 - 3.
2. Мустафаев Г.А., Уянаева М.М., Мустафаев А.Г. Влияние условий осаждения поликремния на характеристики приборов //Материалы V Международной научно-технической конференции «Микро- и нанотехнологии в электронике», Нальчик, 2012, с. 72-74.

3. Мустафаев Г.А., еркесова Н.В., Панченко В.А., Мустафаев А.Г. Влияние технологических факторов на дефектность структур кремний на сапфире // Электроника и электротехника. – 2017. – № 1. – с. 7-15.
4. Мустафаев Г.А., Черкесова Н.В. Трехмерные интегральные схемы // учебное пособие, Нальчик: КБГУ, 2016, 89 с.
5. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Черкесова Н.В. Легированные пленки поликристаллического кремния // Материалы VIII Международной научно-технической конференции «Микро- и нанотехнологии в электронике», Нальчик, 2016, с. 216-218.
6. Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С. Алферов Ж.А, Бимберг Д. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // ФТП. 1998. Т. 32. № 4. С. 385 - 410.
7. Борисенко Д.Н. Получение и исследование свойств углеродных наноматериалов и нанокристаллов широкозонных полупроводников: автореф. дис. ... канд. техн. наук. Черноголовка, 2005. 24 с.

EFFECT OF SUBSTRATE TEMPERATURE AND ION BOMBARDMENT ON THE PROPERTIES OF ZNS THIN FILMS

Zdravomyslov D.M.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

The study of the properties of ZnS films under changing substrate temperatures and ion bombardment of growing films is carried out. It is shown that in the absence of additional ion bombardment, there is a sharp decrease in the refractive index n and the size of crystallites in the low temperature range. It has been established that when the temperature of the substrates decreases, some enrichment of the ZnS films with sulfur occurs.

УДК 538.9 25-35

НАНОЧАСТИЦЫ, КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ, НАНОКРИСТАЛЛЫ: СОПОСТАВЛЕНИЕ СИНТЕЗА, СВОЙСТВ, ПРИМЕНЕНИЙ

Жуков Н.Д.

Общество с ограниченной ответственностью «НПП Волга», Саратов.

Проведено сопоставление полупроводниковых наночастиц, квантовых точек и нанокристаллов, изготавливаемых коллоидным синтезом. Отличительными особенностями нанокристаллов являются требования по морфологии и совершенству кристаллической структуры, что обеспечивает проявления свойств электронного квантового транспорта (квантовые проводимость, осцилляции, запутанность) и применений в наноэлектронике информационных квантовых систем.

Наночастицы, квантовые точки, нанокристаллы имеют, по меньшей мере, тридцатилетнюю историю с поэтапным развитием исследований их свойств – от простого к сложному [1]. Наночастицы – это частицы с размерами до 100 nm, основными отличительными свойствами которых являются большие «насыпная» поверхность и химическая активность. Квантовые точки – это наночастицы с размерами до 10 nm с основными отличительными свойствами размерного экситонного ограничения, кулоновской блокады и лестницы, баллистического туннельного электронного транспорта. В основе физики квантовых точек лежат модели нульмерного объекта. Структурное совершенство наночастиц и квантовых точек ограничено свойствами шарика, а кристаллическое совершенство либо не рассматривается, либо, по умолчанию, принимается таким же, как для большого кристалла. Нанокристаллы – это наночастицы разной морфологической одно-, двух и трёхмерной формы с размерным электронным квантованием хотя бы по одному из геометрических направлений. Свойства квантовой размерности неизбежно связаны с требованиями к совершенству кристаллической структуры.

Применения рассматриваемых физических объектов отличаются благодаря ограничениям их свойств: наночастицы – это, в основном, составляющие композитных материалов, называемых, благодаря чему, нанокомпозитами; квантовые точки – это, в основном, фотолюминофоры с их масштабным использованием в различных вариантах дисплеев; нанокристаллы – пока не нашли масштабных применений из-за их физической сложности, но реально ожидают использования в элементной базе супер- и фотонных компьютеров, квантовой связи, биоинформатике.

Методы синтеза рассматриваемых физических объектов, как правило, определены коллоидной химией и отличаются деталями и тонкостями технологических процессов, определяющих форму, дисперсию размеров, кристаллическое совершенство наночастиц.

Коллоидный синтез наночастиц проводится, как правило, в среде высококипящих органических растворителей (метод горячей инъекции), одновременно выполняющих роль координатора (ускорителя) процесса. Правильно подобранные условия синтеза позволяют получить наночастицы наиболее однородные по составу, с минимальным разбросом форм и размеров, и, соответственно, характеризующиеся максимальной однородностью структурно-физических и физико-химических свойств [2].

Спецификой синтеза нанокристаллов является более детальное рассмотрение условий образования совершенной кристаллической структуры. При этом используют как химические, так и физические подходы. Это связано с пограничным положением, занимаемым коллоидной химией между химией и физикой, что оказывает сильное влияние на его методологию. Кинетическая модель нуклеации при синтезе представляется как метастабильная система локально выделенных статистически независимых нанозон, в каждой из которых может возникнуть один, и только один, зародыш радиуса, близкого к критическому. Полагается, что это событие возникает в результате локальной флуктуации состава и приводит к формированию жизнеспособного зародыша в данной нанозоне. Процесс его появления рассматривается как переход броуновской наночастицы, молекулы или атома через потенциальный барьер. Этот переход «лишнего» объекта создаёт в нанозоне необходимое для фазового перехода локальное пересыщение.

При образовании зародышей нанокристаллов (нуклеации) в растворе и последующих изменениях их состояния действуют термодинамические механизмы, описываемые в простых случаях изменением энергии системы кристалла, выраженным потенциалом (энергией) Гиббса ΔG. Для гомогенного раствора и кубической формы зародышей [3]: $\pm\Delta G \sim (9/16)kT(M^{-1}\ln S)a^3 - 6\gamma^* a^2$,где: S – энтропия; M – молярный объём осаждаемой фазы; a – размер наночастицы (ребра куба), γ^* – удельная поверхностная энергия наночастицы. Здесь знак «+» отвечает процессу кристаллизации, «–» – растворения. Случай $\Delta G \sim 0$ соответствует критическому размеру зародыша: $a^* \sim 11\gamma^* M(kT\ln S)^{-1}$. При условии, что раствор максимально обеднён осаждаемой фазой (C_{sa}~0), следует правило Оствальдовского созревания – зародыши размеров $a<a^*$ растворяются, а $a>a^*$ – разрастаются. Необходимо заметить, что при невыполнении условия C_{sa}~0, процесс может идти по смешанной модели – созревания и кинетической, отмеченной выше. Этот случай может реализоваться, на наш взгляд, при использовании некоординирующего (несольватирующего) растворителя.

Для задачи получения совершенного коллоидного нанокристалла термодинамическое рассмотрение имеет принципиальное значение. Поскольку с ростом нанокристалла его объёмная энергия увеличивается, а влияние поверхностной – уменьшается, при некотором размере нанокристалла a_{max} поверхностная энергия достигнет наименьших значений, на-

пример, энергии Ван-дер-Ваальса, после чего кристалл будет нарастать неуправляемо, с присоединением атомов и молекул-«чужаков».

Определение поверхностной энергии нанокристалла является сложной теоретической и практической задачей. Для оценок можно принять, что энергия образования нанокристалла $H_{обр}$ равна энергии одной электронной связи, умноженной на их число N в нём. Для самого простого варианта кубической решётки $N \sim (a/a_0)^3$ пересчёт на поверхностную энергию E_s приведёт к пропорции $E_s/H_{обр} \sim 6a_0/a_{max}$. Откуда – $a_{max} \sim 6a_0(H_{обр}/E_s)$. А формула для вычислений будет иметь следующий вид: $E_s \sim 6H_{обр}\, a_0/a_n$.

Принимая E_c как энергию Ван-дер-Ваальса, вычисляемую из расчёта нескольких kT на одну связь [4] и числа связей в элементарной, для наших случаев полупроводников кубической, ячейке, можно оценить наибольшее значение E_c величиной 20 кДж/моль, что примерно соответствует оценкам других авторов. Исходя из этого, можно оценить наибольший размер совершенного нанокристалла a_{max} для нанокристаллов исследуемых вариантов полупроводников: CdSe – 17, PbS – 16, HgSe – 10, InSb – 6 nm.

На рис. 1 представлены рассчитанные зависимости поверхностной энергии от размера нанокристаллов разных полупроводников и энергия ван-дер-Ваальса как предельное значение.

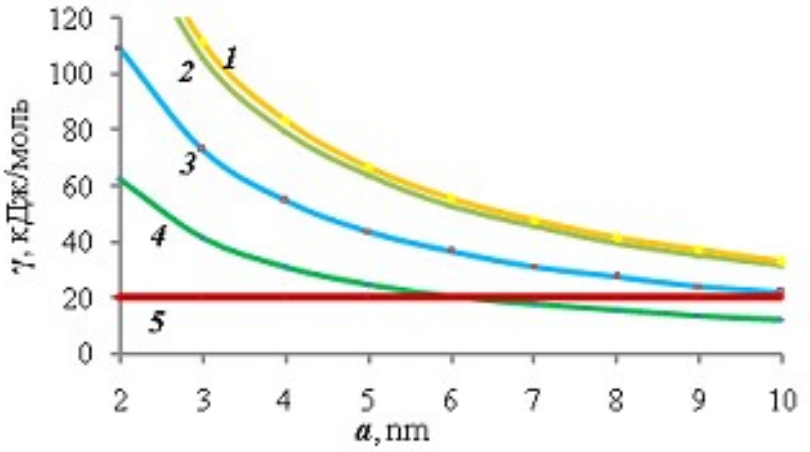


Рисунок 1 – Зависимости поверхностной энергии от размера кубического нанокристалла разных полупроводников: 1 – CdSe; 2 – PbS; 3 – HgSe; 4 – InSb. 5 – Энергия ван-дер-Ваальса

Свойства всех вариантов наночастиц отличаются принципиальным обстоятельством – электронным размерным квантованием. Наилучшим образом это проявляется в нанокристаллах узкозонных полупроводников, для которых наблюдаются специфические характерные свойства – квантовая проводимость и квантовые токовые осцилляции. На вольтамперных характеристиках нанокристаллов эти проявления выглядят как квазипериодические небольшие по току пики и одиночные резкие большие пики тока при определённых значениях напряжения (рис. 2).

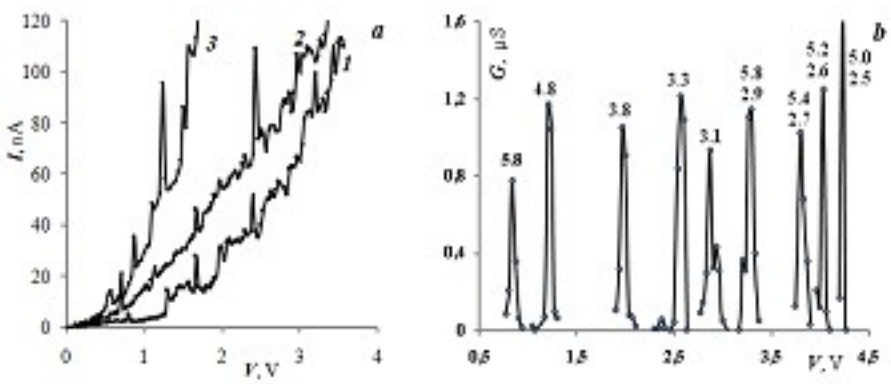


Рисунок 2 – ***a***: ВАХ: 1, 2, 3 – NC-InSb; ***b*** – пики проводимости, цифры над кривыми – вычисленные значения размеров a_n для случаев $q = 1$ (одиночные и нижние) и $q = 2$ (верхние)

В квантоворазмерном нанокристалле проводимость рассматривается нами в модели одномерной глубокой протяжённой квантовой ямы с проявлениями в ней инжекции электрона, его транспорта и туннельной эмиссии. Движение электрона внутри нанокристалла описывается решением уравнения Шредингера и дебройлевским волновым процессом. Значения энергии электрона $\tilde{E}_{qn}=h^2q^2(8ma_n^2)^{-1}$ определяются размерным ограничением электронного волнового процесса и рассчитываются в зависимости от типа полупроводника (значений эффективной массы электрона m/m_0) и размеров нанокристалла a_n. Формула для вероятности K^* прохождения электрона через нанокристалл, как глубокую прямоугольную протяжённую потенциальную яму, в одномерной одноэлектронной модели могут быть получены в следующем виде:

$$K^* \propto \exp[-4\pi a_n(2m\tilde{E}_k)^{1/2}/h] \approx \exp[-4(q^2-2.7Va_n^2m/m_0)^{1/2}] = \exp[-4V^*],$$

где: $\tilde{E}_k \sim (\tilde{E}_{qn}-V)$ – кинетическая энергия электрона; q – квантовое число; h – постоянная Планка; $V^* \sim (q^2-2.7Va_n^2m/m_0)^{1/2}$ – безразмерный параметр, зависящий от напряжения V– разности потенциалов на нанокристалле; при вычислениях: $\tilde{E}_k$, $\tilde{E}_{qn}$, V– в электронвольтах, a_n – в нанометрах.

Формулу для ВАХ для случая, когда ток лимитируется вероятностью прохождения электрона через нанокристалл как протяжённый потенциальный барьер, можно записать, как:

$$I \propto K^* \propto \exp[-4V^*].$$

А условие резонанса и квантовой проводимости G можно оценить, продифференцировав ВАХ:

$$G = \mathrm{d}I/\mathrm{d}V = -4I(\mathrm{d}V^*/\mathrm{d}V) \approx 5.4(I/V^*)a_n^2m/m_0. \quad (1)$$

Как следует из формулы (1), условие резонанса и квантовой проводимости ($V^* \sim 0$) –

$$q^2 \sim 2.7Va_n^2m/m_0. \quad (2)$$

Физически это условие означает, что потенциальный барьер квантовой ямы становится прозрачным. По формуле (2) можно построить номограммы связи размера a_n и напряжения для проявлений первого q=1 и вто-

рого q=2 резонансов – рис. 3. При этом для значений a_n слева от кривых условие конфайнмента выполняется, справа – нет.

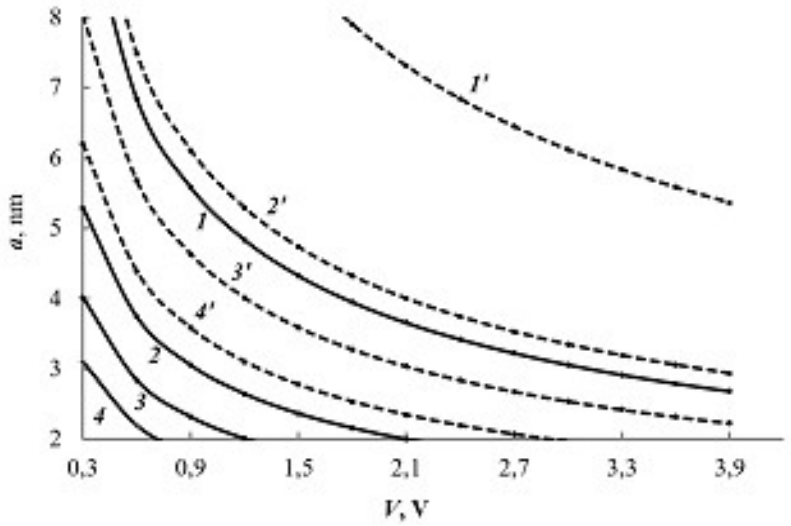


Рисунок 3 –

Номограмма связи размера QP и напряжения (энергии электрона) для проявления квантовой проводимости (V*=0)в резонансах q =1: *1*– QP-InSb; *2*– QP-HgSe; *3* – QP-PbS;

4 – QP-CdSe;
q =2: *1'*– QP-InSb; *2'*– QP-HgSe; *3'* – QP-PbS;

4' – QP-CdSe;

Квантово-волновой процесс транспорта электрона в глубокой протяжённой квантовой яме сопровождается пространственно-временными осцилляциями заряда, в частности, осцилляциями Блоха. Эти осцилляции – квантово-механическое явление, обусловленное пространственно-временной неустойчивостью заряда (электрона), находящегося в периодическом потенциале кристаллической решётки и, в частности, под действием электрического поля. Физическая суть явления обусловлена отражениями дебройлевской волны от кристаллографических плоскостей так, что электрон в пространстве зонной диаграммы нанокристалла совершает колебательное движение вдоль оси волнового вектора около начала координат в схеме повторяющихся зон Бриллюена.

Применения нанокристаллов в нашем варианте предлагается на основе создания проводящей наноячейки с квантоворазмерными частицами, которая может быть элементом одноэлектронного транзистора, мемристора, однофотонной пары. При этом физико-химическими основами создания наноячеек являются процессы и модели коллоидного синтеза нанокристаллов и их адресного размещения методом ПЛБ-моноплёнок, рассмотренные в данной работе, и явления квантовой проводимости с учётом влияния на неё излучений. Такая наноячейка может стать основой для формирования чипа наносхемы на одноэлектронном и однофотонном принципах. При этом рабочими в наносхеме будут следующие наноэлементы.

Литература

1. Наночастицы, наносистемы и их применение. Ч.1. Коллоидные квантовые точки /ред. В. А. Мошников. – Уфа: Аэтерна, 2015. – 236 с. ISBN 978-5-906808-95-0.

2. Р.Б. Васильев. Физико-химические основы формирования полупроводниковых наноструктур соединений A_2B_6 с заданными оптическими свойствами в коллоидных системах. Дисс. доктора химических наук. Москва, 2021.
3. Дубовик А.Ю., Получение коллоидных наноматериалов и исследование их оптических свойств– СПб: Университет ИТМО, 2020. – 52 с.
4. Д.Н. Израелашвили. Межмолекулярные и поверхностные силы. Научный мир. 2011. 457 с.
5. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. Основы наноэлектроники (М.: Логос, 2006), 495 с.

NANOPARTICLES, QUANTUM DOTS, AND NANOCRYSTALS: SYNTHESIS, PROPERTIES, AND APPLICATIONS

Zhukov N.D.

Limited Liability Company NPP Volga, Saratov

A comparison of semiconductor nanoparticles, quantum dots, and nanocrystals produced by colloidal synthesis is carried out. The distinctive features of nanocrystals are the requirements for morphology and perfection of the crystal structure, which ensures the manifestation of the properties of electronic quantum transport (quantum conductivity, oscillations, entanglement) and applications in nanoelectronics of information quantum systems.

УДК 539.21; 539.23 25-37

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ГАФНИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО АЛЮМИНИЕМ

Бобылев А.Н., Шулаев Н.А., Касеинов Р., Кирнев В., Удовиченко С.Ю.

Тюменский государственный университет, Тюмень

Мемристоры, или резисторы с памятью, являются наиболее перспективным элементом наноэлектроники, способных изменить технологии хранения и обработки информации за счет способности сочетать функции памяти и логических элементов в одном устройстве. Особый интерес в последние годы вызывают мемристоры на основе диоксида гафния HfO_2, что обусловлено их совместимостью с современными КМОП-технологиями и высокой стабильностью характеристик [1].

Легирование алюминием Al – один из наиболее эффективных подходов модификации структур HfO_2 для использования в мемристорах [2, 3]. Он обеспечивает возможность контроля концентрации дополнительных кислородных вакансий, играющих ключевую роль в механизме переключения [4], и делает устройства более предсказуемыми и надежными [5].

Существуют различные технологии изготовления тонких плёнок диоксида гафния, легированных алюминием, самая распространенная – атомно-слоевое осаждение (АСО) [1, 6, 7, 8]. В АСО легирование обеспечивается дискретным нанесением слоёв алюминия и оксида гафния в различных соотношениях, что не может обеспечить равномерной концентрации примесей легирующего материала по толщине плёнки. Сравнительный анализ трех основных стратегий внесения примеси – использования Al в качестве верхнего электрода HfO_2/Al, формирования промежуточного слоя HfO_2/Al/HfO_2 и объемного легирования Al:HfO_2 – выявил, что последний метод обеспечивает наилучшие характеристики стабильности и воспроизводимости параметров переключения [8].

Для обеспечения равномерной концентрации легирующей примеси оксидов, может применяться метод реактивного магнетронного распыления. В литературе упоминается два различных подхода. Метод реактивного магнетронного распыления при совместном использовании двух магнетронов [3], где варьирование составов происходило за счет изменения парциального давления реактивного газа (O_2), или распылении составной мишени с варьированием активной площади поверхности каждого материала [9]. Эти методики не способны обеспечить оптимальный контроль за степенью легирования, а также стехиометрией пленок.

В данной работе предложен метод реактивного совместного распыления материалов мишеней, обеспечивающего контроль за этими параметрами.

Большинство исследований ограничиено анализом электрических характеристик мемристоров, при этом физико-химические параметры активного слоя остаются недостаточно изученными. В частности, редко при-

водятся данные о элементном составе [10], ширине запрещенной зоны (Eg) и параметрах элементарной ячейки кристалла. Отсутствие этих данных затрудняет корреляцию экспериментальных результатов с теоретическими моделями, описывающими механизмы переключения сопротивления.

Так как влияние концентраций примеси Al более 3,7 % по металической решётке на электрические характеристики уже рассматривалось в работах [3, 9], интерес представляют малые концентрации примесей и способы их контроля.

При отработке режима распыления HfO_x найдена максимальная скорость осаждения стехиометрического оксида гафния (рис. 1) R_{HfO2}=(0.46±0.01) Å/c, большие скорости не достижимы в силу особенностей установки. Для достижения доли Al менее 3,5 %, скорость осаждения тонкой пленки R_{Al2O3}, должна находиться в пределах 0.01–0.02 Å/c. Такие скорости осаждения при распылении на импульсном магнетроне достигнуты при мощности 33W в режиме стабилизации по мощности.

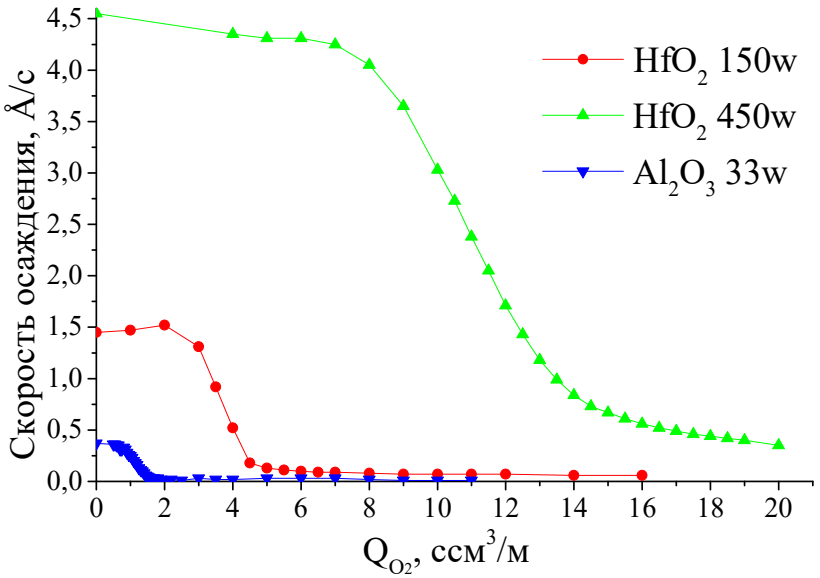


Рис. 1. Зависимость скорости осаждения пленок HfOx и AlOx в зависимости от расхода кислорода. Кривые обладают тремя характерными областями, правая асимптотическая часть относится к осаждению стехиометрического материала

Состав пленок с более низким содержанием Al контролировался за счет снижения и фиксации мощности разряда импульсного магнетрона. Для определения и подтверждения стабильности получаемого состава, изготовлена серия пленок толщиной 50 нм для каждого значения мощности. Состав подтвержден элементным анализом (рис. 2)

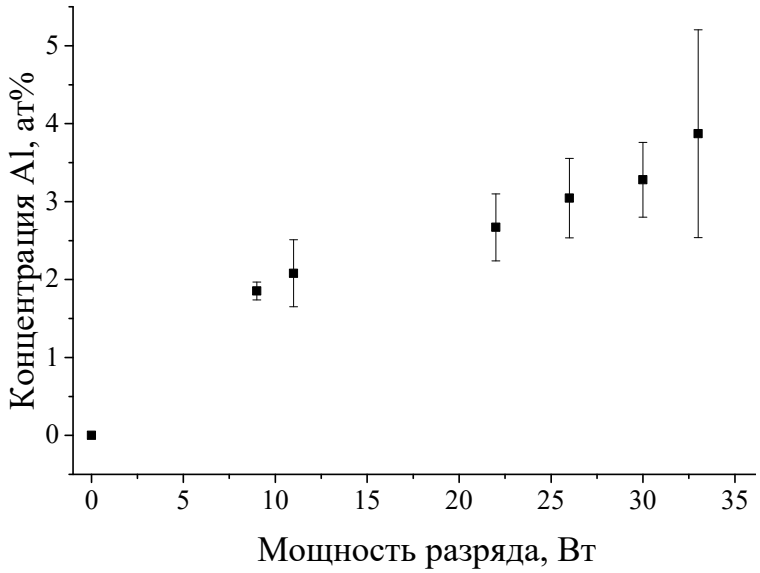


Рис. 2. Зависимость среднего значения доли примеси Al от мощности разряда магнетрона

Оценка ширины запрещенной зоны произведена с использованием построения Тауца для пересчета данных UV-спектрометрии. Учтено, что для соединения HfO_2 характерно наличие непрямых межзонных переходов [11]. Ширина запрещенной зоны чистого HfO_2 составила 5.92 эВ [12], (рис. 3). При повышении доли легирующей примеси наблюдается увеличение ширины запрещенной зоны [2] материала (табл.).

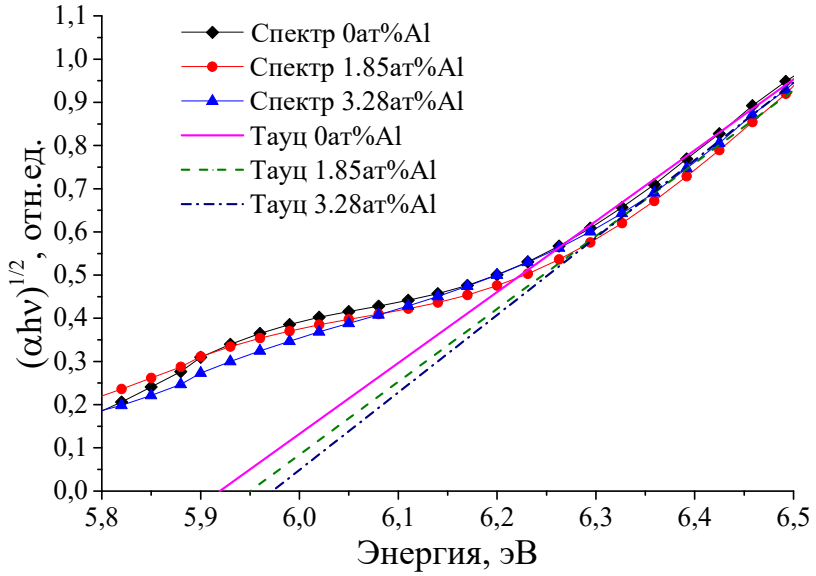


Рис. 3. Преобразованный спектр пропускания и построенные линии Тауца

Табл. Измеренные параметры

$C_{(Al)}$, ат. %	a, Å	b, Å	c, Å	β, °	V, Å3	Rwp	Rp	χ2	Eg, эВ
0	5,159	5,301	6,480	91,63	177,1	3,31	2,21	1,67	5,92
1,85	5,170	5,306	6,496	91,35	180,1	3,10	2,01	1,55	5,95
3,28	5,158	5,366	6,943	90,63	192,2	3,01	2,00	1,50	5,97

Результаты рентгеновской дифракции позволили оценить параметры элементарной ячейки изготовленных пленок (табл. 1), образуемое соединение представляет собой твердый раствор внедрения Al на основе моноклинной элементарной ячейки HfO_2. По мере увеличения доли примеси происходят структурные изменения, что подтверждает гипотезу о том, что при реактивном магнетронном распылении образуется твердый раствор внедрения оксидов материалов мишеней, а не образование агрегатов отдельных фаз, что важно при моделировании физических процессов работы мемристоров.

Разработана методика тонкого контроля состава тонких плёнок при одновременном реактивном распылении через контроль мощности разряда и потока реактивного газа. Одновременное распыление стехиометрических HfO_2 и Al_2O_3 позволяет синтезировать твердый раствор внедрения без разделения фаз. Легирование HfO_2 алюминием увеличивает ширину запрещенной зоны и объем элементарной ячейки. Полученные данные позволяют проводить систематические исследования мемристоров с точным контролем состава и улучшить контроль количества кислородных вакансий.

Работа выполнена при финансировании Министерством науки и высшего образования в рамках НИР ГЗ (шифр FEWZ-2024-0020). Результаты спектрометрии получены с использованием оборудования ЦКП «Рациональное природопользование и физико-химические исследования» Тюменского государственного университета.

Литература

1. M. Lederer, K. Seidel, R. Olivo, T. Kämpfe, and L.M. Eng, “Effect of Al_2O_3 interlayers on the microstructure and electrical response of ferroelectric doped HfO_2 thin films,” Front. Nanotechnol., vol. 4, 2022.
2. C.-S. Peng, W.-Y. Chang, Y.-H. Lee, M.-H. Lin, F. Chen, and M.-J. Tsai, “Improvement of resistive switching stability of HfO_2 films with Al doping by atomic layer deposition,” Electrochem. Solid State Letters, vol. 15, no. 4, p. H88, 2012.
3. A.D. Paul, S. Biswas, P. Das, H.J. Edwards, V.R. Dhanak, and R. Mahapatra, “Effect of aluminum doping on performance of HfO_x-based flexible resistive memory devices,” IEEE Trans. Electron Devices, vol. 67, no. 10, pp. 4222–4227, 2020.
4. J. Molina-Reyes and R. Valderrama-B, “Role of oxygen vacancies on the resistive switching characteristics of MIM structures fabricated a low temperature,” in 2015 IEEE International Conference on Electron Devices and Solid-State Circuits (EDSSC), 2015.
5. Y.S. Chen, B. Chen, B. Gao, L.F. Liu, X.Y. Liu, and J.F. Kang, “Well controlled multiple resistive switching states in the Al local doped HfO_2 resistive random access memory device,” J. Appl. Phys., vol. 113, no. 16, 2013.

6. S. Roy et al., “Toward a reliable synaptic simulation using Al-doped HfO_2 RRAM,” ACS Appl. Mater. Interfaces, vol. 12, no. 9, pp. 10648–10656, 2020.
7. L. Wu, H. Liu, J. Li, S. Wang, and X. Wang, “A multi-level memristor based on Al-doped HfO_2 thin film,” Nanoscale Res. Lett., vol. 14, no. 1, 2019.
8. T. Guo, T. Tan, Z. Liu, and B. Liu, “Effects of Al dopants and interfacial layer on resistive switching behaviors of HfO_x film,” J. Alloys Compd., vol. 708, pp. 23–28, 2017.
9. T. Guo, T. Tan, Z. Liu, and B. Liu, “Oxygen vacancy modulation and enhanced switching behavior in HfO_x film induced by Al doping effect,” J. Alloys Compd., vol. 686, pp. 669–674, 2016.
10. A.N. Bobylev, A.A. Gubin, M.A. Sviridenko, N.A. Shulaev, and S.Y. Udovichenko, “Influence of fabrication modes on magnetron-sputtered ZrO_2-based memristors’ properties,” in 2024 IEEE 25th International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM), 2024, pp. 20–23.
11. T.V. Perevalov, V.A. Gritsenko, S.B. Erenburg, A.M. Badalyan, H. Wong, and C.W. Kim, “Atomic and electronic structure of amorphous and crystalline hafnium oxide: X-ray photoelectron spectroscopy and density functional calculations,” J. Appl. Phys., vol. 101, no. 5, 2007.
12. A. Chernikova et al., “Ultrathin $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ ferroelectric films on Si,” ACS Appl. Mater. Interfaces, vol. 8, no. 11, pp. 7232–7237, 2016.

УДК 621.383.8 25-41

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ УРОВНЕЙ ПРОТЕКАНИЯ В СВИНЦОВО-СИЛИКАТНЫХ СТЕКЛАХ

Еремина А.Ф.[1], Пухаева Н.Е.[1,2], Арчегова О.Р.[1], Гончаров И.Н.[1,3], Касумов Ю.Н.[1,3], Чулухадзе Г.Р.[1], Тибилов В.В.[1]

[1]Северо-Осетинский государственный университет, Владикавказ
[2]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна
[3]Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ

В статье рассматриваются результаты инструментального исследования оптических и энергетических свойств свинцово-силикатных стекол, используемых в производстве вторично-эмиссионных канальных умножителей, до и после проведения некоторых важнейших технологических операций. Отмечается изменение их спектров поглощения, а также значений ширины запрещенной зоны, предлагается механизм возникновения свободных электронов в структуре, обуславливающий изменение ее электропроводности.

Свинцово-силикатное стекло весьма востребовано в оптике, фотонике, оптронике, микроэлектронике и других высокотехнологичных областях, поскольку представляет собой уникальный материал, обладающий особыми оптическими свойствами, такими как широкий спектр прозрачности, высокий коэффициент преломления и др. [1]. Понимание механизмов изменения и преобразования его различных параметров, в частности поглощательных, эмиссионных свойств, способствует эффективному поиску возможности выгодного преобразования его характеристик, а также созданию новых материалов с заданными качествами [2, 3].

Целью данной работы является изучение края поглощения свинцово-силикатного стекла, широко используемого в производстве изделий вторично-эмиссионной электроники и структур, выполненных на его основе. Исследование направлено на выявление закономерностей изменения оптических характеристик стекла в зависимости от его состава и внешних условий.

Для достижения указанной цели были поставлены следующие задачи: изучение теоретических основ оптических свойств свинцово-силикатного стекла, разработка методик исследования взаимодействия стекла с частицами, проведение соответствующих экспериментов и анализ результатов. Для исследования поглощательных характеристик свинцово-силикатного стекла использовались методы спектрофотометрии, которые позволяют точно измерять спектры поглощения и выявлять изменения в зависимости от состава и внешних условий. Измерение проводились при комнатной температуре на уф спектрометре марки ThermoEvolution 300 на образцах стекол со специально обработанными поверхностями.

Образцы свинцово-силикатного стекла $6Ba_4$ были изготовлены путём вырезки его из трубки для вытяжки одножильных структур (ОЖС) – заго-

товок, необходимых в производстве канальных электронных умножителей, а образцы стекла А230 вырезались из стержня ОЖС. Они были обработаны в обезжиривающих растворах и сушились при температуре 100 °С. Также исследовались, образцы стекла, прошедшие характерные операции спекания и восстановления. Они с целью очистки травились в растворах кислот HCl и H_2SO_4. После травления в кислотах они проходили очистку в щелочных растворах и тщательную промывку в дистиллированной воде. Промытые образцы сушились путём нагрева на воздухе при температуре 100 °С. Приготовленные таким образом стекла помещались в загрузочную камеру держатель образцов УФ-спектрометра и подвергались исследованию спектров поглощения оптического излучения.

На рисунке 1 представлены результаты измерений.

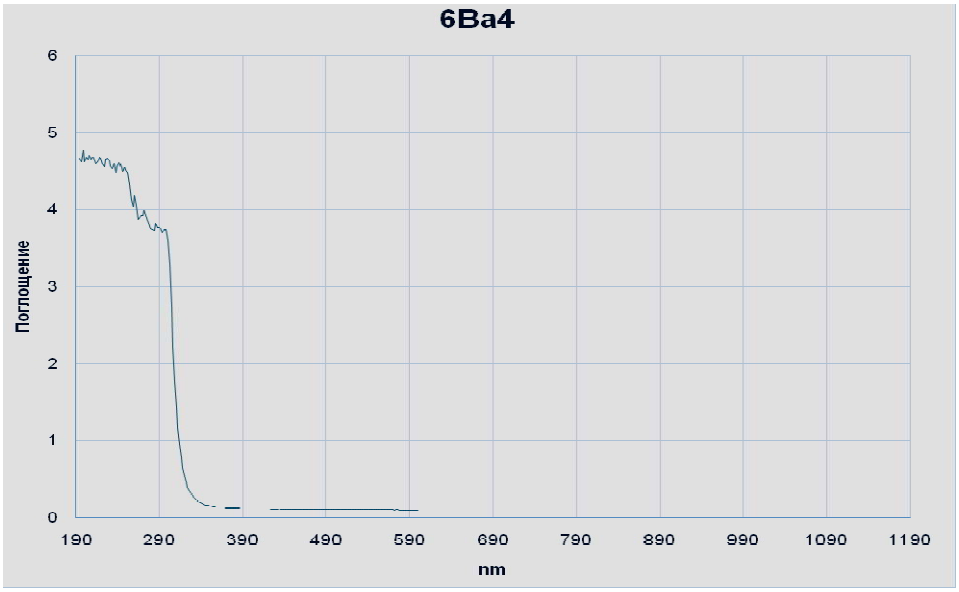


Рисунок 1 – Спектр поглощения $6Ba_4$

Было установлено, что поглощение стекла практически равно 0 в области видимого излучения вплоть до 378 нм, далее идёт резкое повышение поглощения, называемое край УФ-поглощения, возникает ступенька в области 270 нм с дальнейшим ростом поглощения в плоть до 190 нм, где наблюдается максимальный пик поглощения.

На рисунке 2 показан спектр поглощения стекла А230. Он также почти прозрачен в видимой области вплоть до 334нм., где поглощение возрастает от 0,20 до 3 условных единиц с перегибом в области 222-210 нм., т.е. обнаруженная ступенька на кривой по сравнению с $6Ba_4$ сдвинулась в коротковолновую область.

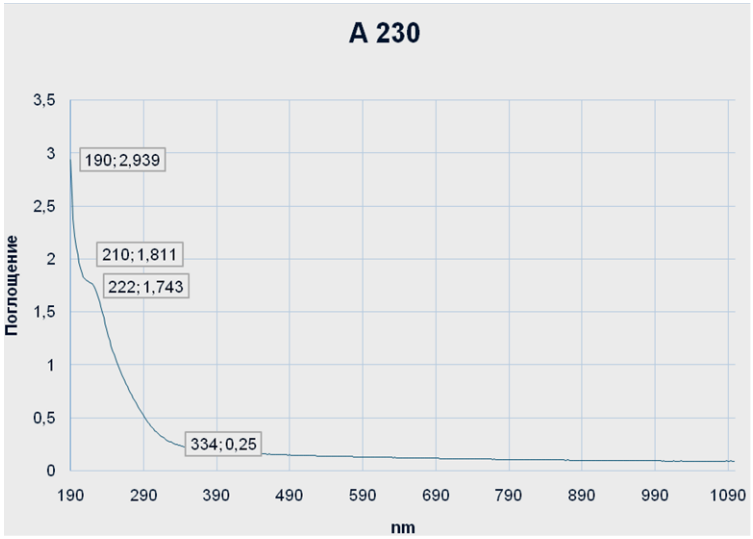


Рисунок 2 – Спектр поглощения стекла А230

Интересно проследить изменение данных свойств стекла после проведения важнейших технологических операций, характерных для изготовления канальных электронных умножителей. Для того чтобы проследить, как изменится спектр поглощения материала, в частности УФ-участок, у стекла, прошедшего операции вытяжки и спекания, были проведены измерения на ThermoEvolution 300. Результаты приведены на рисунке 3. Видно, что поглощение излучения несколько возросло, как в видимой области, так и в УФ. При этом край поглощения сдвинут в длинноволновую область. Кроме того, в области 190-290 нм возникли резкие пики.

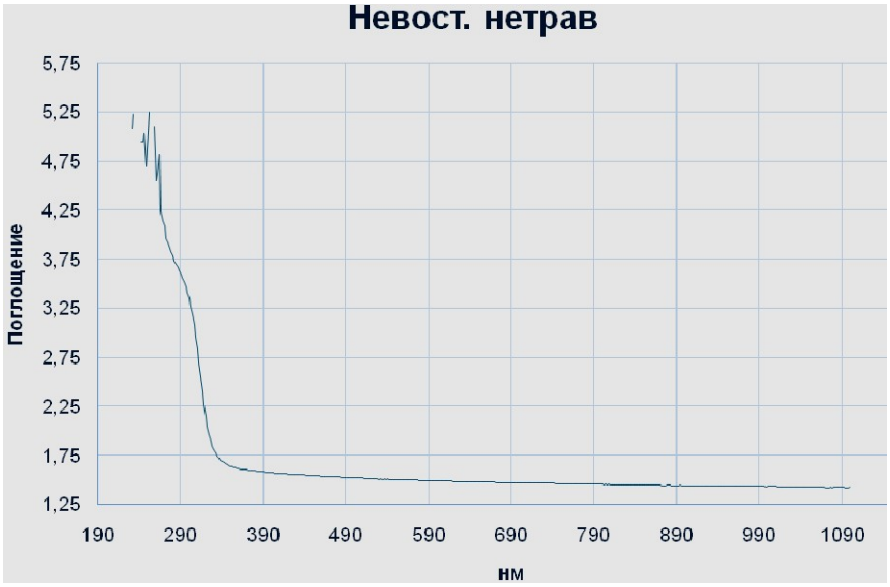


Рисунок 3 – Спектр поглощения стекла $6Ba_4$,
прошедшего высокотемпературное воздействие

На рисунке 4 показан спектр образца $6Ba_4$ прошедшего характерные технохимические воздействия: 4 часа травления в HCl. Спектр почти полностью повторяет характеристику необработанного нетравленного стекла, представленную на рисунке. Однако, следует обратить внимание, что пики шума в области 190–290 нм стали значительно меньше.

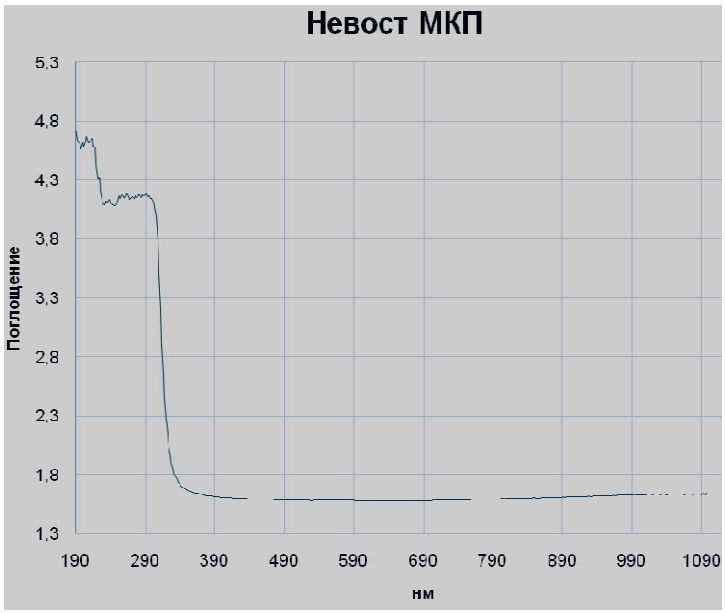


Рисунок 4 – Спектр поглощения 6Ba$_4$4 после 4 часов травления в HCl

Известно, что многоканальные вторично-электронные умножители, изготавливаемые из свинцово-силикатного стекла, проходят технологическую процедуру термоводородного восстановления. При этом стенки каналов данных изделий приобретают эффективные эмиссионные свойства. поглощения. На рисунке 5 представлен спектр восстановленной МКП, предварительно вытравленной в серной кислоте. В характеристике спектра, как видно, наблюдаются пики поглощения в видимой и УФ областях. Край спектра менее крутой край, он более сглажен. Можно выделить 2 участка, что обусловлено разной шириной запрещенной зоны (E_g).

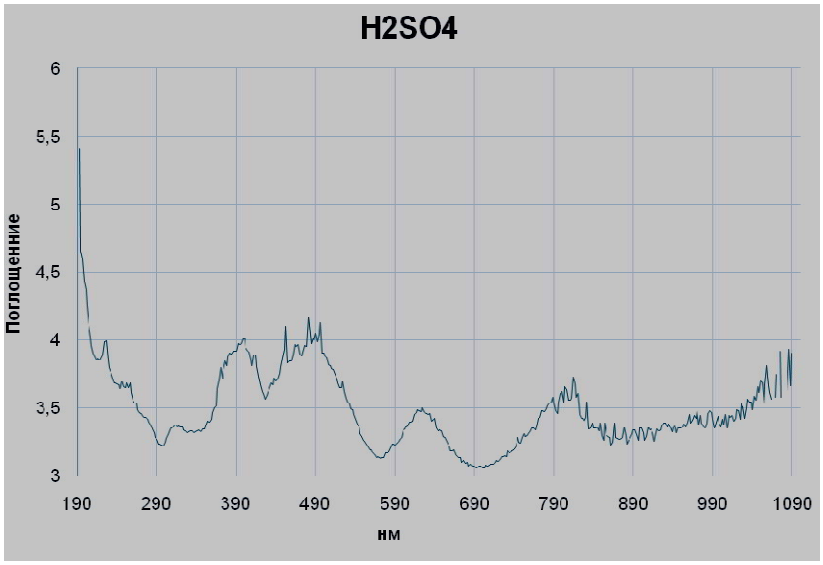


Рисунок 5 – Спектр поглощения восстановленного стекла 6Ba$_4$4 после 4 часов травления в H_2SO_4

По краю поглощения можно определить значения E_g для измеренных образцов согласно в соответствии с уравнением:

$$E = \frac{1{,}24}{\lambda} \text{ (эВ)},$$

где λ – длина волны в мкм.

Было подсчитано, что для $6Ba_4$ E_g = 3,88 эВ, для А230 E_g = 3,71эВ. У невосстановленной невытравленной заготовки вторично-электронного умножителя E_g=3,64 эВ, а с вытравленными каналами E_g= 3,85 эВ. Обнаружен четкий край поглощения в стеклах, подтверждающий наличие ближнего порядка и вывод теории Мотта [1].

Расчеты показали, что в результате термообработки ширина запрещенной зоны несколько увеличивается. При этом проведённые нами исследования указывают также на то, что значение E_g у стекол, подверженных термоводородному восстановлению, может широко варьироваться – от значений E_g для исходных $6Ba_4$, достигающих 5,5 эВ, до 4,6÷3 эВ у восстановленных в различных режимах образцов. Установлено, что вытяжка, спекание и термоводородное восстановление влияют на структурную организацию, приводящую к изменению распределению локальных состояний и их природы, которые отвечают за электрооптические свойства стекол.

По принятой классификации образцы стекла с соответствующим E_g можно квалифицировать как высокоомные полупроводниковые материалы. Природа поставляющих носителей в зоне проводимости и валентной зоне до сих пор не выяснена. Можно предположить, что источниками свободных электронов в стеклах является дефекты как в подрешетке SiO_4, так и в подрешетке PbO. Наиболее распространенным дефектом можно считать *E'* – центры, создаваемые немостиковым кислородом в конце обрыва непрерывной силикатной сетки. *E'* - центр – кислородная вакансия, которая возникает в исходной силикатной сетке и количество таких дефектов может увеличиваться и таким образом снижать ширину запрещенной зоны путем увеличения плотности ловушек вблизи краев зон.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ (Код (шифр) научной темы FEFN-2025-0004 «Разработка детекторных систем для экспериментов ARIADNA и MPD комплекса NICA»).

Литература

1. Кулов С.К., Уртаев А.К., Савенко В.И., Щапова Ю.В., Самканашвили Д.Г., Модификация поверхностных и приповерхностных наноплёнок в каналах микроканальных пластин // Инженерный вестник Дона. 2011. № 2 (16), С. 88–93.
2. Ерёмина А.Ф., Арчегова О.Р., Эсенов Р.С., Накусов А.Т. Определение степени восстанавливаемости PbO в свинцово-силикатных стеклах // Журнал технической физики. 2018. Том 88, С. 101-107.

3. Арчегова О.Р., Ерёмина А.Ф., Эсенов Р.С. Релаксационные процессы в свинцово-силикатных стеклах // Вестник Владикавказского научного центра. 2016. С. 56-60.
4. Н. Мотт, Э. Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах // М.: Мир. 1982. 230 с.

DETERMINATION OF THE POSITION OF LEAKAGE LEVELS IN LEAD-SILICATE GLASSES

Eremina A.F.[1], Puhaeva N.E.[1,2], Archegova O.R.[1], Goncharov I.N.[1,3], Kasumov Yu.N.[1,3], Chulukhadze G.R.[1], Tibilov V.V.[1]

[1]North Ossetian State University named after K.L. Khetagurov, Vladikavkaz
[2]Joint Institute for Nuclear Research, Dubna
[3]North Caucasus Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz

The article discusses the results of an instrumental study of the optical and energy properties of lead-silicate glasses used in the production of secondary emission channel multipliers, before and after some of the most important technological operations. A change in their absorption spectrum, as well as the values of the band gap, is noted, and a mechanism for the occurrence of free electrons in the structure is proposed, causing a change in its electrical conductivity.

УДК 538.915 25-43

ЕСТЕСТВЕННЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ НА ПОВЕРХНОСТИ ЛЕГИРОВАННЫХ III-НИТРИДОВ В УСЛОВИЯХ САМОКОМПЕНСАЦИИ

Филимонов А.В., Бондаренко В.Б.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург
Физико-Технический Институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

В работе исследуется естественный размерный эффект на поверхности легированных III-нитридов на примере нитрида галлия n-типа. Обсуждаются особенности экранирования электроактивных дефектов (точечных и линейных) и структуры хаотического потенциала на поверхности GaN в условиях самокомпенсации. В рамках статистического анализа пуассоновского ансамбля заряженных дефектов определены амплитуда и масштаб хаотического потенциала. Показано, что при больших степенях самокомпенсации на поверхности доминируют неоднородности полей заряженных дислокаций.

Замечательные свойства III-нитридов (AlN, GaN, InN) для полупроводниковой электроники в значительной мере девальвированы дефектностью соответствующих исходных кристаллических структур. Наличие в данных системах технологически обусловленных прорастающих дислокаций несоответствия с концентрацией более 10^9 см$^{-2}$ ухудшают параметры контактных структур на основе данных материалов [1, 2]. Ситуация осложняется нетривиальным экранированием электрических полей сосредоточенных зарядов в слоях обеднения у поверхности, где имеет место естественный размерный эффект [3, 4]. При этом недостаточно сведений об изменении электрофизических свойств указанных полупроводников и контактов в условиях фактически компенсирующего действия дислокационных состояний. Кроме того, сама локализация подвижных носителей на протяжённых линейных дефектах влечёт формирование неоднородного электрического поля в слоях пространственного заряда III-нитридов и модификацию поверхностного потенциала [5]. Другими словами, на поверхности в зависимости от характера и плотности поверхностных электронных состояний, а также условий экранирования поля возникает своеобразный по величине и масштабу хаотический потенциал. Цель настоящей работы – проанализировать естественный размерный эффект у поверхности легированных III-нитридов в условиях их самокомпенсации и определить амплитуду и протяжённость хаотического потенциала, возникающего на поверхности указанных полупроводниковых материалов.

Для определённости рассмотрим нитрид галлия, легированный донорами. При наличии в данной системе дислокаций с поверхностной концен-

трацией N_{disl} часть электронов проводимости будет захвачено на дислокационных состояниях. Определяющим фактором, характеризующим указанную компенсацию, будем полагать отношение

$$K = \frac{\lambda N_{disl}}{eN_0} \tag{1}$$

где λ - линейная плотность заряда на дислокациях, N_0 - уровень легирования, $e = 4.8 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ - элементарный заряд. Поле поверхностного заряда при этом будет экранировано на масштабе области изгиба зон:

$$L_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon U_0}{2\pi e^2 N_0 (1-K)}} \tag{2}$$

Здесь U_0 - величина поверхностного изгиба зон, ε - диэлектрическая проницаемость полупроводника (для GaN $\varepsilon = 10.4$ [6]). Из выражения (2) очевидно, что с увеличением степени компенсации K (например, с ростом величин концентрации линейных дефектов при неизменном уровне заполнения дислокационных состояний) растет и ширина области пространственного заряда L_0. Указанная зависимость в целом снижает остроту естественного размерного эффекта в слоях обеднения у границ раздела и в контактах, поскольку уже при относительно небольших значениях K может выполняться приближение твердотельной плазмы:

$$N_0 L_0^3 >> 1 \tag{3}$$

Последнее, однако, достигается ростом структурного беспорядка в системе и, возможно, изменением условий экранирования неоднородных электрических полей электроактивных дефектов на самой поверхности полупроводника. Кроме того, в широком диапазоне параметров $N_{disl} L_0^2 \sim 1$. Следовательно, учет влияния полей заряженных дислокаций на свойства поверхностной подсистемы является необходимым.

Статистический анализ проявления естественного размерного эффекта у поверхности донорного GaN и оценку флуктуаций электрических полей проведем в предположении некоррелированной локализации дефектов. В этом случае сформированные ансамбли сосредоточенных зарядов можно считать пуассоновскими:

$$p(N) = \frac{< N >^N \exp(- < N >)}{N!}. \tag{4}$$

В распределении (4) $p(N)$ - вероятность найти ровно N заряженных доноров (или дислокаций) в некотором характерном объеме (или на соответствующем участке поверхности), $< N >$ - среднее количество этих дефектов. При наличии на поверхности делокализованных электронных со-

стояний высокой плотности $D \geq 10^{13}$ см$^{-2}$эВ$^{-1}$ для дальнейшего анализа полей электроактивных дефектов можно воспользоваться методом электростатических изображений и приближением Томаса-Ферми [4]. Учитывая статистическую независимость случайных полей заряженных доноров и дислокаций для амплитуды хаотического потенциала на поверхности легированного GaN имеем:

$$\delta U = \frac{1}{D}\sqrt{\frac{1}{\pi}\left(\frac{N_0}{L_0} + \frac{\lambda^2 N_{disl}}{e^2}\right)} \qquad (5)$$

Характерный масштаб флуктуаций поверхностного потенциала зависит от параметра экранирования в двумерной подсистеме $q_s = 4\pi e^2 D / (\varepsilon + 1)$ и оценивается из следующего выражения:

$$R_0 \approx \sqrt{\frac{2L_0}{q_s}} \qquad (6)$$

На рис. приведены результаты расчета по формуле (5) зависимости $\delta U\left(N_{disl}\right)$ для ряда типичных параметров системы. Из данных зависимостей очевиден рост величин δU при увеличении концентрации заряженных дислокаций. В частности, для близких к предельному значению степени заполнения дислокационных состояний (что соответствует линейной плотности заряда порядка 0.01 СГСЭ) средние флуктуации потенциальной энергии электрона на поверхности при заданной плотности поверхностных состояний превышают его тепловую энергию при комнатной температуре уже при $N_{disl} = 10^9$ см$^{-2}$. Увеличение концентрации заряженных дислокаций до уровня 10^{10}см$^{-2}$ может приводить к значениям δU порядка 100 мэВ. При этом характерный масштаб данных изменений потенциальной энергии электрона на поверхности R_0 составляет около 30 нм. В этих условиях хаотический потенциал перестает быть мелкомасштабным, поскольку величина R_0 становится сравнимой с длиной волны теплового электрона.

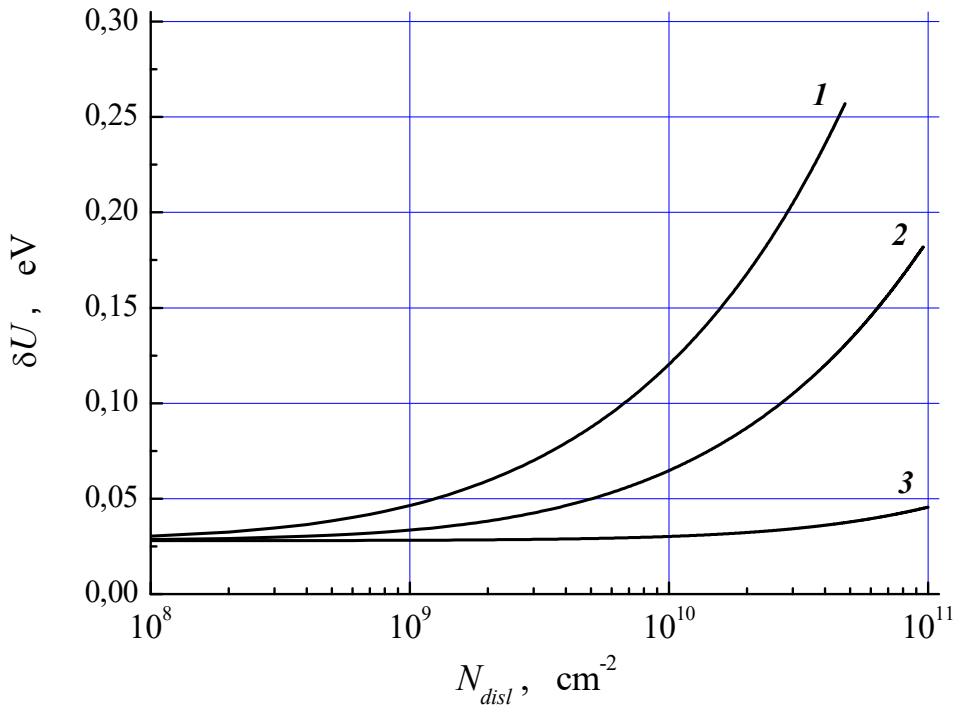


Рис. Графики зависимости амплитуды хаотического потенциала на проводящей поверхности GaN n-типа (концентрация доноров 10^{18} см$^{-3}$, поверхностный изгиб зон 1.5 эВ) с плотностью электронных состояний 10^{13} см$^{-2}$эВ$^{-1}$ от концентрации дислокаций при трех значениях их линейной плотности заряда λ (в единицах СГСЭ): ***1*** – 0.01, ***2*** – 0.005, ***3*** – 0.001

Подведем некоторые итоги проведенных исследований. Оценки показывают, что даже на проводящей поверхности легированных III-нитридов возможно формирование заметного хаотического потенциала, обусловленного ннородеоднородными полями заряженных дефектов. В рамках статистического анализа установлено, что определяющим фактором роста параметров данного хаотического потенциала является самокомпенсация, обусловленная захватом носителей на дислокационных состояниях. В условиях высоких заселенностей этих состояний (т.е. при $\lambda \sim 0.01$ СГСЭ) и плотности дислокаций, превышающей 10^9 см$^{-2}$, на поверхности доминируют неодности полей заряженных дислокаций.

Литература

1. Brandt O., Muralidharan R., Waltereit P., Thamm A., Trampert A., von Kiedrowski H., Ploog K.H. Critical issues for the growth of high-quality (Al,Ga)N/GaN and GaN/(In,Ga)N heterostructures on SiC(0001) by molecular-beam epitaxy // Applied Physics Letters. 1999. Vol. 75. No. 25. P. 4019–4021.
2. Debdeep J., Gossard A. C., Mishra U. K. Dislocation scattering in a two-dimensional electron gas // Applied Physics Letters. 2000. Vol. 76. No. 13. P. 1707–1709.

3. Бондаренко В.Б., Давыдов С.Н., Филимонов А.В. Естественные неоднородности потенциала на поверхности полупроводника при равновесном распределении примеси // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44. No 1. С. 44–47.
4. Бондаренко В.Б., Филимонов А.В., Kumar R. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 1. С. 12–14.
5. Филимонов А.В., Бондаренко В.Б. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов при локализации двумерного электронного газа // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 1. С. 21–28.
6. Jena D. and Wood C. Polarization Effects in Semiconductors: From Ab Initio Theory to Device Applications. New York: Springer, 2008.

THE NATURAL DIMENSIONAL EFFECT ON SURFACE OF DOPED III-NITRIDES

Filimonov A.V., Bondarenko V.B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University St. Petersburg
Ioffe Institute, St. Petersburg

The paper investigates the natural dimensional effect on the surface of doped III-nitrides using the example of n-type gallium nitride. The features of the shielding of electroactive defects (point and linear) and the structure of the chaotic potential on the GaN surface under self-compensation conditions are discussed. The amplitude and scale of the chaotic potential are determined as part of the statistical analysis of the Poisson ensemble of charged defects. It is shown that at high degrees of self-compensation, the inhomogeneities of the fields of charged dislocations dominate on the surface.

УДК 536.413+546.97 25-48

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ РОДИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ДАВЛЕНИЯХ

Магомедов М.Н.

Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал Объединенного института высоких температур РАН, Махачкала

Определены параметры рассчитаны уравнение состояния и поверхностные свойства, как для макро-, так и для нанокристалла родия. Также рассчитана барическая потенциала Ми–Леннард–Джонса для родия. На основе этих параметров зависимость температуры плавления и ее производной по давлению, как для макро-, так и для нано-кристалла родия.

Родий Rh широко применяется в различных областях науки и техники, и его свойства изучаются давно, как экспериментально, так и теоретически [1–5]. Однако, в литературе нет сведений о зависимости удельной поверхностной энергии Rh ни от температуры T, ни от давления P. Барическая зависимость температуры плавления $T_m(P)$ для Rh экспериментально изучена только в [1] при низких давлениях. Недавно были выполнены две теоретические работы по изучению зависимости $T_m(P)$ для Rh: с помощью Full-Potential Linear Muffin-Tin Orbital (FM-LMTO) method компьютерного моделирования в [3], и аналитическим statistical moment method (SMM) в [5]. Однако изменение функции $T_m(P)$ при уменьшении размера нанокристалла Rh никто не изучал. В связи с этим в данной работе аналитическим методом из [6–8] (т.е. без компьютерного моделирования и без ИИ) были рассчитаны уравнение состояния и барические зависимости решеточных и поверхностных свойств родия. В рамках этого же метода изучена барическая зависимость температуры плавления, как для макро-, так и для нанокристалла родия.

Известно, что родий (Rh) имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуру и не испытывает полиморфных фазовых переходов вплоть до 1000 GPa = 1 TPa [3]. Температура плавления родия при $P = 0$ равна $T_m(P{=}0) = 2236 \pm 3$ K [2]. Используемый нами аналитический метод расчета свойств однокомпонентного кристалла был подробно представлен в [6–8]. Для описания парного межатомного взаимодействия в данном методе используется четырех параметрический потенциала Ми–Леннард–Джонса, который имеет следующий вид:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)}\left[a\left(\frac{r_o}{r}\right)^b - b\left(\frac{r_o}{r}\right)^a \right], \qquad (1)$$

где D и r_o – глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ – численные параметры, r – расстояние между центрами атомов.

Для определения параметров межатомного потенциала (1) в данной

работе был использован новый метод. Значение r_o было скорректировано с учетом данных из [2]: $c_{00} = 2.6851 \cdot 10^{-10}$ m – расстояние между центрами ближайших атомов при $P = 0$ и $T = 0$ K. Три других параметра (D, b, a) были определены путем подгонки рассчитанных при $P = 0$ и $T = 300$ K значений коэффициента теплового расширения: $\alpha_p = (\partial \ln v/\partial T)_P$, и модуля упругости: $B_T = -v(\partial P/\partial v)_T$, под экспериментальные данные. При этом варьировались следующие параметры: удельная энергия сублимации L_{00}, температура Дебая Θ_{00}, и параметр Грюнайзена $\gamma_{00} = -(\partial \ln \Theta_{00}/\partial \ln v)_T$. Здесь $v = V/N$ – удельный объем, V и N – объем и число атомов кристалла, индекс 00 означает, что эта величина относятся к $P = 0$ и $T = 0$ K. Таким образом для ГЦК-Rh было получено:

$$r_o = 2.681 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \; D/k_B = 13800 \text{ K}, \; b = 11.85, \; a = 2.15. \qquad (2)$$

Для апробации параметров потенциала из (2) методом из [6–8] были рассчитаны свойства кристалла ГЦК-Rh. В табл. 1 в первых двух строках представлены свойства ГЦК-Rh, которые рассчитаны с применением параметров потенциала из (2) при $P = 0$ и $T = 300$ K. В первой строке показаны результаты для макрокристалла ($N = \infty$), во второй – для нанокристалла кубической формы из $N = 306$ атомов. Внизу Табл. 1 приведены экспериментальные и теоретические (в скобках) данные для макро-ГЦК-Rh, известные из литературы. Как видно из табл. 1 согласие расчетных данных с оценками других авторов вполне хорошее.

Таблица 1. Свойства ГЦК-Rh при $P = 0$ и $T = 300$ K. В первых двух строках представлены свойства, рассчитанные для макро- и нанокристалла. Внизу приведены данные для макро-ГЦК-Rh, известные из литературы

N	$v = V/N$, Å^3/atom	α_p, 10^{-6} K^{-1}	B_T, GPa	$B'(P) = (\partial B_T/\partial P)_T$	Θ, K	γ
∞	13.7555	29.244	225.541	6.693	311.532	2.303
306	13.7728	33.558	197.540	6.697	291.792	2.304
∞	13.757 [2] (13.342(LDA)–14.178(PBE)) [4]	25.44 [2] (25(PBE)–28(LDA)) [4]	(245.3(PBE)–305.6(LDA)) [4] (244.57–251.08) [5]	(5.2(LDA)–5.3(PBE)) [4] 5.36±0.09, (5.5–5.07) [5]	490–530, (486.79(PBE)–527.56(LDA)) [4]	(2.3) [4]

На рис. 1 показаны изотермы уравнения состояния макрокристалла ГЦК-Rh. Давление дано в GPa, удельный объем в Å^3/atom = 10^{-30} m^3/atom. Метод расчета уравнения состояния $P(v, T)$ для однокомпонентного кристалла, атомы которого взаимодействуют посредством парного потенциала (1) описан в наших работах [6–8]. Сплошными линиями показаны наши расчеты изотерм 300 (нижняя), 1000 (средняя), 2000 K (верхняя). Штрихпунктирными линиями показаны результаты расчетов изотерм 301 (слева)

и 1999 K (справа) из [4]: с одной точкой для PBE метода (Perdew–Burke–Ernzerhof generalized gradient approximation), с двумя точками для LDA метода (Local Density Approximation). Символами на левом графике показаны результаты экспериментальных работ при 300 K. На правом графике показаны наши расчеты изотерм 1000 и 2000 K (сплошные линии) и расчеты изотермы 1999 K из [4]. Как видно из рис. 1 согласие наших расчетов с оценками других авторов вполне хорошее.

Рис. 1. Уравнение состояния ГЦК-Rh. Сплошные линии – наши расчеты при 300 (нижняя), 1000, 2000 K (верхняя). Штрихпунктирные линии – расчеты изотерм 301 (слева) и 1999 K (справа) из [4]

На сегодняшний день предложено несколько различных методов расчета удельной (на единицу площади) поверхностной энергии σ для однокомпонентного кристалла, но большинство из них работоспособны только при $T = 0$ K и $P = 0$. Поэтому актуальным является вопрос о зависимости величины σ от P-T-условий. В табл. 2 показаны результаты расчета при использовании метода из [6–8] и параметров потенциала из (2) поверхностных свойств макро-ГЦК-Rh при $P = 0$ и $T = 10$, 300, 1000, 2236 K. Здесь σ(100) – удельная поверхностная энергия грани (100), $\sigma'(T)_i = (\partial\sigma/\partial T)_i$, $\sigma'(P)_T = (\partial\sigma/\partial P)_T$, $\Delta_p = -(\partial\ln\sigma/\partial\ln\Sigma)_T$, Σ – площадь поверхности.

Таблица 2. Значения поверхностных свойств макрокристалла ГЦК-Rh, рассчитанные при $P = 0$ и четырех температурах

T, K	$v/v_o = (c/r_o)^3$	σ(100), 10^{-3} J/m^2	$-\sigma'(T)_v$ 10^{-6} J/(m^{2}K)	$-\sigma'(T)_P$ 10^{-6} J/(m^{2}K)	$\sigma'(P)_T$ 10^{-3} J/(m^{2}GPa)	$\Delta_p = -(\partial\ln\sigma/\partial\ln\Sigma)_T$
10	1.00348	3324.99	$\sim 10^{-6}$	$\sim 10^{-6}$	9.51	1.0073
300	1.00951	3299.59	57.05	123.81	10.12	1.0377
1000	1.03238	3205.87	58.87	141.09	12.17	1.1278
2236	1.08238	3015.12	57.25	169.36	17.33	1.2945

В литературе представлено много оценок величины σ(100) для макро ГЦК-Rh. Ниже представлены некоторые из них, полученные при $T = 0$ K:

$$\sigma(100)/[10^{-3}\text{J/m}^2] = 2470–3170\ [9],\ 2350–3120\ [10].$$

Как видно согласие наших расчетов с оценками других авторов вполне хорошее. Изменения поверхностных свойств с уменьшением размера нанокристалла при различных P-T-условиях было представлено в [7, 8].

Используя параметры потенциала из (2), с помощью метода из [11], была рассчитана барическая зависимость температуры плавления $T_m(P)$ и ее производной по давлению $T_m'(P) = \mathrm{d}T_m/\mathrm{d}P$, представленные на рис. 2.

Рис. 2. Барическая зависимость температуры плавления (слева) и ее производной по давлению (справа) для ГЦК-Rh. Сплошной и штриховой линиями показаны наши результаты для макро- и нанокристалла. Пунктирными линиями показаны расчеты из [3] (нижняя) и из [5] (верхняя). Точки и штрихпунктирные линии – результаты из [1]

Из рис. 2 видно, что наши результаты для макро-ГЦК-Rh хорошо согласуются с оценками других авторов. Поэтому мы использовали этот метод для расчета зависимости $T_m(P)$ для нанокристалла ГЦК-Rh. В [12] метод из [11] был обобщен на случай нанокристалла в форме прямоугольного параллелепипеда (RP-модель). Расчеты для нанокристалла в форме куба из 306 атомов Rh показаны на Рис. 2 штриховой линией. Как видно из рис. 2, величина $T_m(P)$ для нанокристалла уменьшается при изоморфно-изобарном уменьшении его размера при любом давлении. Барические зависимости функций $T_m'(P)$ для макро- и нанокристалла ГЦК-Rh пересекаются в точке: P_x = 12.74 GPa, $T_m'(P)_x$ = 34.74 K/GPa. Однако, зависимость функции $T_m'(P)$ от размера незначительная, поэтому барические зависимости $T_m(P, \infty)$ и $T_m(P, N)$ практически параллельны.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00001, https://rscf.ru/project/25-23-00001/.

Литература

1. *Strong H.M., Bundy F.P.* Fusion curves of four group VIII metals to 100 000 atmospheres // Physical Review. 1959. V. **115**, № 2. P. 278–284. DOI: 10.1103/PhysRev.115.278.
2. *Arblaster J.W.* Crystallographic properties of rhodium // Platinum Metals Review. 1997. V. **41**, № 4. P. 184–189.
3. *Smirnov N.A.* Ab initio calculations of structural stability, thermodynamic and elastic properties of Ni, Pd, Rh, and Ir at high pressures // Journal of Applied Physics. 2023. V. **134**, № 2. P. 025901. DOI: 10.1063/5.0158737.
4. *Thakur B., Gong X., Dal Corso A.* Thermodynamic properties of rhodium – A first principle study // AIP Advances. 2024. V. **14**, № 4, P. 045229. DOI: 10.1063/5.0203098.
5. *Tam N.T., Lam L.T., Hieu H.K.* Investigation of equation-of-state and melting behavior of rhodium up to 200 GPa // Physics Letters A. 2025. V. **547**. P. 130450. DOI: 10.1016/j.physleta.2025.130450.
6. *Magomedov M.N.* About the gold properties and the approximations used to calculate high-pressure high-temperature properties // Computational Conden. Matter. 2022. V. **31**. P. e00673. DOI: 10.1016/j.cocom.2022.e00673.

7. *Magomedov M.N.* Nanocrystalline surface energy studied within the Gibbs thermodynamic framework, Physical Review. B. 2024. V. **109**, № 3. P. 035405. DOI: 10.1103/PhysRevB.109.035405.
8. *Магомедов М.Н.* Влияние размера и формы нанокристалла на барические и температурные зависимости его свойств (Обзор) // Физика Твердого Тела. 2024. Т. **66**, № 10. С. 1641–1661. DOI: 10.61011/FTT.2024.10.59068.151.
9. *Patra A., Bates J.E., Sun J., Perdew J.P.* Properties of real metallic surfaces: Effects of density functional semilocality and van der Waals nonlocality // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2017. V. **114**, № 44. P. E9188–E9196. DOI: 10.1073/pnas.1713320114.
10. *Lee J.-Y., Punkkinen M.P.J., Schönecker S., Nabi Z., Kádas K., Zólyomi V., Koo Y.M., Hu Q.-M., Ahuja R., Johansson B., Kollár J., Vitos L., Kwon S.K.* The surface energy and stress of metals // Surface Science. 2018. V. **674**. P. 51–68. DOI: 10.1016/j.susc.2018.03.008.
11. *Magomedov M.N.* Study of the melting temperature baric dependence for Au, Pt, Nb // Vacuum. 2023. V. **213.** 112079. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112079.
12. *Magomedov M.N.* Change in the melting temperature baric dependence during the transition from macro to nanocrystal // Vacuum. 2024. V. **221**. P. 112950. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112950.

STUDY OF RHODIUM PROPERTIES AT DIFFERENT TEMPERATURES AND PRESSURES

Magomedov M.N.

Institute for Geothermal Problems and Renewable Energy – branch of Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy Sciences, Makhachkala

The parameters of the Mie–Lennard–Jones potential for rhodium have been determined. Based on these parameters, the equation of state and surface properties were calculated for both macro- and nanocrystals of rhodium. The baric dependence of the melting temperature and its pressure derivative for both macro- and nano-rhodium crystals has also been calculated.

УДК 537.611.2. 25-50

ДИНАМИКА СПИНВОЛНОВОГО МАГНИТНОГО СПЕКТРА В ПРОВОДЯЩИХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ НАНОТРУБКАХ

Тагиев В.С., Танрывердиев В.А., Ахундова Э.А., Ибрагимов И.Н.

Институт физики Министерства науки и образования, Баку
v_tagiyev@yahoo.com

Распространение магнитных возбуждений в проводящих ферромагнитных нанотрубках (ПФНТ) исследуются посредством двухвременных температурных функций Грина (ФГ). Получены дисперсионные уравнения для энергии магнонов элементарных магнитных возбуждений. Проанализировано влияние спинов электронов проводимости на спектр спиновых возбуждений. Показано, что особая структура ПФНТ приводит к образованию максимумов и минимумов и уменьшению числа ветвей в высокочастотном диапазоне, что представляет интерес для понимания механизма обменной связи в нано-структуированных системах, Полученные результаты могут быть весьма полезны для создания высокочастотных магнитных квантовых датчиков и, в целом, спинтронных устройств.

Недавние достижения, в области исследования наноквантовых материалов, возродили интерес к изучению механизмов межспинового взаимодействия, зарядовым и решёточным степеням свободы в геометрически ограниченных наносистемах, что играет существенную роль в создании минидатчиков и низкоэнергопотребляемых запоминающих устройств.

Нанотрубки проявляют своеобразную структурную симметрию, которая модулирует обменные взаимодействия по сравнению с объёмными структурами [1-3]. Поэтому, более глубокое теоретическое понимание механизмов спиновых возбуждений в данных наноструктурах имеет решающее значение для разработок новых спинтронных устройств [4-6]. Именно определение магнонного спектра в проводящих нанотрубках позволяет контролировать с высокой точностью поведение электронных приборов при различных внешних воздействий на них [7-9].

В этой работе спектр спинового возбуждения гексагональной ПФНТ вычисляется с использованием формализма ФГ. Данная теоретическая модель расширяет область существующих работ по исследованию дисперсии магнитных возбуждений в ПФНТ, а также в слоистых низкоразмерных и сверхрешёточных магнитных системах. Метод ФГ применяется для вывода аналитических выражений распространяющихся спиновых волн вдоль оси нанотрубки, с учётом обменных взаимодействий между локализованными и свободным электронными спинами. Для этой цели используются два типа запаздывающих температурных ФГ, обозначенных, как $G_{i,j}$ для описания динамических свойств системы, приведённых ниже на рисунке 1.

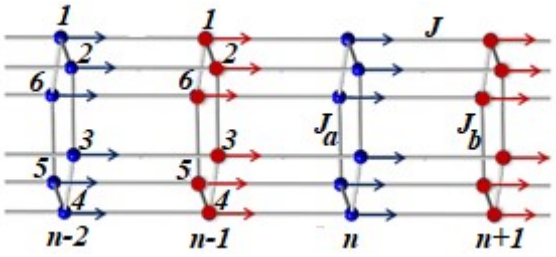


Рис. 1

Здесь атомные слои двух различных ферромагнитных материалов *a* и *b* периодически чередуются друг с другом. Структура нанотрубки существенно влияет на распространение спиновых волн вдоль его аксиального направления. В отличие от плоских и проволочных структур в данных системах, внешнее ограничение и уникальная кривизна нанотрубки влияет на граничные условия и механизм взаимодействия спинов. Полный гамильтониан системы, характеризующий локальные спины, состоит из двух основных членов:

$$H_M = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j} S_i S_j - \sum_i g_i \mu_B \left(H_0 + H_A\right) S^z_{(1)\ i} (1)$$

.

Здесь $J_{i,j}$ представляет обменные взаимодействия между локализованными спинами, g_i является фактором Ланде, H_0 и H_A это приложенное внешнее магнитное и анизотропное поле, соответственно направленное вдоль оси Z. Гамильтониан $H_{I\sigma d(f)} = -\sum_i I_i S_i s_i$ (2) описывает обменное взаимодействие между локализованными и проводящими электронами.

В этой работе спектр спинового возбуждения гексагональной ПФНТ вычисляется с использованием формализма ФГ. Для этой цели используются два типа запаздывающих температурных ФГ, обозначенных, как $G_{i,j}(t) = \langle\langle S_i^+(t) \mid S_j^-(0)\rangle\rangle$ и $G'_{i,j}(t) = \langle\langle s_i^+(t) \mid S_j^-(0)\rangle\rangle$, описывающие динами-ческие свойства системы. Записав уравнение движения для этих функций, и применяя приближение случайных фаз, которое справедливо в режиме слабых спиновых флюктуаций ниже критической температуры, получим замкнутый набор самосогласованных уравнений, отражающий спектр спиновых возбуждений [10-11].

$$\left\{\omega - g_i\mu_B H_0 - I_i\langle s_i^z\rangle - \frac{I_i^2\langle S_i^z\rangle\langle s_i^z\rangle}{\omega - g_e\mu_B H_0 - I_i\langle S_i^z\rangle} - \sum_\delta J_{i,i+\delta}\langle S_{i+\delta}^z\rangle\right\} G_{i,j}(\omega) + \langle S_i^z\rangle \sum_\delta J_{i,i+\delta} G_{i,i+\delta}(\omega) = 2\langle S_i^z\rangle\delta_{ij} \quad (3)$$

Как можно видеть из рис.1, периодическая гексагональная структура в каждом слое, с соответствующими спинами в узлах, создаёт элементарную ячейку, содержащую 12 спинов, что является следствием симметрии рассматриваемой решётки и специфичных для слоя взаимодействий между спинами. Применяя теорему Блоха

$$G_{n+2,(n+1)} = \exp[ikd]G_{n,(n-1)} \tag{4}$$

для связи ФГ соседних слоёв [12-13] можно получить систему из 12 уравнений, описывающих динамику спинов в пределах одной элементарной ячейки.

$$\begin{cases}
(\omega-\lambda_a)G^{1,\tau'}_{n,m} + J_a\langle S^z_a\rangle\left(G^{2,\tau'}_{n,m}+G^{6,\tau'}_{n,m}\right) + J\langle S^z_a\rangle\left(G^{1,\tau'}_{n-1,m}+G^{1,\tau'}_{n+1,m}\right) = \langle S^z_a\rangle\delta^{1,\tau'}_{n,m} \\
(\omega-\lambda_a)G^{2,\tau'}_{n,m} + J_a\langle S^z_a\rangle\left(G^{1,\tau'}_{n,m}+G^{3,\tau'}_{n,m}\right) + J\langle S^z_a\rangle\left(G^{2,\tau'}_{n-1,m}+G^{2,\tau'}_{n+1,m}\right) = \langle S^z_a\rangle\delta^{2,\tau'}_{n,m} \\
(\omega-\lambda_a)G^{3,\tau'}_{n,m} + J_a\langle S^z_a\rangle\left(G^{2,\tau'}_{n,m}+G^{4,\tau'}_{n,m}\right) + J\langle S^z_a\rangle\left(G^{3,\tau'}_{n-1,m}+G^{3,\tau'}_{n+1,m}\right) = \langle S^z_a\rangle\delta^{3,\tau'}_{n,m} \\
(\omega-\lambda_a)G^{4,\tau'}_{n,m} + J_a\langle S^z_a\rangle\left(G^{3,\tau'}_{n,m}+G^{5,\tau'}_{n,m}\right) + J\langle S^z_a\rangle\left(G^{4,\tau'}_{n-1,m}+G^{4,\tau'}_{n+1,m}\right) = \langle S^z_a\rangle\delta^{4,\tau'}_{n,m} \\
(\omega-\lambda_a)G^{5,\tau'}_{n,m} + J_a\langle S^z_a\rangle\left(G^{4,\tau'}_{n,m}+G^{6,\tau'}_{n,m}\right) + J\langle S^z_a\rangle\left(G^{5,\tau'}_{n-1,m}+G^{5,\tau'}_{n+1,m}\right) = \langle S^z_a\rangle\delta^{5,\tau'}_{n,m} \\
(\omega-\lambda_a)G^{6,\tau'}_{n,m} + J_a\langle S^z_a\rangle\left(G^{1,\tau'}_{n,m}+G^{5,\tau'}_{n,m}\right) + J\langle S^z_a\rangle\left(G^{6,\tau'}_{n-1,m}+G^{6,\tau'}_{n+1,m}\right) = \langle S^z_a\rangle\delta^{6,\tau'}_{n,m} \\
(\omega-\lambda_b)G^{1,\tau'}_{n+1,m} + J_b\langle S^z_b\rangle\left(G^{2,\tau'}_{n+1,m}+G^{6,\tau'}_{n+1,m}\right) + J\langle S^z_b\rangle\left(G^{1,\tau'}_{n,m}+G^{1,\tau'}_{n+2,m}\right) = \langle S^z_b\rangle\delta^{1,\tau'}_{n+1,m} \\
(\omega-\lambda_b)G^{2,\tau'}_{n+1,m} + J_b\langle S^z_b\rangle\left(G^{1,\tau'}_{n+1,m}+G^{3,\tau'}_{n+1,m}\right) + J\langle S^z_b\rangle\left(G^{2,\tau'}_{n,m}+G^{4,\tau'}_{n+2,m}\right) = \langle S^z_b\rangle\delta^{2,\tau'}_{n+1,m} \\
(\omega-\lambda_b)G^{3,\tau'}_{n+1,m} + J_b\langle S^z_b\rangle\left(G^{2,\tau'}_{n+1,m}+G^{4,\tau'}_{n+1,m}\right) + J\langle S^z_b\rangle\left(G^{3,\tau'}_{n,m}+G^{3,\tau'}_{n+2,m}\right) = \langle S^z_b\rangle\delta^{3,\tau'}_{n+1,m} \\
(\omega-\lambda_b)G^{4,\tau'}_{n+1,m} + J_b\langle S^z_b\rangle\left(G^{3,\tau'}_{n+1,m}+G^{5,\tau'}_{n+1,m}\right) + J\langle S^z_b\rangle\left(G^{4,\tau'}_{n,m}+G^{4,\tau'}_{n+2,m}\right) = \langle S^z_b\rangle\delta^{4,\tau'}_{n+1,m} \\
(\omega-\lambda_b)G^{5,\tau'}_{n+1,m} + J_b\langle S^z_b\rangle\left(G^{4,\tau'}_{n+1,m}+G^{6,\tau'}_{n+1,m}\right) + J\langle S^z_b\rangle\left(G^{5,\tau'}_{n,m}+G^{5,\tau'}_{n+2,m}\right) = \langle S^z_b\rangle\delta^{5,\tau'}_{n+1,m} \\
(\omega-\lambda_b)G^{6,\tau'}_{n+1,m} + J_b\langle S^z_b\rangle\left(G^{1,\tau'}_{n+1,m}+G^{5,\tau'}_{n+1,m}\right) + J\langle S^z_b\rangle\left(G^{6,\tau'}_{n,m}+G^{6,\tau'}_{n+2,m}\right) = \langle S^z_b\rangle\delta^{6,\tau'}_{n+1,m}
\end{cases} \tag{5}$$

Анализируя только полюса ФГ, которые соответствуют энергиям элементарных возбуждений можно определить дисперсионные соотношения для магнонного спектра без явного решения полной системы уравнений:

$$\begin{cases}
\cos(kd) = \pm\sqrt{4J_aJ_b - 2J_b(\omega-\lambda_a)/\langle S^z\rangle - 2J_a\langle S^z\rangle(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle + (\omega-\lambda_a)(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle^2}\,/2J \\
\cos(kd) = \pm\sqrt{4J_aJ_b + 2J_b(\omega-\lambda_a)/\langle S^z\rangle + 2J_a\langle S^z\rangle(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle + (\omega-\lambda_a)(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle^2}\,/2J \\
\cos(kd) = \pm\sqrt{J_aJ_b - J_b(\omega-\lambda_a)/\langle S^z\rangle - J_a\langle S^z\rangle(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle + (\omega-\lambda_a)(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle^2}\,/2J \\
\cos(kd) = \pm\sqrt{J_aJ_b + J_b(\omega-\lambda_a)/\langle S^z\rangle + J_a\langle S^z\rangle(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle + (\omega-\lambda_a)(\omega-\lambda_b)/\langle S^z\rangle^2}\,/2J
\end{cases} \tag{6}$$

где $\lambda_{a(b)} = g\mu\left(H_0 + H^{(A)}_{a(b)}\right) + 2J_{a(b)}\langle S^z_{a(b)}\rangle + 2J\langle S^z_{b(a)}\rangle + I_{a(b)}\langle s^z\rangle + \dfrac{I^2_{a(b)}\langle S^z_{a(b)}\rangle\langle s^z\rangle}{\omega - g_e\mu H_0 - I_{a(b)}\langle S^z_{a(b)}\rangle}$ и S_a, S_b – спиновые моменты *a* и *b* материалов.

Уравнения (6) представляют основные результаты этого исследования. Численные результаты для конкретных вариантов параметров изображены на рис. 2, где выбраны следующие параметры: $g\mu H_0/J = 0.2$, $g_e\mu H_0/J = 0.01$, $g_a = g_b$, $g_a\mu_B H^{(A)}_a/J = 0.01$, $g_b\mu_B H^{(A)}_b/J = 0.03$, $J_a/J = 0.6$, $J_b/J = 0.8$, $I_a/J = 5$, $I_b/J = 6$, $\langle S_a\rangle = \langle S_b\rangle = 0.5$, $\langle s\rangle = 0.5$.

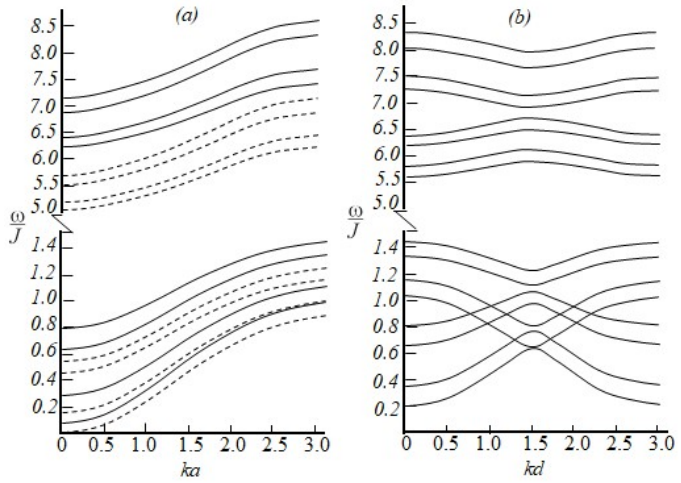


Рис. 2

На рисунке 2 (*a*) отображаются ветви спиновых волн для отдельных материалов *a* (пунктирная линия) и *b* (сплошная линия), в то время как рис. 2 (*b*) иллюстрируют ветви спиновых волн для всей сверхрешёточной системы. Как было замечено, количество ветвей спиновых волн в ПФНТ вдвое больше, чем в обычной ферромагнитной нанотрубке ФНТ. В частности в ПФНТ демонстрирует 16 ветвей спиновых волн по сравнению с 8 в ФНТ.

Низкочастотная область спектра спиновых волн – это та часть, которая напрямую связана с количеством узловых (локализованных) спинов. В результате вращательной симметрии из 6 спиновых узлов в ФНТ возникают только 4 ветви. Это означает, что, фактически из 6 возможных мод, 2 вырождаются и совпадают друг с другом. В ПФНТ присутствие свободных спинов частично снимает эти вырождения и увеличивают ветви в два раза (8 ветвей).

Частоты спиновых волн в ПФНТ в основном определяются константой ферромагнитного обмена между рассматриваемыми атомами. Одной из заметных особенностей в дисперсионном графике для ПФНТ заключается в том, что некоторые из ветвей имеют максимумы или минимумы в средней части спектра. Возможно это связано с некоторой асимметрией дисперсионных кривых, имеющих место в нанотрубках. При этом, если константы контактного взаимодействия двух материалов существенно разнятся, в системе происходит неравный обмен энергией, что и приводит к асимметрии дисперсионных кривых. Необходимо отметить также, что распространение спиновых волн в нанотрубке имеет характер «поверхностного режима», тогда как в нанопроволоке задействованы, как поверхностный, так и внутренний, «объёмный» механизмы.

Литература

[1] Keshri K.K., Rout M.K., Saha R., Keshri S. Spin Dynamics in Hexagonal Ferr. Nanotubes at Low Temp. *Phys. Solid State* 66 (11), 521–528 (2024).

[2] Fert A., Reyren N., Cros V. Magnetic Skyrmions: From Fundamental Physics to Applications *Nature Reviews Materials* 4 (3), 123–145 (2019).
[3] Sarma S.D., Loss D., Klinovaja J. Topological Quantum Computing with Majorana Fermions *Physical Review Letters* 123 (3), 036801 (2020).
[4] Kumar A., Lee S., Kim H. Chiral Spin Transport in Curved Nanotubes: Role of Geometric Confinement *Nano Letters* 23 (8), 3120–3127 (2023).
[5] Gupta R., Zhang Y., Balents L. Edge States and Topological Protection in Hexagonal Magnetic Nanotubes" *Phys. Review B* 105 (18), 180402(R) (2022).
[6] Chen X., Wang Z., Tokura Y. Magnon-Phonon Coupling in Low-Dimensional Ferromagnetic Superlattices *Advanced Functional Materials* 32 (45), 2201234 (2024).
[7] Parkin S.S.P., Hayashi M., Thomas L. Current-Driven Domain Wall Motion in Magnetic Nanotubes for Racetrack Memory *Sci.* 368 (6488), 261-265 (2021).
[8] Nunez A.S., Tserkovnyak Y., Bender S.A. Nanotube-Based Magnetic Logic: Controlled Domain Wall Propagation *Nat. Elect.* 5 (6), 320–328 (2022).
[9] Fukami, S., Ohno, H. Three-Dimensional Racetrack Memory Using Magnetic Nanotube Arrays *Nature Nanotechnology*18 (7), 685–692 (2023).
[10] Sudha Gopalan and M.G.Cottam. *Phys. Rev.* B42, 16, 10311 (1990).
[11] J.M. Wesselinova, E.Kroumova, N. Teofilov, W. Nolting. *Phys. Rev*. B57, 11 (1998).
[12] H.T.Diep *Phys.Lett*. A 138, 69 (1989).
[13] V.A. Tanriverdiyev, V.S. Tagiyev, S.M. Seyid-Rzayeva, *Low Temp. Phys*., v. 29, Num. 12, p. 1004 (2003).

DYNAMICS OF SPIN-WAVE MAGNETIC SPECTRUM IN CONDUCTING HEXAGONAL MAGNETIC NANOTUBES

Tagiyev V.S., Tanriverdiyev V.A., Akhundova E.A., Ibrahimov I.N.

Insitute of Physics of Ministry of Sciences of Education, Baku
v_tagiyev@yahoo.com

The propagations of magnetic excitations in conducting ferromagnetic nanotubes (CFNT) are investigated by the means of two-time temperature Green functions (GF). The dispersion equations for energy of elementary magnetic excitations are obtained. The influence of conduction electron spins on spin excitation spectrum is analyzed. It is shown that the special structure of CFNT leads to the formation of maximums and minimums, and decrease of brunch number in high-frequency range, that is the interest for understanding of exchange coupling mechanism in nano-structured systems. The obtained results can be useful for the formation of high-frequency magnetic quantum gauges and for spintronic devices on the whole.

УДК: 538.91

МАГНИТНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СИТЕМЫ $BiFeO_3/TiO_2(nt)$ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ДО 7 ГПа

Курбанов А.З., Арсланов Т.Р.[*]
Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала
[*] arslanovt@gmail.com

В работе выполнено экспериментальное исследование изотермической намагниченности пленки феррита висмута ($BiFeO_3$), нанесенной на подложку TiO_2 в условиях гидростатического давления до 7 ГПа и при комнатной температуре. Для данной гетероструктуры намагниченность характеризуется необычным поведением, связанным с магнитными свойствами нанотрубок TiO_2. Полученные результаты отмечают значительный вклад в общую намагниченность, происходящий от нанотрубок TiO_2, в то время как $BiFeO_3/TiO_2(nt)$ проявляет магнитную кинетику в области высокого давления, обусловленную индуцированными давлением магнитными превращениями.

Введение

Гетероструктуры на основе мультиферроика $BiFeO_3$ (BFO) и диоксида титана (TiO_2) демонстрируют сложное магнитное поведение из-за взаимодействия на границе раздела фаз. По отдельности каждое из соединений характеризуется своими индивидуальными свойствами. Так BFO является одним из наиболее изученных мультиферроидных материалов, одновременно обладающим сегнетоэлектрическими ($T_C \approx 1100$ K) и антиферромагнитными ($T_N \approx 643$ K) порядком при комнатной температуре [1]. Благодаря этому BFO представляет значительный интерес для применения в спинтронике, энергонезависимой резистивной памяти (ReRAM) и магнитных датчиках. Однако практическое использование BFO ограничено высокой плотностью тока утечки, связанной с наличием кислородных вакансий и примесных фаз [2], а также слабой магнитоэлектрической связью. Диоксид титана в объемном состоянии является диамагнетиком, в то время как его наноструктурированные формы, в частности нанотрубки, могут проявлять необычные магнитные свойства. Нанотрубки TiO_2 представляет собой высокоупорядоченную одномерную структуру, как правило, состоящую из анатазной или рутильной фаз [3]. Они синтезируются преимущественно методом анодного окисления титана, что позволяет получать массивы вертикально ориентированных трубок с диаметром от 20 до 200 нм и длиной до нескольких микрон [4]. Уникальная морфология нанотрубок обеспечивает большую удельную поверхность (~100 м²/г) и эффективный транспорт носителей заряда вдоль оси нанотрубок. При этом отмечается, что дефекты структуры и кислородные вакансии играют ключевую роль в возникнове-

нии парамагнетизма и даже ферромагнетизма при комнатной температуре в нанотрубках TiO_2 [5,6].

Синергетическое сочетание свойств обоих материалов представляет дальнейший интерес изучения смешанных эффектов возникающих при контакте BFO с нанотрубками TiO_2. Раннее было показано, что на границе раздела гетероструктур $BiFeO_3/TiO_2$ могут возникать необычные магнитные состояния, такие как обменное смещение (exchange bias) и индуцированный магнетизм [7]. Экспериментальные исследования показывают, что взаимодействие между антиферромагнитным BFO и диамагнитным TiO_2 может приводить к появлению слабого ферромагнетизма, связанного с нарушением спиральной магнитной структуры BFO вблизи на границе раздела [8]. В настоящей работе приводятся результаты исследования намагниченности гетероструктуры $BiFeO_3/TiO_2$ и нанотрубок TiO_2 в условиях гидростатического давлении до 7 ГПа.

Образцы и методика эксперимента

Пленки BFO выращивалось методом атомно-слоевого осаждения, описанного в работе [9]. Измерения АС изотермической намагниченности на переменном токе выполнялись в установке высокого давления Тороид-15 [10] с использованием индукционного метода, адаптированного для пленок $BiFeO_3/TiO_2$(nt) малых размеров (2.8×1.2 мм^2). В качестве среды предающей давление использовалась смесь спиртов метанол-этанол в соотношении 4:1. Все измерения проводились в области комнатной температуры.

Результаты и их обсуждение

Использование индукционного метода измерения намагниченности в условиях высокого давления ранее использовалось для кармических образцов BFO, проявляющие слабые ферромагнитные свойства [11]. В этом случае величина измеряемой намагниченности находилась пределах чувствительности индукционного метода (10^{-4} – 10^{-6} emu). С целью реализации измерения намагниченности $BiFeO_3/TiO_2$(nt) последовательно производились измерения бифилярной катушки без образца, с пленкой $BiFeO_3/TiO_2$(nt) и отдельно измерение подложки TiO_2(nt). Результаты этих измерений представлены на рис. 1 в виде зависимости выходного напряжения вторичной катушки от прикладываемого давления. Как показано на вставке к рис. 1(a), фоновый сигнал катушки с начальным значение U_{out}=0.3955 мВ почти линейно убывает с ростом давления до 7 ГПа. Начальные значения U_{out} для $BiFeO_3/TiO_2$(nt) и подложки TiO_2(nt) составляют 1.0673 мВ и 0.577 мВ, соответственно. Как следует из рис. 1(a) поведение намагниченности $BiFeO_3/TiO_2$(nt) и TiO_2(nt) с ростом давления в целом демонстрирует одинаковые особенности.

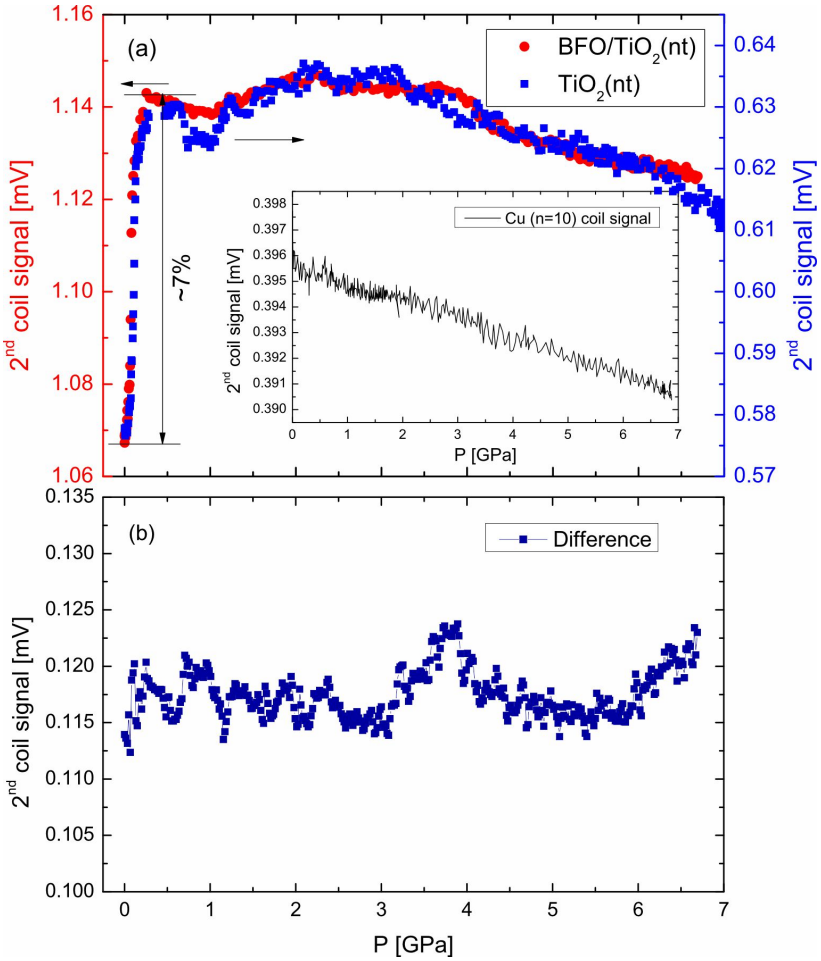


Рис. 1. Зависимость сигнала вторичной катушки (AC намагниченности) от давления для гетероструктуры $BiFeO_3/TiO_2$(nt) (a) и TiO_2(nt) (b). На вставке в (a) показано изменение выходного сигнала медной катушки с числом витков N=10 без образца

Во-первых, на начальном этапе происходит резкое возрастание U_{out}, составляющее 7% при давлении P≈0.25 ГПа. Далее динамика хода намагниченности происходит гораздо слабее и демонстрируют максимум при 2.2 ГПа с последующим монотонным убыванием до 7 ГПа. Для оценки намагниченности, связанной со слоем BFO, находилась разница между U_{out}[$BiFeO_3/TiO_2$(nt)] - U_{out}[TiO_2(nt)] - U_{out}[Cu(coil)]. Рисунок 1(b) показывает зависимость $U_{out}(P)$ для слоя BFO, который отмечает аномалию при P=3.8 ГПа. Данная аномалия может быть связана с промежуточными фазами между структурным переходом $R3c \rightarrow Pnma$ в объемном феррите висмута [11].

На рис. 2 показана зависимость $U_{out}(P)$ для $BiFeO_3/TiO_2$(nt) при наборе и сбросе давления. При сбросе давления данная зависимость демонстрирует заметный гистерезис выше P>3.8 ГПа, который может свидетельствовать о реализации магнитного фазового превращения в пленке. Более того, при выдержке на обратном ходе давления P=7 ГПа, обнаруживается

кинетика магнитных свойств (вставка к рис. 2), которая демонстрирует спонтанное повышение намагниченности. Измерения выполненные на TiO_2(nt) в то же время не показали подобного поведения.

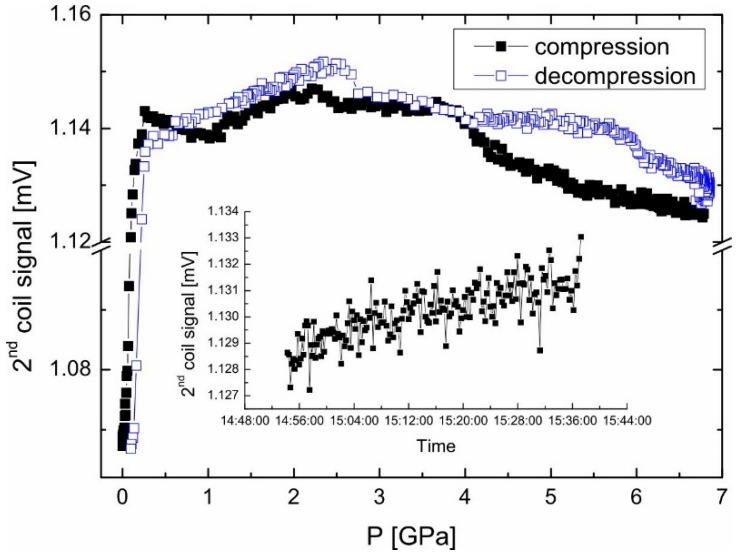


Рис 2. Зависимость сигнала вторичной катушки от давления для гетероструктуры $BiFeO_3/TiO_2$(nt) при компрессии и декомпрессии. На вставке показана временная зависимость намагниченности

Наблюдаемые в эксперименте фазовые превращения в $BiFeO_3/TiO_2$(nt) могут быть признаком индуцированного давлением слабого магнетизма, обусловленного несколькими причинами: передачей спинового момента от Fe^{3+} (BFO) к Ti^{3+}/вакансиям (TiO_2), искажением кристаллической структуры в интерфейсе (по причине структурных изменений происходящих в BFO [11]), нарушением спиральной структуры BFO у границы раздела и изменением обменного взаимодействия.

Заключение

В заключении нами было выполнено экспериментальное исследование намагниченности гетероструктуры $BiFeO_3/TiO_2$(nt). На основании данных измерений выявлено магнитное поведение, обусловленное слоем BFO, которое демонстрирует аномалию при P=3.8 ГПа, аналогичную объемному соединению. Показано, что магнитные свойства пленки при небольших давлениях до 0.25 ГПа, главным образом происходят от TiO_2(nt) нанотрубок, в то время как при большем давлении (7 ГПа) система $BiFeO_3/TiO_2$(nt) проявляет кинетику свойств, связанную с индуцированным давлением магнитным превращением.

Список литературы

[1] J. Wang, J. B. Neaton, H. Zheng, V. Nagarajan, S. B. Ogale, B. Liu, D. Viehland, V. Vaithyanathan, D. G. Schlom, U. V. Waghmare, N. A. Spaldin, K. M. Rabe, M. Wuttig, R. Ramesh, Science **299**, 1719 (2003).

[2] R. Ramesh, N. A. Spaldin, Nature Materials **6**, 21 (2007).

[3] G. K. Mor, O. K. Varghese, M. Paulose, K. Shankar, C. A. Grimes, Nano Letters **6**, 215 (2006).

[4] J. M. Macak, H. Tsuchiya, P. Schmuki, Current Opinion in Solid State and Materials Science **11**, 3 (2007).

[5] M. Venkatesan, C. B. Fitzgerald, J. G. Lunney, J. M. D. Coey, Nature **430**, 630 (2004).

[6] Y. Matsumoto, M. Murakami, T. Shono, T. Hasegawa, T. Fukumura, M. Kawasaki, P. Ahmet, T. Chikyow, S. Koshihara, H. Koinuma, Science **291**, 854 (2001).

[7] S. M. Wu, W. Zhang, A. KC, P. Borisov, J. E. Pearson, J. S. Jiang, D. Lederman, A. Hoffmann, A. Bhattacharya, Physical Review Letters **110**, 067202 (2013).

[8] H. J. Liu, L. Sun, X. Y. Huang, L. Zhao, J. J. Wang, W. D. Wu, C. W. Zou, J. L. MacManus-Driscoll, X. H. Zhu, Nature Communications **7**, 12712 (2016).

[9] Г. М. Гаджиев, Ш. М. Рамазанов, Н. С. Абакарова, Т. Н. Эфендиева, ФТТ **66**, 259 (2024).

[10] L. G. Khvostantsev, V. N. Slesarev, V. V. Brazhkin, High Pressure Research **24**, 371 (2004).

[11] Т. Р. Арсланов, С. Н. Каллаев, Л. А. Резниченко, Письма в ЖЭТФ **107**, 499 (2018).

MAGNETIC BEHAVIOR OF THE $BiFeO_3/TiO_2$(nt) SYSTEM AT HIGH PRESSURE UP TO 7 GPa

A.Z. Kurbanov, T.R. Arslanov[*]

Amirkhanov Institute of Physics, DFRC RAS, Makhachkala

[*] arslanovt@gmail.com

In this work, the isothermal magnetization of a bismuth ferrite $BiFeO_3$ deposited on a TiO_2 substrate under hydrostatic pressure up to 7 GPa and at room temperature has been studied. For this heterostructure, the magnetization is characterized by unusual behavior associated with the magnetic properties of TiO_2 nanotubes. The obtained results indicate a significant contribution to the total magnetization originating from TiO_2 nanotubes, while $BiFeO_3/TiO_2$(nt) exhibits magnetic kinetics in the high-pressure region due to pressure-induced magnetic transformations.

УДК 536.4-546. 98 25-52

ИЗУЧЕНИЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ И БАРИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ СВОЙСТВ ПАЛЛАДИЯ

Яхьяев М.Г.

Институт физики им. Х.И. Амирханова»
Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала

Рассчитаны барические зависимостей свойств палладия (Pd) вдоль изотерм 100, 300 и 1800 K с использованием аналитического метода, основанного на потенциале Ми–Леннард-Джонса. Рассчитаны уравнение состояния, коэффициент теплового расширения, теплоемкость и температура плавления. Результаты показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Введение и постановка задачи

Палладий Pd – пластичный переходный металл серебристо–белого цвета, относится к платиновой группе. Кристаллическая решётка палладия– гранецентрированная кубическая (ГЦК, fcc), температура плавления палладия при давлении P = 0 равна Tm(0) = 1827 K. Палладий относительно мало распространён и поэтому высоко ценится. Палладий применяется в производстве каталитических нейтрализаторов выхлопных газов, в электронике, стоматологии, ювелирном деле, химической промышленности как катализатор и как компонент сплавов с другими металлами платиновой группы. Наша задача состоит в расчете барических зависимостей свойств Pd вдоль различных изотерм.

Метод расчета

Используемый нами аналитический метод расчета свойств однокомпонентного кристалла представлен в статьях [1, 2]. Для описания парного межатомного взаимодействия в данном методе используется четырех параметрический потенциал Ми–Леннард-Джонса, имеющий вид:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)}\left[a\left(\frac{r_o}{r}\right)^b - b\left(\frac{r_o}{r}\right)^a \right], \qquad (1)$$

где D и r_o – глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ – численные параметры, r – расстояние между центрами атомов.

Тогда, используя приближение «взаимодействия только ближайших соседей» температуру Дебая можно определить из выражения*:*

$$\Theta(k_n, c) = A_w(k_n, c)\,\xi\left[-1+\left(1+\frac{8D}{k_B A_w(k_n, c)\,\xi^2}\right)^{1/2}\right]. \qquad (2)$$

Здесь $k_B = 1.3807\cdot10^{-23}$ J/K – постоянная Больцмана, k_n – первое координационное число, $c = (6k_p\, v/\pi)^{1/3}$ – расстояние между центрами ближайших атомов, k_p – коэффициент упаковки структуры, $v = V/N$ удельный объем, V и N – объем и число атомов кристалла.

Функция A_w возникает из-за учета энергии «нулевых колебаний» атомов в кристалле и имеет следующий вид:

$$A_w(k_n, c) = K_R\,\frac{5k_n ab(b+1)}{144(b-a)}\left(\frac{r_o}{c}\right)^{b+2},\ K_R = \frac{\hbar^2}{k_B {r_o}^2 m},\ \xi = \frac{9}{k_n(\infty)},$$

где m – масса атома, $\hbar = 1.0546\cdot10^{-34}$ J·s – постоянная Планка.

Если использовать приближение «взаимодействия только ближайших соседей», а для колебательного спектра модель Эйнштейна, то для удельной (на атом) свободной энергии Гельмгольца можно получить:

$$f_H(k_n, c, T) = \left(\frac{k_n}{2}\right)D\cdot U(R) + 3k_B\Theta_E(k_n, c)\left\{\frac{1}{2}+\left(\frac{T}{\Theta_E(k_n, c)}\right)\ln\left[1-\exp\left(-\frac{\Theta_E(k_n, c)}{T}\right)\right]\right\}, \qquad (3)$$

где Θ_E – это температура Эйнштейна, которая связана с температурой Дебая: $\Theta = (4/3)\Theta_E$, $R = r_o/c$ – относительная линейная плотность,

$$U(R) = \frac{aR^b - bR^a}{b-a}. \qquad (4)$$

Исходя из выражения (3), для уравнения состояния (P) и изотермического модуля упругости (B_T) можно получить:

$$P = -\left(\frac{\partial f_H}{\partial v}\right)_T = \left[\frac{k_n}{6}D\cdot U'(R) + 3k_B\Theta_E\cdot\gamma\cdot E_w\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)\right]\frac{1}{v}, \qquad (5)$$

$$B_T = -v\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = P + \left[\frac{k_n}{18}D\cdot U''(R) + 3k_B\Theta_E\cdot\gamma(\gamma-q)\cdot E_w\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)\right. \\ \left. - 3k_B\cdot\gamma^2\cdot T\cdot F_E\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)\right]\frac{1}{v} \qquad (6)$$

Здесь введены следующие функции:

$$E_w(y) = 0.5 + \frac{1}{\left[\exp(y)-1\right]},\quad U'(R) = R\left[\frac{\partial U(R)}{\partial R}\right] = \frac{ab(R^b - R^a)}{b-a},$$

$$F_E(y) = \frac{y^2 \exp(y)}{[\exp(y)-1]^2}, \qquad U''(R) = R\left[\frac{\partial U'(R)}{\partial R}\right] = \frac{ab(bR^b - aR^a)}{b-a}. \quad (7)$$

Из формулы (2) легко найти выражения для первого (γ) и второго (q) параметров Грюнайзена, которые имеют вид:

$$\gamma = -\left(\frac{\partial \ln\Theta}{\partial \ln v}\right)_T = \frac{b+2}{6(1+X_w)}, \quad q = \left(\frac{\partial \ln\gamma}{\partial \ln v}\right)_T = \gamma\frac{X_w(1+2X_w)}{(1+X_w)}, \quad (8)$$

где введена функция $X_w = A_w\xi/\Theta$, которая определяет роль квантовых эффектов при расчете параметров Грюнайзена.

Изохорную и изобарную теплоемкости можно определить в виде:

$$C_v = 3Nk_B \cdot F_E\left(\frac{\Theta_E}{T}\right), \; C_p = C_v(1 + \gamma\, \alpha_p\, T), \quad (9)$$

где изобарный коэффициент теплового объемного расширения можно рассчитать по уравнению Грюнайзена:

$$\alpha_p = \frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = \gamma\frac{C_v}{V \cdot B_T} = \frac{\gamma \cdot C_v}{N \cdot B_T[\pi r_o{}^3/(6k_p)]}\left(\frac{v_o}{v}\right), \; v_o = \frac{\pi\, r_o{}^3}{6\, k_p}. \quad (10)$$

Выражения (2)–(10) позволяют рассчитать зависимость указанных свойств от v/v_o и T если известны параметры межатомного потенциала (1).

Результаты расчета

В данной работе для расчета свойств ГЦК-Pd были использованы следующие значения параметров межатомного потенциала (1), которые были получены в [1] (здесь k_B – постоянная Больцмана):

$$r_o = 2.7432\cdot10^{-10}\,\text{m}, \; D/k_B = 7671.23\ \text{K}, \; b = 10.04, \; a = 3.43. \quad (11)$$

Используя метод расчета из [1, 2] и параметры потенциала из (11), нами были рассчитаны уравнение состояния $P(v, T)$ и барические зависимости различных свойств ГЦК-Pd при трех температурах.

На рис. 1 показаны изотермы уравнения состояния ГЦК-Pd в зависимости от нормированного объёма V/V_0 (слева) и удельного объема (в $Å^3/\text{atom} = 10^{-30}\,\text{m}^3/\text{atom}$, справа). Сплошными линиями показаны наши расчеты изотерм 100 (нижняя), 300, 1800 K (верхняя). Символами на Рис. 1 показаны экспериментальные результаты, линиями показаны расчеты других авторов для изотермы 300 K. Из рис. 1 видно, что наша зависимость лучше согласуется с экспериментом, чем расчеты из [3].

На рис. 2 слева показана барическая зависимость коэффициента теплового расширения. Точками на графике отмечены расчетные данные из [7]. Из графика видно, что наша линия совпадает с данными из [7]. Справа показаны барические зависимости нормированных на $R_g = Nk_B$ значений

изобарной теплоемкости C_p (сплошная линия) и изохорной теплоемкости C_v (штриховая линия) для изотерм 1800, 300 и 100 K. При температуре 100 K линии C_p и C_v сливаются. При 300 K заметно небольшое расхожение линий в диапозоне от 0 до 60 GPa, далее линии сливаются. При температуре 1800 K расхожение зависимостей более заметное. Видно, что наши расчеты хорошо согласуются с расчетными даннывми из [7].

Рис. 1. Изотермы уравнения состояния ГЦК-палладия до 210 GPa

Рис. 2. Барическая зависимость коэффициента теплового объемного расширения (слева) и нормированной теплоемкости ГЦК-палладия

На рис. 3 показаны барические зависимости температуры плавления (T_m) ГЦК-Pd: слева для диапазона 0–300 GPa, справа для 0–60 GPa. Кружками и сплошной линией показана экспериментальная зависимость из [4], сплошными линиями (красной и зеленой), лежащими выше, показаны наши расчеты, полученные методом Линдеманна и методом из [5]. Символами показаны результаты расчетов других авторов.

Рис. 3. Барическая зависимость температуры плавления ГЦК-палладия

Как видно из рис. 3 согласие расчетов по методу из [5] лучше согласуется с экспериментальной зависимостью из [4], чем расчеты по методу Линдеманна и по методам других авторов. Наши результаты лучше согласуются с экспериментальными данными, чем зависимость, полученная в [6] SSM-методом расчета (statistical moment method). Однако при $P > 60$ GPa расчеты по методам из [5] отклоняются от зависимости из [4], что может быть обусловлено приближенностью данного метода расчета. Но результаты расчетов других авторов, полученные методами компьютерного моделирования, отклоняются от экспериментальных данных из [4] намного заметнее, чем наши расчеты, полученные более простым аналитическим методом из [5], на основании потенциала (1).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00001, https://rscf.ru/project/25-23-00001/.

Литература

1. Magomedov M.N. Study of properties of fcc-Au-Fe alloys in macro- and nano-crystalline states under various P-T-conditions // J. Phys. and Chemistry of Solids. – 2021. – V. 151. – P. 109905. DOI: 10.1016/j.jpcs.2020.109905.
2. Magomedov M.N. About the gold properties and the approximations used to calculate high-pressure high-temperature properties // Computational Cond.

Matter. – 2022. – V. 31. – P. e00673. DOI: 10.1016/j.cocom. 2022.e00673
3. Baty S.R., Burakovsky L., Luscher D.J., Anzellini S., Errandonea D. Palladium at high pressure and high temperature: A combined experimental and theoretical study // Journal of Applied Physics. – 2024. – V. 135, № 7. – P. 075103. DOI: 10.1063/5.0179469.
4. Errandonea D. High-pressure melting curves of the transition metals Cu, Ni, Pd and Pt // Physical Review B. – 2013. – V. **87**. – P. 054108. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.054108.
5. Magomedov M.N. Study of the melting temperature baric dependence for Au, Pt, Nb // Vacuum. – 2023. – V. 213. – P. 112079. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112079.
6. Hieu H.K. Systematic prediction of high-pressure melting curves of transition metals // Journal of Applied Physics. – 2014. – V. 116, № 16. – P. 163505. DOI: 10.1063/1.4899511.
7. Liu Z.L., Yang J.H., Cai L.C., Jing F.Q., Alfe D. Structural and thermodynamic properties of compressed palladium // Physical Review B. – 2011. – V. **83**. – № 14. – P. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.144113.

STUDY OF THE EQUATION OF STATE AND BARIC DEPENDENCIES OF THE PROPERTIES OF PALLADIUM

Institute of Physics named after Kh.I. Amirkhanov
of the Dagestan Federal Research Center of the RAS, Makhachkala

Yakhyaev M.G.

The baric dependences of palladium (Pd) properties along isotherms of 100, 300, and 1800 K are calculated using an analytical method based on the Mie–Lennard–Jones potential. The equation of state, thermal expansion coefficient, heat capacity, and melting point are calculated. The results showed good agreement with the experimental data.

УДК 538.93 25-53

ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $AgSbSe_2$

Рагимов С.С.[1,2], Алиева А.И.[2], Саддинова А.А.[2], Искендерова П.М.[2]

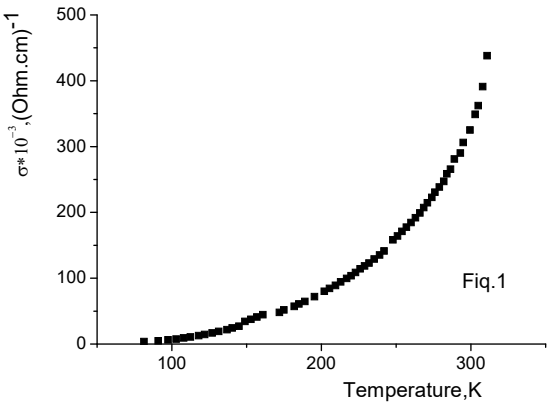
[1]Бакинский государственный университет, НИИ Физических проблем, Баку
[2]Институт физики Министерство науки и образования Азербайджана, Баку

Проведено исследования температурных зависимостей термоэдс, электропроводности и теплопроводности $AgSbSe_2$ в температурном интервале 80–300 К. Показано, что разупорядочение структуры и точечные дефекты приводят к уменьшению значение теплопроводности. Вычислена термоэлектрическая эффективность при 300 К ($ZT=S^2\sigma/kT=0.01$) и удельная чувствительность $S/k=0.04$ V.m/W.

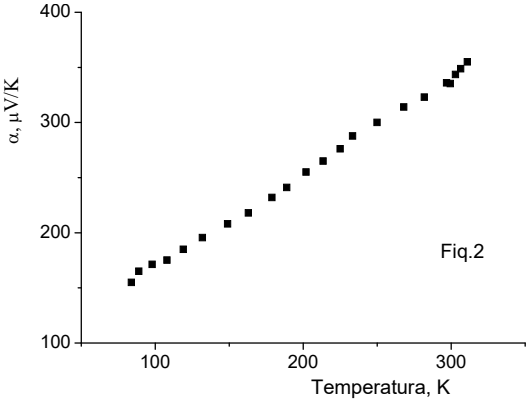
$AgSbSe_2$ является известным термоэлектрическим материалом с низкой теплопроводностью [1]. Хотя его термоэлектрическая добротность ниже, чем у других термоэлектрических материалов, таких как Bi_2Te_3 и Bi_2Se_3, этот состав может быть рекомендован в качестве чувствительного материала для различных термоэлектрических преобразователей. Он может быть использован в термоэлектрических приемниках теплового излучения благодаря высокому значению отношения S/k (где S - коэффициент термоэдс, а k - коэффициент теплопроводности) [2,3]. Исследования $AgSbSe_2$ в основном проводились при температурах выше комнатной, поскольку термоэлектрическая эффективность этого соединения достигает максимума около 500 K. В последние годы наблюдается активный интерес к изучению $AgSbSe_2$, легированного различными элементами [4], с целью улучшения характеристик термоэлектрических приемников и преобразователей, а также для понимания особенностей зарядопереноса и теплопереноса в этих соединениях. В данной работе представлены результаты исследования термоэлектрических свойств $AgSbSe_2$ в температурном диапазоне 80–320 K.

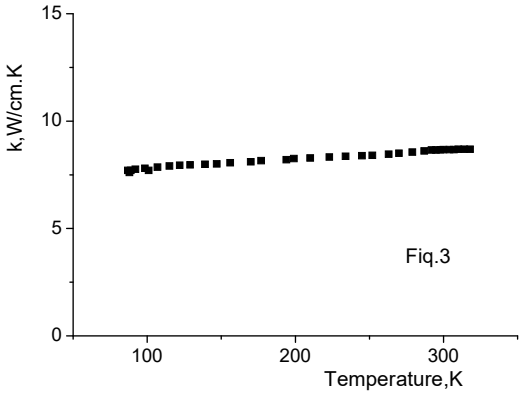
Исследуемый образец был получен путем сплавления исходных компонентов в запаянном кварцевом ампуле с выдержкой в течение 10 часов при температуре, превышающей температуру плавления, после чего проводилось медленное охлаждение со скоростью 1 K/мин до достижения комнатной температуры. Полученный состав имел серебристый цвет и пористую структуру. Измерительные контакты были нанесены индием, а ток, проходящий через образец, составлял 0,1 мА. Рентгеноструктурный анализ был выполнен с использованием дифрактометра BRUCKER-D8 ADVANCE. Результаты анализа показывают, что данный состав соответствует пространственной группе Fm-3m и имеет гранецентрированную кубическую решетку с параметром решетки a=5.76253(51) Å. Объем элементарной ячейки для этого соединения составляет $V(AgSbSe_2)=191.355(51)$ Å^3. На рис. 1 показана температурная зависимость электропроводности $AgSbSe_2$. При температурах выше 160 K электропроводность резко увели-

чивается. Как видно из графика, при температурах ниже 160 K электропроводность $AgSbSe_2$ имеет относительно низкое значение порядка 10^{-3} $(Ом \cdot см)^{-1}$. Увеличение электропроводности можно объяснить ростом концентрации носителей заряда.



На рис. 2 представлена температурная зависимость термоэдс $AgSbSe_2$. Термоэдс имеет положительное значение, что указывает на дырочный механизм проводимости. Как видно, термоэдс $AgSbSe_2$ увеличивается с повышением температуры почти линейно и достигает значения 350 мкВ/К при комнатной температуре. На рис.3 представлена температурная зависимость теплопроводности $AgSbSe_2$ в интервале 80-300 K. Значение теплопроводности этого соединения в исследованном температурном интервале достаточно низка, и наблюдается незначительный рост k с температурой. Малое значение теплопроводности $AgSbSe_2$ может быть обусловлено несколькими факторами: разупорядочением, точечным дефектами и структурными составляющими. $AgSbSe_2$ кристаллизуется со структурой NaCl, где ионы Ag и Sb распределены разупорядоченно и занимают позиции в катионной подрешетке [1,15]. С ростом температуры возникают все более наноразмерные нарушения периодичности кристаллической решетки в областях, обогащенных Ag и Sb. С другой стороны, имеет место также высокая степень ангармоничности связей Sb-Se, которая приводит к сильным фонон-фононным взаимодействиям. Помимо этого, имеет место одновременно незначительный рост значения теплопроводности. Это обусловлено тем, что халькогениды серебра известны как проводники с высокой ионной проводимостью. С ростом температуры ионы серебра выходят из своих фиксированных позиций, что усиливает перестройку кристаллической решетки и, соответственно, влияет на электронные свойства материала. Выше было отмечено, что, несмотря на меньшую термоэлектрическую добротность, этот состав может быть рекомендован в термоэлектрических приемниках теплового излучения из-за высокого значения отношения S/k. С этой целью было оценено значение термоэлектрической эффективности ZT=0.01 и удельной чувствительности S/k=0.04 V.m/W исследованного состава.





Литература

[1] А.В. Дмитриев, И.П. Завягин. *Современные тенденции развития физики термоэлектрических материалов*, УФН, **180** № 8 (2010) 821-838.

[2] С.С. Рагимов, С.А. Алиев. Характер α→β –перехода Ag_2Te в сплаве системы Ag-Sb-Te, отвечающем составу $AgSbTe_2$, Неорганические Материалы, 2007, 43, 1321-1323.

[3] K.T. Wojciechowski, M. Schmidt, Structural and thermoelectric properties of $AgSbTe_2$-$AgSbSe_2$ pseudobinary system, Phys. Rev. B 79, 2009, 184202−1−7.

[4] S.N. Guin, A. Chatterjee, K. Biswas, Enhanced thermoelectric performance in p-type $AgSbSe_2$ by Cd-doping, The Royal Society of Chemistry Adv., 2014, 4, 11811–11815.

[5] Л.Д. Дудкин, А.Н. Остраница. Тройные полупроводниковые соединения $A^IB^VC_2^{VI}$, Доклады АН СССР, (1959), 124, № 1, 94-97.

THERMOELECTRIC PROPERTIES OF $AgSbSe_2$

S.S. Ragimov[1,2], A.I. Alieva[2], A.A. Saddinova[2], P.M. Isgenderova[2]

[1]Baku State University, Institute for Physical Problems, Baku
[2]Institute of Physics of Azerbaijan Ministry of Science and Education, Baku

The temperature dependences of thermoelectric power, electrical conductivity and thermal conductivity of $AgSbSe_2$ were studied in the temperature range of 80-300 K. It was shown that disordering of the structure and point defects lead to a decrease in the thermal conductivity. The thermoelectric efficiency at 300K ($ZT = S^2\sigma/kT=0.01$) and specific sensitivity $S/k=0.04$ V.m/W were estimated.

УДК:51-37; 51-72; 537.39 25-55

ПЕРКОЛЯЦИЯ В ОДНОМЕРНОЙ СТРУКТУРЕ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА

Ализаде Р.А.

Институт физики Министерства науки и образования Азербайджана, Баку

Исследована зависимость статистических параметров множеств случайных чисел, сгенерированных в компиляторе Fortran, от количества случайных чисел в множествее. Показано, что статистические параметры множества псевдослучайных чисел сходятся к устойчивому значению при большом их количестве. Псевдослучайные числа использовались для определения порога перколяции одномерной структуры наночастиц магнетита. Для того чтобы результаты модельных расчетов перколяции одномерных сред были близки к реальным, необходимо брать наночастицы длиной более 500.

Введение

Компьютерные программы, основанные на методе Монте-Карло (МК), широко используются в различных областях науки и техники. В математике они используются: дифференцированием и интегрированием функций одной или нескольких переменных, решением дифференциальных и интегральных уравнений и т.д.; в физике: многими теоретиками, которые используют их для прогнозирования экспериментов и разработки предлагаемых методов проведения экспериментов, моделирования физических процессов, а также экспериментаторами при анализе полученных результатов [1-3]. Моделируя математические, физические, биологические, химические, экономические, геологические, экологические процессы и т. д. случайными числами, можно уточнить параметры изучаемого процесса для качественного и количественного соответствия предлагаемой модели реальному процессу и создать более точную модель процесса.

Эффективность, точность и надежность результатов, получаемых при использовании случайных чисел, во многом зависят от свойств наборов случайных чисел и, следовательно, способа их генерации. Метод генерации псевдослучайных чисел можно считать эффективным, если небольшое количество генерируемых псевдослучайных чисел позволяет проводить высокоточные расчеты с использованием МК, определять характеристики и моделировать рассматриваемые процессы.

Статистические параметры множества псевдослучайных чисел и метод перколяции

Основные статистические параметры множества псевдослучайных чисел, сгенерированных в комптляторе Fortran: среднее значение $\bar{x}$, стан-

дартное отклонение σ, стандартная ошибка x_m, n-й центральный момент распределения μ_n, коэффициент асимметрии η_n, эксцесс ε, коэффициент полидисперсности p_k, коэффициент корреляции K и число псевдослучайных чисел с одинаковым значением N_{ID} были определены с помощью формул в [4].

Перколяция в одномерной среде определялась с помощью программы, написанной на алгоритмическом языке Фортран на основе алгоритма [2].

Результаты численных расчетов и их обсуждение

Исследования зависимости статистических параметров $\bar{x} = \bar{x}(N)$, $\sigma=\sigma(N)$, $\mu=\mu(N)$, $\varepsilon=\varepsilon(N)$, $p_k=p_k(N)$ множеств случайных чисел, показал, что имеется соотношение: $\lim_{N\to N_{\min}} \bar{x}(N) = x_0$, $\lim_{N\to N_{\min}} \sigma(N) = \sigma_0$, $\lim_{N\to N_{\min}} \mu(N) = \mu_0$, $\lim_{N\to N_{\min}} \varepsilon(N) = \varepsilon_0$, $\lim_{N\to N_{\min}} p_k(N) = p_{k_0}$.

На рис. 1 (а,б,в,г) показаны зависимости среднего значения $\bar{x}$, стандартного отклонения σ, коэффициент асимметрии (η) и коэффициент корреляции (K) от количества псевдослучайных чисел N в множестве.

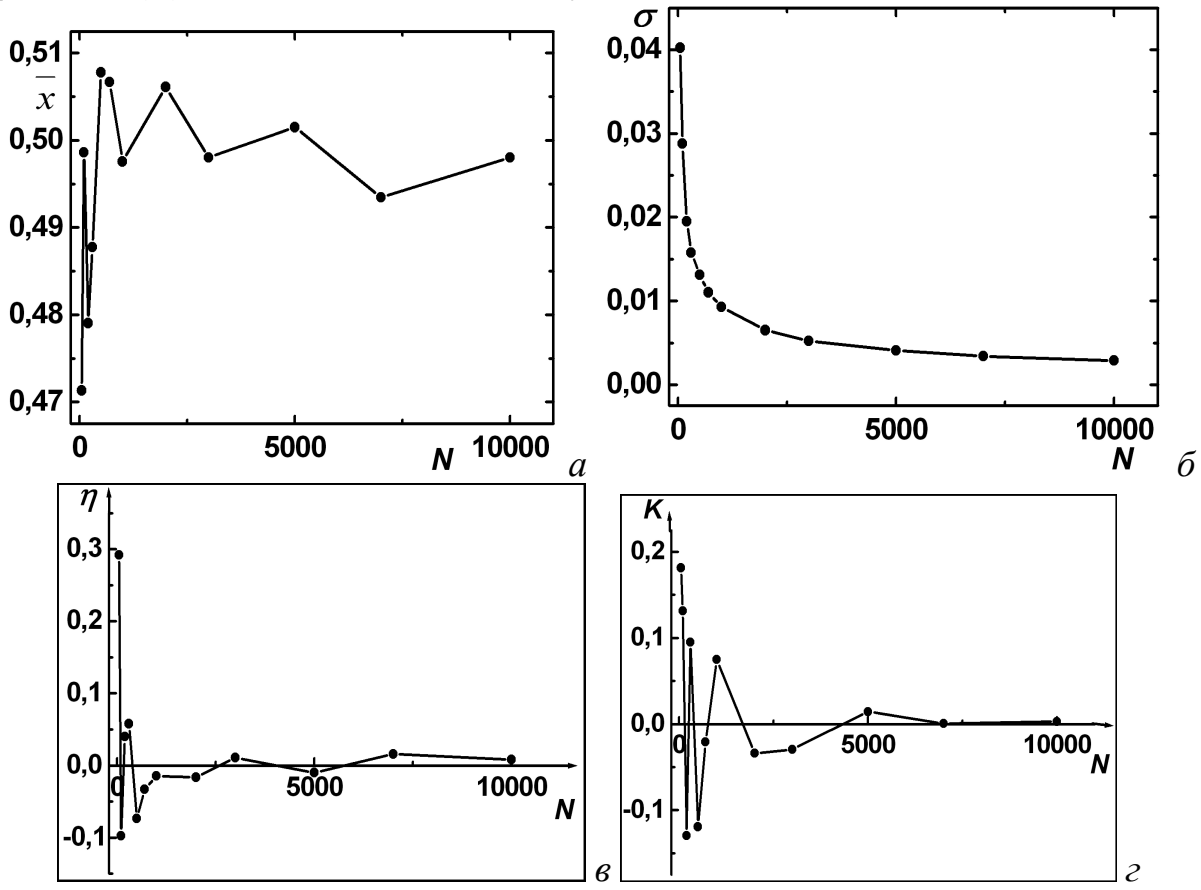


Рис. 1

Как видно из рис. 1 (а), среднее значение $\bar{x}$ псевдослучайных чисел колеблется около 0,5 и достигает стабил ьного значения при количестве случайных чисел 7000.

Стандартное отклонение σ уменьшается с увеличением количества псевдослучайных чисел в наборе (рис. 1 (б)). Стандартное отклонение σ наборов псевдослучайных чисел определяет величину погрешности расчета при использовании псевдослучайных чисел [5].

Как видно из рис. 1 (в,г), значения коэффициента асимметрии η и коэффициента корреляции K стремятся к устойчивому значению, равному нулю, при увеличении числа псевдослучайных чисел.

Значение коэффициента полидисперсности p_k сходится к устойчивому значению 1,67 (рис. 1 (д)) при увеличении числа псевдослучайных чисел в множестве. Это свидетельствует о немонодисперсности множества псевдослучайных чисел [6].

Определение порога перколяции

Рассматривается перколяция одномерной среды длиной L, состоящей из 20, 30, 50 и 100 наночастиц. На рис. 2 (а, б, в) показано заполнение 30 ячеек в зависимости от заданной вероятности p.

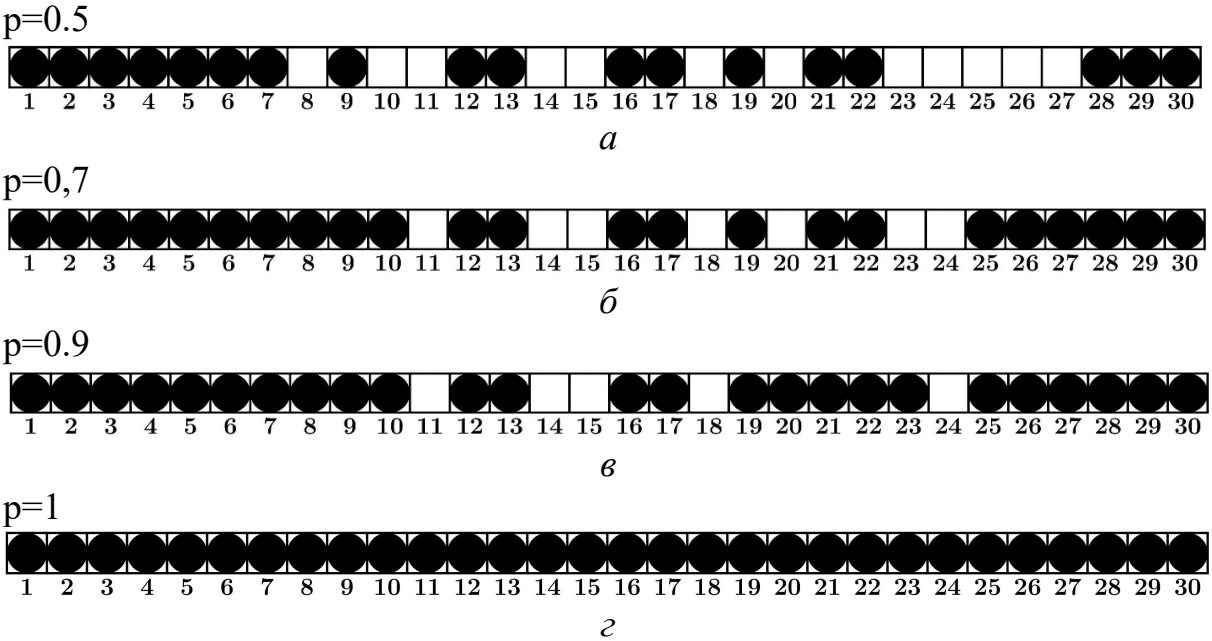


Рис. 2

Порог перколяции для одномерной среды наночастиц длиной L=20, 30, 50, 100, 200, 300, 500, 1000, 2000, 3000, 5000 и 10000 ячеек составляет 0,993, 0,993, 0,993, 0,999, 0,9992, 0,9992, 0,9993, 0,9994, 0,99992, 0,99992 и 0,99992 соответственно. Как видно, значения порога перколяции увеличиваются с длиной (количеством ячеек) одномерной среды наночастиц. Кроме того, для точного определения порога перколяции реальных одномерных сред необходимо брать одномерную среду длиной более 500 ячеек.

Исследование зависимости коэффициента заполнения (отношения числа заполненных ячеек к общему числу ячеек) от числа ячеек L показа-

ло, что с увеличением числа ячеек он становится линейным. Коэффициент регрессии для зависимости фактора заполнения от длины (числа ячеек) одномерной среды наночастиц длиной L = 20, 30, 50, 100, 200, 300, 500, 1000, 2000, 3000, 5000 и 10000 ячеек составляет соответственно 0,977, 0,989, 0,994, 0,997, 0,998, 0,999, 0,9993, 0,9996476, 0,9997257, 0,9999663, 0,9999615, 0,9999846. Это свидетельствует о том, что в качестве реальной одномерной среды наночастиц следует рассматривать среду одномерных наночастиц длиной более 500.

На рис. 3 (а,б) показаны зависмость количеств кластеров от вероятности случайных чисел для кривых 1, 2 и 3, соответственно 20, 50 и 200 (а) и зависимость максимального количество наночастиц в кластере от длины одномерной среды (б).

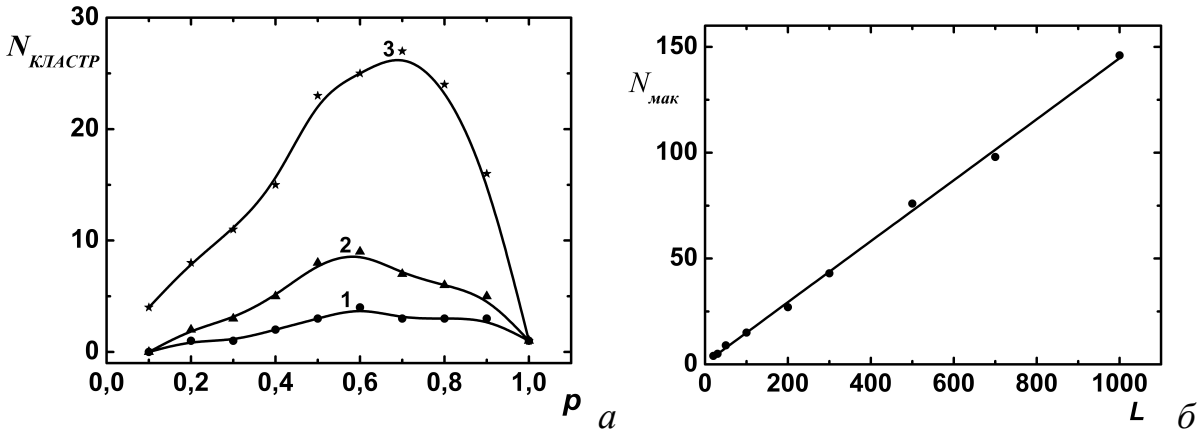


Рис. 3

Как видно из рис. 3 (а) максимальное количество кластеров появляется при $0.6 \leq p \leq 0.7$. Зависимость максимального количество наночастиц в кластере от длины одномерной среды линейная (рис. 6 (б)).

Выводы

Надежность результатов, полученных с использованием наборов случайных чисел, зависит от статистических параметров наборов случайных чисел.

Порог перколяции увеличивается с ростом числа ячеек. Для моделирования перколяции реальной одномерной среды необходимо рассмотреть более 500 ячеек. Во всех случаях образование максимального числа кластеров ($0,6 \leq p \leq 0,7$) не зависит от числа ячеек.

Литература

1. Landau D.P., Binder K.. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Fourth Edition Cambridge University Press, (2015) 519.
2. Gould H., Tobochnik J., Christian W.. An Introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical System, (2016) 785.

3. Yinghong Z., Jianguo W.. Application of Monte Carlo method to solving boundary value problem of differential equations, High Power Laser and Particle Beams, 24 (2012) 3023-3027.
4. Feller W. An introduction to probability theory and its applications. New York: Wiley, (1971) 509.
5. Knuth D.E. The art of computer programming, 2: Semi-numerical algorithms, 3rd edn. Addison-Wesley, Reading, (1998) 688.
6. Irani R.R., Calls C.F., Particle size measurement. Interpretation and application. New York: Wiley, (1963) 165.

PERCOLATION IN THE ONE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF MAGNETITE NANOPARTICLES

Alizade R.A.

Institute of Physics Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Baku

The dependence of statistical parameters of random number sets generated in the Fortran compiler on the number of random numbers in the set is investigated. It is shown that the statistical parameters of the set of pseudorandom numbers converge to a stable value with a large number of them. Pseudorandom numbers were used to determine the percolation threshold of the one-dimensional structure of magnetite nanoparticles. In order for the results of model calculations of percolation of one-dimensional media to be close to real ones, it is necessary to take nanoparticles longer than 500.

УДК 621.315.592.9 25-65

ВЛИЯНИЕ АМИННЫХ ДОБАВОК НА ПРОВОДЯЩИЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ PEDOT:PSS

Будник В.С., Лабунов В.А., Тучковский А.К.

Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, Минск

Аннотация

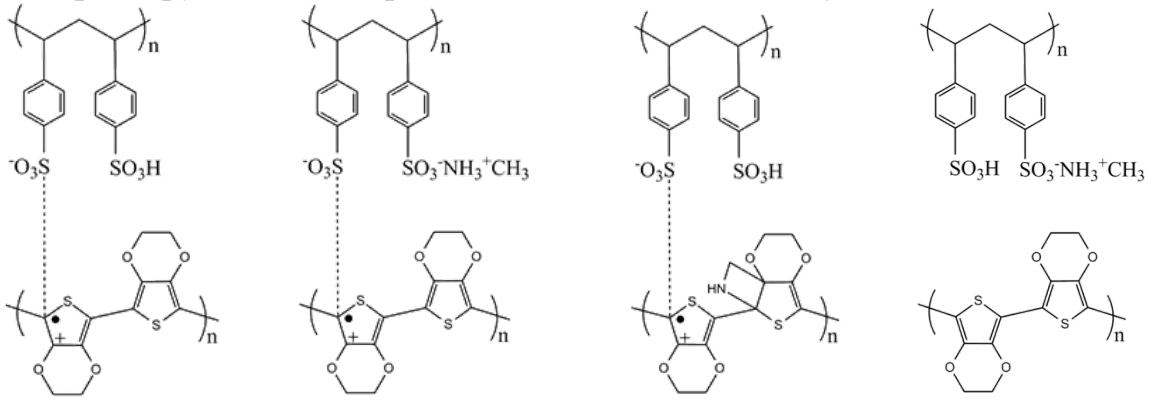
Полупроводниковые полимеры представляют собой класс электронных материалов, которые нашли применение при разработке большого количества новых электронных и оптоэлектронных устройств, включая органические светоизлучающие диоды, органические фотоэлектрические элементы, органические полевые транзисторы, преобразователи для химического или биохимического анализа, топливные элементы [1]. Наиболее широко используемым проводящим полимером в органических электронных устройствах является PEDOT:PSS благодаря его высокой прозрачности (более 90%), высокой проводимости (до 10^3 См/см), хорошей гибкости, стабильности в условиях окружающей среды и превосходным плёнкообразующим свойствам [2]. В отличие от большинства полупроводниковых полимеров, PEDOT:PSS синтезируется в легированном (т.е. проводящем) состоянии. Частично окисленные цепи PEDOT компенсируются зарядом депротонированных сульфокислотных групп PSS, в результате чего происходит образование полиэлектролитного комплекса, имеющего свойства стабильной дисперсии [3].

Целью работы является изучение влияния добавок аминов с различной функциональной группой на сопротивление и вольт-амперные характеристики модифицированного полимера. PEDOT:PSS наносили на стеклянные подложки методом лезвия с фторопластовым наконечником, промытые стёкла помещали на нагревательный столик, нагревали до 70 °С, затем на нагретые стёкла наносили каплю полимера с необходимым содержанием амина. Сопротивление и вольт-амперные характеристики исследованы мультиметром DT 832.

Для исследования взяли образцы четырёх аминов: метиламин (38 % водный раствор), диэтиламин, моноэтаноламин, анилин, которые добавляли в PEDOT:PSS.

Добавление метиламина и диэтиламина показало, что малые количества приводит к падению сопротивления, однако увеличение их концентрации действует противоположно. Это объясняется тем, что амины нейтрализуют остаток серной кислоты, добавляемой в PEDOT:PSS (рис. 1, *а)* для увеличения его растворимости (рис. 1, *б* и *г*), а затем они вступают в реакцию с самим PEDOT по двойной связи, чем нарушается сопряжение

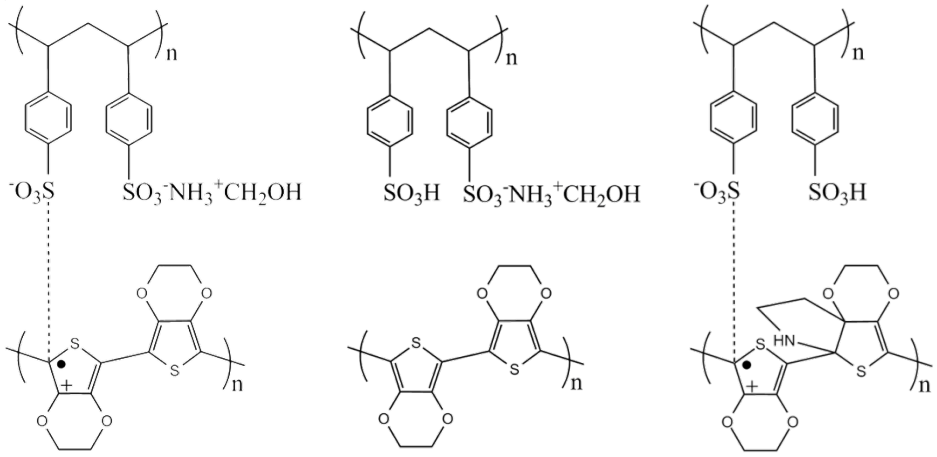
двойная–одинарная связь и происходит рост напряжения (рис. 1, *в*). Диэтиламин реагирует с полимером аналогично метиламину.



а *б* *в* *г*

Рис. 1. Взаимодействие PEDOT:PSS с метиламином

В случае моноэтаноламина его добавление приводит сразу к падению сопротивления за счёт нейтрализации сульфогруппы (рис. 2, *а* и *б*), а затем к постоянному росту сопротивления, т.к. он взаимодействует по двойной связи серосодержащего гетероциклического остатка в PEDOT (рис. 2, *в*).



а *б* *в*

Рис. 2. Взаимодействие PEDOT:PSS с моноэтаноламином

Анилин сразу связывает сульфогруппу в четвертичную аммониевую соль (рис. 3, *а* и *б*), а затем, возможно, идёт его полимеризация с образованием параллельной цепи (рис. 3, *в*).

Как видно на рис. 4, при малом содержании аминных добавок сопротивление падает, затем после их концентрации 0,5 мг/мл монотонно растёт, что объясняется взаимодействием аминов в первую очередь с сульфогруппой PSS и протеканием по остаточному принципу реакции с нарушением двойной связи. Однако для анилина характерно отклонение от вышеназванной закономерности в виде постоянного уменьшения сопротивления с нарастанием концентрации добавки.

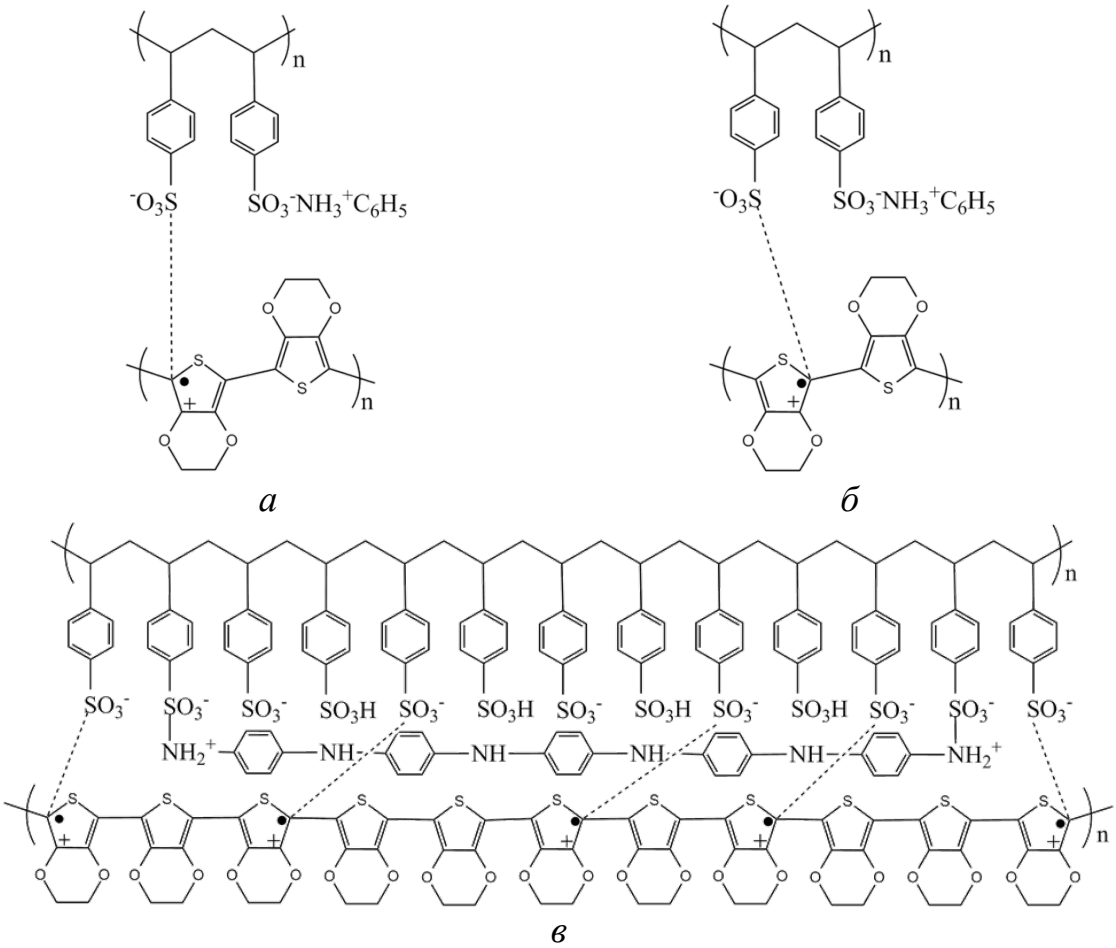


Рис. 3. Взаимодействие PEDOT:PSS с анилином

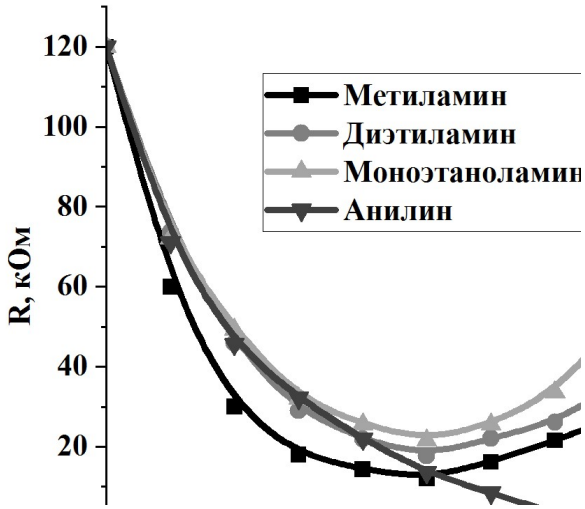


Рис. 4. Зависимость сопротивления полимера от содержания добавки

Из таблицы и рис. 5 видно, что модификация PEDOT:PSS анилином приводит к достижению наиболее высоких электрических параметров, в то время как самые низкие – без добавок.

Таблица. Электрические характеристики
PEDOT:PSS в зависимости от внедряемого амина

Вид добавки	Ток короткого замыкания, J_{sc}, мА/см^2	Напряжение холостого хода, V, мВ	Фактор заполнения, FF	КПД η, %
Без добавок	16,0	0,650	0,49	5,5
Метиламин	16,8	0,675	0,56	6,5
Диэтиламин	17,5	0,700	0,63	7,1
Моноэтаноламин	17,2	0,700	0,60	6,8
Анилин	17,8	0,700	0,66	7,5

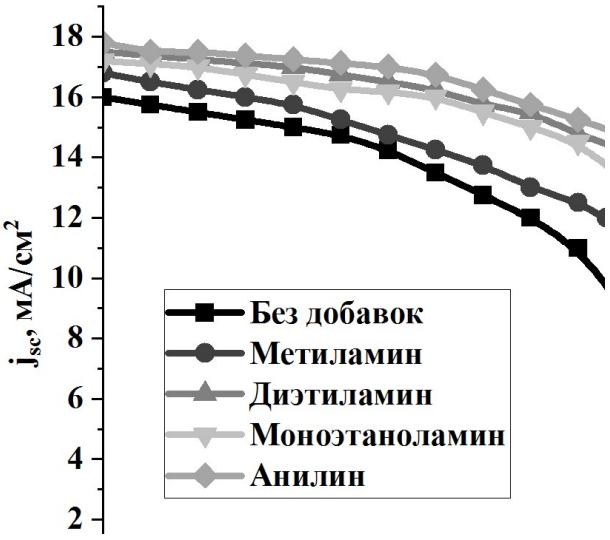


Рис. 5. Вольт-амперные характеристики
PEDOT:PSS в зависимости от внедряемого амина

Таким образом, проведённые исследования показали благоприятное воздействие аминных модификаций на проводящие и электрические свойства PEDOT:PSS, лучшие результаты среди которых были выявлены при добавлении анилина.

Литература

1. Carr, O. Analysis of the electrical and optical properties of PEDOT:PSS/PVA blends for low-cost and high performance organic electronic and optoelectronic devices / O. Carr [et al.] // Translational Materials Research. – 2015. – № 2. – P. 1–12.
2. Song, J. High-Conductivity, Flexible and Transparent PEDOT:PSS Electrodes for High Performance Semi-Transparent Supercapacitors / J. Song [et al.] // Polymers. – 2020. – Vol. 12. – № 450. – P. 1–10.
3. Tom, P.A. The Mechanism of Dedoping PEDOT:PSS by Aliphatic Polyamines / P. A. Tom [et al.] // J. Phys. Chem. – 2019. – № 123. – P. 24328–24337.

УДК 620.3: 681.586 25-68

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИИ ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР $ZnFe_2O_4$ МЕТОДАМИ СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Крюков Р.С.[1], Бузовкин С.С.[1], Рыбина А.А.[1], Шомахов З.В.[2,3], Гукетлов А.М.[2], Кондратьев В.М.[4,5], Налимова С.С.[1], Мошников В.А.[1]

[1]Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург
[2]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[3]Институт информатики и проблем регионального управления ФНЦ КБНЦ РАН, Нальчик
[4]Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алферова РАН, Санкт-Петербург
[5]Московский физико-технический институт, Москва

Данная работа посвящена исследованию композиции газочувствительных наноструктур $ZnFe_2O_4$ методами атомно-силовой микроскопии и сканирующей зондовой микроскопии Кельвина. Результаты атомно-силовой микроскопии показали, что образец обладает паутинообразной структурой. Результаты сканирующей кельвин-зонд-микроскопии показали, что на поверхности образца присутствуют области резкого изменения поверхностного потенциала, что связано с разложением феррита цинка на оксид цинка и оксид железа.

Феррит цинка ($ZnFe_2O_4$) является перспективным материалом для создания газочувствительных сенсоров благодаря его высокой чувствительности к широкому спектру различных летучих органических соединений и токсичных газов [1-2], возможности работы при пониженных температурах [3] и гибкости в модификации [4]. Применение различных наноформ феррита цинка позволяет увеличить чувствительность сенсоров на основе данного материала за счет увеличения количества активных центров, на которых могут протекать окислительно-восстановительные реакции с анализируемым газом. Поэтому состояние и свойства поверхности подобных наноматериалов являются важными характеристиками, которые необходимо учитывать при создании устройств на их основе. Современные методики сканирующей зондовой микроскопии позволяют эффективно исследовать свойства поверхности подобных материалов.

Данная работа посвящена изучению свойств поверхности газочувствительных наноструктур $ZnFe_2O_4$ методами атомно-силовой микроскопии и сканирующей зондовой микроскопии Кельвина. Процесс синтеза образцов феррита цинка, а также результаты исследования их газочувсвтительных свойств были описаны ранее [5-8].

Результаты атомно-силовой микроскопии показали, что полученные наноструктуры феррита цинка обладают паутинообразной структурой (рисунок 1).

Рис. 1. Результаты исследования морфологии образца методом АСМ

Результаты сканирующей зондовой микроскопии Кельвина выявили наличие на поверхности образца областей с резким изменением поверхностного потенциала (рисунок 2). Наблюдаемый эффект может быть обусловлен разложением феррита цинка на две составляющие – оксид цинка (ZnO) и оксид железа (Fe_2O_3). В местах контакта данных оксидов возможно формирование гетеропереходов, через которые происходит перераспределение заряда вследствие различия работ выхода материалов.

Рис. 2. Результаты исследования образца феррита цинка методом сканирующей зондовой микроскопии Кельвина

Неравномерное распределение компонентов было подтверждено дополнительным исследованием образца методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (рисунок 3)

Рис. 3. Результаты исследования распределения компонентов образца методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии

Авторы доклада выражают свою благодарность сотрудникам Центра сканирующей зондовой микроскопии СПбГЭТУ «ЛЭТИ».

Литература

1. Mukherjee, K., & Majumder, S. B. (2009). Analyses of response and recovery kinetics of zinc ferrite as hydrogen gas sensor. Journal of Applied Physics, 106 (6).
2. Yang, H., Bai, X., Hao, P., Tian, J., Bo, Y., Wang, X., & Liu, H. (2019). A simple gas sensor based on zinc ferrite hollow spheres: Highly sensitivity, excellent selectivity and long-term stability. Sensors and Actuators B: Chemical, 280, 34-40.
3. Singh, A., Singh, A., Singh, S., Tandon, P., Yadav, B.C., & Yadav, R.R. (2015). Synthesis, characterization and performance of zinc ferrite nanorods for room temperature sensing applications. Journal of Alloys and Compounds, 618, 475-483.
4. Ravikumar, T., Thirumalaisamy, L., Madanagurusamy, S., & Kalainathan, S. (2023). Manganese doped two-dimensional zinc ferrite thin films as chemiresistive trimethylamine gas sensors. Physical Chemistry Chemical Physics, 25(46), 32216-32233.

5. Nalimova, S.S., Shomakhov, Z.V., Kondratev, V.M., Moshnikov, V.A., & Karmokov A.M. (2023). Investigation of hierarchical gas-sensing $ZnFe_2O_4$ nanostructures. Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 17(S1), S416-S422.
6. Шомахов, З.В., Налимова, С.С., Гукетлов, А.М., Кондратьев, В.М., Мошников, В.А. (2024). Управление свойствами адсорбционных центров при формировании газочувствительных структур смешанных оксидов. Известия высших учебных заведений. Электроника, 29 (1), 7-18.
7. Шомахов, З.В., Налимова, С.С., Рыбина, А.А., Бузовкин, С.С., Калажоков, З.Х., Мошников, В.А. (2023). Улучшение сенсорных характеристик бинарных и тройных оксидных наносистем. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, 15, 879-887.
8. Nalimova, S, Shomakhov, Z, & Moshnikov, V. (2023). Binary and Ternary Oxide Nanostructured Multisystems for Gas Sensors. Engineering Proceedings, 48 (1), 47.

STUDY OF THE COMPOSITION OF GAS-SENSITIVE $ZnFe_2O_4$ NANOSTRUCTURES BY SCANNING PROBE MICROSCOPY

Kryukov R. S.[1], Buzovkin S. S.[1], Rybina A.A.[1], Shomakhov Z.V.[2], Guketlov A.M.[2], Kondratev V.M.[3,4], Nalimova S.S.[1], Moshnikov V.A.[1]

[1]Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg
[2]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[3]Saint Petersburg Academic University, Saint Petersburg
[4]Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow

This study focuses on investigating the composition of gas-sensitive $ZnFe_2O_4$ nanostructures using atomic force microscopy (AFM) and Kelvin probe force microscopy (KPFM). The AFM results revealed that the sample exhibits a spider-web-like structure. The Kelvin probe force microscopy results demonstrated the presence of regions with abrupt changes in surface potential, which is attributed to the decomposition of zinc ferrite into zinc oxide and iron oxide.

УДК 538.958 25-70

ИЗМЕРЕНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОГО СВЕТОВЫХОДА ЖИДКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СЦИНТИЛЛЯТОРА НА ОСНОВЕ НАФТАЛИНА В РАСТВОРЕ ДОДЕКАНА

Азизов И.К., Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н., Шогенова М.М., Ханукаева Е.И.

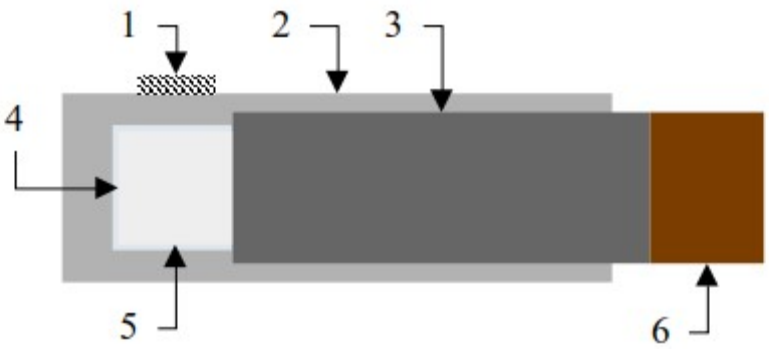
Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В этом исследовании изучается эффективность и функциональность жидкого органического сцинтиллятора, состоящего из додекана в качестве растворителя, нафталина в качестве основного фтора и PPO (2,5-дифенилоксазола) в качестве преобразователя длины волны. Результаты продемонстрировали повышение светового выхода по сравнению со стандартными образцами, что подтверждает перспективность данных систем для применения в низкофоновых экспериментах, в том числе по поискам безнейтринного двойного бета-распада.

Жидкие органические сцинтилляторы широко используются в детекции излучения благодаря их способности преобразовывать ионизирующее излучение в обнаруживаемый свет. В этом исследовании рассматривается сцинтилляционная система, в которой додекан служит растворителем, а комбинация нафталина и PPO повышает эффективность процесса преобразования энергии.

Измерения светоотдачи проводились с использованием кварцевой кюветы, заполненного жидким сцинтиллятором, при наблюдении с помощью ФЭУ-39А с сурьмяно-цезиевым фотокатодом на кварцевом стекле. Диаметр рабочей поверхности 34 мм., наибольший диаметр 48,5 мм. Область спектральной чувствительности 160-600 нм, область максимальной спектральной чувствительности 380-420 нм. Для возбуждения образца использовался источник 137Cs (фотоны с энергией 662 кэВ). Фотоны рассеиваются от электронов в сцинтилляторе, испуская энергичные электроны. Это приводит к получению света главным образом за счет прямого возбуждения растворителя и первичных компонентов фтора.

Экспериментальная установка для измерения светоотдачи расположена в темном помещении. Температура в этом помещении колеблется от 20 до 25 °C. Схема установки показана на рис. 1, а блок схема на рис. 2. На кварцевое окно ФЭУ устанавливается цилиндрическая кварцевая кювета с габаритами 40х40 мм толщиной стенки 3 мм., содержащую образец сцинтиллятора. Кювета окружена отражателем, алюминиевой майларовой пленкой, за исключением той стороны, которая с кварцевым окном и оптически соединена видна с помощью ФЭУ. Образец облучается радиоактивным источником в закрытой коробке, в которой находятся образец и отражатель.



1) Источник гамма-квантов Cs-137; 2) Экранирующий кожух детектора;
3) ФЭУ-39А; 4) Отражатель из алюминиевой фольги; 5) Кювета для раствора;
6) Корпус делителя ФЭУ

Рис. 1. Чертеж установки, используемой для измерения светоотдачи

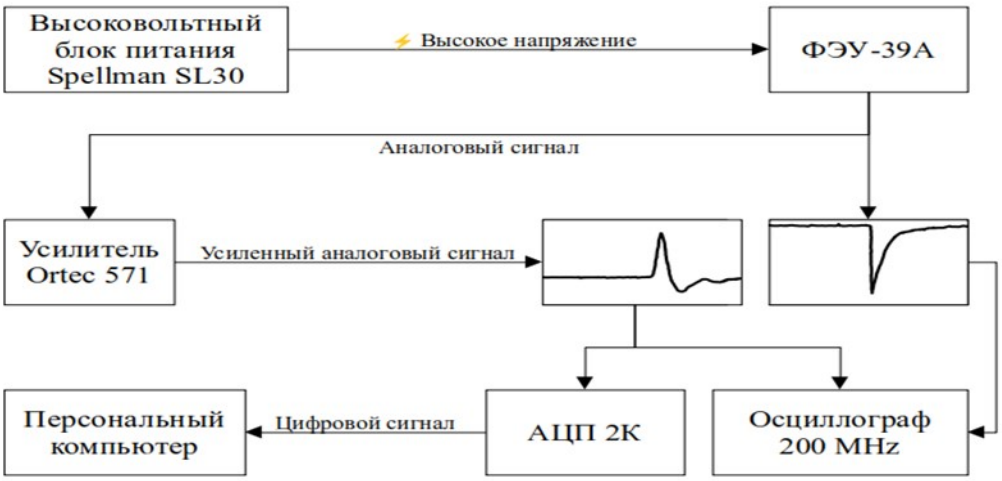


Рис. 2. Блок схема, используемая для измерения светоотдачи

Источник высокого напряжения SL30 spellman высокое напряжение (HV) 1088 В. Сигнал ФЭУ подается на вход спектрометрического усилителя модели 571 фирмы Ortec. Сигнал выхода спектрометрического усилителя ФЭУ с временем формирования импульса в виде колокольчика составляет 2 микросекунды на АЦП последовательного приближения типа Вилкинсон с количеством каналов 2К, который сопряжен с компьютером через USB.

Световой поток определяется путем регистрации характерного комптоновского спектра (количество событий в зависимости от сигнала заряда ФЭУ) и определение для заданной энергии, накопленной на комптоновском плече, соответствующего сигнала ФЭУ. Затем сигнал ФЭУ на границе Комптона сравнивается с сигналом стандарта псевдокумол при той же энергии. Чтобы сравнить значения между образцом и стандартом, необходимо вычесть значение пьедестала. Пьедестал определяется путем сбора данных с использованием тех же настроек, что и при "реальном" измерении.

Примеры двух измеренных комптоновских спектров приведены на рис. 3 и 4. На рис. 3 показан комптоновский контур образца псевдокумол, а рис. 4 - комптоновский спектр образца, загруженного сцинтиллятором додекан-нафталин. Более высокая светоотдача сцинтиллятора соответствует смещению комптоновского края в сторону более высоких сигналов ФЭУ (по оси абсцисс на графике). Максимум комптоновского спектра на комптоновском крае и высокоэнергетическом хвосте аппроксимируется с помощью гауссовой аппроксимации. Светоотдача встроенного сцинтиллятора составляет 120 % от псевдокумола. В некоторых случаях форму амплитуды импульса смотрели с помощью цифрового осциллографа.

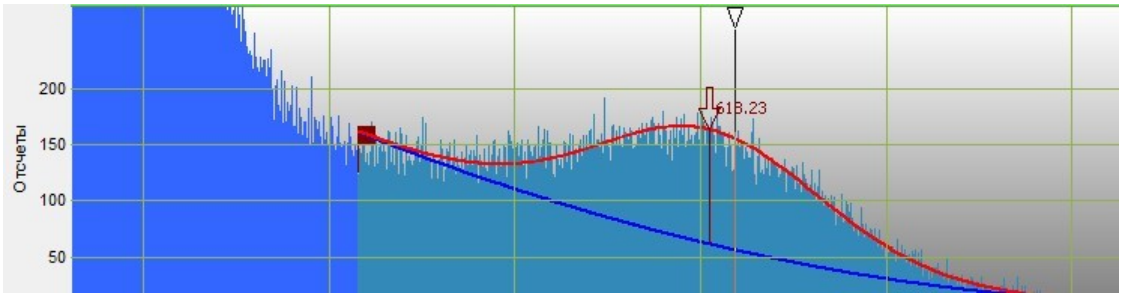


Рис. 3 калибровочный спектр гамма-источника Cs-137
с энергией гамма-квантов 662 кэВ для детектора додекан

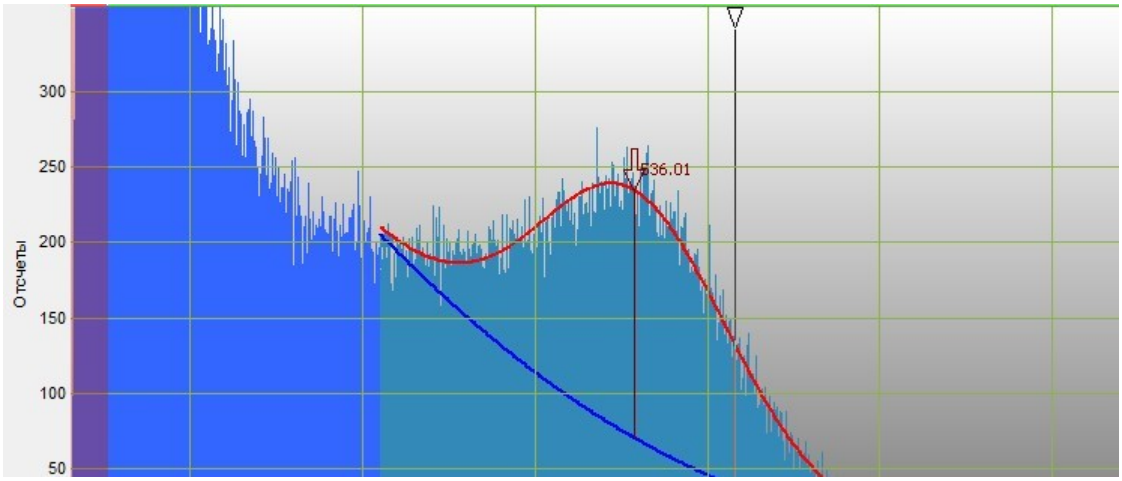


Рис. 4 калибровочный спектр гамма-источника Cs-137
с энергией гамма-квантов 662 кэВ для детектора псевдокумол

Перед облучением сцинтилляционных образцов источником ^{137}Cs, для создания хорошего светового импульса они были обработаны N_2 в течение 20 минут и отфильтрованы микрофильтром. Измерения были начаты примерно через 10 минут после включения высокого напряжения (ВН). Мы старались поддерживать этот период времени постоянным для всех измерений, чтобы избежать эффекта смещения ВН через некоторое время или возможного увеличения содержания кислорода в образце.

Комптоновские спектры детектора додекан (см. рис. 3) и детектора псевдокумол (см. рис. 4.) при облучении источником 137Cs, измеренные в ячейке диаметром 3.35 см и высотой 3.75 см.

Таким образом, сцинтилляционная система продемонстрировала значительное увеличение световыхода: комбинация додекан-нафталин достигла примерно 15600 фотонов/МэВ, что составляет 120 % световыхода стандарта псевдокумола. Высокоэффективное детектирование света и повышенное энергетическое разрешение делают эти сцинтилляционные системы идеальными кандидатами для использования в экспериментах по обнаружению безнейтринного двойного бета-распада. Итоги проведенных экспериментов открывают путь к дальнейшему совершенствованию конструкции сцинтилляторов на основе растворов органических веществ, способствуя разработке чувствительных и экономичных сцинтилляционных датчиков для использования в научных исследованиях, Результаты настоящей работы представляют значительный интерес для специалистов, занимающихся разработкой новых методов регистрации и анализа низкоэнергетического излучения.

Литература

1. Förster, T. (1948). Annalen der Physik, 437(1-2), 55-75.
2. Birks J.B. The Theory and Practice of Scintillation Counting // Pergamon Press. 1964. P. 107-115.
3. Пшуков А.М., Кокоева А.А. Исследование оптических свойств жидкого органического сцинтиллятора на основе синтина и нафталина для использования в нейтринной физике // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2023. Т. 13, № 3. С. 39-44.
4. Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н. Исследование люминесцентных и спектрометрических свойств гибридных жидких органических сцинтилляторов с добавкой нафталиновых кристаллов для использования в нейтринной физике. Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14. № 3. С. 30-37.
5. Пшуков А.М., Кокоева А.А., Якуба Ю.Ф., Блиева О.З. Низкофоновый детектор на основе синтина для исследований в области нейтринной физики Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14. № 2. С. 15-21.
6. Пшуков А.М., Кокоева А.А. Радиоактивная частота фотоумножителей для экспериментов по безнейтринному двойному бета распаду неодима-150 Важность выбора материалов. Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14. № 3. С. 38-42.

MEASUREMENT OF THE RELATIVE LIGHT OUTPUT OF SCINTILLATORS LIQUID ORGANIC SCINTILLATOR BASED ON NAPHTHALENE IN DODECANE SOLUTION

Azizov I.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Kashezhev A.Z., Ermoolenko D.N., Shogenova M.M., Khanukaeva E.I.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

This study examines the efficiency and functionality of a liquid organic scintillator consisting of dodecane as a solvent, naphthalene as the main fluorine, and PPO (2,5-diphenyloxazole) as a wavelength converter. The results demonstrated an increase in light output compared to standard samples, which confirms the potential of these systems for use in low-background experiments, including searches for neutrinoless double beta decay.

УДК 538.958 25-71

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ГИБРИДНЫХ ЖИДКООРГАНИЧЕСКИХ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ С ДОБАВЛЕНИЕМ КРИСТАЛЛОВ НАФТАЛИНА

Азизов И.К., Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н., Шогенова М.М., Ханукаева Е.И.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В работе изучаются впервые обнаруженные люминесцентные свойства гибридных жидких органических сцинтилляторов, улучшенных растворенными в воде кристаллами нафталина. Проведен 3D-спектральный анализ для иллюстрации того, как концентрация компонентов влияет на характеристики сцинтиллятора. Результаты указывают на значительное улучшение эффективности передачи энергии, что прокладывает путь для разработки более чувствительных сцинтилляционных детекторов и систем обнаружения излучения.

Органические сцинтилляторы широко используются в ядерной физике, медицинской диагностике и радиационном мониторинге благодаря высокому световому выходу, быстрому времени отклика и настраиваемым спектральным характеристикам. Данные исследования направлены на нахождение путей повышения эффективности передачи энергии и увеличение светового потока.

Одним из перспективных материалов, улучшающих вышеизложенные параметры является включение ароматических соединений, таких как нафталин, который демонстрирует высокий квантовый выход и способность образовывать эксимерные состояния. Эта модификация позволяет осуществлять спектральную настройку и повышать эффективность передачи энергии. Добавление кристаллов нафталина влияет на люминесцентные свойства жидких органических сцинтилляторов [1-6].

Настоящее исследование посвящено изучению влияния добавления кристаллов нафталина на люминесцентные свойства гибридных жидкоорганических сцинтилляторов. Полученные данные позволят создать новые композиты с улучшенными характеристиками, расширить область применения сцинтилляционных технологий и повысить точность измерений в экспериментальной физике.

Спектральный анализ проводился с использованием люминесцентного спектрометра PerkinElmer LS 55, известного своей высокой чувствиительностью и точностью измерений спектров возбуждения и испускания.

Нафталин $C_{10}H_8$ (чистота 99%,): выбран из-за высокого квантового выхода флуоресценции и эффективного приема энергии. Додекан $C_{12}H_{26}$: инертный растворитель с высокой прозрачностью в УФ области излучений (плотность: 0,75 г/л). PPO (2,5-дифенилоксазол, $C_{15}H_{11}ON$): сцинтилляци-

онный флуорофор, добавляемый в концентрации 2,5 г/л для повышения интенсивности флуоресценции и эффективности передачи энергии.

Сцинтилляционные растворы готовили путем растворения нафталина (100 г/л) и PPO (2,5 г/л) в додекане, обеспечивая минимальное самопоглощение. Для достижения однородности суспензий использовали ультразвуковой гомогенизатор. PPO добавляли в контролируемой концентрации для оценки его влияния на эффективность передачи энергии.

Спектры излучения: возбуждение осуществлялось длиной волны 325 нм; излучение измеряется в диапазоне 250–500 нм. 3D спектральный анализ: сканирование эмиссии для построения 3D карт распределения интенсивности.

В оптимизированных условиях получены спектры, представленные на рис. 1.

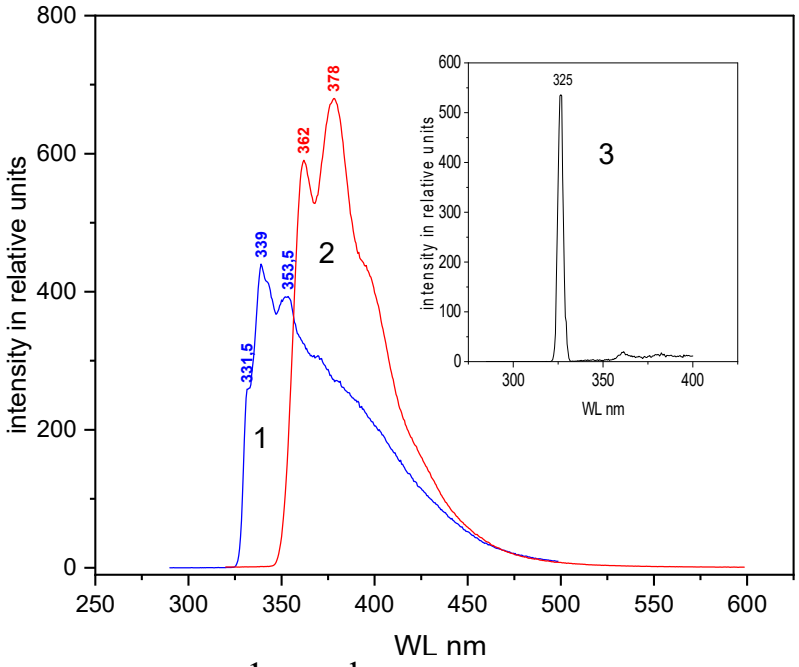


Рис. 1. Спектр излучения 1 - нафталин в растворе додекана. 2 - спектр излучения сцинтиллятора нафталина 100 г/л в додекане с добавкой PPO (2,5 г/л) с пиком возбуждения при 325 нм. 3 – спектр возбуждения

Из-за высокой концентрации растворенного нафталина в додекане, по-видимому, увеличивается вероятность образования эксимеров. Результирующая люминесценция состоит из структурированной мономерной флуоресценции при 332 нм, 340 нм и 353 нм, характерной для нафталина, а также эксимерной флуоресценции, проявляющейся в виде широкой смещенной в длинноволновую сторону полосы испускания.

Основным наблюдаемым механизмом передачи энергии является резонансный перенос энергии Фёрстера (FRET) (1-3).

При концентрации нафталина 100 г/л эффективность передачи энергии достигает ~96%, от максимального (4,5).

При концентрации нафталина 100 г/л возможно возникновение эксимерной люминесценции, обусловленной молекулярными взаимодействиями.

Эксимерное излучение характеризуется широкой полосой (400–450 нм), что подтверждается экспериментально, на рис. 1. Это явление усиливает общую интенсивность сцинтилляции, делая систему более эффективной для обнаружения излучения.

Далее провели 3D спектральный анализ. Трехмерный спектральный анализ является мощным инструментом для изучения переноса энергии и распределения интенсивности излучения в сцинтилляторах.

Диапазон возбуждения (320–340 нм) рис. 2 совпадает со спектром поглощения нафталина, что подтверждает эффективное возбуждение. После добавления PPO спектр излучения претерпевает существенные изменения. ксимерная люминесценция при высоких концентрациях нафталина усилиивает свечение. Трехмерный спектральный анализ подтверждает эффективную передачу энергии и помогает оптимизировать сцинтиллятор. Анализ полученных результатов показал, что оптимальное содержание кристаллического нафталина существенно улучшает рабочие характеристики композитных сцинтилляторов, повышая их чувствительность к различным видам излучения и увеличивая квантовый выход света. Эти результаты дают ценную информацию для проектирования высокочувствительных детекторов излучения и улучшения характеристик органических сцинтилляторов. Полученные данные позволят создать новые сцинтилляторы с улучшенными характеристиками, расширить область применения сцинтилляционных технологий и повысить точность измерений в экспериментальной физике, медицине и промышленности. Дальнейшие исследования будут направлены на изучение долгосрочной стабильности разработанных составов и создание оптимизированных технологических решений для массового производства высокоэффективных сцинтилляторов нового поколения.

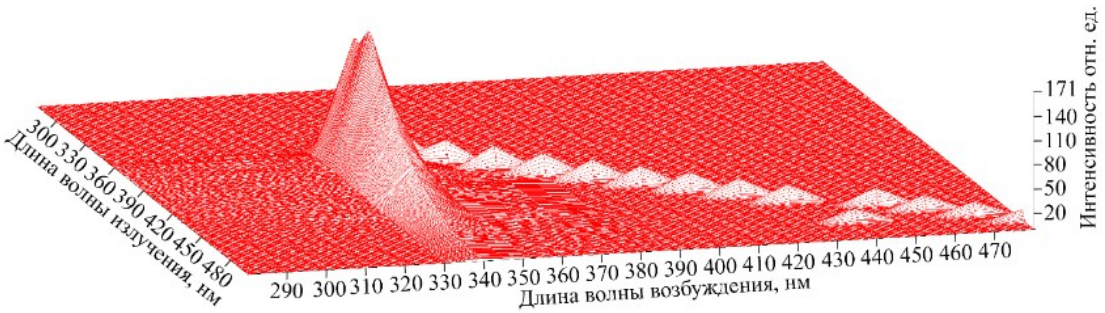


Рис. 2. 3D спектр возбуждения сцинтиллятора. Усиленная флуоресценция интенсивность максимумы излучения наблюдаются в диапазоне 350–400 нм

Литература

1. Фёрстер, Т. (1948). Аннален дер Физик, 437 (1-2), 55-75.

2. Лакович, Дж. Р. (2006). Принципы флуоресцентной спектроскопии. Springer.
3. Валер, Б. и Берберан-Сантос, МН (2012). Молекулярная флуоресценция: принципы и применение. Wiley -VCH.
4. Пшуков А.М. и др. (2023). Вестник Кабардино-Балкарского государственного университета, 13 (3), 39-44.
5. Пшуков А.М., Кокоева А.А. Исследование оптических свойств жидкого органического сцинтиллятора на основе синтина и нафталина для использования в нейтринной физике // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2023. Т. 13, № 3. С. 39-44.
6. Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н. Исследование люминесцентных и спектрометрических свойств гибридных жидких органических сцинтилляторов с добавкой нафталиновых кристаллов для использования в нейтринной физике. Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14. № 3. С. 30-37.
7. Пшуков А.М., Кокоева А.А., Якуба Ю.Ф., Блиева О.З. Низкофоновый детектор на основе синтина для исследований в области нейтринной физики Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14. № 2. С. 15-21.
8. Пшуков А.М., Кокоева А.А. Радиоактивная частота фотоумножителей для экспериментов по безнейтринному двойному бета распаду неодима-150 Важность выбора материалов. Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14. № 3. С. 38-42.
9. Вересникова А.В. и др. (2022). Вестник Кабардино-Балкарского государственного университета, 12 (4), 69-77.

STUDY OF LUMINESCENT PROPERTIES OF HYBRID ORGANIC LIQUID SCINTILLATORS WITH ADDED NAPHTHALENE CRYSTALS

Azizov I.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Kashezhev A.Z., Ermoolenko D.N., Shogenova M.M., Khanukaeva E.I.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

The work studies the first discovered luminescent properties of hybrid liquid organic scintillators, improved by naphthalene crystals dissolved in water. 3D spectral analysis was performed to illustrate how the concentration of components affects the characteristics of the scintillator. The results indicate a significant improvement in energy transfer efficiency, paving the way for the development of more sensitive scintillation detectors and radiation detection systems.

УДК 536.713+546.92++548.528 25-72

ЭВОЛЮЦИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ СВОЙСТВ ПЛАТИНЫ С ИЗМЕНЕНИЕМ РАЗМЕРА И ДАВЛЕНИЯ

Крамынин С.П.

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала

Основываясь на параметрах парного потенциала межатомного взаимодействия Ми–Леннард–Джонса для Pt, и используя RP-модель нанокристалла, изучены температурные, барические и размерные зависимости следующих свойств: модуля упругости и коэффициента теплового расширения. Расчет уравнения состояния Pt показал хорошее согласие с экспериментом. Впервые с единых позиций выполнены расчеты температурных зависимостей указанных свойств Pt в диапазоне от 0 до1500 K вдоль изобар 0 и 50 ГПа.

Благодаря своим теплофизическим и химическим свойствам платина находит широкое применение в научных приборах. Ее термостойкость и механическая прочность в агрессивных средах при экстремально высоких температурах делают ее незаменимым материалом. Платина используется в качестве маркера давления в экспериментах с лазерным нагревом из-за ее устойчивости к структурным переменам при высоких давлениях и химической инертности. Однако, зависимости ее свойств от размеров, а также эволюция температурных зависимостей на данный момент слабо изучены.

Метод расчета

Для расчета свойств гранецентрированного кристалла (ГЦК) Pt представим парное межатомное взаимодействие в виде потенциала Ми–Леннард–Джонса:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)}\left[a\left(\frac{r_o}{r}\right)^b - b\left(\frac{r_o}{r}\right)^a \right], \qquad (1)$$

где D и r_o – глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ – численные параметры. Для расчета свойств ГЦК-Pt были использованы следующие значения параметров потенциала (1), представленные ранее в работе [1] (здесь k_B – постоянная Больцмана):

$$r_o = 2.7675 \cdot 10^{-10} \text{ м}, D/k_B = 11400.7 \text{ K}, a = 3.05, \quad b = 11.65, \qquad (2)$$

При расчетах свойств макро-кристалла Pt был использован метод представленный в работе [2]. Расчеты размерных зависимостей свойств нанокристалла платины производились на основе RP-модели из [3].

Результаты

На рис. 1 показаны изотермы уравнения состояния ГЦК-Pt. Давление дано в ГПа, удельный объем, на рис.1 *a* – в $cm^3/mole = 10^{-6}\ m^3/mole$, а на рис. 1 *b* – в относительных единицах. Сплошными линиями показаны наши расчеты изотерм 300, 1300 и 1900 K. Штриховыми линиями показаны резуьтаты расчетов изотерм 300 K из [4]. Квадратами представлена изотерма 300 K, окружности – 1300 K, треугольники – 1900 K из работы [5]. Штрихпунктирными линиями представлены данные для изотермы 300 K из статьи [6]. Как видно из рисунка 1, наши данные хорошо согласуются с литературными.

Рис. 1. Изотермы уравнения состояния для макрокристалла ГЦК-платины

На рис. 2 показаны барические зависимости модуля упругости (B_T в GPa, справа) и коэффициента теплового расширения (α_p в 10^{-6} 1/K, слева) ГЦК-Pt. Сплошными линиями слева показаны наши расчеты изотерм 300, 1300, 1900 K, справа сплошными линиями указаны наши расчеты для изотерм 300 и 1000 K. На левом графике открытыми окружностями, квадратами и треугольниками показаны расчеты изотерм 298, 1000 и 2000 K для α_p (на левом графике) из работы [7]. Штриховыми линиями на левом графике показаны данные для α_p изотерм 298, 1300, 1900 K из [4]. Штриховыми линиями на правом графике показаны данные для B_T изотерм 298, 1000 из [7].

Анализ, представленный на рис. 1 и 2, демонстрирует хорошее соответствие результатов наших вычислений данным, полученным другими авторами в [4-7]. В связи с этим, указанный метод с параметрами потенциала (2) был применен нами для предсказания характеристик нанокристалла ГЦК-Pt.

Рис. 2. Барическая зависимость коэффициента теплового расширения (слева) и модуля упругости (справа) ГЦК-платины

На рис. 3. (слева) представлены температурные зависимости модуля упругости $B_T(T)$ для двух изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа. Сплошная кривая и кривая со звездочками – наши расчеты для изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа соответственно. Сплошная кривая с треугольниками ($P = 0$) – данные из [8]; штрихпунктирная кривая ($P = 0$) – данные из [9]; кривая с окружностями ($P = 0$) – данные из [7]; кривая с квадратами ($P = 0$) – данные из [10]; пунктирная кривая ($P = 0$) – данные из [11]. Как видно из рис. 3 имеется довольно большой разброс в оценках температурных зависимостей модуля упругости Pt. В тоже время видно, что у всех авторов [8-11] с ростом температуры происходит уменьшение значения B_T. Температурные зависимости $B_T(T)$ при давлениях отличных от $P = 0$ в литературе не представлены.

Рис. 3. Температурная зависимость модуля упругости $B_T(T)$ для двух изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа (слева). Справа показано сравнение температурных зависимостей $B_T(T)$ нано- и макрокристалла Pt для изобар 0 и 50 ГПа

На рис. 3 (справа) представлено сравнение температурных зависимостей $B_T(T)$ нанокристалла (здесь и далее изучается нанокристалл кубической формы из $N = 306$ атомов) и макрокристалла платины для двух изобар. Сплошная кривая и сплошная кривая со звездочками – наши расчеты для макрокристалла платины, изобары $P = 0$ и $P = 50$ ГПа, соответственно. Штриховая кривая и пунктирная кривая со звездочками – наши расчеты для нанокристалла платины, изобары $P = 0$ и $P = 50$ ГПа, соответственно. Из графиков видно, что с уменьшением давления либо размера нанокристалла происходит уменьшение значения $B_T(T)$ для любого значения T в исследуемом диапазоне температур.

На рис. 4 (слева) показаны температурные зависимости коэффициента теплового объемного расширения платины $\alpha_p(T)$ для двух изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа. Сплошная кривая и кривая со звездочками – наши расчеты для платины, изобары $P = 0$ и $P = 50$ ГПа, соответственно. Окружности ($P = 0$) – данные из работы [9]; треугольники ($P = 0$) и перевернутые треугольники ($P = 50$ ГПа) – данные из [8]; квадраты ($P = 0$) – данные из [7].

Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента теплового объемного расширения платины $\alpha_p(T)$ для двух изобар P=0 и P=50 ГПа (слева), а также сравнение температурных зависимостей $\alpha_p(T)$ нано- и макрокристалла платины для двух изобар (справа)

Из рис. 4 видно, что наши данные при $P = 0$ хорошо согласуются с работами [7, 9] в диапазоне температур $T < 500$ K, дальше наблюдается расхождение, которое можно объяснить отсутствием в нашей модели учета влияния вакансий и самодиффузии. Изменение температурной зависимости при увеличении давления хорошо согласуется с данными из [8].

Сравнение температурных зависимостей $\alpha_p(T)$ нано- и макрокристалла платины для двух изобар представлено на рис. 4 (справа). Сплошная кривая и кривая со звездочками – наши расчеты для макрокристалла при P=0 и P=50 ГПа, соответственно. Штриховая кривая и пунктирная кривая со звездочками – наши расчеты для нанокристалла при P=0 и P=50 ГПа, соответственно.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00001, https://rscf.ru/project/25-23-00001/.

Литература

1. M.N. Magomedov. Temperature and pressure dependences of the surface energy for a macro- and nanocrystal // Physics of the Solid State. – 2021. – V. 63, № 10. – P. 1465–1479. DOI: 10.1134/S1063783421090250.
2. S.P. Kramynin. Theoretical study of the size dependencies of the thermodynamic properties of tungsten at various pressures and temperatures // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2021. – V. 152. – P. 109964. DOI: 10.1016/j.jpcs.2021.109964.
3. M.N. Magomedov. Study of properties of fcc-Au-Fe alloys in macro- and nano-crystalline states under various P-T-conditions // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2021. – V. 151. – P. 109905. DOI: 10.1016/j.jpcs.2020.109905.
4. A. Dewaele, P. Loubeyre, M. Mezouar. Equations of state of six metals above 94 GPa // Physical Review B. – 2004. – V. 70, № 9. – P. 094112. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.094112.
5. C. Zha, K. Mibe, W.A. Bassett, O. Tschauner, H. Mao, R.J. Hemley. P-V-T equation of state of platinum to 80GPa and 1900K from internal resistive heating/x-ray diffraction measurements // Journal of Applied Physics. – 2008. – V. 103, № 5. – P. 054908. DOI: 10.1063/1.2844358.
6. D.E. Fratanduono, M. Millot, D.G. Braun, S.J. Ali, A. Fernandez-Pañella, C.T. Seagle, J.-P. Davis, J.L. Brown, Y. Akahama, R.G. Kraus, M.C. Marshall, R.F. Smith, E.F. O'Bannon III, J.M. McNaney, J.H. Eggert. Establishing gold and platinum standards to 1 terapascal using shockless compression // Science. – 2021. – V. 372. – P. 1063–1068. DOI: 10.1126/science.abh0364.
7. P.I. Dorogokupets, T.S. Sokolova, B.S. Danilov, K.D. Litasov. Near-absolute equations of state of diamond, Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nb, Pt, Ta, and W for quasi-hydrostatic conditions // Geodynamics & Tectonophysics. – 2012. – V. 3, № 2. – P.129–166. DOI: 10.5800/ GT-2012-3-2-0067.
8. S. Ono, J.P. Brodholt, G.D. Price. Elastic, thermal and structural properties of platinum // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2011. – V. 72. – № 3. – P. 169-175. DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.12.004.
9. V.M. Elkin, V.N. Mikhaylov, A.A. Ovechkin, N.A. Smirnov. A wide-range multiphase equation of state for platinum // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2020. – V. 32. – № 43. – P. 435403. DOI: 10.1088/1361-648X/aba428.
10. S.M. Collard, R.B. McLellan. High-temperature elastic constants of platinum single crystals // Acta Metallurgica et Materialia. – 1992. – V. 40. – № 4. – P. 699-702. DOI: 10.1016/0956-7151(92)90011-3.
11. A. Karbasi, S.K. Saxena, R. Hrubiak. The thermodynamics of several elements at high pressure // Calphad. – 2011. – V. 35. – № 1. – P. 72-81. DOI: 10.1016/j.calphad.2010.11.007.

EVOLUTION OF TEMPERATURE DEPENDENCIES OF PLATINUM PROPERTIES WITH CHANGES IN SIZE AND PRESSURE

Kramynin S.P.

Institute of Physics DFRC RAS, Makhachkala

Based on the parameters of the pair potential of interatomic interaction Mie-Lennard-Jones for Pt, and using the RP-model of a nanocrystal, the temperature, pressure and size dependences of the following properties were studied: elastic modulus and thermal expansion coefficient. The calculation of the equation of state showed good agreement with the experiment. For the first time, temperature dependences of these properties in the range from 0 K to 1000 K along isobars 0 and 50 GPa were calculated from a unified position.

УДК 541.128.7+538.958 25-76

ИЗУЧЕНИЕ УПРУГООПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В КРИСТАЛЛАХ $KAl(SO_4)_2 12H_2O$

Матиев А.Х.[1,2], Успажиев Р.Т.[2], Эсмурзиева А.А.[1]

[1]Ингушский государственный университет, Магас
[2]Грозненский государственный нефтяной технический университет, Грозный

Выращен крупный, правильной геометрической формы оптически прозрачный одноосный монокристалл $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ из водного раствора. Установлено, что при приложении к кристаллу одноосного механического напряжения приводит к появлению искусственной анизотропии, вследствие изменения его симметрии. Из экспериментальная зависимость величины двойного лучепреломления кристалла от внешнего механического напряжения, приложенного к кристаллу определена константа упругооптического эффекта.

Известно, что под действием механической нагрузки изотропные материалы становятся оптически анизотропными. Возникающие деформации вызывают наведенное двойное лучепреломление. При этом направления главных осей эллипсоида диэлектрической проницаемости материала совпадают с направлениями главных осей эллипсоида напряжений. В случае одностороннего сжатия это направление сжатия становится выделенным и играет роль оптической оси. Оптические свойства деформированного таким образом тела соответствуют свойствам одноосного кристалла. Разность показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей $\Delta n = n_o - n_e$ является мерой возникшей анизотропии и пропорциональна механическому напряжению σ [1-7].

Целью настоящей работы являлось изучение явления двойного лучепреломления одноосных кристаллов $KAl(SO_4)_2 12H_2O$, выращенных из водных растворов, повергнутых односторонней деформации сжатия.

Выращивание монокристаллов $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ осуществляли из насыщенного водного раствора $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ с использованием правильной геометрической формы кристаллика в качестве затравки. Выращенные кристаллы имели двойники. (рис. 1). Однако от полученных двойников был извлечен крупный монокристалл кубической формы с размерами 2х0,6х0,8 $см^3$. Так как кристаллы данного типа гигроскопичны, то их покрывали несколькими слоями бесцветного лака.

Рис. 1. Монокристалл $KAl(SO_4)_2 12H_2O$

Известно, что если подвергать прозрачное изотропное тело сжатию или растяжению вдоль некоторого направления, то это направление становится выделенным и играет роль оптической оси возникающего квазикристалла. Схема установки по наблюдению оптической анизотропии при механической деформации сжатия монокристалла $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ представлена на рис. 2.

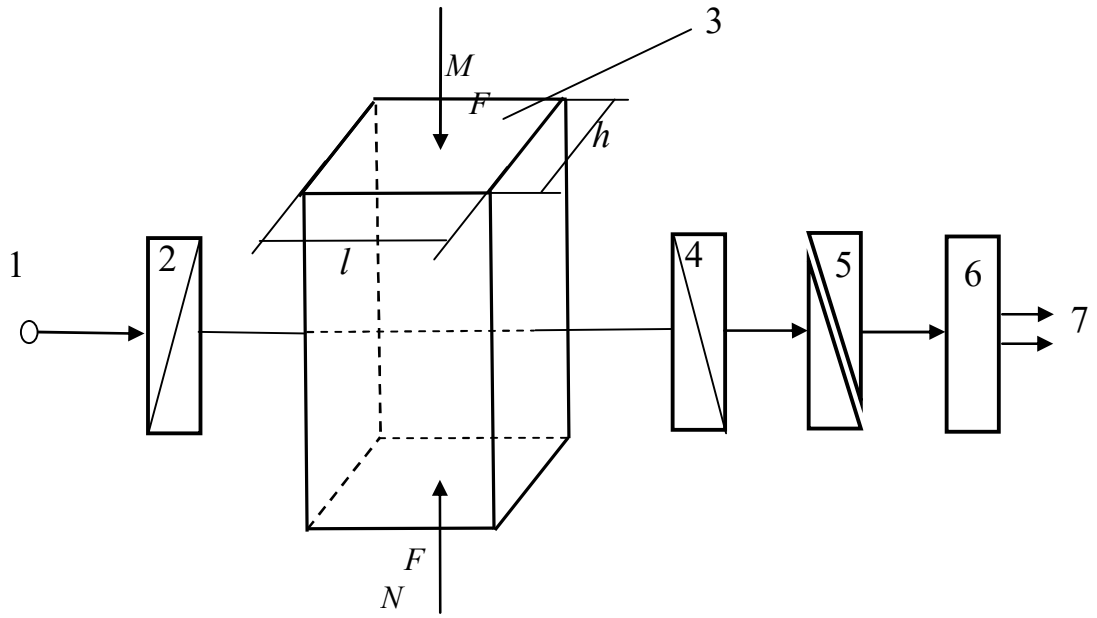


Рис. 2. Установка для исследования оптической анизотропии монокристалла $KAl(SO_4)_2 12H_2O$: 1 – источник излучения; кристалл; 2 – поляризатор; 3 – исследуемый кристалл; 4 – анализатор; 5 – компенсатор двойного лучепреломления Бобине Солейля; 6 – ФЭУ-100; 7 – регистрирующее устройство

Исследуемый монокристалл помещали между двумя скрещенными поляризаторами. В отсутствии деформации свет через такую систему не проходил, так как угол между главными направлениями поляризаторов равен 90°.

При сжатии или растяжении тела вдоль направления *MN* происходило изменение межатомных расстояний в этом направлении, что в свою очередь влияло на поляризуемость и, следовательно, на условия распространения световых волн. В деформированном кристалле возникали обыкновенная «*o*» и необыкновенная «*e*» волны, которые распространялись в одном направлении, перпендикулярно оптической оси *MN* квазикристалла, но с разными скоростями. В точке возникновения «*o*» и «*e*» волн разность фаз колебаний между ними кратна π (на квазикристалл падает линейно поляризованный свет). На выходе из квазикристалла разность фаз колебаний изменится на величину

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda(n_e - n_o)l}.$$

В результате этого свет станет эллиптически поляризованным и частично пройдёт через второй поляризатор. Таким образом, поле зрения на выходе из системы просветлится.

Мерой оптической анизотропии является показатель двойного лучепреломления $\Delta n = (n_e - n_o)$. Опыты показали, что двойное лучепреломление Δn пропорционально величине механического напряжения σ = F/S = F/hl, то есть величине силы приходящейся на единицу площади.

Таким образом,

$$(n_e - n_o) = \gamma\sigma.$$

где γ – постоянная Коттона-Мутона; l – толщина кристалла; h – ширина кристалла.

В зависимости от рода вещества γ может быть как положительной, так и отрицательной величиной. Кроме того γ зависит от длины волны.

Постоянная Коттона-Мутона, значение которой необходима для определения показатель двойного лучепреломления исследуемого кристалла, в литературе отсутствует.

Для ее нахождения нами было изготовлено устройство для создания одноосной деформации сжатия с помощью пружин (с жесткостью $k=3\cdot10^3$ Нм) вдоль направления *MN*, которое становится выделенным, и играет роль оптической оси. Используя градуировочный график зависимости силы упругости от деформации сжатия пружины, определяли силу, действующую на площадь кристалла $S = l\cdot h\cdot10^{-6}$ м^2. На рис. 3 представлена зависимость двойного лучепреломления кристалла $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ от внешнего механического напряжения приложенного к нему. Из рисунка видно, что величина двойного лучепреломления, возникающая в кристалле $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ даже при напряжении $8\cdot10^3$ Н/м^2**,** имеет маленькое значение $\Delta n = 20\cdot10^5$. Среднее значение постоянной упругооптического эффекта определенная, используя полученные экспериментальные данные, равна γ=3,1810^{-7} м^2/Н.

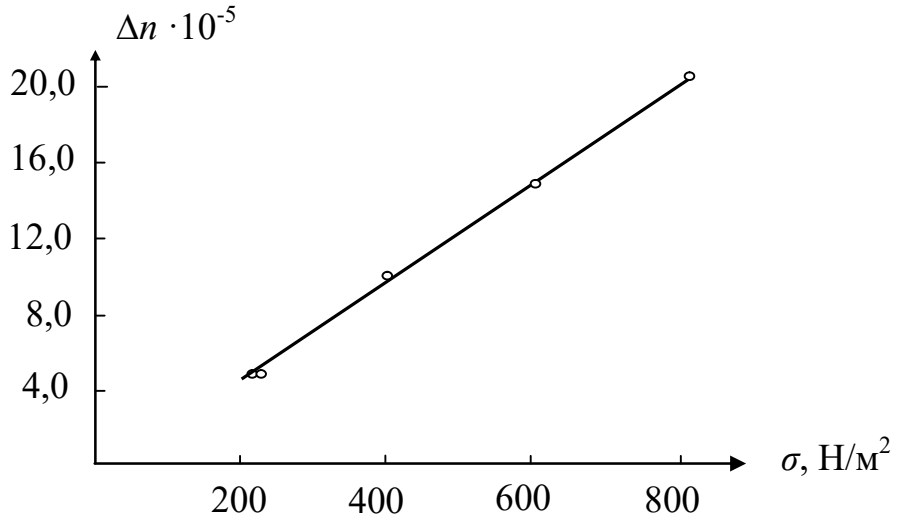


Рис. 3. Зависимость двойного лучепреломления кристалла $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ от внешнего механического напряжения приложенного к нему

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы.

1. Выращен крупноблочный одноосный тетрагональной сингонии монокристалл хорошего оптического качества.

2. Изучена зависимость величины двулучепреломления кристалла $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ от напряжения, приложенного к нему.

3. Определена константа упругооптического эффекта в кристалле $KAl(SO_4)_2 12H_2O$.

Литература

1. T.S. Нарасимхамурти. Фотоупругие И электрооптические свойства кристаллов. М: Мир. 1984. 624 с.
2. Сонин А.Н., Василевская А.С. // Электрооптические кристаллы. «Атомиздат». – М., 1971. – 200 с.
3. Ландсберг Г.С. Оптика. – М.: "Наука", 1976. – 927 с.
4. Детлаф А.А., Яворский Б.М., Милковская М.Б. Курс физики. Том III. Волн вые процессы. Оптика. Атомная и ядерная физика. – М.: Высшая школа, 1979. – 511 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10-ти т. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред: Учеб. пособие. – 4-е изд., испр. и доп. – М.; Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.
6. А.А. Детлаф, Б.М. Яворский, М.Б. Милковская Курс физики. Том III. Волновые процессы. Оптика. Атомная и ядерная физика. М.: Высшая школа, 1979. - 511 с.
7. Г.С. Ландсберг, Оптика. М., "Наука", 1976.

STUDY OF THE ELASTIC-OPTICAL EFFECT IN $KAl(SO_4)_2 12H_2O$ CRYSTALS

[1,2]Matiyev A.Kh., [2]Uspazhiev R.T., Esmurzieva A.A.[1]

[1]Ingush State University, Magas
[2]Grozny State Oil Technical University, Grozny

A large, geometrically correct optically transparent uniaxial single crystal of KAl(SO4)212H2O was grown from an aqueous solution. It was found that when uniaxial mechanical stress was applied to the crystal, it led to the appearance of artificial anisotropy due to a change in its symmetry. The constant of the elastic-optical effect was determined from the experimental dependence of the crystal birefringence on the external mechanical stress applied to the crystal.

УДК 541.128.7+538.958 25-77

РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ЗОНАХ ВЫСОКООМНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА АЛМАЗА

Матиев А.Х.[1,2], Успажиев Р.Т.[2], Гатиев Р.У.[1]

[1]Ингушский государственный университет, Магас
[2]Грозненский государственный нефтяной технический университет, Грозный

На основе теоретически рассчитанных температурных зависимостей плотности квантовых состояний электронов и дырок, концентрации носителей заряда чистого кристалла алмаза, установлено, что плотность квантовых состояний электронов и дырок с ростом температуры нелинейно возрастает, ширина запрещенной зоны алмаза с ростом температуры линейно уменьшается, а концентрация электронов и дырок в температурном интервале 100–700 К не зависит от температуры.

Интерес к исследованиям алмазных материалов обусловлен, с одной стороны, необычными физико-химическими свойствами алмаза, благодаря которым он являются привлекательным объектом фундаментальной науки, а с другой стороны - богатыми перспективами прикладного использования таких объектов. Область возможных применений алмазных пленок это интегральные схемы, включающие в себя элементы на основе алмаза, которые могут привести к революционным изменениям в области миниатюризации современных компьютеров, а также к развитию силовой электроники [1-4].

При изучении фотоэлектрических свойств алмаза установлено, что легированные электрически активными примесями кристаллы в отличие от нелегированных являются фоточувствительными в ближней ультрафиолетовой, видимой и ИК областях. С увеличением содержания бора в шихте фототек соответствующих образцов возрастает, и проявляются два основных максимума в области 800 и 1400 нм, которые, возможно, и имеют примесную природу. С увеличением содержания As в шихте фотопроводимость кристаллов возрастает, основной максимум сохраняет свое положение и появляется ряд новых при длинах волн 900 нм и более [2, 5, 6].

Это связано с перегруппировкой поверхностных атомов в результате обрыва направленных связей на поверхности. Такая перестройка поверхности происходит в кристаллах германия, кремния, алмаза и интерметаллических соединений с решеткой типа алмаза. Важно отметить, что по крайней мере в некоторых случаях поверхность кристаллов с решеткой типа алмаза, покрытая монослоем кислорода, не показала изменений межплоскостных расстояний на поверхности. Электроотрицательные атомы кислорода насыщают разорванные связи и позволяют поверхностным атомам занимать те же положения, что и в объемной решетке. Для полупро-

водникового алмаза дифракционная картина с характеристиками, соответствующими объемной решетке, была получена после нагревания и откачки без применения специальных методов очистки. Однако в дальнейшем было показано, что эта поверхность была загрязненной [7-9].

Физические свойства вещества характеризуются температурой кипения, вязкостью, плотностью, цветом, абсорбцией, теплопроводностью, электропроводностью, твердостью и так далее. Дисперсия алмаза порядка 0,06, а показатель преломления достигает 2,421. Большими значениями дисперсии и показателя преломления обусловлена игра света в гранях алмазов, у ограненных кристаллов это игра света еще красивее.

Формы кристаллов алмаза разнообразны. Они бывают вытянутые, деформированные, сплющенные и многие другие формы Несколько видов наиболее распространенных формы алмаза это октаэдроид, декаэдроид, псевдокуб, гексаэдроид и др.

Известно, что кристалл алмаза это - диэлектрик с шириной запрещенной зоны E_g=5,45 эВ, эффективная масса электронов равна m_n=1,4 m_o, а эффективная масса дырок равна m_p=0,34 m_o [1], где m_o=9,11·10^{-31} кг это масса покоя электрона [3]. Представляет интерес значения плотности квантовых состояний электронов и дырок для данного широкозонного диэлектрика в связи с его широким применением в промышленности.

Целью настоящей работы являлось исследовать температурные зависимости плотности квантовых состояний электронов и дырок, концентрацию носителей заряда и ширину запрещенной зоны чистого (не содержащего примесей) кристалла алмаза.

Результаты и их обсуждение

Плотности квантовых состояний для чистого (не содержащего примесей) кристалла алмаза электронов N_c и дырок N_v рассчитывали используя формулы [2]:

$$N_c = 2\left(\frac{2\pi m_n^2 kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (1)$$

$$N_v = 2\left(\frac{2\pi m_p^2 kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2)$$

где m_n – эффективная масса электронов. m_p – эффективная масса дырок.

Вынося из выражений (1) и (2) постоянные величины, получаем следующие выражения:

$$N_c = 7{,}8\cdot 10^{21}(T)^{3/2};\ N_v = 0{,}94\cdot 10^{21}(T)^{3/2}. \quad (3)$$

Расчет плотности квантовых состояний для температуры T=300 К дает значения N_c =40,54·10^{24} м$^{-3}$; N_v =4.89·10^{24} м$^{-3}$. Для сравнения плотности квантовых состояний наиболее широко применяемого полупроводника

N_v

германия при T=300 К равны N_c =2,08·10^{25} м$^{-3}$, =1,02·10^{25} м$^{-3}$. Из сравнения видно, что плотность квантовых состояний электронов почти одинакова, а плотность квантовых состояний дырок на порядок меньше у алмаза чем у германия.

Расчет проводили через 50 К в интервале 100–700 К. На рис. 1 представлены температурные зависимость эффективной плотности квантовых состояний электронов N_c в зоне проводимости (1) и дырок N_v в валентной зоне (2) кристалла алмаза

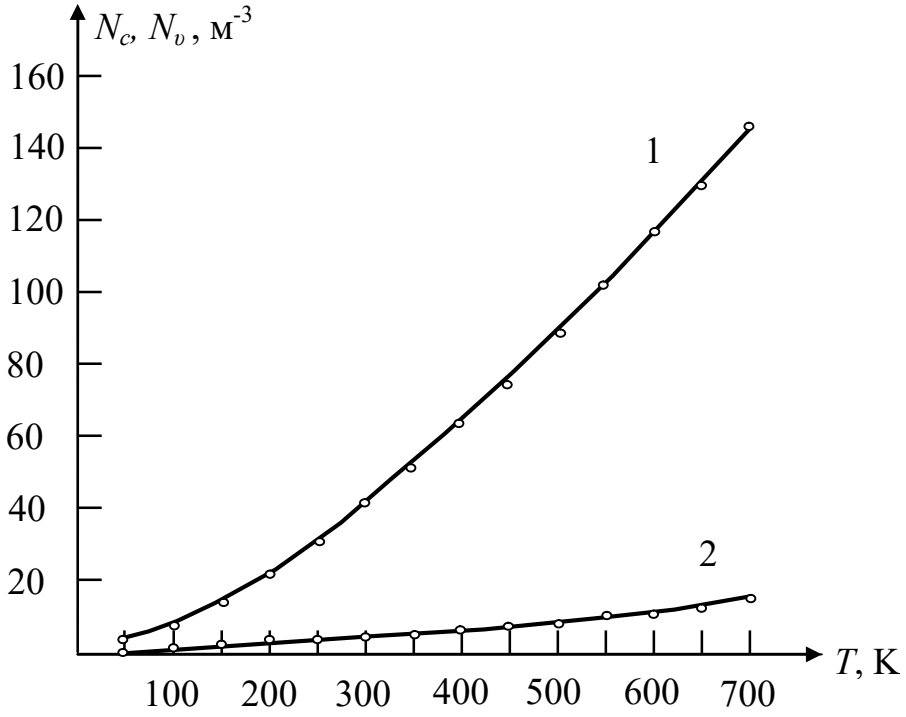


Рис. 1. Температурные зависимости эффективной массы квантовых состояний электронов N_c в зоне проводимости (1) и дырок N_v в валентной зоне (2) кристалла алмаза

Если в кристалле нет примесей, то концентрация электронов и дырок в собственном полупроводнике одинакова. Концентрацию носителей заряда в собственном полупроводнике можно используя формулу [10]:

$$n = p = (N_c \cdot N_v)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{E_g}{kT}}. \quad (4)$$

Для расчета концентрации носителей заряда в полупроводнике алмаза по формуле (1), необходимо вначале рассчитать температурную зависимость ширины запрещенной зоны алмаза. Ширину запрещенной зоны полупроводника можно рассчитать по формуле [11]:

$$E_g = E_{g0} + \alpha T, \qquad (5)$$

где $\alpha = dE_g/Dt$ - температурный коэффициент изменения ширины запрещенной зоны полупроводника, E_{g0} - ширина запрещенной зоны полупроводника при $T = 0$ К, E_g - ширина запрещенной зоны кристалла при температуре T. Для алмаза $\alpha = -1.979 \cdot 10^{-4}$ эВ/К [3], $E_{g0} = 5.51$ эВ [2].

Рассчитанные значения ширины запрещенной зоны полупроводника алмаза по формуле (5) для температур от 100 до 700 К представлены в таблице.

Таблица

T, K	50	100	200	300	400	500	600	700
E_g, эВ	5,5	5,49	5,48	5,46	5,43	5,41	5,39	5,37

Учитывая значения плотности квантовых состояний и значения ширины запрещенной зоны нами рассчитана концентрация носителей заряда в полупроводнике алмаза в интервале температур от 100 К до 700 К с интервалом 50 К. Используя расчетные данные нами построена температурная зависимость концентрации электронов и дырок в полупроводнике алмаза представленная на рис. 2. Из рисунка видно, что в собственном полупроводнике алмазе в температурном интервале концентрация свободных электронов и дырок равна нулю.

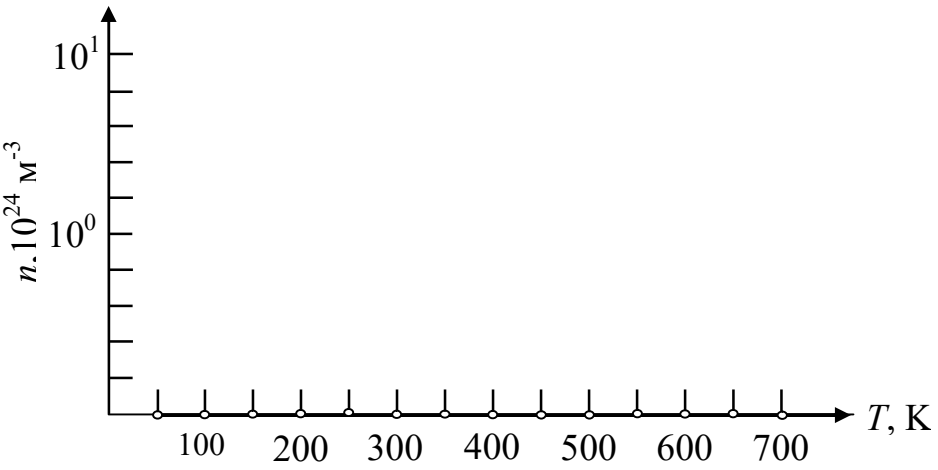


Рис. 2. Температурная зависимость
концентрации электронов в кристалле алмаза

Таким образом, можно сделать следующие выводы.

1. Плотность квантовых состояний электронов и дырок с ростом температуры нелинейно возрастает.

2. Ширина запрещенной зоны алмаза с ростом температуры линейно уменьшается.

3. Концентрация электронов в температурном интервале 100–700 К не зависит от температуры.

Литература

1. С.И. Борисенко, В.Ю. Рудь, Ю.В. Тютерев. ФТП, 35 (6), 720 (2008).
2. И.К. Полушина, В.Ю. Рудь, Ю.В. Ушакова. ФТТ, 41, 1190 (2009).
3. T.N. Morgan. Phys. Rev. A, 139, 343 (1965).
4. С.И. Борисенко, Г.Ф. Караваев. Изв. вузов. Физика, № 4, 101 (1988).
5. Ю. В. Гуляев, А. Ю. Митягин, Г. В. Чучева и др. Полевой транзистор на гидрированной поверхности алмаза // Радиотехника и электроника, 2021, 4 № 3, с. 304–310.
6. Л.А. Васильев, З.П.Белых / Алмазы, их свойства и применение / М., Недра, 1983. 101 с.
7. N.Bar-Gill, L.M.Pham and others. Solid-state electronic spin coherence time approaching one second // Nature Comm. – 2013. – V. 4. – P. 1743.
8. А.В.Цуканов N_V-центры в алмазе. Часть II:спектроскопия, измерения, квантовые операции // Микроэлектроника. 2012. Т. 41. С.163–180.
9. Kovalenko T.V., Ivakhnenko S.A. Properties of Diamonds Seed-Grown in the Magnesium–Carbon System. – 2013. – V. 35. - P. 131-136.
10. K. Makoto, H. Kazuyuki and others. Study on capacitance–voltage characteristics of diamond field-effect transistors. // Journal of Applied Physics № 55, 2016.
11. M. Miczek, C. Mizue, T. Hashizume, and B. Adamowicz, J. Appl. // Phys. № 103, 2008.

CALCULATION OF ELECTRON AND HOLE CONCENTRATIONS IN ZONES OF HIGH-RESISTANCE DIAMOND SEMICONDUCTOR

[1,2]Matiyev A.Kh., [2]Uspazhiev R.T., Gatiev R.U.[1]

[1]Ingush State University, Magas
[2]Grozny State Oil Technical University, Grozny

Based on theoretically calculated temperature dependences of the density of quantum states of electrons and holes, the concentration of charge carriers of a pure diamond crystal, it was established that the density of quantum states of electrons and holes increases nonlinearly with increasing temperature, the width of the forbidden zone of diamond decreases linearly with increasing temperature, and the concentration of electrons and holes in the temperature range 100–700 K does not depend on temperature.

УДК 541.128.7+538.958 25-78

АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ОБРАТНОГО ТОКА *p-n*-ПЕРЕХОДА

Матиев А.Х.[1,2], Успажиев Р.Т.[2], Горбакова Х.К.[1]

[1]Ингушский государственный университет, Магас
[2]Грозненский государственный нефтяной технический университет, Грозный

На основе анализа температурной зависимости обратного тока p-n-перехода определена ширина запрещенной зоны кремниевого диода. Высказано предположения, о возможности использования полученной формулы может для вычисления ширины запрещенной зоны других полупроводников.

Известно, что ширина запрещенной зоны представляет собой один из фундаментальных параметров полупроводниковых материалов, знание которой определяет возможности их использования в науке и технике. Однако определения данного параметра необходимо иметь специальные экспериментальные научно-исследовательские установки, осуществлять подготовку различных образцов в зависимости от применяемого метода исследования. [1]. Авторы [2, 3] предложили метод определения ширины запрещенной зоны для промышленных полупроводников из анализа их вольт-амперных характеристик при двух различных фиксированных температурах.

Целью настоящей работы являлось использовать несложный метод определения E_g из анализа экспериментальной температурной зависимости обратного тока промышленного диода Д220.

Вначале рассмотрим процессы, происходящие на границе раздела двух областей полупроводника с различными типами носителей заряда. Электроны являются основным носителями заряда в *n*-области и неосновными в *p*-области. Дырки же, наоборот, служат основными носителями заряда в полупроводнике *p*-типа и неосновными – в полупроводнике *n*-типа. В *p*- и *n*-германия и кремния, используемых для изготовления электронных приборов, концентрация основных носителей составляет примерно 10^{22} м$^{-3}$, концентрация неосновных 10^{16} м$^{-3}$, то есть в миллион раз меньше [1,4]. Различия в концентрациях носителей одного типа по обе стороны контакта ведет к возникновению диффузионных потоков дырок из *p*-области в *n*-область, а электронов в обратном направлении. В результате *n*-полупроводник заряжается положительно, а полупроводник *p*-типа отрицательно, и между ними возникает разность потенциалов. Процесс диффузии происходит до тех пор, пока влияние разности концентраций не уравновешивается возникающими электрическими силами. Возникновение разности потенциалов приводит к тому, что в *p*-области все энергетические уровни, в том числе и уровень Ферми, повышаются, а в *n*-области энергия всех уровней уменьшается. Диффузионный поток прекращается, когда уровень

Ферми в *n*-полупроводнике E_{Fn} сравнивается с уравнением Ферми в *p*-полупроводнике E_{Fp}. После выравнивания уровней Ферми результирующий поток заряда через область контакта становится равным нулю и между областями устанавливается равновесная контактная разность потенциалов V_k. Величина контактной разности потенциалов определяется в основном отношением концентрации носителей заряда одного типа по обе стороны контакта, а также температурой *p-n* перехода [8,9]:

$$V_k = \frac{kT}{e} In \frac{n_n}{n_p} = \frac{kT}{e} In \frac{p_p}{p_n}, \quad (1)$$

где n_n и n_p – концентрации электронов и дырок в *n*-полупроводнике, а p_n и p_p – соответствующие концентрации в полупроводнике *p*-типа.

Известно, что при комнатной температуре (T=300 К) для концентрации n_n=10^{22} м$^{-3}$ и n_p=10^{16} м$^{-3}$, контактная разность потенциалов $V_k \approx 0{,}45$В.

На рис. 1 показана схема энергетических уровней в *n-p*-полупроводниках непосредственно в момент их соприкосновения, то есть до начала диффузионного перехода носителей заряда.

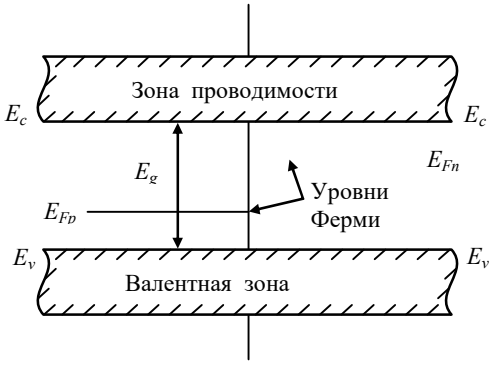


Рис. 1. Схема расположения энергетических уровней в момент соприкосновения полупроводников с различными типами примесей. Слева полупроводник *p*-типа, справа- *n*-типа.

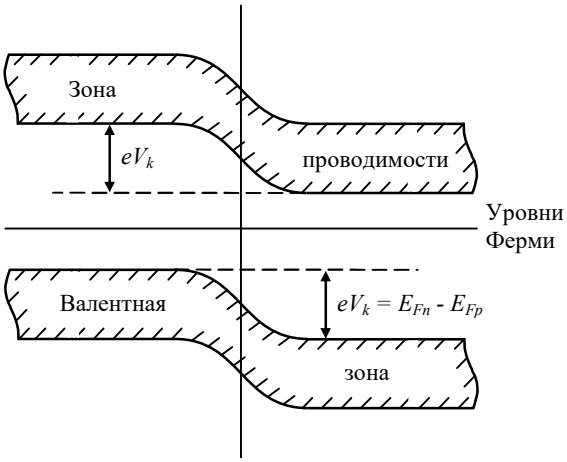


Рис. 2. Расположение энергетических уровней в области *p-n* перехода после установления равновесной контекстной разности потенциалов.

На рис. 2 приведена схема энергетических уровней после установления равновесия. Из рисунка видно, чторавновесная высота потенциального, барьера eV_k в месте контакта определяется значениями энергий Ферми в *p*-и *n*-полупроводниках: $eV_k = E_{Fp} - E_{Fn}$. Высоту потенциального барьера *p-n* перехода можно изменять путем прикладывания внешнего напряжения V. В зависимости от знака внешней разности потенциалов, высота барьера может либо, уменьшатся, либо увеличиваться. Результирующая высота потенциального барьера $e(V_к \pm V)$ отличатся от равновесной, и через область контакта под действием электрических сил начинается движение носителей заряда, то есть возникает электрический ток. Известно, что плотность тока в проходящих средах j пропорционально концентрации но-

сителей, их заряду $\pm e$ и средней скорости направленного движения u. В p-n-переходе концентрация неосновных носителей может быть определена так же, как и для собственной проводимости чистого полупроводника:

$$n_p = p_n \approx A \cdot T^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_c - E_v}{2kT} \approx A \cdot T^{3/2}} \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}, \qquad (2)$$

где E_c, E_v - энергии дна зоны проводимости и вершины валентной зоны, E_g ширина запрещённой зоны, A - коэффициент, определяемый типом полупроводника и не зависящий от внешних условиях. Согласно (1) концентрация основных носителей связана с разностью потенциалов по обе стороны p-n-перехода. Учитывая, что при подключении внешнего источника напряжения, высота потенциального барьера становится равной не $eV_к$, а $e(V_к \pm V)$, и выражая концентрацию неосновных носителей по формуле (2), имеем

$$\left.\begin{aligned} n_n &= n_p e^{\frac{e(V_k \pm V)}{kT}} = A \cdot T^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} \cdot e^{\frac{e(V_k \pm V)}{kT}} \\ p_p &= p_n e^{\frac{e(V_k \mp V)}{kT}} = A \cdot T^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} \cdot e^{\frac{e(V_k \pm V)}{kT}} \end{aligned}\right\}. \qquad (3)$$

С учетом направления движения заряда и их знаков для плотности тока основных носителей через p-n переход имеем:

$$j_{осн} = en_n u_n + ep_p.$$

При приближенных оценках плотности тока различием в скоростях движения основных и неосновных носителей можно пренебречь. Тогда плотность тока неосновных носителей:

$$j_{неосн} \approx -ep_n u_n - en_p u_p,$$

и суммарная плотность тока через p-n переход:

$$j = j_{осн} + j_{неосн} \approx eu_n(n_n - \rho_n) + eu_p(p_p - n_p).$$

Подставляя сюда концентрации носителей заряда из (2) и (3), имеем:

$$j \approx e \cdot (u_p + u_n) \cdot A \cdot T^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} \left[e^{\frac{e(V_k \pm V)}{kT}} - 1 \right]. \qquad (4)$$

В равновесном состоянии, при отсутствии внешнего напряжения, ток через переход должен отсутствовать, то есть в использованном приближении выражение, стоящее в квадратных скобках, должно обращаться в нуль. Следовательно, $e^{\frac{eV_k}{kT}} = 1$. По сравнению температурной зависимостью множителя $e^{-\frac{E_g}{2kT}}$, как множитель $T^{3/2}$, так и скорости движение зарядов слабо зависят от температуры (в полупроводниках $u_p \sim u_n \sim T^{-\alpha}$, где $-3/2 \le \alpha \le 3$). Поэтому, приближенно $e(u_p + u_n) \cdot A \cdot T^{3/2} \approx const$. Сила тока прямо пропорциональна, его плотности $I = j.S$, где S – площадь кон-

такта. С учетом сделанных замечаний, из (4) имеем окончательное выражение для вольт-амперной характеристики *p-n*-перехода

$$I \approx Ce^{-\frac{E_g}{2kT}}\left[e^{\frac{+eV_k}{kT}} - 1\right] \quad (5)$$

где C – постоянная, независящая от температуры и приложенного напряжения, E_g – ширина запрещенной зоны, T – температура, e – заряд электрона, k – постоянная Больцмана. Знак плюс (+) в показателе степени соответствует напряжению V, приложенному в «прямом» направлении, то есть положительным полюсом к *p*-области; знак минус (–) соответствует напряжению, приложенному в противоположном, «обратном» направлении. Отсюда следует, что «прямая» разность потенциалов, уменьшает высоту потенциального барьера, облегчая движение основные носителей через область контакта. Уже при разностях потенциалов в несколько десятых долей вольта, единицей в квадратных скобках формуле (5) можно пренебречь и считать, что вольт-амперная характеристика имеет экспоненциальную форму:

$$I_{\text{прям}} \approx e^{-\frac{E_g}{2kT}} \cdot e^{\frac{eV_k}{kT}}, \quad (6)$$

то есть величина прямого тока очень быстро меняется с увеличением приложенного напряжения. При наличие же разности потенциалов, приложенной в «обратном» направлении, высота потенциального барьера возрастает, так что движение основных носителей через *p-n*-переход практически невозможно. Движение же неосновных носителей от высоты потенциального барьера почти не зависит, и их концентрация (2) полностью определяет величину обратного тока. При «обратной» разности потенциалов слагаемым $e^{\frac{-eV_k}{kT}}$ в (5) можно пренебречь по сравнению с единицей, если V>0,1–0,2 В, и для обратного тока получается выражение, не зависящее от V:

$$\left|I_{\text{обр}}\right| \approx C \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}}. \quad (7)$$

Таким образом, исследуя температурную зависимость обратного тока от можно определить ширину запрещённой зоны используемого полупроводникового материала. Если установить постоянное обратное напряжение, больше нескольких десятых долей Вольта, применимо простое формула (7). Логарифмируя обе части формулы получаем:

$$In\left|I_{\text{обр}}\right| \approx InC - \frac{E_g}{2kT}.$$

На рис. 3 представлена принципиальная схема установки для снятия температурной зависимости обратного тока *p-n*-перехода кремниевого диода Д220.

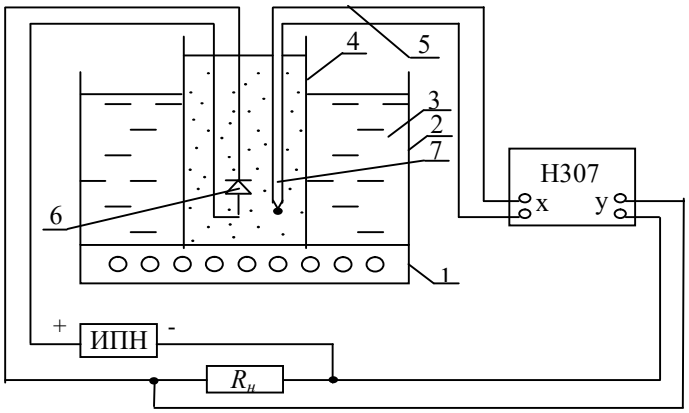


Рис. 3. Принципиальная схема установки: 1 – электроплитка; 2 – термостойкий химический сосуд; 3 – вода;4 – стеклянная пробирка; 5 – порошок окиси алюминия; 6 – исследуемый диод Д220; 7 – термопара медь-константан; ИПН – высокоточный источник постоянного напряжения ВИП-09; $R_н$=100 кОм – сопротивление нагрузки; Н307 – графопостроитель

Таким образом зависимость $In\left|I_{обр}\right|$ от $1/T$ представляет собой прямую линию (рис. 4.) По наклону этой прямой может быть определена ширина запрещенной зоны:

$$E_g = 2k\frac{(In\, I_{обр})_1 - (In\, I_{обр})_2}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}. \qquad (8)$$

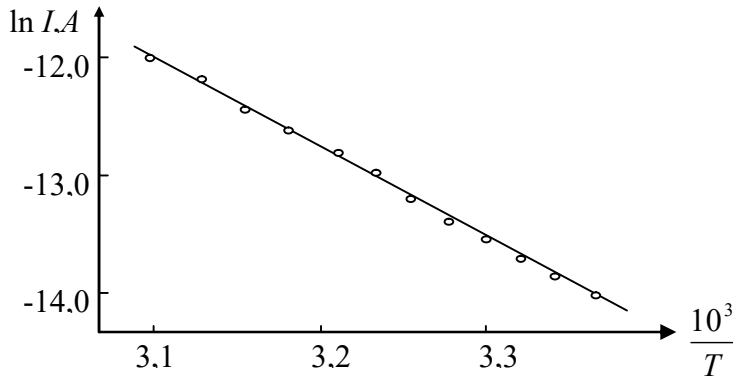


Рис. 4. Зависимость обратного тока от температуры $\ln I = f(1/T)$

Таким образом снимали зависимость обратного тока от температуры $I = f(t)$. Полученный график перестраивали в координатах $\ln I = f(1/T)$ представлен на рис. 4. По наклону прямой используя формулу (8) может определи ширину запрещенной зоны E_g. [1]. Погрешность в измерении E_g, составила ≈ 1%.

Литература

1. Л.П. Павлов. / Методы измерения параметров полупроводниковых материалов. М., ВШ. 1987. 239 с.

2. А.Х. Матиев, М.Я. Беков, Р.Т. Успажиев, А.И. Хасанов. // Определение ширины запрещенной зоны полупроводниковых кремниевых диодов. Естественные и технические науки. 2024. №6 (193). С.77-80.
3. А.Х. Матиев, М.Я. Беков, Р.Т. Успажиев, Р.М. Евтиева. // Определение ширины запрещенной зоны полупроводниковых кремниевых диодов. Естественные и технические науки. 2024. № 6 (193). С.81-84.
4. К.В. Шалимова. Физика полупроводниковых приборов. / М., Энергоатомиздат. 1985. 392 с.

ANALYSIS OF TEMPERATURE DEPENDENCE OF REVERSE CURRENT OF THE *p-n*-JUNCTION

[1,2]Matiyev A.Kh., [2]Uspazhiev R.T. Gorbakova H.K.[1]

[1]Ingush State University, Magas
[2]Grozny State Oil Technical University, Grozny

Based on the analysis of the temperature dependence of the reverse current of the p-n junction, the width of the forbidden zone of a silicon diode is determined. Assumptions are made about the possibility of using the obtained formula to calculate the width of the forbidden zone of other semiconductors.

УДК 53.01 25-79

ТРЕНИЕ КАЗИМИРА-ЛИФШИЦА И НАГРЕВ НАНОЧАСТИЦЫ ПРИ ДВИЖЕНИИ ВБЛИЗИ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Дедков Г.В., Кунашев З.А.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В рамках флуктуационно-электромагнитной теории рассчитаны максимальные температуры нагрева наночастицы Au при ее движении над поверхностью золота с более низкой фиксированной температурой.

Пространственные корреляции квантовых и тепловых флуктуаций поляризации и намагниченности конденсированных тел, а также вакуумного электромагнитного поля приводят к появлению флуктуационных электромагнитных сил между атомными частицами, атомами и макроскопическими телами, и между последними.

Радиационно-фрикционный нагрев Казимира-Лифшица обусловлен флуктуационно-электромагнитным взаимодействием незаряженных тел, разделенных вакуумным зазором, движущихся относительно друг друга [1]. В работах [2, 3] обращалось внимание на низкотемпературное возрастание силы трения Казимира-Лифшица между металлическими телами и возможность «аномального» нагрева одного из них: частицы в конфигурации частица-пластина и пластины в конфигурации двух пластин. Эти особенности возникают в результате теплового и динамического неравновесия, усиленного температурной зависимостью удельного сопротивления металлов при температурах значительно ниже температуры Дебая. Они могут сыграть решающую роль при измерении силы флуктуационно-электромагнитного трения через тепловой нагрев взаимодействующих тел [4 ,5]. Прямое экспериментальное измерение этой силы до сих пор является нерешенной приоритетной задачей фундаментального характера.

Возможно ли достичь квазистационарного состояния системы частица-пластина, когда движущаяся частица горячее неподвижной пластины, и насколько велика может быть разность температур между ними в зависимости от скорости, свойств материалов и других условий? Целью работы является определение максимально возможного перегрева наночастицы Au, движущейся относительно пластины золота. Такой сценарий можно реализовать при условии, что температура пластины поддерживается постоянной за счет контакта с тепловым резервуаром (бассейном).

Конфигурация системы показана на рис. 1.

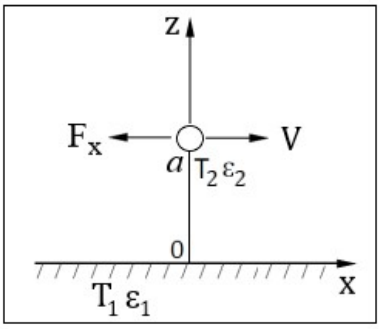


Рис. 1. Конфигурация системы частица-пластина

Базируясь на общих результатах теории флуктуационно-электромагнитного взаимодействия в случае наночастицы, движущейся параллельно поверхности с нерелятивистской скоростью *v* [1], выражения для мощности силы трения, тормозящей ее, и скорости нагрева можно записать в виде [6]

$$F_x v = -\frac{\hbar}{2\pi^2}\sum_{p=e,m}\int_0^\infty d\omega\, f_p(\omega), \tag{1}$$

$$f_p(\omega) = \int d^2k (k_x v)\,\mathrm{Im}\alpha_p(\omega^-)\,\mathrm{Im}\left(R_p\frac{e^{-2qa}}{q}\right)\left(\frac{\coth(\hbar\omega^-)}{2T_2} - \frac{\coth\hbar\omega}{2T_1}\right), \tag{2}$$

$$\frac{dQ_2}{dt} = -\frac{\hbar}{2\pi^2}\sum_{p=e,m}\int_0^\infty d\omega\, q_p(\omega), \tag{3}$$

$$q_p(\omega) = \int d^2k \omega^-\,\mathrm{Im}\alpha_p(\omega^-)\,\mathrm{Im}\left(R_p\frac{e^{-2qa}}{q}\right)\left(\frac{\coth(\hbar\omega^-)}{2T_2} - \frac{\coth\hbar\omega}{2T_1}\right), \tag{4}$$

$$R_e = \left(2k^2 - \omega^2/c^2\right)r_e + \left(\omega^2/c^2\right)r_m,\ R_m = \left(2k^2 - \omega^2/c^2\right)r_m + \left(\omega^2/c^2\right)r_e, \tag{5}$$

$$r_e = \frac{\varepsilon_1 q - q_1}{\varepsilon_1 q + q_1},\ r_m = \frac{\mu_1 q - q_1}{\mu_1 q + q_1}. \tag{6}$$

В формулах (1)–(6) индексом 1 обозначены величины, относящиеся к неподвижной пластине, а индексом 2 – величины, относящиеся к частице, суммирование по индексу *p* включает влады электрической и магнитной поляризации, $\omega^- = \omega - k_x v$. Кроме того, $q = \sqrt{k^2 - \omega^2/c^2}$, $q_1 = \sqrt{k^2 - \varepsilon_1\mu_1\omega^2/c^2}$, ε_1 – зависящая от частоты ω диэлектрическая проницаемость материала пластины, μ_1 – магнитная проницаемость. В (1)–(4) использованы также стандартные обозначения для постоянной Планка $\hbar$ и скорости света *c*, температуры выражены в энергетических единицах. Область применимости (1)–(6) ограничена условием дипольности *R*<<*a*. В численных расчетах далее использовалось соотношение *R*/*a*=1/5 $\frac{R}{a} = \frac{1}{5}$. Для электрической и магнитной поляризуемости сферической (металлической) частицы радиуса R применялись выражения [6]

$$\alpha_e = 4\pi R^3\frac{\varepsilon_2(\omega) - 1}{\varepsilon_2(\omega) + 2},\ \alpha_m = \frac{2\pi R^3}{15}\left(\frac{\omega R}{c}\right)^2(\varepsilon_2(\omega) - 1), \tag{7}$$

а для диэлектрической проницаемости золота, соответственно, модель Друде

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2 / \omega(\omega + i\nu(T)). \quad (8)$$

В формуле (8) ω_p – частота плазмы ($1.37 \cdot 10^{16}$ с$^{-1}$ для золота), $\nu(T)$ – частота релаксации электронов, зависящая от температуры. Она связана соотношением $\rho = \frac{4\pi\nu}{\omega_p^2}$ с удельным сопротивлением ρ. Выбор золота в численных расчетах обусловлен наличием экспериментальных значений удельного сопротивления в широком температурном интервале. В этом случае $\mu_1 = 1$.

При низких температурах $T \ll \theta_D$ (θ_D – температура Дебая, θ_D=172 K для золота) доминирующий вклад в трение и нагрев частицы вносят электромагнитные моды с частотами $\omega \sim \nu \ll \omega_p$, так как $\frac{\mathrm{Im}\alpha_e}{\mathrm{Im}\alpha_m} \sim \frac{R^2}{\nu^2} \ll 1$

Возможность аномального нагрева движущейся частицы обусловлена наличием температурного множителя $Z(T_1, T_2, v) = \coth(\hbar\omega / 2T_2) - \coth(\hbar\omega / 2T_1)$ в формуле (3). Представляя его в виде

$$Z = \left(\coth(\hbar\omega / 2T_2) - \coth(\hbar\omega / 2T_2)\right) + \left(\coth\left(\hbar\omega / 2T_2\right) - \coth\left(\hbar\omega / 2T_1\right)\right) \equiv Z_1 + Z_2,$$

мы всегда будем иметь Z_1<0 и Z_2>0, и, соответственно, два вклада разного знака в интеграл (3) при $T_2 > T_1$. При этом Z=0 в случае $v = 0$ и $T_1 = T_2$. Следовательно, при некотором значении скорости v (но при постоянной температуре пластины T_1) будет иметь место квазистационарный режим с перегревом частицы до некоторой максимальной температуры, зависящей от ее скорости. Как предлагается в [5], такой режим можно обеспечить, например, при подвеске пробной сферической частицы над поверхностью пластины с помощью кантилевера атомно-силового микроскопа. Движение самой частицы можно эквивалентно заменить вращением пластины в форме диска с контролируемой угловой скоростью вращения.

На рис. 2 и 3 показаны результаты численного расчета максимальной температуры перегрева ($\Delta T_1 max = T_1 2 - T_1 1$) частицы Au у поверхности золота в зависимости от ее скорости и других условий с использованием двух модельных зависимостей частоты релаксации $\nu(T)$ [6]. В первом случае (рис. 2) применялась усеченная модель Блоха-Грюнайзена для сопротивления золота (при $T > 7$ K и $\rho = \rho_1 БГ(7\mathrm{K})$ при $T \le 7$ K) . Во втором случае (рис. 3) использовалась модификация зависимости Блоха-Грюнайзена с остаточным сопротивлением $\rho_0 = 2.56 \cdot 10^{-20}$с (подробнее см. в [6]). Заметим, что $\rho_1 БГ(7\mathrm{K})/\rho_0 = 10^{-2}$. Цифровые обозначения на кривых (в принятом порядке) соответствуют температуре пластины T_1 и радиусу частицы R. Как следует из приведенных результатов, перегрев частицы относительно пла-

стины весьма значителен и зависит от используемой модели сопротивления. Приведенные значения ΔT_{max} можно рассматривать как максимальные (рис. 2) и минимальные (рис. 3). Соответствующие значения скоростей минимальны в первом случае и максимальны во втором.

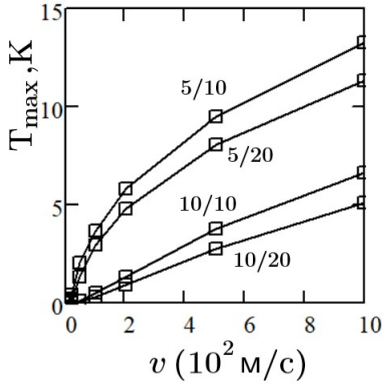


Рис. 2. Максимальный нагрев наночастицы Au относительно пластины золота как функция ее скорости. Удельное сопротивление частицы и пластины соответствует усеченной модели Блоха-Грюнайзена (БГ7) с $\theta_D = 172\,\mathrm{K}$, $\rho = \rho_{BG(7)}$ при $T < 7K$; $a = 100$ нм; 5/10 означает, что $T_s = 5\mathrm{K}$, $R = 10$ нм и т.д.

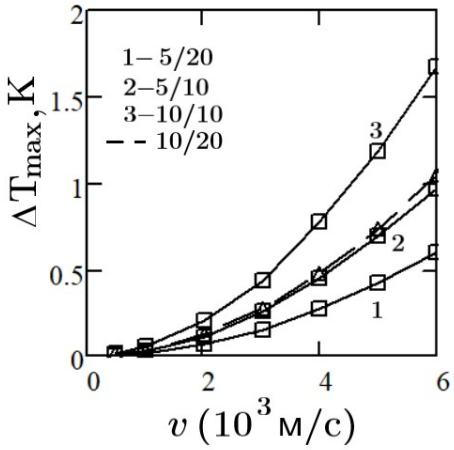


Рис. 3. Максимальный нагрев сферической частицы Au как функция скорости в модифицированной модели Блоха-Грюнайзена [6]

Характерные времена нагрева наночастиц Au при принятых выше условиях и начальных температурах 5–10 K имеют порядок десятка секунд.

Литература

[1] Дедков Г.В., Кясов А.А. УФН, **60**, 559 (2017).
[2] Дедков Г.В. Письма в ЖЭТФ **114**, 779 (2021).
[3] Dedkov G. V. Appl. Phys. Lett. **121**, 231603 (2022).
[4] Дедков Г.В. Письма в ЖЭТФ **117**, 952 (2023).
[5] Дедков Г.В. Письма в ЖЭТФ **117**, (2024).
[6] Дедков Г.В. Письма в ЖЭТФ **121**, 154 (2025).

CASIMIR-LIFSHITZ FRICTION AND HEATING OF A NANOPARTICLE WHEN MOVING NEAR A METAL SURFACEQUANTUM FRICTION OF METALLIC AND DIELECTRIC PLATES

Dedkov G.V., Kunashev Z.A.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

Within the framework of the fluctuation-electromagnetic theory, the maximum heating temperatures of an Au nanoparticle are calculated during its movement over a gold surface with a lower fixed temperature.

УДК 620.91.51.74 25-82

ОПТИМИЗАЦИЯ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЕРОВСКИТНОГО СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА $ZnO/CH_3NH_3PbI_3/NiO$

Кармоков А.М.[1], Козырев Е.Н.[2], Агоев А.З.[1],
Молоканов О.А.[1], Кармокова Р.Ю.[1], Хасанов А.И.[3]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2]Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ
[3]Чеченский государственный университет, Грозный

Проведена оценка коэффициента поглощения, скоростей генерации и рекомбинации носителей зарядов в тонких слоях предложенной структуры нового солнечного элемента со слоями ITO/ZnO/$CH_3NH_3PbI_3$/NiO/Ag (ITO – электропроводящий слой оксидов олова и индия).

Ключевые слова: *перовскит, солнечный элемент, оксид цинка, оксид титана, носители заряда*

В численных экспериментах при моделировании солнечных элементов, скорости генерации и рекомбинации носителей зарядов является исходными параметрами, определяющими эффективность фотонно-индуцированной генерации носителей зарядов, и от этих параметров зависят выходные характеристики солнечного элемента в целом. У разных авторов коэффициент эффективности генерации значительно различается, например в [1, 2] от 80 до 100 %.

Оценка коэффициентов поглощения излучения и скоростей генерации и рекомбинации проводилась для основной рабочей области структуры солнечного элемента с тонкими оксидными слоями ZnO, перовскита $CH_3NH_3PbI_3$ и NiO, где происходит генерация и рекомбинация носителей зарядов. Профили энергетических уровней по толщине этих основных слоев, составляющих структуру показаны на зонной диаграмме (рис. 1). Толщины слоев составляют 100/400/100 нм, соответственно. Расчтты проводились с помощью программ SCAPS-1D, широко применяемой исследователями при моделировании подобных структур солнечных элементов [1–4] и MathCad.

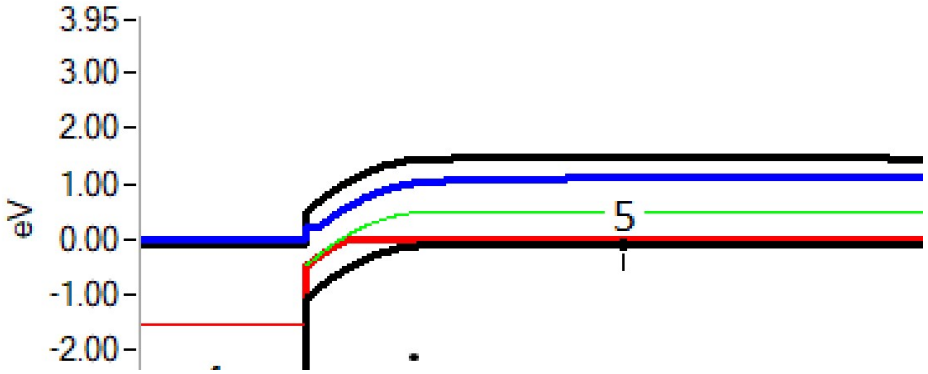


Рис. 1. Зонная диаграмма структуры ZnO/CH3NH3PBI3/NiO: 1 – зона проводимости; 2 – уровень Ферми F_n в слоях ZnO, $CH_3NH_3PbI_3$; 3 – валентная зона; 4 – уровень Ферми F_p в NiO; 5 – уровень Ферми для проводимости собственного типа

При взаимодействии солнечного излучения с функциональными слоями солнечного элемента происходит последовательное поглощение фотонов, энергия которых расходуется на образование экситонов и последующего разделение экситонов. Кроме того при прохождении фотонов через среду плотность тока уменьшается в результате поглощения, поэтому скорость генерации также является функцией глубины x от поверхности и выражается соотношением [1]:

$$G(\lambda,x)=\int_0^{\lambda_0}\gamma(x)I(\lambda)(\alpha,x)e^{-\alpha(\lambda)x}d\lambda,(1)$$

где λ – длина волны, λ_0 – край поглощения, $\gamma(\lambda)$– эффективность преобразования падающего фотона в ток, а $I(\lambda)$ – эффективная плотность падающего света, $\alpha(\lambda)$ – коэффициент поглощения.

Кривая, описывающая область спектра (от 380 до 760 нм), участвующую в генерации носителей зарядов [3], аппроксимируется с хорошей достоверностью (R^2=0,9851) полиномом

$$I(\lambda)=-5{,}42\cdot10^{-10}\lambda^4+1{,}25\cdot10^{-6}\lambda^3-1{,}07\cdot10^{-3}\lambda^2+4{,}08\cdot10^{-1}\lambda-56{,}2\ \left[\text{Вт}/\left(\text{м}^2\text{нм}\right)\right].$$

В этой области спектра излучения Солнца максимальное значение спектральной плотности интенсивности составляет 1,5 Вт/(м^{2}нм), которое достигается при длине волны ~0,47 мкм. В наших расчетах использовано максимальное значение 1,5 Вт/(м^{2}нм) из спектра AM1 [5]. Энергия кванта света в области λ = 0,38–0,76 мкм изменяется в пределах от 3,35 до 1,63 эВ. Поэтому, для генерации электронно-дырочной пары в поглощающем слое

солнечного элемента ширина запрещенной зоны должна быть меньше, чем минимальная энергия кванта света 1,63 эВ. Приводимые в литературе экспериментальные значения ширины запрещенной зоны в перовскитах, используемых в солнечных элементах, различаются, и находятся в пределах от 1,45 до 1,70 эВ.

Рассчитанная нами квантовая эффективность преобразования солнечной энергии в носители заряда от длины волны представлена на рисунке 2. Она согласуется с уравнением аппроксимации, полученным нами по кривой AM1 из [3] для области λ = 0,38–0,76 мкм.

Рис. 2. Квантовая эффективность преобразования солнечной энергии в носители заряда от длины волны

Как видно из рисунка, основной квантовый выход наблюдается при длинах волн от 400 до 550 нм, что хорошо согласуется с коэффициентом поглощения перовскитом. Кроме того, известно, что при энергиях фотона, превышающих в 2 и более раза ширину запрещённой зоны полупроводника, т.е. $E_g < 2h\nu$ (h – постоянная Планка, ν – частота излучения), эмиссия носителей зарядов может увеличиться в два и более раза [6, 7]. Для наиболее перспективного перовскита $CH_3NH_3PbI_3$, широко применяемого в исследованиях, E_g = 1,55 эВ. Поэтому, для расчета эффективности преобразования падающего фотона в ток $\gamma(\lambda)$ в уравнении (1) в использованном нами перовските можно принять равным единице, так как для перовскита $E_g < h\nu$, а в ИК-области $E_g < 2h\nu$.

Коэффициент поглощения $\alpha(\lambda)$ зависит от энергии кванта света, падающего на поверхность, и ширины запрещенной зоны полупроводникового материала и выражается соотношением [6]:

$$\alpha(\lambda) = B_\alpha \sqrt{\frac{hc}{\lambda} - E_g}\,, \qquad (2)$$

где B_α – независимая константа, определенная как 10^5 см$^{-1}$эВ$^{-0,5}$, а hc/λ представляет собой энергию фотона. На рис. 3 показаны рассчитанные по (2) зависимости коэффициента поглощения от длин волны излучения для рабочих слоев элемента.

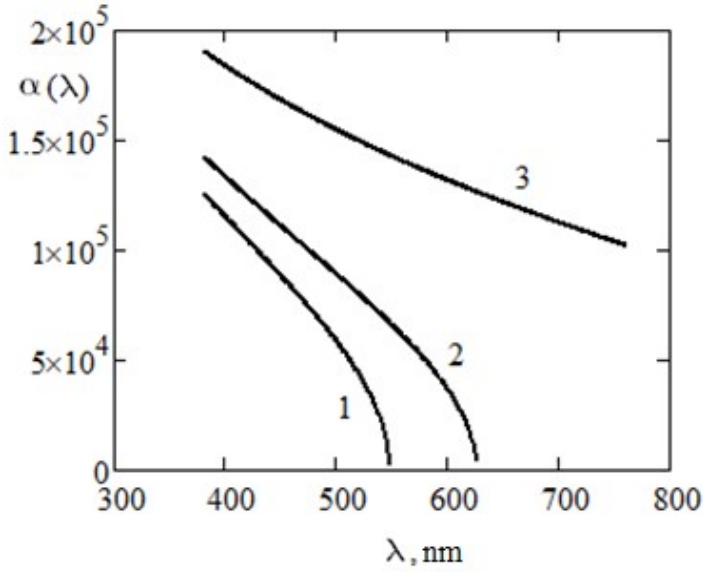


Рис. 3. Зависимости коэффициента поглощения от длин волны излучения для пленок: 1 – ITO; 2 – ZnO и 3 – перовскита $CH_3NH_3PbI_3$

Как видно из рисунка коэффициенты поглощения ITO и ZnO в несколько раз меньше, чем у перовскита, и у них значение α(λ) резко снижается с увеличением длины волны излучения и становятся незначительными при длинах волн больше 550 и 630 нм, соответственно. Значение коэффициента поглощения перовскита изменяется в ~ 1,5 раза в области λ = 0,38–0,76 мкм спектра и превосходит поглощение оксидов более, чем в 2 раза. В отличие от оксидов цинка и никеля, слой перовскита поглощает излучения во всей области спектра с λ = 0,38–0,76 мкм. Таким образом, предлагаемый нами солнечный элемент, как и в [7], подходит для преобразования инфракрасного излучения в электрическую энергию.

Рекомбинация свободных носителей заряда в материалах с низкой концентрацией дефектов и малой подвижностью часто описывается прямой рекомбинацией. Согласно теории Ланжевена, скорость рекомбинации зарядов пропорциональна плотностям электронов и дырок:

$$R = r\left(np - n_i^2\right), \tag{3}$$

где r – коэффициент рекомбинации, $n_i = N_c \times \exp(-E_{gap}/2kT)$ – собственная концентрация носителей заряда. Поскольку в перовскитных материалах присутствуют большие запрещенные зоны, собственный носитель заряда очень мал по сравнению с носителями заряда, генерируемыми фотонами.

Рекомбинация также может произойти через ловушки и дефекты, которые можно описать методом Шокли-Рида-Холла [3, 7]:

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p\left(n + n_1\right) + \tau_n\left(p + p_1\right)}, \tag{4}$$

где τ_p и τ_n – времена жизни дырки и электрона соответственно, где n_1 и p_1 – концентрации электронов и дырок, когда квазиуровень Ферми совпадает с энергией ловушки. В то время как n_1 и p_1 зависят от энергетических уровней центров рекомбинации E_d:

$$n_1 = N_c \exp[-(E_C - E_d)/(kT)],$$

$$p_1 = N_v \exp[(E_V - E_d)/(kT)].$$

На рис. 4 показаны профили распределения скоростей генерации и рекомбинации носителей зарядов в активных слоях $ZnO/CH_3NH_3PbI_3/NiO$ структуры солнечного элемента при толщине слоев: ZnO 100 нм, перовскита 850 нм и NiO 100 нм.

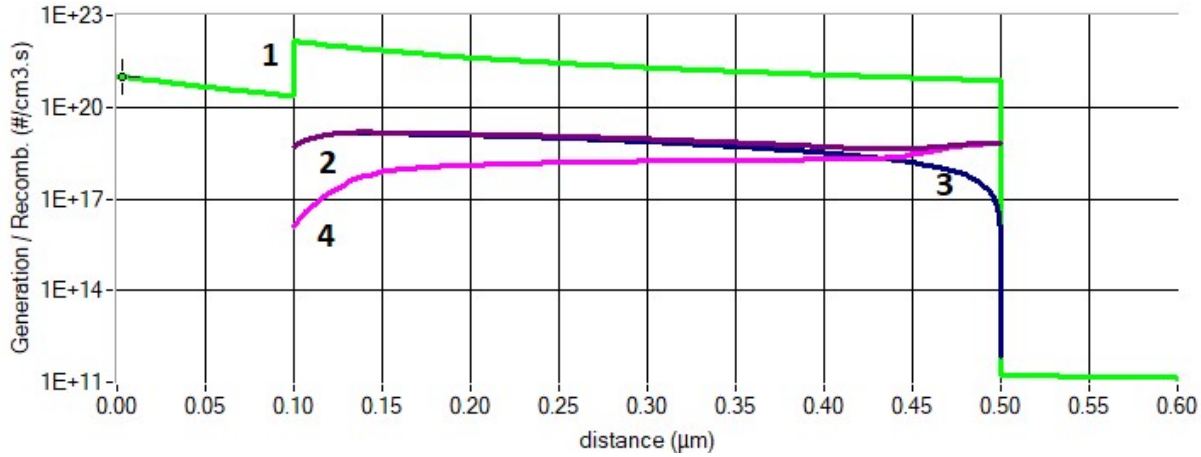


Рис. 4. Профили распределения скоростей генерации и рекомбинации в слоях $ZnO/CH_3NH_3PbI_3/NiO$: 1 – генерация электронно-дырочных пар; 2 – захват дырок; 3 – захват электронов; 4 – эмиссия дырок

Как видно из рисунка скорость генерации электронно-дырочных пар имеет наибольшее значение ~ 10^{22} $см^{-3}с^{-1}$ и превосходит скорости захвата электронов и дырок на несколько порядков величины.

Таким образом, расчеты, проведенные по предлагаемой модели, показывают высокую квантовую эффективность слоя перовскита по всей анализируемой области спектра солнечного излучения. Зонная диаграмма предлагаемой структуры обеспечивает высокую эффективность генерации носителей зарядов. Коэффициент поглощения слоем перовскита значительно выше, чем в слоях оксидов цинка и никеля. Скорость генерации электронно-дырочных пар в структуре имеет высокое значение, превосходящее 10^{22} $см^{-3}с^{-1}$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 23-13-20012).

Литература

1. Yecheng Zhou and Angus Gray-Weale. A numerical model for charge transport and energy conversion of perovskite solar cells // Physical Chemistry Chemical Physics. 2016, 18, p. 4476-4486.
2. Sajid Ullah, Ayesha Gulnaz, Guangwei Wang. Modeling and Simulation of Heterojunction Solar Cell with Mono Crystalline Silicon // Journal of Applied Mathematics and Physics. Vol. 12 No. 3, March 2024. DOI: 10.4236/jamp.2024.123061
3. Саенко А.В., Малюков С.П., Рожко А.А. Моделирование структуры бессвинцового перовскитного солнечного элемента // Прикладная физика, 2022, № 1. с. 19-27.
4. Takashi Minemoto, Yu Kawano, Takahito Nishimura, Jakapan Chantana // Optical Materials. 2019. Vol. 92. P. 60.
5. Справочник по геофизике и космическому пространству. Под ред. С.Л. Валлея и МакГроу-Хилла, Нью-Йорк, 1965.
6. Акманов А.Г., Шакиров Б.Г. Основы квантовых и оптоэлектронных приборов. Учебное пособие. Уфа: РИО БашГУ, 2003. - 129 с.
7. Пихтин А.Н. Оптическая и квантовая электроника. М.: Высшая школа, 2001. 350 с.

OPTIMIZATION OF THE PHOTOELECTRIC CHARACTERISTICS OF THE PEROVISKET SOLAR ELEMENT ZNO/$CH_3NH_3PBI_3$/NIO

Karmokov A.M.[1], Kozyrev E.N.[2], Agoev A.Z.[1], Molokanov O.A.[1], Karmokova R.Yu.[1], Khasanov A.I.[3]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]North Caucasian Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz
[3]Chechen State University, Grozny

The absorption coefficient, generation rates and recombination of charges of charges in the thin layers of the proposed structure of the new solar element with layers of ITO/ZnO/$CH_3NH_3PbI_3$/NiO/Ag (ITO is an electrical conductive layer of tin oxides and India) was carried out.

Key words: *perovskite, solar element, zinc oxide, titanium oxide, charge carriers*

СЕКЦИЯ 3

ТЕХНОЛОГИИ НАНОМАТЕРИАЛОВ И ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР ДЛЯ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ. ПРИБОРЫ И УСТРОЙСТВА

УДК 621.315.592 25-12

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЙ МОНОЛИТНО-ИНТЕГРИРОВАННЫЙ МИКРОДИСПЛЕЙ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩЕГО ТИПА НА ОСНОВЕ СЛОЖНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ A^3B^5

Смирнов А.Г.[1], Степанов А.А.[1], Корсак К.В.[1], Шрамов И.И.[1], Муха Е.В.[1], Можаров А.М.[2,3], Федоров В.В.[2,3], Мухин И.С.[2,3]

[1]Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск
[2]Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург
[3]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург

На сегодняшний день микро-LED и OLED-дисплеи высокого разрешения являются ключевыми кандидатами для следующего поколения устройств дополненной (AR) и виртуальной (VR) реальности, обеспечивающих эффективное взаимодействие человека с компьютерными системами. В данной работе рассматривается концепция формирования твердотельных монолитно-интегрированных прямозонных гетероструктур GaAsP/GaPN, излучающих в красной области спектра, с кремниевыми КМОП-чипами для адресации светоизлучающих элементов.

Введение

В настоящее время существующие технологии изготовления монолитно-интегрированных светодиодных микродисплеев высокого разрешения имеют определенные ограничения. В частности, монолитная интеграция прямозонных полупроводниковых соединений III-V с кремниевым адресующим чипом хотя и возможна и позволяет изготавливать излучатели сверхвысокого разрешения в видимом диапазоне спектра, однако несоответствие в симметрии кристалла, параметрах решетки и коэффициентах теплового расширения между Si и полупроводниками III-V не позволяет осуществлять их прямую гетероэпитаксию.

В последнее время были предприняты попытки использования GaAs или InP наноструктур типа nanowires, формируемых на Si, излучающие в ближнем инфракрасном диапазоне спектра. Напротив, практически отсутствуют сообщения о селективно выращенных наноструктурах на основе фосфидов III группы, излучающих в красном диапазоне спектра. В связи с этим возникает обоснованный интерес к таким материалам в качестве альтернативы системам материалов InGaN или AlIn-GaP. Отметим, что увеличение содержания индия в структурах на основе InGaN, необходимого для перехода в красную область спектра, приводит к снижению эффективности люми-

несценции. Аналогично, в устройствах на основе AlIn-GaP наблюдается существенное падение эффективности из-за поверхностной рекомбинации. Среди других материалов группы III-V фосфид галлия (GaP) хорошо согласован по параметру решетки с монокристаллическим кремнием, что обеспечивает ему определенные преимущества с точки зрения снижения дефектности выращенных структур. Однако изначально его непрямая запрещенная зона ограничивает использование в качестве люминесцирующего материала. В данном исследовании мы использовали тройные прямозонные соединения GaAsP и GaPN, излучающие в красном диапазоне спектра.

1. Методология исследований

Тестовые образцы монолитно-интегрированных микросветодиодов формировали в три этапа: 1) селективный эпитаксиальный рост на монокремнии нитевидных гетероструктур на основе GaP с сегментами GaAsP или GaPN с прямой запрещенной зоной, излучающими в красной области спектра; 2) формирование промежуточного носителя на основе полидиметилсилоксана (PDMS) с гибкой композитной структурой; 3) отделение от промежуточного носителя и перенос нитевидных нано- структур на кремниевый чип, содержащий КМОП матрицу управления.

Наноструктуры выращивали на кремниевых пластинах (001) методом плазменной молекулярно-лучевой эпитаксии (PA-MBE). Для формирования маски роста термического оксида кремния использовали безмасковую оптическую литографию, основанную на самоорганизующихся монослоях микросфер [1]. Такой подход обеспечивает формирование рисунка на пластине кремния с субмикронным разрешением и высокой производительностью без использования сложного и дорогостоящего литографического оборудования.

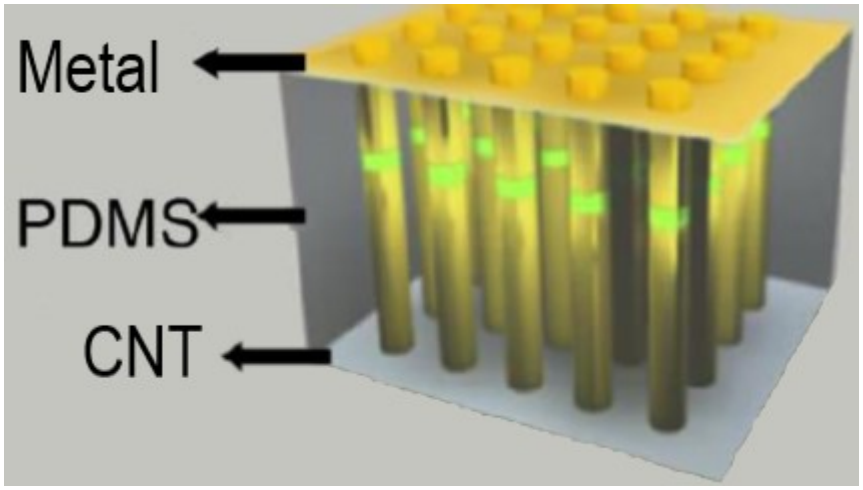


Рис. 1. Внешний вид гибкой структуры микросветодиодных наноструктур

Нанесение верхних и нижних прозрачных электродов светодиодов в виде тонких пленок металла или однослойных углеродных нанотрубок завершают формирование тестовых образцов.

Установлено, что процессы отделения и переноса с промежуточного носителя на целевую подложку серьезно влияет на качество соединения

микросветодиодов с матрицей управляющих транзисторов. В нашем случае мы формировали микросветодиоды на носителе с шагом 150 мкм (рис. 2) при температуре 250 °C в течение 2 мин для снижения адгезии. Тестовый модуль включал в себя квадратные пиксельные электроды размером 50 мкм с каждой стороны и квадратные контактные площадки размером 100 мкм с каждой стороны. Кроме того, общий электрод имеет длину 700 микрон и ширину 50 микрон.

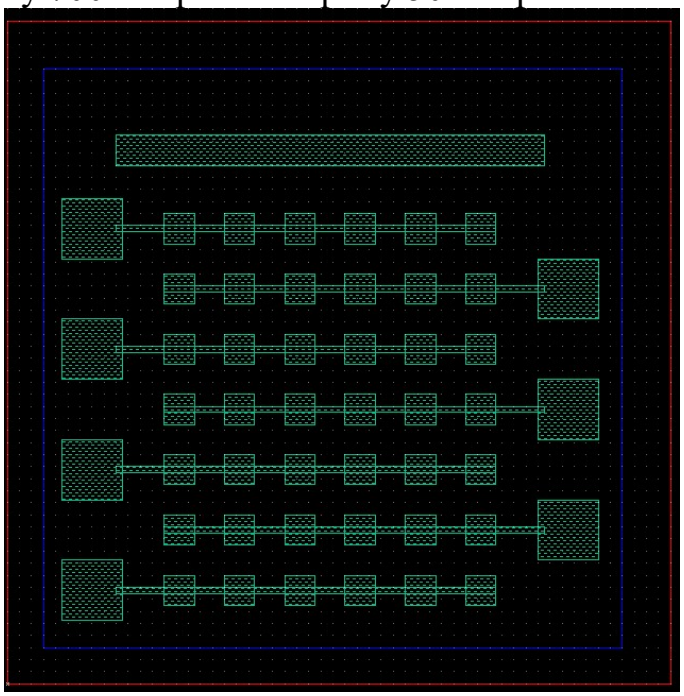


Рис. 2. Топология тестового модуля.

При температуре склеивания 180 °C и давлении 0,3 МПа гибкая несущая матрица микросветодиодов надежно контактировала с матрицей транзисторов, сформированной на кремниевой подложке [2].

Процесс изготовления пиксельных электродов включал предварительную стадию травления кремния перед нанесением электродного материала для улучшения адгезии с последующим осаждением слоев Ti/Au, Zn/Au или Cr/Au, обеспечивающих омические контакты.

2. Модуль управления тестового образца

Для моделирования модуля управления использовали программный пакет Cadence для 0,18 мкм кремниевого КМОП-процесса. Схема управления реализована с использованием широтно-импульсной модуляции (ШИМ) на постоянном токе [3]. Светодиод работает в режиме максимальной яркости и включается и выключается на определенный период времени. При этом яркость источника излучения варьируется временем включения, поскольку человеческий глаз действует как фильтр нижних частот и не может воспринимать частоту кадров выше 60 Гц. При использовании метода ШИМ-регулировки изменение яркости можно выразить следующим образом:

$$BRG_{PWM}(\%) \approx \frac{t_{on}}{t_{frame}} \cdot 100 \qquad (1)$$

Поскольку для управления яркостью был выбран метод импульсной ШИМ, первым модулем блока управления яркостью является делитель частоты. Он реализован на основе принципа обработки сигнала через ряд каскадных D-триггеров, где выход каждого триггера служит комбинаторным сигналом для генерации уровней яркости.

Выбор пикселей в светодиодной матрице реализован посредством адресации с использованием двух демультиплексоров, используемых в качестве блоков выбора строк и столбцов. Каждый выход демультиплексора строк подключен к блокам управления яркостью, количество которых напрямую зависит от количества строк. Выходы демультиплексора строк и блока управления яркостью подключены к вентилю И. Когда оба выхода отправляют логическую «1», происходит выбор пикселя.

Заключение

На основе проведенных экспериментальных исследований и моделирования модуля управления излучательными характеристиками микросветодиодных структур сформулирована новая концепция формирования монолитно-интегрированных микродисплеев светоизлучающего типа, управляемых КМОП-матрицей на кремниевом чипе.

Данная работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (грант № Ф24СПбГ-007), а также государственными программами научных исследований Республики Беларусь «Материаловедение, новые материалы и технологии» (задание 2.25) и «Конвергенция 2025» (задание 3.02.5), Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № ФСРМ 2023-0007), Санкт-Петербургским научным фондом (соглашение № 23-РБ-02–08).

Литература

1.Dvoretckaia, L.N. et al. Selective area epitaxy of gallium phosphide-based nanostructures on microsphere lithography-patterned Si wafers for visible light optoelectronics / L.N. Dvoretckaia et al. // Materials Research Bulletin. – 2024. – Vol. 182, – P. 113126.

2. Шрамов И.И, Степанов А.А., Смирнов А.Г., Корсак К.В., Муха Е.В, Можаров А.М., Федоров В.В., Мухин И.С. /КМОП-матрица для управления массивом светоизлучающих наноструктур/ Материалы VIII международ--ной научно-практической конференции «Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики, аэрокосмических технологий и физики конденсированного состояния», май 2025 г., Минск, Беларусь, С. 124-127.

3. H. Issac, “Dimming in switched-mode LED drivers,” Texas Instrument, 2018. https://e2e.ti.com/blogs_/b/powerhouse/posts/dimming-in-switched-mode-led-drivers (accessed Nov. 23, 2024).

УДК 531.781.2 25-13

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНСТРУКЦИИ И РЕЖИМОВ НАРАБОТКИ МЭМС-ДАТЧИКОВ ИЗБЫТОЧНОГО ДАВЛЕНИЯ С ПОВЫШЕННОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТЬЮ И ПРЕЦИЗИОННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

Басов М.В., Сысоев С.С.

ФГУП ВНИИА им. Н.Л. Духова, Москва

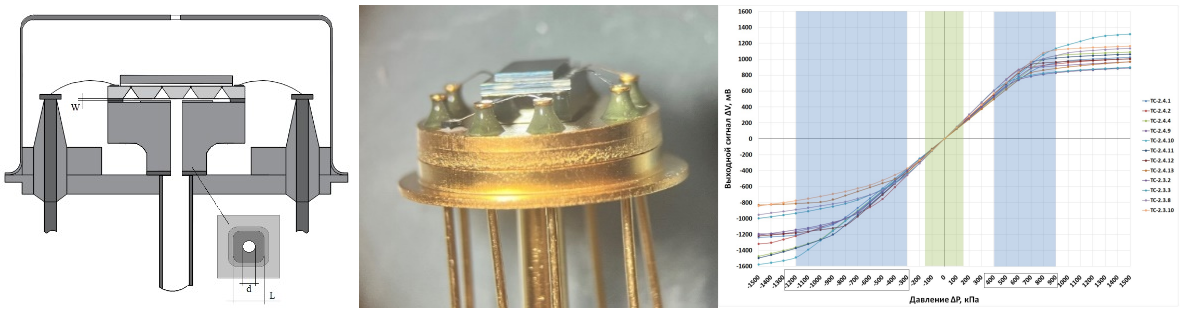
Разработана новая сборочная конструкция чувствительного элемента давления для диапазонов избыточного давления до 25…160 кПа, который может быть применен в составе любого вида корпуса тензомодуля. Представлен спектр преимуществ разработки по увеличению механической прочности и сокращению основных и дополнительных погрешностей относительно применяемого в настоящем аналога, серийно выпускаемого тензомодуля.

Введение. Датчики давления (ДД), выпускаемые в ФГУП «ВНИИА», являются продуктом одного из основных направлений по серийному производству предприятия для атомной, нефтегазовой и оборонной промышленности. Новые конструкторские и технологические решения в подавляющем большинстве случаев относятся к основному элементу ДД, которым является тензомодуль ДД. Тензомодуль ДД – это сборочная конструкция, содержащая в своем составе чувствительный элемент давления (ЧЭД), выполненный в виде микроэлектромеханической системы (МЭМС) из кремния. Главным элементом ЧЭД является интегральный тензопреобразователь (ИТП) – это преобразователь давления, основанный на тензорезистивном методе. Выбор конструктивно-технологических методов реалиизации ЧЭД влияет на метрологические характеристики.

Актуальность работы и обзор методов реализации. При эксплуатации датчиков избыточного давления диапазонов до 25, 40, 60, 100 и 160 кПа неоднократно возникала проблема отказа у потребителя после воздействия перегрузки давлением со скоростью нарастания $V_{Р.аварийный} \approx 70…100$ кПа/мс, превышающей скорость реакции механического сильфонного компенсатора. В результате повторяющихся аварийных ситуаций у потребителей было установлено, что в частном случае использования аналогов максимально происходящая перегрузка давлением достигает $Р'_{перегр.\ лиц} = 3{,}5$ МПа с лицевой стороны ИТП и $Р'_{перегр.\ обр} = 1{,}0$ МПа с обратной стороны ИТП. Основная цель разработки – это увеличение стойкости к перегрузкам по давлению и гидроударам ДД, где составной частью является разрабатываемый тензомодуль, а также ЧЭД в его составе.

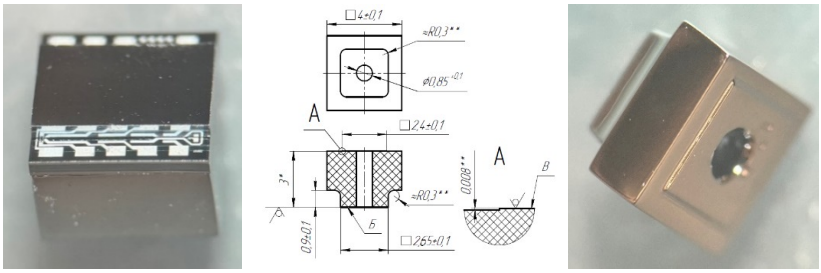
Конструкторские и технологические решения для разработанного ЧЭД. Различными группами исследователей было доказано [1], что причины достижения прецизионных характеристик ЧЭД можно разделить на две со-

ставляющие – качество реализации самого ИТП и корректность структуры сборочной конструкции. Конструкция разрабатываемого ЧЭД и его макетного исполнения в виде тензомодуля в составе корпуса типа КЮЯЛ представлена на рис. 1а,б. В разрабатываемой конструкции ЧЭД и тензомодуля используется один и тот же ИТП в виде кристалла ИПД60 под одинаковый диапазон давления, как и для аналога. Конструкция ЧЭД состоит из основания с упором, ИТП и крышки, используемой в качестве упора с лицевой стороны ИТП (рис. 1а,б и 2а,в) [2-6].



а) б) в)

Рис. 1. Разрабатываемый тензомодуль: а) схематический разрез; б) фото без баллона; в) график изменения выходного сигнала



а) б) в)

Рис. 2. Разработанный ЧЭД: а) фото; б) чертеж основания; в) фото основания

Основание разработанного ЧЭД имеет отверстие для подвода давления с обратной стороны ИТП и пьедестал с требуемой высотой, сглаженными углами в двух плоскостях области перехода структуры и с определенной площадью соединения с корпусом тензомодуля. Соединение кремниевых элементов между собой происходит с помощью низкотемпературного стекла или фритты с формированием определённых зазоров для свободного перемещения мембраны при номинальных давлениях и посадки ее на упоры до момента разрушения. Соединение конструкции с корпусом происходит при использовании кремнийорганического клея. Дополнительно в составе разработанного тензомодуля давления используется ранее разработанный малогабаритный преобразователь температуры на основе диода Шоттки [7].

Проверка механической прочности разработанных тензомодулей. Основные преимущества разработки заключаются в том, что все 22 образца

разработанной конструкции тензомодуля с существенным запасом удовлетворяют требованиям ТЗ предприятия при проверке механической прочности (табл. 1). Показатели механической прочности разрабатываемого тензомодуля и аналога с упорами фактически совпадают. На рис. 1в показаны моменты посадки мембраны на упоры тензомодуля при подаче давления с любой из двух сторон ИТП, зеленым выделен диапазон номинального давления и синим – моменты посадки мембраны на упоры.

Таблица 1. Данные по перегрузочной способности разработанной конструкции тензомодуля и аналогов

Вид сборки	Макет разработки (с упорами)			Аналог с упорами			Аналог без упоров		
Вид конструкции	анные по г аналога ТЖИ Вид сборки/			зочной способно 4.026-03 и ТЖИУ. Макет ТС2			ізработанной 043-03 ЖИУ 408854 043 (		
Сторона подачи давления	Лицевая	Обратная	Кол-во (процент) образцов	Лицевая	Обратная	Кол-во (процент) образцов	Лицевая	Обратная	Кол-во (процент) образцов
Должны выдерживать по ТЗ, МПа	3,50	1,00	22 из 22 (100%)	4,50	3,00	36 из 36 (100%)	0,75		(n≈10^3) 98 %
Фактический предел, МПа	4,50	2,50							
	6,00	4,50	6 из 12 (50 %)				1,00		(n≈10) 55 %

Исследование влияния наработки циклическими воздействиями. В исследовании параметрических характеристик разработанной конструкции тензомодуля участвовало 52 образца, которые были разделены на 6 подгрупп, отличающихся площадью пьедестала квадратной формы с длиной стороны 2,65, 2,40 и 2,20 мм, а также поочередным влиянием наработки либо термоциклирования (ТЦ), либо бароциклирования (БЦ) (табл. 2).

Таблица 2. Виды и подгруппы партий тензомодулей

№ подгруппы	ТС2.4б	ТС2.4т	ТС2.5б	ТС2.5т	ТС2.6б	ТС2.6т
Кол-во образцов	10	11	9	10	6	6
Циклы наработки	Баро	Термо	Баро	Термо	Баро	Термо
Площадь соединения основания ЧЭД с корпусом, $мм^2$	2,65		2,40		2,20	

Основные выводы по изменению характеристик: 1) средние значения модуля нулевого сигнала уменьшаются в результате БЦ на 6,6 % и в результате ТЦ на 3,4 %; 2) средние значения чувствительности увеличились во всех партиях незначительно порядка 0,05%; 3) средние значения нелинейности в

диапазоне до 25 кПа имеет существенно более высокие эффекты от снижения остаточных механических напряжений порядка 80 % от начальных показателей относительно сокращения нелинейности в диапазоне до 160 кПа порядка 10 %; 4) после проведения ТЦ и БЦ показатели температурного гистерезиса нулевого сигнала (ТГН) сокращаются на 55% для отрицательного диапазона температур и на 37% для положительного диапазона температур, при этом разброс между параметрами в партии сокращается в 2-4 раза; 5) показатели температурного гистерезиса чувствительности (ТГЧ) сокращаются на 65 % для отрицательного диапазона температур и на 20% для положительного диапазона температур, при этом разброс между параметрами в партии сокращается в 3-5 раз для отрицательного диапазона температур и не изменяется для положительного; 6) после проведения ТЦ и БЦ показатели температурного коэффициента нулевого сигнала (ТКН) сокращаются на 17 % для отрицательного диапазона температур и на 26% для положительного диапазона температур и разброс между параметрами в партии сокращается всего на 20 %; 7) температурный коэффициент чувствительности (ТКЧ) не изменяется; 8) финальные наименьшие параметры по ТГН достигаются на партии с длиной стороны пьедестала 2,65 мм и наименьшие показатели по ТГЧ и ТКН – с длиной стороны пьедестала 2,40 мм.

Исследование параметрических характеристик разработанных тензомодулей. Преимущества разработанной конструкции тензомодуля заключается в сокращении основных некомпенсируемых погрешностей по ТГН и ТГЧ и сокращении дополнительных погрешностей по нелинейности $2K_{NL}$, ТКН и ТКЧ (табл. 3).

Таблица 3 – Параметрические характеристики и процент выхода годных для макетной разработки тензомодуля и аналога

Наименование параметра (граничные значения по модулю при $E_{пит}$ = 5 В)	Единица измер.	Обозначение	Значение		
			Аналог без упоров	Аналог с упорами	Макет разработки
1. Нулевой сигнал U_0, мВ			15		
2. Чувствительность dU_0 (ΔP = 100 кПа), мВ			> 108		
3. Нелинейность $2K_{NL}$, %			0,50		0,30
4. ТК нулевого сигнала U_0 ТКН, %/(10 °С)			0,30		0,25
5. ТК чувствительности S ТКЧ, %/(10 °С)			3,50		2,80

6. ТГ нулевого сигнала U_0 ТГН, %			0,30		0,20
7. ТГ чувствительности S ТГЧ, %			0,30		0,20
8. Стабильность в течение 7 ч δU^S_0, %			0,10		
9. Перегрузка давлением 0,75 МПа δU^M_0			0,10		
10. Обжатие давлением 10 МПа δU^{ST}_0, %			0,15		
Количество образцов в статистике			1635	36	52
Процент выхода годных с требованиями к	Аналог		59,7 %	52,0 %	73,1 %
	Макет разработки		-	-	46,2 %

Выводы. Резюмируя результаты разработки, можно сделать следующие выводы: 1) на основе проведенного аналитического обзора и теоретического моделирования представлены эффективные конструкторско-технологические решения относительно требований по ТЗ ФГУП «ВНИИА»; 2) разработана новая сборочная конструкция чувствительного элемента давления с упорами с двух сторон от ИТП для диапазона избыточного давления до 25…160 кПа, позволяющие выдерживать перегрузки давлением до 4,5 МПа при подаче с лицевой стороны мембраны и до 2,5 МПа при подаче с обратной стороны мембраны; 3) новая сборочная конструкция позволяет сократить целый ряд различных погрешностей разработанного тензомодуля избыточного давления относительного аналога за счет существенного снижения влияния остаточных механических напряжений на ИТП.

Список литературы

[1] Yole Development [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.i-micronews.com/products/mems-pressure-sensors-technology-and-market-trends-2021.

[2] Sandvand A., Halvorsen E., Aasmundtveit K.E., Jakobsen H. Influence of Glass-Frit Material Distribution on the Performance of Precision Piezoresistive MEMS Pressure Sensors // IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology. – 5. – 2015. – P. 1559-1566, DOI: https://doi.org/10.1109/TCPMT.2015.2486018.

[3] Zarnik M.S., Rocak D., Macek S. Residual stresses in a pressure-sensor package induced by adhesive material during curing: a case study // Sensors and Actuators A: Physical. – 116. – 2004. – P. 442-449, DOI: https://doi.org/10.1016/j.sna.2004.05.010.

[4] M. Basov, “Research of Long-Term Stability of High Sensitivity Piezoresistive Pressure Sensors for Ultra-Low Differential Pressures,” IEEE Sensors Journal, vol. 24, no. 22, pp. 36443 – 36450, 2024, DOI: 10.1109/JSEN.2024.3455379.

[5] M. Basov, “Research of MEMS pressure sensor stability with PDA-NFL circuit,” IEEE Sensors Journal, vol. 24, no. 21, pp. 34083 - 34090, 2024, DOI: 10.1109/JSEN.2024.3454952.

[6] M. Basov, “Ultra-High Sensitivity MEMS Pressure Sensor Utilizing Bipolar Junction Transistor for Pressures Ranging from -1 to 1 kPa,” IEEE Sensors Journal, vol. 21, no. 4, pp. 4357-4364, 2021, DOI: 10.1109/JSEN.2020.3033813.

[7] M. Basov, “Schottky diode temperature sensor for pressure sensor,” Sensors and Actuators A: Physical, vol. 331, 112930, 2021, DOI: 10.1016/j.sna.2021.112930.

RESEARCH OF ASSEMBLY DESIGN AND PRE-OPERATION MODES FOR MEMS PRESSURE SENSORS WITH INCREASED MECHANICAL STRENGTH AND LOW ERRORS

Basov M., Sysoev S.

Dukhov Automatics Research Institute (VNIIA, Moscow)

A new assembly design of pressure sensitive element has been developed for pressure range of 25…160 kPa, which can be used as part of any kovar package. The advantages of this development are the high mechanical strength and low errors in relation to the currently used analogue.

УДК 621.315 25-21

ОСАЖДЕНИЕ СЛОЕВ ОКСИДА В ТЕХНОЛОГИИ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.

Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ

Технологические принципы изготовления приборных структур с воспроизводимыми параметрами обеспечиваются созданием диэлектрических слоев при формировании элементов интегральной электроники. Решение задач по оптимальному проектированию и производству изделия осуществляется комплексно на основе учета производственно-технологических факторов.

При создании микроэлектронных приборных структур прилагают технологические принципы формирования приборных структур с воспроизводимыми параметрами и имеет место элементно-технологическая и конструктивная интеграции [1-4].

Пленочные технологии обнаруживаются стержневыми во всех процессах изготовления электронных устройств и их элементов, которые применяются для получения пленок металлов, полупроводников и диэлектриков, а также для формирования пленочных приборных структур [5-7].

Технологичным способом образования оксидов кремния без участия материалов подложки является пиролитическое разложение различных кремний органических соединений. Что дает возможность осаждать оксидные пленки кремния на подложку из произвольного материала, позволяет свести к минимуму перераспределение примесей, которое имело место в исходной подложке, т.е. сохранить геометрические размеры и электрические параметры активных и пассивных областей подложки, низкую температуру процесса.

В планарной технологии изготовления интегральных микросхем применяется метод термического окисления кремния, при котором защитные диэлектрические пленки SiO_2 получают при нагревании исходных кремниевых подложек в окислительной среде. Этот метод позволяет получать высококачественные маскирующие пленки, равномерные по толщине и структуре и обладающие высокими защитными и диэлектрическими свойствами.

Для получения защитных диэлектрических пленок на кремнии используют термическое окисление в парах воды высокой чистоты.

Влияние на скорость роста оксидной пленки оказывают ориентация подложки, тип электропроводности и концентрация примеси исходной подложки. Высокая концентрация примеси в подложке влияет на скорость реакции окисления на границе раздела кремний – оксид, либо на коэффициенты диффузии окислителей.

Пленки SiO_2, полученные равномерно по толщине по всей поверхности пластины, обладают достаточной сплошностью, стабильностью химического состава и хорошей маскирующей способностью при проведении процессов диффузии.

Для нанесения защитных пленок оксида кремния используют испарение монооксида кремния. Методом реактивно-катодного распыления получают пленки оксида кремния, подвергая распылению в присутствии кислорода кремниевую мишень.

Наряду с защитными диэлектрическими пленками диоксида кремния в производстве интегральных микросхем применение находят пленки нитрида кремния. Пленки нитрида кремния обладают меньшей проницаемостью для диффузантов, используемых в обычной планарной технологии, чем пленки диоксида кремния.

Пленки оксидов металлов образуют на поверхности полупроводникового материала защитные покрытия, которые обладают высокой влагоустойчивостью и термостойкостью.

В производстве применяют защитные пленки на основе оксидов алюминия, титана, бериллия, циркония. Исходный материал берут в виде порошков. В качестве несущего агента может быть использован галоген или галоидное соединение водорода. Осаждение защитных пленок проводят в реакционных камерах, в которых устанавливается градиент температуры между источником и полупроводниковым материалом.

При изготовлении интегральных микросхем термическое испарение и ионно-плазменные процессы используют для создания омических переходов, пассивных элементов тонкопленочных схем, межэлементной изоляции и коммутации. Для оценки качества тонкопленочных покрытий контролируют их толщину и структуру.

В качестве диэлектрика в тонкопленочных конденсаторах используют пленки оксидов кремния SiO и тантала Ta_2O_5, а в качестве обкладок – пленки металлов высокой проводимости. Обкладки конденсаторов выполняют из пленок алюминия. При этом верхние обкладки танталовых конденсаторов изготовляют из пленок алюминия с подслоем ванадия.

Контактные площадки пленочных интегральных микросхем являются продолжением соединительных проводниковых линий (межсоединений) и служат для припайки или приварки внешних выводов корпуса.

Пленочные технологии являются ключевыми во всех процессах изготовления современных электронных устройств. Их применяют для получения пленок металлов, полупроводников и диэлектриков, а также для формирования пленок разной структуры: аморфной, поликристаллической или монокристаллической. В современном планарном КМОП-процессе эти технологии повышают функциональную и экономическую эффективность, надежность и миниатюризацию пассивных и активных элементов.

Формирование диэлектрических слоев на поверхности кремния назначено для пассивации поверхности пластины после создания в ней элементов микросхемы. Наличие такого слоя препятствует адсорбции атомов из окружающей среды на поверхность пластины, тем самым исключается образование электропроводящих дорожек, шунтирующих *p*-*n*-переходы. Для этой цели применяются оксид и нитрид кремния. Диэлектрические слои из оксида и нитрида кремния используются при операции фотолитографии в качестве маскирующих покрытий. Диэлектрические слои необходимы также для создания МДП-транзисторов микросхем.

Получить пленку оксида кремния на поверхности кремниевой пластины можно используя методы термического окисления и химического осаждения. При термическом окислении рост пленки оксида кремния происходит за счет окисления кремния кислородом (сухое окисление) или парами воды (влажное окисление). Температура процесса находится в диапазоне 800−1300 °С. Чем выше температура, тем выше скорость роста пленки оксида кремния.

На скорость роста слоя оксида кремния влияет температура и окислительная среда, давление газа-окислителя. Повышение давления увеличивает концентрацию молекул окислителя, растворенных в приповерхностном слое, при этом увеличивается градиент концентрации молекул в слое оксида кремния и скорость диффузии. Окисление при повышенном давлении водяного пара позволяет получать оксидные пленки толщиной 2−3 мкм, что существенно при формировании изопланарных структур, приборов с зарядовой связью.

На скорость роста слоя оксида кремния оказывает влияние кристаллографическая ориентация кремниевой пластины. Окисление на пластине с ориентацией (111) происходит быстрее, чем с ориентацией (100). Влияние ориентации особенно заметно при относительно низких температурах. Зависимость скорости окисления от кристаллографической ориентации истолковывается – различным кристаллографическим направлениям пластины соответствует разное количество связей атомов кремния.

Существенное влияние на скорость роста слоя оксида кремния оказывает концентрация легирующей примеси в исходной пластине кремния. Это влияние обусловлено явлением сегрегации примеси на границе раздела оксид – кремний.

Прогресс в технологии термического окисления был достигнут при добавлении в окислительную среду хлора и хлорсодержащих компонентов, что позволило увеличить скорость окисления, улучшить стабильность электрических характеристик и повысить пробивное напряжение оксидных слоев. Увеличение скорости окисления обусловлено образованием механических напряжений в растущем слое оксида, что способствует увеличению скорости диффузии молекул окислителя. Улучшение качества оксидных

слоев обусловлено тем, что ионы хлора способны связать ионы натрия и калия, оказывающих очень негативное влияние на характеристики оксида.

В технологии микроэлектроники применяются также методы осаждения слоев оксида кремния путем пиролиза кремнийорганических соединений (тетраэтоксилана) и окисление силана. Для многих диффузантов проницаемость слоев из силана значительно меньше, чем слоев из оксида кремния. Это позволяет делать их более тонкими, что повышает разрешающую способность фотолитографии.

Используют также комбинации слоев типа оксида кремния − нитрида кремния. Получить слои из нитрида кремния можно методом прямого нитрирования поверхности кремния азотом, аммиаком или гидразином.

Слои из оксида алюминия используют в качестве изолирующих или защитных покрытий в МДП-структурах. Оксид алюминия обладает повышенной радиационной стойкостью, имеет высокие электрические характеристики, высокую диэлектрическую проницаемость, что обеспечивает эффективное использование слоев в элементах памяти.

Слои из оксида алюминия получают методом анодного окисления предварительно нанесенного на пластину тонкого слоя алюминия, методом реактивного распыления алюминиевой мишени в кислородной плазме, распылением подложки из сапфира электронным или лазерным лучом в вакууме, пиролизом алюминийорганических соединений.

Литература

1. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Повышение эффективности микроэлектронной технологии при создании функционально-интегрированных элементов // Нано- и микросистемная техника. – 2022. – Т. 24. – № 5. – С. 237-240.

2. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Материаловедческо-технологический подход при формировании межсоединений в микроэлектронных приборных структурах // Нано- и микросистемная техника. – 2020. – Т. 22. – № 5. – С. 271-276.

3. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Технологические принципы формирования приборных структур с воспроизводимыми параметрами // Нано- и микросистемная техника. – 2020. – Т. 22. – № 9. – С. 489-492.

4. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Воспроизводимость параметров приборных структур в технологии интегральной электроники // В сборнике: Инновационные технологии в электронике и приборостроении. сборник докладов Российской научно-технической конференции с международным участием Физико-технологического института РТУ МИРЭА. – Москва. – 2020. – С. 158-160.

5. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Элементно-технологическая и конструктивная интеграции при создании микроэлек-

тронных приборных структур // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № 2 (95). – С. 108-113.

6 Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Формирование контактно-металлизационных систем с улучшенными технологическими параметрами // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № 2 (95). – С. 122-125.

7. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Контактно-металлизационные системы при создании элементов интегральной электроники // В сборнике: Инновационные технологии в электронике и приборостроении. сборник докладов Российской научно-технической конференции с международным участием Физико-технологического института РТУ МИРЭА. – Москва. – 2020. – С. 154-157.

DEPOSITION OF OXIDE LAYERS IN MICROELECTRONICS TECHNOLOGY

Mustafaev M.G., Mustafaeva D.G., Mustafaev G.A.

North Caucasus Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz

Technological principles of manufacturing device structures with reproducible parameters are ensured by creating dielectric layers during the formation of integrated electronics elements. The solution to problems of optimal design and production of the product is carried out in a comprehensive manner based on the consideration of production and technological factors.

УДК 621.315 25-22

ПЛЕНОЧНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПРИ СОЗДАНИИ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР

Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.

Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ

Проанализирован процесс изготовления элементов приборных структур полупроводниковых приборов и интегральных микросхем, применения тонкопленочной технологии, определены требования к материалам, изоляционным пленкам и к минимизации паразитных связей между элементами.

Современный этап развития электронных средств характеризуется повышением функциональной сложности, уровня интеграции, быстродействия и тепловыделения элементной базы, что проводит к увеличению сложности конструкций и повышению требований к их производству, эффективности работы и т.п. В последние время прослеживается тенденция усиления взаимосвязи решений схемотехнических вопросов проектирования и конструкторско-технологических, которые существенно влияют на параметры изделий. Решение задач по оптимальному проектированию и производству изделий осуществляется комплексно на основе учета технологических и производственных факторов [1-3].

В этих условиях от разработчиков электронных средств требуются знания физико-химических основ процессов изготовления компонентов, плат, материалов, их установки и пайки и т.д. [4, 5].

При изготовлении полупроводниковых приборов и интегральных микросхем в том или ином объеме используется технологический процесс нанесения тонких пленок в вакууме – тонкопленочная технология.

Основными конструктивными и схемными элементами и компонентами как пленочных, так и толстопленочных гибридных микросхем являются: диэлектрическая подложка, пленочные резисторы, конденсаторы, проводники и контактные площадки. Диэлектрические пленки в толстопленочных микросхемах применяются в качестве диэлектриков конденсаторов, межслойной изоляции, защитных слоев.

Для обеспечения заданных электрических параметров интегральных микросхем материал подложки соответствен: высоким коэффициентом теплопроводности; высокой механической прочностью; высокой химической инертностью к осаждаемым материалам; стойкостью к воздействию высокой температуры в процессах формирования элементов; стойкостью к воздействию химических реактивов в процессе подготовки поверхности подложки перед нанесением пленок, при электрохимических обработках и химическом осаждении пленок; способностью к хорошей механической обработке.

Полупроводниковая интегральная микросхема имеет элементы, сформированные в объеме полупроводниковой пластины и на ее поверх-

ности. Для получения в полупроводнике областей с заданной концентрацией примесей применяют различные способы: легирование из расплава, сплавление, диффузия, эпитаксия, ионное легирование.

При диффузии поверхностная концентрация и профиль распределения примеси определяются температурой процесса, а при ионном легировании эти два параметра можно изменять независимо друг от друга. Профиль определяется энергией ионов, а концентрация – дозой облучения.

Для сведения к минимуму паразитных связей между элементами применяют метод электрической изоляции, путем создания локальных хорошо изолированных друг от друга областей полупроводника. Для диэлектрической изоляции используют пленки диоксида кремния, алюминия и нитрида кремния.

При нанесении тонких пленок используют методы генерации потока частиц в вакууме: термическое испарение и ионное распыление. Выбор метода нанесения пленки зависит от природы и сортамента используемого материала, вида и состояния обрабатываемых поверхностей, требования к чистоте и толщине пленки, производительность процесса.

Металлические пленки в интегральных схемах применяют в качестве проводников, контактных площадок, адгезионного подслоя, защитного слоя. Электрофизические свойства проводников и контактных площадок в значительной степени определяются свойствами применяемых материалов, к которым предъявляется требования: низкое удельное сопротивление; хорошая адгезия к подложке; высокая антикоррозийная стойкость; обеспечение низкого и воспроизводимого переходного сопротивления контакта; возможность присоединения выводов навесных компонентов и проволочных перемычек, совместимость технологии нанесения проводников и контактных площадок с технологией изготовления других элементов микросхем.

Проводники и контактные площадки в интегральных микросхемах выполняют многослойными. Для улучшения адгезии токопроводящих материалов к подложке напыляют подслой. В качестве материала подслоя используют: хром, нихром. В качестве защиты проводников и контактных площадок от внешних воздействий применяют: ванадий, никель, хром.

Изоляционные пленки, применяемые для изготовления диэлектрических слоев, обладают высоким значением диэлектрической проницаемости; минимальным температурным коэффициентом емкости; минимальными потерями; влагостойкостью и теплостойкостью; хорошей адгезией к подложке; высокой электрической прочностью.

Тонкие пленки применяются в качестве функциональных, упрочняющих, светоотражающих, проводящих и диэлектрических материалов при формировании контактов, изготовлении печатных плат, элементов интегральных схем в микроэлектронике, создании светофильтров, элементной базы оптоэлектроники, в современных литографических процессах [6-9].

Развитие химических методов получения тонких прозрачных пленок положило начало новым, более простым и экономичным технологиям осаждения тонкопленочных материалов для различного назначения.

Пленочные технологии лежат в основе многих методов приготовления наноструктур. Гетероструктуры, сверхрешетки создаются на основе тонких полупроводниковых пленок. Диэлектрические, в том числе оксидные пленки, выступают в качестве защитных, изолирующих покрытий. Металлические пленки обычно используют в качестве проводников в электронных изделиях.

Для фиксации пленки применяют подложку. Подложка не должна взаимодействует с пленкой, но обеспечивает механическую жесткость пленки и необходимую адгезию.

Подложки подбирают таким образом, чтобы их свойства позволяли получать пленку с необходимыми характеристиками. В подложке должны отсутствовать дефекты, у нее должна быть атомно-гладкая поверхность. Они обладают высокой твердостью, определенной стойкостью к воздействию механических и термических напряжений. Подложки из благородных металлов или полимерные подложки обладают стойкостью к воздействию химических реагентов.

Монокристаллические подложки, изготовленные определенным образом, используют для приготовления эпитаксиальных монокристаллических пленок и при изготовлении различных устройств. Свойства приготавливаемых пленок во многих случаях неразрывно связаны со свойствами подложек для них.

Поверхность подложки должна быть оптически гладкой с минимальной шероховатостью, минимальной волнистостью и идеальной плоскостностью.

При исследовании пленок выявляются дефекты с помощью просвечивающего электронного микроскопа высокого разрешения, наблюдаются точечные, линейные дефекты, поры и трещины. С помощью растрового электронного микроскопа, атомного силового микроскопа, сканирующего туннельного микроскопа наблюдаются дислокации, поры, трещины, включения других фаз и т.д. Рентгеновский дифракционный анализ – для получения интегральной оценки наличия дефектов в пленке.

Для измерения толщин пленок применяют эллипсометрию – метод неразрушающего измерения толщины прозрачной пленки по поляризационным характеристикам отраженного света от подложки. На образец падает луч линейно поляризованной плоской волны. После отражения от подложки и пленки изменяется характер поляризации света. По изменению поляризации отраженного луча от подложки можно оценить толщину пленки.

Для контроля за протеканием процесса осаждения пленок используются вакуумметры, измерители толщины пленок, различные анализаторы качества и состава растущей пленки.

Для большей эффективности осаждения пленок используются ионные установки с дополнительной термоэмиссией электронов в плазму над мишенью. Используют также ионные установки с высокочастотным источником, которые позволяют распылять не только проводящие материалы, но и диэлектрики, установки для реактивного приготовления нитридов и оксидов в атмосфере аргона с азотом или кислородом соответственно.

Для приготовления пленок применяют лазеры: эксимерные, твердотельные и CO_2-лазеры. Твердотельные лазеры применяются также и в технологических процессах (сварка, резка, пайка), оптической локации и связи, оптоэлектронике и др. В качестве оборудования используются химические, полупроводниковые, электроразрядные и другие лазеры.

Изделия из пленок формируются посредством нанесения последующих слоев на исходный образец или при помощи их технологической обработки.

Современная технология производства изделий интегральной электроники основана на двух основополагающих принципах: последовательном формировании тонких слоев или пленок при определенных режимах и создании топологических рисунков с помощью процессов литографии.

Повышение степени интеграции реализуется как за счет уменьшения размеров элементов и компонентов, так и за счет увеличения размера кристалла микросхемы. Оба эти способа успешно реализуются на практике.

Основные усилия разработчиков интегральных микросхем направлены на усовершенствование уже сложившихся принципов создания интегральных микросхем, на улучшение их электрических и эксплуатационных характеристик. Работы ведутся, главным образом, в направлении повышения быстродействия микросхем и их степени интеграции. Решение этих проблем связывают с усовершенствованием технологии получения микроэлектронных структур минимально возможных размеров.

Обработку поверхности полупроводниковых пластин подразделяют на очистку и травление. При очистке удаляют только загрязнения поверхности. При травлении происходит удаление поверхностных слоев пластины или технологических слоев. Травление в жидких средах представляет собой процесс переноса вещества из твердой фазы в жидкую, т.е. растворение вещества подложки или технологических слоев химическими реактивами, именуемыми травителями.

Процесс химического травления обеспечивает:

– удаление с поверхности полупроводниковой подложки механически нарушенного слоя;

– снятие с полупроводниковой подложки слоя исходного материала определенной толщины;

– локальное удаление материала подложки или технологического слоя с определенных участков поверхности;

– создание определенных электрофизических свойств обрабатываемой поверхности подложки;

– выявление структурных дефектов кристаллической решетки полупроводниковой подложки;

– получение мезаструктур.

Геометрические параметры и качество обработки поверхности подложек определяются рядом технологических операций механической обработки полупроводниковых материалов.

Снижение загрязнений поверхности полупроводниковых подложек является важной задачей в технологии интегральной электроники, которая осуществляется на всех стадиях технологического цикла изготовления интегральных микросхем начиная от изготовления подложек. Данную задачу решают в трех аспектах:

– использование эффективных методов очистки подложек перед выполнением ответственных технологических операций;

– исключение попадания загрязнений на поверхность подложек из воздушной среды производственных помещений путем реализации техпроцесса в чистых производственных помещениях;

– исключение попадания загрязнений на поверхность подложек при выполнении операций в технологических установках путем использования чистых технологических сред и тщательной подготовки технологического оборудования.

Для обеспечения заданных электрических параметров интегральных микросхем материал подложки должен обладать назначенными физико-химическими и механическими свойствами. Для улучшения адгезии токопроводящих материалов к подложке напыляют подслой. В качестве защиты проводников и контактных площадок от внешних воздействий применяют защитное покрытие.

Литература

1. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Повышение эффективности микроэлектронной технологии при создании функционально-интегрированных элементов. // Нано- и микросистемная техника. – 2022. – Т. 24. – № 5. С. 37-40.

2. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Воспроизводимость параметров приборных структур в технологии интегральной электроники. // В сборнике: Инновационные технологии в электронике и приборостроении. сборник докладов Российской научно-технической конференции с международным участием Физико-технологического института РТУ МИРЭА. – Москва. – 2020. – С. 158-160.

3. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Технологические принципы формирования приборных структур с воспроизводимыми параметрами. // Нано- и микросистемная техника. – 2020. – Т. 22. – № 9. – С. 89-92.

4. Николаев И.М., Филинюк Н.А. Интегральные микросхемы и основы их проектирования. – М.: Радио и связь, 1992. – 424 с.

5. Петров К.С. Радиоматериалы, радиокомпоненты и электроника. – СПб: Питер, 2005 – 528 с.

6. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Материаловедческо-технологический подход при формировании межсоединений в микроэлектронных приборных структурах. // Нано- и микросистемная техника. – 2020. – Т. 22. – № 5. – С. 271-276.

7. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Элементно-технологическая и конструктивная интеграции при создании микроэлектронных приборных структур. // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № 2 (95). – С. 108-113.

8. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Формирование контактно-металлизационных систем с улучшенными технологическими параметрами. // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – №2 (95). – С. 122-125.

9. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Контактно-металлизационные системы при создании элементов интегральной электроники. // В сборнике: Инновационные технологии в электронике и приборостроении. сборник докладов Российской научно-технической конференции с международным участием Физико-технологического института РТУ МИРЭА. – Москва. – 2020. – С. 154-157.

FILM TECHNOLOGY IN THE CREATION OF ELEMENTS OF INSTRUMENT STRUCTURES

Mustafaev M.G., Mustafaeva D.G., Mustafaev G.A.

North Caucasus Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz

The process of manufacturing elements of device structures of semiconductor devices and integrated circuits, the use of thin-film technology are analyzed, requirements for materials, insulating films and for minimizing parasitic connections between elements are determined.

УДК 621.315 25-23

ЭЛЕМЕНТЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ МИКРОСХЕМ

Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А.

Северо-Кавказский горно-металлургический институт, г. Владикавказ

Пленочные технологии обнаруживаются стержневыми во всех процессах изготовления электронных устройств и их элементов, которые применяются для получения пленок металлов, полупроводников и диэлектриков, а также для формирования пленочных приборных структур.

В полупроводниковых микросхемах электрические межэлементные связи осуществляются с помощью пленочных проводников. Материал пленочных проводников обеспечивает низкоомный контакт к кремниевым электродам активных и пассивных элементов схемы, обладает хорошим сцеплением с диэлектриком и допускает разделение пленки на узкие полоски с большой точностью, а также металлургически совместимы с металлами, которые применяются для присоединения внешних выводов к контактным площадкам. Контактно-металлизационные системы играют существенную роль при создании элементов интегральной электроники [1-7].

Пленочные проводники соприкасаются с участками кремниевых структур через окна в слое термически выращенной оксидной пленки, образуя электрический контакт. Для осуществления электрической связи между элементами микросхемы формируют невыпрямляющие омические контакты, которые обладают высокой электропроводностью, теплопроводностью, механической прочностью. Материал контакта имеет хорошую адгезию к кремнию и оксиду, химически инертен, устойчив к воздействию окружающей среды. Исходя из этого материалом для контактов, коммутационных шин и контактных площадок является алюминий, который обладает высокой электропроводностью, имеет хорошую адгезию к кремнию и SiO_2, пластичен, технологичен, образует низкоомный контакт к кремнию *p*- и *n*-типов.

Коммутационные проводники наносят непосредственно на термический оксид кремния. Минимальная ширина дорожек определяется возможностями литографии.

Многоуровневая разводка позволяет сократить площадь, занимаемую схемой за счет уменьшения площади, отводимой под разводку и увеличение плотности размещения элементов, сохранить размеры кристаллов в приемлемых для технологии пределах при значительном увеличении степени интеграции, уменьшить длину межэлементных связей в микросхеме и задержку распространения сигналов.

Изоляция одного уровня металлических проводников от другого осуществляется при помощи диэлектрика фосфор силикатного стекла, полимерных пленок, формируемых путем нанесения полиамидного лака.

Для предотвращения разрывов и утончений в металлических пленках принимают конструктивные и технологические меры, осуществляется сглаживание ступенек в диэлектрике на пересечениях металлических дорожек разных уровней; увеличивается толщина металлических проводников более высоких уровней металлизации.

Пленки SiO_2 в многоуровневой разводке осаждаются из газовой фазы путем разложения кремнийорганических соединений или в результате реакции моносилана с кислородом. В качестве диэлектрика применяют пленку AI_2O_3. Пленки AI_2O_3 отличаются от SiO_2 высокой плотностью, лучшими изолирующими свойствами, мало чувствительны к воздействию атмосферы, паров воды, обладают более высокой радиационной стойкостью.

Межуровневая изоляция из полиимида применима с высокой плотностью упаковки элементов. После нанесения первого уровня металлизации и получения в ней рисунка с помощью фотолитографии на поверхность подложки наносят слой полиимидного лака и проводят термообработку для его полимеризации.

Для получения последующих уровней металлизации процесс повторяется. Полиимидная изоляция отличается хорошими физическими, химическими и электрическими свойствами. Полиимидные пленки по сравнению с пленками оксида кремния имеют более высокую адгезию к алюминию и другим металлам, которая сохраняется после термоциклирования и испытаний на термоудар. Растрескивание пленок полиимида в отличие от пленок оксида кремния не наблюдается.

Полиимидные пленки отличаются высокой радиационной стойкостью. Многоуровневая разводка с полиимидным диэлектриком позволяет уменьшить число отказов микросхем из-за разрывов металлизации на ступеньках диэлектрика.

В микросхемах повышенной надежности используют коммутационные проводники, контактные площадки, состоящие из нескольких слоев различных материалов.

Качество алюминиевой металлизации можно улучшить путем совместного ее использования с другими материалами, из которых используют переходные металлы, молибден, палладий. Молибден и палладий в таких двухслойных системах металлизации играют роль контактного слоя.

Контактный слой в многослойных системах металлизации, обеспечивает омический контакт к кремнию любого типа проводимости в широком диапазоне легирующих кремний примесей *n*- или p-типа. Контактный слой обеспечивает прочный контакт с кремнием и с материалами вышележащих слоев.

Материал контактного слоя имеет малую растворимость и малую диффузионную подвижность в кремнии, низкое переходное сопротивление в контакте с кремнием, способность к восстановлению SiO_2, хорошую адгезию к SiO_2.

В качестве материала контактного слоя используют молибден, хром, никель, титан, платину, палладий, иридий. Молибден обеспечивает получение хорошего омического контакта к кремнию обоих типов проводимости, имеет высокую электропроводность, не взаимодействует с алюминием и золотом, хорошо травится в процессе фотолитографии.

Хром отличается хорошей адгезией к пленке SiO_2. Как и алюминий, он активно восстанавливает SiO_2. Никель технологичен, легко наносится из растворов электролитов. Его можно наносить термовакуумным напылением, катодным распылением, разложением паров карбонила. Титан обладает высокой адгезией к кремнию, оксиду кремния и к фосфоросиликатному стеклу, химически не реагирует с кремнием, не образует интерметаллических соединений. Пленка двуокиси титана имеет невысокое сопротивление.

Адгезионный слой обеспечивает высокую прочность сцепления многослойной разводки с пленкой SiO_2 и с контактным слоем. Материалами адгезионных слоев могут быть титан, молибден, хром и другие переходные металлы. Если данные материалы используются в качестве контактных слоев, они же одновременно выполняют функции адгезионного слоя.

Проводящий слой, наносимый поверх контактного и адгезионного, выполняет функции разводки, имеет низкое удельное сопротивление, обеспечивает надежное контактирование с внешними выводами микросхемы.

В многослойных системах разводки предусматривают буферный слой, который предотвращает образование интерметаллических соединений между верхним и нижним слоями, препятствует диффузии металла одного слоя в другой, приводящей к ухудшению механической прочности и изменению сопротивления контакта. В качестве буферного слоя применяют молибден, никель, платину, палладий.

Завещающим из наносимых на интегральную микросхему, в том числе на металлизацию, слоев является диэлектрический защитный слой, который обеспечивает ее защиту от внешних воздействий в межоперационный период в процессе присоединения выводов и размещения в корпус.

Хорошими свойствами обладают трехслойные системы металлизации: титан - платина - золото, титан- молибден - золото, силицид платины - платина - золото и четырехслойные: хром - титан - платина - золото. Слой титана имеет хорошую адгезию к хрому и платине и служит для их прочного сцепления. Слой платины применяется для улучшения адгезии пленки золота к титану.

При конструировании многослойной многоуровневой разводки особое внимание уделяют правильному выбору материалов контактирующих друг с другом слоев, а также выбору соотношения толщин слоев разводки, методов и режимов их нанесения с целью получения разводки с высоким уровнем электропроводности, малыми внутренними напряжениями и согласованными коэффициентами термического расширения.

Контактная площадка интегральной микросхемы (металлизированный участок на кристалле) служит для присоединения внешних выводов, а также для контроля ее электрических параметров. Контактные площадки располагают по периферии полупроводникового кристалла. Они представляют собой расширенные области коммутационных пленочных проводников и формируются одновременно с разводкой. С целью предотвращения замыканий контактных площадок на подложку в случае нарушения целостности оксида в процессе присоединения внешних выводов под каждой контактной площадкой формируется изолированная область.

Литература

1. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Повышение эффективности микроэлектронной технологии при создании функционально-интегрированных элементов // Нано- и микросистемная техника. – 2022. – Т. 24. – № 5. – С. 237-240.

2. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Материаловедческо-технологический подход при формировании межсоединений в микроэлектронных приборных структурах // Нано- и микросистемная техника. – 2020. – Т. 22. – № 5. – С. 271-276.

3. Мустафаев М.Г., Мустафаев Г.А., Мустафаева Д.Г. Технологические принципы формирования приборных структур с воспроизводимыми параметрами // Нано- и микросистемная техника. – 2020. – Т. 22. – № 9. – С. 489-492.

4. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Элементно-технологическая и конструктивная интеграции при создании микроэлектронных приборных структур // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № 2 (95). – С. 108-113.

5. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Формирование контактно-металлизационных систем с улучшенными технологическими параметрами // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № 2 (95). – С. 122-125.

6. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Контактно-металлизационные системы при создании элементов интегральной электроники // В сборнике: Инновационные технологии в электронике и приборостроении. сборник докладов Российской научно-технической конференции с международным участием Физико-технологического института РТУ МИРЭА. – Москва. – 2020. – С. 154-157.

7. Мустафаев М.Г., Мустафаева Д.Г., Мустафаев Г.А. Воспроизводимость параметров приборных структур в технологии интегральной электроники // В сборнике: Инновационные технологии в электронике и приборостроении. сборник докладов Российской научно-технической конференции с международным участием Физико-технологического института РТУ МИРЭА. – Москва. – 2020. – С. 158-160.

ELEMENTS OF SEMICONDUCTOR INTEGRAL CIRCUITS

Mustafaev M.G., Mustafaeva D.G., Mustafaev G.A.

North Caucasus Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz

Film technologies are found to be pivotal in all processes of manufacturing electronic devices and their elements, which are used to obtain films of metals, semiconductors and dielectrics, as well as to form film device structures.

УДК 621.382.28 25-33

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПЛЕНОК ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО Si И НИТРИДА КРЕМНИЯ Si_3N_4 ДЛЯ ГЕТТЕРИРОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ В Si ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ

Мустафаев Г.А.[1], Мустафаев А.Г.[2]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2]Дагестанский государственный университет народного хозяйства, Махачкала

В работе исследована эффективность пленок поликристаллического Si (поли-Si), Si_3N_4 и их сочетания для геттерирования дефектов в Si эпитаксиальных структурах. Показано, что наилучшая эффективность геттерирования получена с двухслойной пленкой поли-Si/Si_3N_4 на тыльной стороне, а изменение плотности дефектов коррелирует с временем перехода от глубокого обеднения в состояние инверсии. Показано, что участки эпитаксиальной пленки без геттерирующей пленки на тыльной стороне образца во всех случаях характеризовались большой плотностью дефектов.

Для обеспечения приемлемого выхода годных структур в технологии полупроводниковых приборов и ИС очень важно высокое качество эпитаксиальных пленок Si. Разработаны различные методики геттерирования дефектов в Si [1-5]; большинство этих методик использует образование напряжений и нарушений кристаллической решетки на тыльной стороне подложки с последующим высокотемпературным отжигом, в процессе которого дефекты (и нежелательные примеси) мигрируют из эпитаксиальной пленки к тыльной стороне подложки и там захватываются в слое искусственно созданных нарушений. Методы оценки эффективности геттерирования включают декорирование дефектов с помощью выявляющих травителей, либо путем анодного травления [6]. Чисто химическое травление одинаково хорошо выявляет разнородные дефекты в объеме монокристаллического материала – дефекты упаковки (образующиеся как в процессе эпитаксии, так и при последующем окислении), различные неоднородности и дислокации скольжения; анодное травление позволяет выявлять электрически активные дефекты. Разные методы выявляющего травления – в сочетании с обследованием с помощью оптического либо интерференционного микроскопа – весьма наглядно показывают эффективность геттерирования, однако наилучшей чувствительностью характеризуется метод измерения времени удержания заряда на МДП структурах.

В работе исследована эффективность пленок поликристаллического Si(поли-Si), Si_3N_4 и их сочетания для геттерирования дефектов в Si эпитаксиальных структурах. Эпитаксиальные пленки выращивали путем пиролиза смеси $SiCl_4$-H_2 при температуре 1050 °C; в качестве подложек использовали пластины Si с ориентацией (100) n+ -либо p- типа, диаметром 76 мм и

толщиной 380 мкм. Перед загрузкой в реактор подложки обрабатывали так, чтобы обеспечить большую концентрацию дефектов в эпитаксиальных пленках. Толщину пленок варьировали в пределах 1,3-3,5 мкм; для легирования использовали AsH_3, удельное сопротивление пленок составляло 0,2–2,0 Ом•см.

Перед выявляющим травлением [6] образцы в течение 10 с обрабатывали в BHF, а затем в течение 40–120 с проводили травление. Электрически активные дефекты выявляли с помощью методики, рассмотренной в работе [6], в 5 % растворе HF при напряжении смещения 3 В. Тыльную сторону образцов делили на четыре сегмента: на половине площади выращивали пленку поли-Si (500 нм, газофазное осаждение при температуре 650 °С), затем маску на образце поворачивали на 90° и выращивали пленку Si_3N_4 (70 нм, газофазное осаждение при температуре 700 °С). В итоге один сегмент не имел никакой геттерирующей пленки, на другом была пленка поли-Si, на третьем – двухслойная пленка поли- Si/Si_3N_4 и на четвертом – пленка Si_3N_4. После термообработки (для отжига геттерирующих пленок) выполняли окисление эпитаксиальной пленки (50 нм, температура 1000 °С, сухой O_2) и на этом окисле формировали Al электроды МДП структур. Для контроля использовали пластины без эпитаксиальной пленки.

Участки эпитаксиальной пленки без геттерирующей пленки на тыльной стороне образца во всех случаях характеризовались большой плотностью дефектов (до 10^7 $см^{-2}$) типа мелких бугорков, выявляемых путем химического и анодного травления, до окисления и дефектов упаковки (иногда в сочетании с мелкими бугорками) после процесса окисления в атмосфере водяного пара.

На рис. показаны кривые зависимости тока в процессе анодного травления от времени для двух образцов n-пленок на n^+-подложках и одного образца n-пленки на *p*-подложке; для травления был открыт участок диаметром 50 мм. Относительно большой начальный ток обусловлен наличием поверхностных дефектов. Далее для n/p образца анодный ток устанавливался на постоянном уровне, а для n/n^+-образца ток сначала уменьшался, а затем вновь резко увеличивался, что отражает протравливание эпитаксиальной пленки до подложки. После анодного травления можно было наблюдать как мелкие бугорки, так и значительно более крупные объекты – дискообразные, обычно с небольшой квадратной структурой в центре, плотность которых обычно не превышала 10^2 $см^{-2}$, эти крупные объекты соответствуют эпитаксиальным дефектам упаковки, они наблюдались на всех образцах – до и после окисления в атмосфере водяного пара.

Наилучшая эффективность геттерирования получена на участках с двухслойной пленкой поли-Si/Si_3N_4 на тыльной стороне, причем переходная зона от области без геттерирующей пленки к бездефектной области имеет ширину всего ~ 0,5 мм; существование этой зоны можно объяснить неступенчатым профилем края геттерирующей пленки. Границу между де-

фектной и бездефектной областями можно легко обнаружить невооруженным глазом, рассматривая образец на отсвет. При этом ясно видно по степени зеркальности, что поли-Si дает много лучшие результаты, чем Si_3N_4.

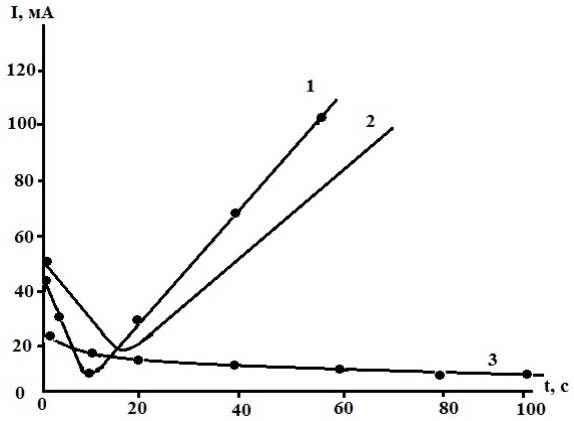


Рис. Зависимости тока в процессе анодного травления от времени для двух образцов n-пленок на n+ - подложках и одного образца n -пленки на p- подложке: 1,2- n/n+,3- n/p

Время T_R перехода от глубокого обеднения в состояние инверсии связано с временем жизни носителей r выражением

$$r = \frac{n_i}{8N_d}\frac{C_f}{C_O}\left(1+\frac{C_i}{C_f}\right)T_R,$$

где n_i - собственная концентрация носителей, N_d - концентрация доноров в подложке, C_O - емкость слоя окисла, C_i - начальная емкость в глубоком обеднении, C_f - конечная емкость в сильной инверсии.

Результаты исследований демонстрируют действие геттерирующих пленок. Высокий процент малых значений T_R (менее 1с) свидетельствует о большой исходной плотности микродефектов в образцах: даже в области наиболее эффективного геттерирования - с двухслойной пленкой поли-Si/Si_3N_4 - значения T_R более 1 с не получены для ~ 13% структур.

Выявляющее травление образцов с МДП структурами (после электрических измерений слой окисла удаляли сухим травлением, используя Al электроды в качестве маски, а затем выполняли травление) показало корреляцию плотности дефектов и величины T_R. Изменение плотности дефектов от T_R показывает, что практически для получения T_R = 30 с (что соответствует времени жизни, генерируемых носителей ~10 мкс) требуется полное отсутствие дефектов на участке МДП структуры; наличие даже одного, любых размеров, электрически активного дефекта на участке МДП структуры значительно уменьшает величину TR. Вместе с тем, на участках МДП структур с малыми значениями T_R выявляющее травление не всегда позволяло обнаружить электрические дефекты.

Литература

1. Технология СБИС./ под ред. С. Зи. М.: Мир, 1986. – 454 с.
2. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Черкесова Н. В., Мустафаев А.Г. Способ изготовления полупроводникового прибора. Патент 2680607 РФ, опубликовано 25.02.2019, Бюл. № 6.
3. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г. , Черкесова Н. В., Мустафаев А.Г. Способ изготовления полупроводниковых структур. Патент 2680606 РФ, опубликовано 25.02.2019,Бюл. № 6.
4. Курносов А.И. Юдин В.В. Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных микросхем - М.: Высшая школа, 1986. 315 с.
5. Зебрев Г.И. Физические основы кремниевой наноэлектроники: учеб. пособие для вузов М.: Лаборатория знаний, 2020,243 с.
6. Холодкова, Н.В., Шикова Т,Г. Технология материалов электронной техники: лабораторный практикум. Иван. гос.хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2013 – 181 с.

EFFICIENCY OF POLYCRYSTALLINE SI AND SILICON NITRIDE Si_3N_4 FILMS FOR GETTERING DEFECTS IN SI EPITAXIAL STRUCTURES

Mustafaev G.A.[1], Mustafaev A.G.[2]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]Dagestan State University of National Economy, Makhachkala

The paper studies the efficiency of polycrystalline Si (poly-Si), Si_3N_4 and their combinations for defect gettering in Si epitaxial structures. It is shown that the best gettering efficiency is obtained with a two-layer poly-Si/Si_3N_4 film on the back side, and the change in defect density correlates with the time of transition from deep depletion to the inversion state. It is shown that epitaxial film areas without a gettering film on the back side of the sample in all cases were characterized by a high defect density.

УДК 621.382.3 25-34

ТЕХНОЛОГИЯ СОЗДАНИЯ КМОП-СТРУКТУР С ПОВЫШЕННОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ ДОНОРНОЙ ПРИМЕСИ ПОД СЛОЕМ ПОЛЕВОГО ОКИСЛА

Здравомыслов Д.М.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В работе разработана технология создания структур с повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла и проведено исследование влияние повышенной концентрацией примеси под слоем полевого окисла на электрические параметры КМОП-ИС. Показано, что увеличение дозы имплантированных ионов приводить к уменьшению поверхностного сопротивления области повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла и последовательного сопротивления коллектора.

В работе разработана технология создания структур с повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла, а также исследовано влияние повышенной концентрацией примеси под слоем полевого окисла на электрические параметры КМОП-ИС при фиксированной толщине кармана n-типа проводимости. В качестве исходного материала использовали p Si (100) с удельным сопротивлением 10 Ом·см. Карманы *n*-типа проводимости формировали с использованием имплантации ионов фосфора P и проведением последующего отжига [1-3]. Энергия и доза имплантируемых ионов составляли соответственно 160 кэВ и $2{,}5\cdot10^{12}$ $см^{-2}$. Поверхностное сопротивление сформированных карманов составляла 2,9 кОм/квадрат при глубине 1,5 мкм. Затем через маскирующее покрытие, включающее слои SiO_2, Si_3N_4 [4, 5] и фоторезиста производили травление Si на глубину 0,3 мкм. Полученная канавка ослабляет отрицательное влияние повышенной концентрации примеси под слоем полевого окисла на величины емкости *p*-МОП. После удаления фоторезиста на поверхность канавки наносили тонкий спой окисла [6]. Затем формировали новую фоторезистную маску и проводили повторную имплантацию ионов фосфора P с цепью создания внутри *n*-кармана повышенной концентрации примеси под слоем полевого окисла области. После повторной имплантации глубина pn- перехода, ограничивающего n -карман, достигала 2,2 мкм. Затем наращивали слой полевого окисла по стандартной технологии [7].

Далее следовали технологические операции, используемые при создании КМОП-ИС [7]. Профили распределения концентрации представлены на рис. 1.

На рис. 2 приведены графики зависимости поверхностного сопротивления (1) повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла и последовательного сопротивления (2) коллектора биполярного транзистора от дозы имплантированных ионов.

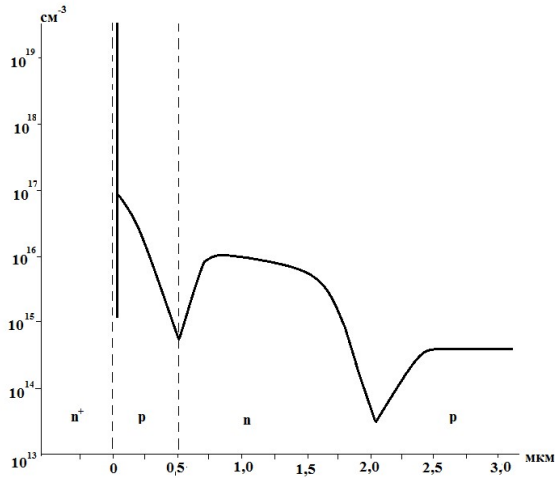


Рис. 1. Профили распределения концентрации

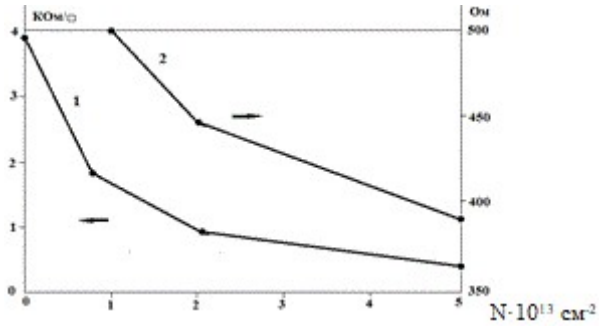


Рис. 2. Зависимости поверхностного сопротивления (1) повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла и последовательного сопротивления (2) коллектора биполярного транзистора от дозы имплантированных ионов

Из приведенных графиков следует, что увеличение дозы имплантированных ионов от $8\cdot10^{12}$ до $5\cdot10^{13}$ см$^{-2}$ приводит к уменьшению поверхностного сопротивления области повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла до 0,4 кОм/квадрат и последовательного сопротивления коллектора от 500 до 390 Ом. Следовательно, достигнутое уменьшение сопротивления приводит к существенному снижению величины последовательного сопротивления коллектора. Максимальные токи, которыми способны управлять полученные ИС, равны 60 и 36 мА при дозах имплантации ионов легирующей примеси в области повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла $8\cdot10^{12}$ и $5\cdot10^{13}$ см$^{-2}$, соответственно. При отсутствии повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла максимальное значение тока аналогичных ИС равнялось 23 мА. Такое увеличение максимального значения рабочего тока можно объяснить тем, что повышенная концентрация донорной примеси под слоем полевого окисла выполняет функции защитного кольца, а также способствует ослаблению боковой диффузии примеси из *n*-кармана. Увеличение дозы легирования повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла сопровождалось ослаблением влияния утечек на параметры БиКМОП ИС. При использовании повышенной концентрации донорной примеси под слоем полевого окисла наблюдалось уменьшение сопротивления между *p*-МОП-ПТ и биполярным транзистором, расположенными в одном *n*-кармане, следствием чего являлось как снижение утечек, так и уменьшение последовательного сопротивления коллектора биполярного транзистора.

Одна из проблем, возникающих вследствие создания повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла, обусловлена возрастанием емкостей исток-сток в *p*-МОП-ПТ и база-коллектор в биполярном транзисторе. Влияние этой емкости можно проиллюстрировать с использованием зависимости времени запаздывания сигнала от уровня ле-

гирования повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла. Графики указанной зависимости для КМОП-кольцевых генераторов приведены на рис. 3.

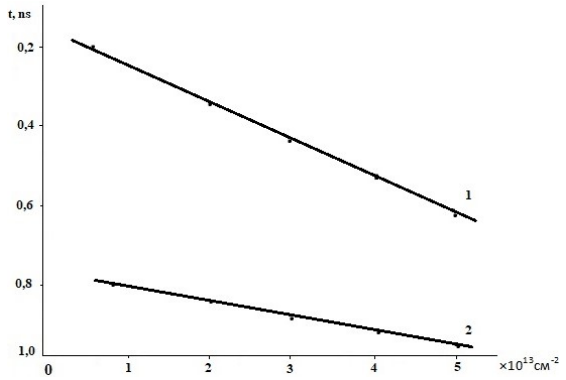


Рис. 3. Зависимости времени запаздывания сигнала от уровня легирования повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла: 1 – с канавкой, 2 – без канавки

Из приведенных графиков следует, что повышение дозы сопровождается увеличением времени запаздывания. Следует отметить, что ИС с канавкой отличалась меньшим временем запаздывания вследствие меньшего значения паразитной емкости.

В БиКМОП-ИС паразитная емкость повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла области при малых напряжениях питания являлась причиной снижения управляемости биполярного транзистора. Другая проблема, возникающая при формировании повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла, связана с уменьшением пробивного напряжения p^+n-перехода и возрастанием влияния эффектов короткого канала в р МОП-ПТ вследствие боковой диффузии фосфора Р в повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла области. Возрастание дозы имплантации при формировании повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла области от $8 \cdot 10^{12}$ до $5 \cdot 10^{13}$ см$^{-2}$ сопровождалось уменьшением пробивного напряжения база-коллектор биполярного транзистора от 19,5 до 10,5 В.

Следовательно, необходима оптимизация параметров процессов создания канавки и повышенной концентрацией донорной примеси под слоем полевого окисла области.

Литература

1. Юмагузин Ю.М., Корнилов В.М., Лачинов А.Н. Энергетические распределения электронов в системе металл–полимер–вакуум. // ЖЭТФ. – 2006. – Т. 130. – Вып. 2(8). – С. 303–308.
2. Партенский М.Б. Некоторые вопросы электронной теории металлической поверхности // Поверхность. – 1982. – № 10. – С. 15–32.
3. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г.,Мустафаев А.Г. Способ формирования легированных областей полупроводникового прибора. Патент. РФ. 2476955,.2013. Бюл. № 6

4. Мустафаев Г.А.,Хасанов А.И.,Мустафаев А.Г. ,Кутуев Р.А.Способ изготовления легированных областей. Патент 2654984 РФ, 2018, Бюл. № 15.
5. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Мустафаев А. Г.,Черкесова Н.В. Способ отжига полупроводниковых структур. Патент РФ 2567117, 2015 Бюл. № 31.
6. Mustafaev G.A., Mustafaev A. G., Cherkesova.N.V. Khasanov A.I.Thin Layers of Oxide Coating in Very-Large-Scale Integration // AER-Advances in Engineering Research volume 177(ISEES 2018) p.p. 377-379.
7. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Мустафаев А.Г., Черкесова Н.В., Способ получения нитрида кремния. Патент 2629656, 2017,Бюл. № 25.
8. Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Мустафаев А. Г.,Черкесова Н.В. Способ изготовления полупроводникового прибора. Патент 2752125 РФ, 2021, Бюл. № 21.
9. Зи С. Технология СБИС: М. Мир,1986, 453 с.

TECHNOLOGY FOR CREATING CMOS STRUCTURES WITH AN INCREASED CONCENTRATION OF DONOR IMPURITY UNDER A LAYER OF FIELD OXIDE

Zdravomyslov D.M.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

The paper develops a technology for creating structures with an increased concentration of a donor impurity under a layer of field oxide and studies the effect of an increased concentration of an impurity under a layer of field oxide on the electrical parameters of CMOS IC. It is shown that an increase in the dose of implanted ions leads to a decrease in the surface resistance of the area with an increased concentration of donor impurity under the field oxide layer and the sequential collector resistance.

УДК 538.9 25-36

СВОЙСТВА И ТЕХНОЛОГИЯ СВЯЗАННЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ В МЕЖЭЛЕКТРОДНОМ НАНОЗАЗОРЕ

Глуховской Е.Г., Жуков Н.Д., Гавриков М.В.

Саратовский госуниверситет, Саратов

Изготовлена и исследована органо-модифицированная упорядоченная слоистая (от одного до пяти слоев) наноструктура с трёхмерной плотной упаковкой на основе коллоидных наночастиц полупроводников InSb, PbS, CdSe и плёнок Ленгмюра-Блоджетт. По вольтамперным характеристикам (ВАХ) одноэлектронного транспорта в модели наноячейки с линейной цепочкой поперёк слоёв установлены лимитирующие процессы – эмиссионно-инжекционное туннелирование из зонда в наночастицу, движение в наночастице, определяемое установлением в ней электронного волнового процесса, туннелирование через нанозазор между наночастицами.

Научные и практические проблемы создания элементной базы для развивающихся в последние годы направлений наноэлектроники продолжают быть актуальными. Развитие технологий изготовления наноструктур сделало возможными исследования и разработки базовых элементов в виде систем упорядоченных квантовых точек в контакте с микро- и наноэлектродами так, что возможен электронный транспорт между всеми элементами системы [1 – 3]. Кроме прикладного значения этих исследований и таких элементов они вызывают большой научный интерес с точки зрения фундаментальных физических эффектов и теории происходящих в них процессов [4]. Даже относительно простые системы, включающие лишь несколько конфигуративно расположенных квантовых точек, демонстрируют большое число квантовых эффектов, не всегда имеющих прямые аналоги в объемных материалах, таких, как эффекты кулоновской блокады, одноэлектронной и квантовой проводимости, квантовой интерференции, Кондо-эффект в проводимости, особых зарядовых и магнитных упорядочений и неустойчивости, квантовых фазовых переходов и «призрачных» резонансов Фано.

Принципиальное значение имеют технологические способы изготовлений наноструктур как на основе традиционной микроэлектроники, так, в особенности, и новых приёмов молекулярной электроники. Эффект органо-модификации позволяет интегрировать и многослойно формировать неорганические наночастицы за счет усиления ван-дер-ваальсовых взаимодействий между цепями, что приводит к солюбилизации неорганических наночастиц и повышению сродства между ними [5].

Важным для этих исследований является многообразие вариантов нано-объектов и форм и способов их исполнений. В данной работе нами экспериментально исследованы и объяснены свойства электронной проводи-

мости линейно последовательно выстроенных от одной до пяти полупроводниковых коллоидных наночастиц (QP) в проводящем межэлектродном нанозазоре сканирующего зондового микроскопа (СЗМ). Исследованные наноструктуры представляют собой плёнки Ленгмюра-Блоджетт (ПЛБ), полученные переносом единичных монослоев наночастиц в органической матрице с поверхности водной субфазы на поверхность твердой подложки.

Эксперименты проведены на случайных выборках большого числа (более 200) образцов QP путём их коллоидного синтеза, ТЕМ-контроля формы и размеров нанокристаллов, электрон-рентгеновского контроля состава, ПЛБ-осаждения на диэлектрическую подложку с проводящим ITO-слоем, измерений вольтамперных характеристик (ВАХ) одиночных QP, и их линеек, в герметичной компактной камере сканирующего зондового микроскопа (СЗМ). Измерения ВАХ проводились на сканирующем зондовом микроскопе СЗМ SOLVERNano в условиях герметичности его камеры и величин нанозазора зонд-образец ~5 нм при полярности «минус» на зонде.

Формирование исследованной плёночной структуры проводилось методом ПЛБ, основанном на свойствах амфифильности молекул поверхностно-активных веществ (ПАВ) и самоорганизации их на границе раздела фаз «газ-жидкость», что позволяет получать плотно упакованный молекулярный монослой [6].

Для получения плёночной структуры с квантовыми точками использовалась установка KSV-Nima LB Trough KN2002, которая позволяет формировать, изучать и переносить плавающие монослои Ленгмюра (МС). МС формировались на поверхности водной субфазы в результате самоорганизации молекул органической матрицы – амфифильных молекул поверхностно-активных веществ (ПАВ). В качестве органической матрицы в нашем случае выступала арахиновая кислота. Рабочий раствор представлял собой смесь молекул органической матрицы и наночастиц различного состава. Для приготовления смеси готовили растворы арахиновой кислоты в хлороформе с концентрацией 10^{-3} М. Его смешивали с раствором QP, концентрация которых подбиралась экспериментально таким образом, чтобы на поверхности воды формировался истинный (толщиной в одну наночастицу) монослой. Как правило, в растворе присутствует некоторый избыток молекул стабилизатора – олеиновой кислоты, молекулы которой близки по строению к молекулам арахиновой кислоты, хорошо с ней смешиваются, что не мешает формированию плотно упакованного МС QP.

Для уточнения механических свойств МС и выявления условий формирования состояния плотной упаковки молекул и QP в ленгмюровском монослое его предварительно исследовали методом изотерм сжатия. Для этого раствор смеси ПАВ и наночастиц в хлороформе по каплям наносили на поверхность водной субфазы. Спустя время, необходимое для испарения растворителя, слой сжимали подвижными барьерами. Скорость дви-

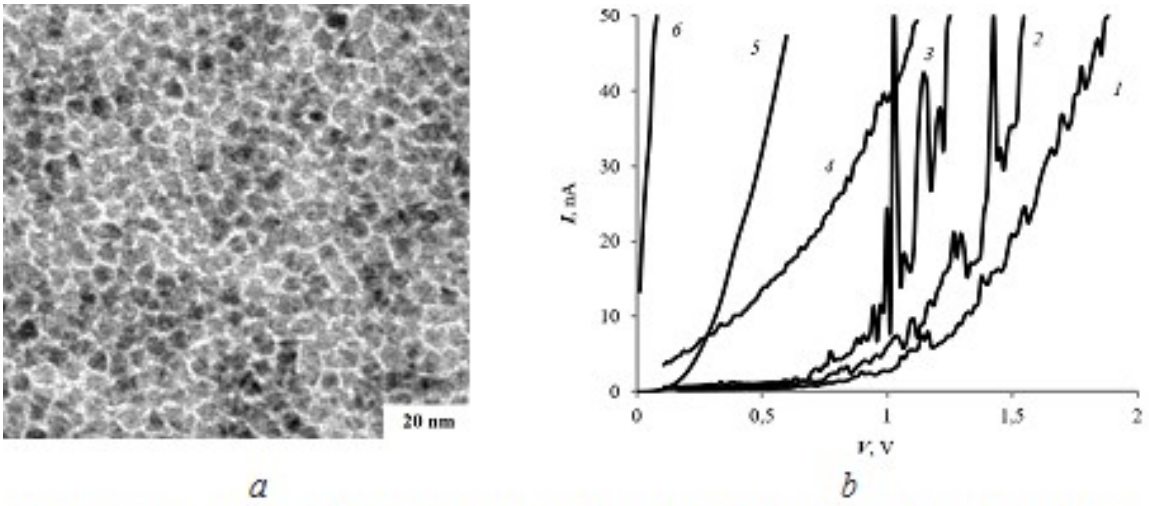
жения барьеров при сжатии составляла 20 мм/мин. При сжатии регистрировались положения барьеров (по которым рассчитывалась площадь, занимаемая МС) и поверхностное давление, измеряемое весами Вильгельми. Анализировали зависимости поверхностного давления от площади МС и определяли давление, необходимое для поддержания в момент переноса МС. В наших случаях для переноса МС выбирали давление в диапазоне 15–20 мН/м.

Контроль плотности упаковки наночастиц осуществлялся несколькими способами: по характеру зависимости поверхностного натяжения от степени сжатия, методами оптической микроскопии под углом Брюстера, сканирующей зондовой микроскопии, электронной просвечивающей микроскопии (ТЕМ).

При достижении нужной плотности плёночной матрицы с наночастицами их монослой переносится на поверхность твердой подложки с наноячейками – путем контакта поверхности горизонтально ориентированной подложки с монослоем, либо путем погружения вертикально ориентированной подложки через горизонтальную границу раздела газ-жидкость с сформированным на ней монослоем. Плотность наночастиц в монослое может быть подобрана таким образом, что они будут достаточно равномерно на расстоянии друг от друга, заданном путем подбора технологических параметров. Качественная оценка плотности межслойного расположения проводилась по воспроизводимости измеряемых ВАХ и данным аналогичных технологических исследований.

На рисунке 1, *a* приведена типичная картина ТЕМ-фрагмента, которая отражает плотно упакованную структуру монослоя QP. При этом зазор между наночастицами, в основном, не превышает десятой доли их размера. Таким образом, с помощью метода ЛБ удаётся сформировать органомодифицированную упорядоченную слоистую структуру с плотной упаковкой полупроводниковых коллоидных наночастиц.

На рисунке 1,*b* приведены типичные варианты ВАХ, имеющих, в том числе, особенности в виде отдельных пиков и квазипериодических пульсаций тока (кривые 1 – 4). ВАХ кривая 4 имеет наименьшие проявления особенности. Кривые 1 и 2 – тестовые, показывающие отсутствие наблюдаемых особенностей для простых вариантов.



a *b*

Рисунок 1 – *a*: типичный фрагментарный ТЕМ-снимок наночастиц на ПЛБ (на примере QP-InSb); *b* – типичные варианты ВАХ. 1 – 4: ВАХ образцов QP; 5 – ВАХ туннельно-эмиссионного тока микронных частиц InSb; 6 – ВАХ туннельного контакта к слою ITO

Различия по типам ВАХ (кривые 1 – 4) мы объясняем степенью проявления размерного квантования: кривые 1 и 4 – слабое, 2 и 3 – сильное. При этом при сильном влиянии проявляются резонансные свойства в виде резких пиков тока на ВАХ. Степень этих проявлений определяется типом полупроводника и размерами наночастиц – для разных случаев может быть оценена параметром $C \sim (m/m_0)^{-1} a_n^{-2}$ [7]. В табл. приведены рассчитанные для максимума кривой распределения a_n значения параметра C и сопоставляемые им экспериментальные данные процентной доли p_i числа образцов с хорошо выраженным резонансом в общем их количестве для одиночных QP (p_1) в одном (первом) нанослое и последовательно для нескольких слоёв – $N \sim 2, 3, 4, 5$. Наблюдается тенденция волнообразного изменения p_i с минимумами для чётных N.

Таблица – Сводка основных данных

	m/m_0	a_0, nm	a_n, nm	$\tilde{E}_n$, eV		C	p_1, %	p_2, %	p_3, %	p_4, %	p_5, %
				$\tilde{E}_{n=1}$	$\tilde{E}_{n=2}$						
QP-CdSe	0.13	0.430	2.0-4.0	0.2-0.7	0.8-3.0	0.9	10	0	20	10	15
QP-PbS	0.080	0.593	2.5-4.5	0.2-0.8	0.8-3.2	1.1	20	15	20	10	15
QP-InSb	0.013	0.649	3.5-7.5	0.5-2.0	2.0-8.0	2.5	45	35	65	30	45

В определённых интервалах напряжения наблюдалась характерная особенность зависимости ВАХ от числа монослоёв N в образцах: для их чётного числа – значения тока уменьшались, для нечётного увеличивались.

Пики тока на ВАХ (кривая 2 на рис. 1,*b*) определяются энергией поля в условиях резонанса электронного волнового процесса [8]. На рис. 2 приведена типичная картина зависимости от N проводимости образцов

dI/dV=G в энергетических зонах резонанса. Резонансные пики одноэлектронной проводимости линейной цепочки QP мы трактуем как квантовую проводимость в модели квантовой нити. С учётом одноэлектронного характера тока $G \sim k^{-1}q^2/h \sim 4\cdot10^{-5}k^{-1}$ См, где: q – заряд электрона, k – число квантовых ступенек. В качестве числа квантовых ступенек в единичной QP, можно принять отношение a_n/a_0, а во всей цепочке – Na_n/a_0. В нашем случае $a_n/a_0 \sim 10$, а $k = Na_n/a_0 \sim (10 - 50)$. Тогда должно быть: $G \sim (1- 4)\cdot10^{-6}$ См. Как показывают графики рис. 5, значения $G \sim (1 – 2)\cdot10^{-6}$ См. Это хорошее соответствие расчёту, если учитывать, что интервал дифференцирования (~30 мВ) практически равен ширине резонансного пика, или в отдельных случаях даже несколько больше неё.

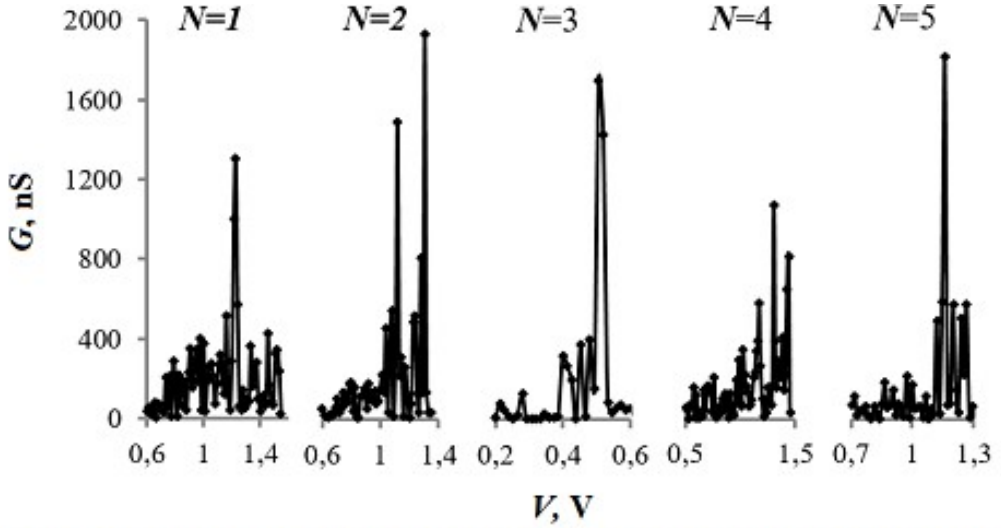


Рисунок 2 – Резонансные пики дифференциальной проводимости для разного числа N (на примере образца QP-InSb).

Наблюдаемые зависимости ВАХ можно объяснить в предположении следующей физической модели. При чётном числе N электронное взаимодействие между QP проявляется слабо. Они действуют, как бы, независимо. Поэтому ток через QP последовательно двух или четырёх слоёв уменьшается, как через последовательно включенные сопротивления, на зависимостях наблюдаются провалы тока для N, равным двум или четырём. При их независимом действии характеристики квантовой проводимости образуются простым смешиванием и имеют более сложную картину (рис. 2, N=2 и N=4). Для случаев нечётных чисел N (1, 3 и 5) QP в межслойной линейке действуют согласованно как единая квантовая нить, и наблюдается «идеальная» картина квантовой проводимости (рис. 2, N =1, 3, 5).

Литература

[1] С.Б. Бричкин, В.Ф. Разумов. Успехи химии, **85**(12), 1297 (2016). DOI: 10.1070/RCR4656.

[2] M. Alizadeh-Ghodsi, M. Pourhassan-Moghaddam, A. Zavari-Nematabad, B. Walker, N. Annabi, A. Akbarzadeh. Part. Part. Syst. Charact.,**36**, 1800302 (2019). DOI: 10.1002/ppsc.201800302.

[3] N.D. Zhukov, I.T. Yagudin, N.P. Aban'shin, D.S. Mosiyash. Technical Physics Letters, **46** (11), 1088 (2020). DOI: 10.1134/S1063785020110152.
[4] V.S. Protsenko, A.A. Katanin. Phys. Rev. B., **99** (16), 165114 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevB.99.165114.
[5] M. Iizuka, Yu. Shidara, A. Fujimori. Graduate School of Sci. and Eng., Saitama University, 225, MATEC Web Conf., (Japan), 97, 1 (2017) .DOI: 10.1051/matecconf/20179801001.
[6] I.A. Gorbachev, S.N. Shtykov, G. Brezesinski, E.G. Glukhovskoy. BioNanoScience, 7 (4), 686 (2017). DOI 10.1007/s12668-017-0404-4.
[7] Н.Д. Жуков, М.В. Гавриков, С.Н. Штыков. ФТП, **56** (6), 552 (2022). DOI: 10.21883/FTP.2022.06.52588.9809.
[8] Г.Ф. Глинский. Письма в ЖТФ, **44**(6), 17 (2018). DOI: 10.21883/PJTF.2018.06.45763.17113.

PROPERTIES AND TECHNOLOGY OF BONDED NANOCRYSTALS IN AN INTERELECTRODE NANOSCALE

E.G. Glukhovskoy, N.D. Zhukov, M.V. Gavrikov

Saratov State University, Saratov

An organo-modified ordered layered (from one to five) nanostructure with a three-dimensional dense packaging based on colloidal nanoparticles of InSb, PbS, CdSe semiconductors and Langmuir-Blodgett films has been manufactured and studied. According to the voltage–voltage characteristics (VAC) of single-electron transport, limiting processes are established in the model of a nanocell with a linear chain across the layers - emission-injection tunneling from a probe into a nanoparticle, movement in a nanoparticle determined by the establishment of an electronic wave process in it, tunneling through a nanoscale between nanoparticles.

УДК 621.311.243 25-39

ПОДХОДЫ К ФОРМИРОВАНИЮ СЕЛЕКТИВНЫХ СЛОЕВ СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА

Козырев Е.Н.[1], Гончаров И.Н.[1,2], Березов А.В.[2], Аскеров Р.О.[1], Тлехугов А.М.[1], Кабисов Г.С.[1], Калаев А.Н.[1], Тотикова Д.З.[1]

[1]Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ
[2]Северо-Осетинский государственный университет, Владикавказ

В статье рассматриваются некоторые технологические пприемы формирования полупроводниковых нанослоев оксидов металлов на стеклянной подложке, используемых при изготовлении генераторов солнечной энергии на основе перовскита. Сравниваются способы получения данных пленок с помощью золь гель метода и термического испарения. Предлагаются к рассмотрению результаты соответствующих проведенных экспериментов по синтезу транспортно-селективных слоев структуры элемента на основе оксидов цинка и никеля с различными типами проводимости.

Сегодня бурный рост испытывают перовскитные солнечные элементы, которые можно синтезировать осаждением раствора органо-неорганических галогенидов, поскольку на их основе по прогнозам экспертов можно построить преобразователь с КПД более 32%. Они обладают очень высоким уровнем конверсии солнечного излучения в фототок. Системы на их основе могут быть достаточно технологичными. Более того, использование, к примеру, методов осаждения позволит создавать, как небольшие потребительские товары, так и большеформатные устройства, структуры на их основе очень тонки и легки. Все эти качества определяют их перспективность.

Очевидно, что проведение практических исследований по поиску наиболее оптимальной технологии формирования компонентов данных изделий, в частности, двух транспортно-селективных слоев *n*- и *p*-типа проводимости, необходимых для эффективного функционирования элемента солнечной энергии весьма актуально. Эффективность перовскитного солнечного элемента наряду с обеспечением оптимальности протекания процессов образования зарядов в рабочем слое в значимой степени зависит от достигнутого состояния зарядо-селективных слоев. Известно (рис. 1), что функции сбора и перевода во внешнюю цепь фотосгененерированных заряженных частиц обеспечивают слой с электронной проводимостью (ETL), называемый также электронно-селективным слоем ESL и слой с дырочной проводимостью (HTL), называемый дырочно-селективным слоем HSL. Для передачи зарядов в цепь они электрически соединены с внешними электродами – металлическим и оптически прозрачным, сформированным на стеклянной подложке (электрод ITO). Данные слои позволяют собирать на каждом из электродов солнечного элемента заряды одной полярности, они способствуют ослаблению процессов рекомбинации на границе раздела, и

следовательно в конечном итоге в определенной степени обеспечивают достижение требуемых фотоэлектрических параметров изделия в целом. В системе должен быть обеспечен эффективный перенос заряда внутри рабочих слоев, а также его сбор.

Рисунок 1 – Строение перовскитного солнечного элемента

Среди важнейших требований, предъявляемых к этим слоям наряду с заданным типом их проводимости, регулярностью архитектуры, высокой пропускной способностью для электронов и дырок, следует выделить максимальную прозрачность в видимом диапазоне, а также эффективное выравнивание энергетических уровней с уровнями перовскитного поглотителя.

В рамках работы, представленной в данной публикации, синтез зарядо-транспортных (зарядо-селективных) слоев производился на основе оксидов цинка (слой с электронной проводимостью) и никеля (слой с дырочным типом проводимости).

Структура ETL может быть сформирована и с применением TiO_2, обеспечивающим эффективный отбор электронов из рабочей перовскитной структуры, а также снижение интенсивности рекомбинационных процессов на границе раздела. Для увеличения подвижности TiO_2 широко применяется его легирование атомами металлов или галогенов. Для планарных и мезопористых ETL на основе TiO_2 в качестве легирующих элементов были успешно использованы Nb, Li, Mg, Sn, Zn, Y, Z, Mo, а также графен, который обладает превосходной способностью переноса электронов, что помогает улучшить эффективность сбора электронов в соответствующем PSC [1].

Применяется также и SnO_2, обладающий регулярной архитектурой, эффективным выравниванием энергетических уровней слоя с уровнями перовскита, высокой оптической прозрачностью.

Использование оксида цинка обусловлено более выгодными свойствами, по сравнению, например, с TiO_2 в плане высокой подвижности электронов, низкой температурой кристаллизации [2]. Известно, что его легирование, например, алюминием еще больше улучшает его свойства, обес-

печивающие высокую скорость извлечения зарядов, а также снижение работы выхода.

Весьма важна функция слоя с дырочной проводимостью HTL. Он также обеспечивает достижение высоких фотоэлектрических характеристик и стабильность работы устройства. HTL структура, в частности, блокирует движение сгенерированных в перовскитном слое электронов к катоду, а также способствует извлечению положительных носителей заряда. При формировании данного слоя применяются различные органические и неорганические материалы [3]. В частности вещества на основе тиофена, эффективно извлекающие заряд. Выгодно способны проявить себя также некоторые высокомолекулярные соединения, например, политриариламин (PTAA) [4]. Он, в частности, способствует снижению скорости рекомбинации зарядов. Однако использование органических материалов не гарантирует высокой долговечности перовскитного преобразователя, т.к. они склонны к деградации. Кроме того, они характеризуются высокой гидрофобностью поверхности после их отжига, это снижает качество перовскитного слоя.

Известно, что привлекательными при изготовлении слоя HTL могут быть неорганические оксиды металлов, в частности, эффективен *NiO*. Они устойчивы к влаге, а также отличаются хорошей термической и химической стабильностью.

Один из подходов получения данных слоев - золь-гель-технология синтеза наноструктурированных плёнок, особенностями которой являются: относительная простота, низкая стоимость, высокая степень качества поверхности синтезируемых структур, а также простота модификации свойств слоев путём изменения параметров синтеза [5]. Была отработана соответствующая методика получения нанослоя ETL на основе распространенного в природе представленного ранее широкозонного оксида цинка. На его примере исследовались методики управления фото каталитическими и адсорбционными свойствами. Для синтеза плёнок были использованы следующие реактивы: ацетат цинка двуводный $(CH_3COO)\ 2Zn{\cdot}2H_2O$, 2-метоксиэтанол $CH_3OCH_2CH_2OH$ и $HOCH_2CH_2NH_2$.

Для получения данной полупроводниковой наноструктуры был приготовлен золь путём смешивания 20 г двуводного ацетата цинка, 40 мл 2-метоксиэтанола и 6,4 мл этанол-амина. Получившаяся смесь перемешивалась в течение 15 минут при комнатной температуре до полного растворения ацетата цинка в золе. После этого раствор перемешивался при температуре 60 °C с использованием магнитной мешалки. Время нагрева золя не превышало 60 минут. Полученный золь созревал в течение суток. Работа проводилась в соответствии с данной схемой (рис. 2).

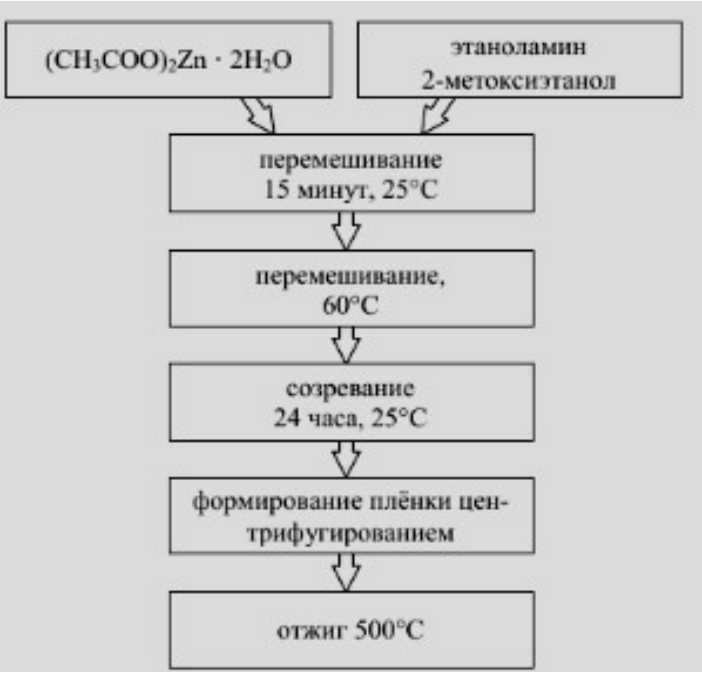


Рисунок 2 – Методика синтеза
наноструктурированных плёнок оксида цинка

Синтез плёнок оксида цинка осуществлялся на лабораторной центрифуге с частотой вращения 3000 об./мин на стеклянной подложке. Сформированные плёнки отжигались в муфельной печи при температуре порядка 500 °C. Известны и другие подходы в проведении процедуры отжига, в частности под воздействием лазерного луча [5].

В ходе данной работы был также осуществлен способ формирования зарядо-транспортных слоев с применением термического испарения оксидов на подложку из стекла. Вновь стояла задача получения максимально равномерного слоя кристаллического строения требуемой стехиометрии и обладающего заданными физическими параметрами: удельной проводимостью, шириной запрещенной зоны, прозрачностью, толщиной, подвижностью носителей заряда и др.

В ходе проведения операции термического испарения, в частности NiO для слоя HTL, следовало учитывать два фактора, заключающиеся в том, что температура плавления данного оксида до которой его для испарения необходимо довести, составляет порядка 1600°C, а температура его химического разрушения – 1200 °C. Поскольку требуется распылять и наносить на подложку полноценный NiO, было принято решение собрать установку, которая бы в условиях вакуума позволяла с помощью специального манипулятора загружать порошок оксида в предварительно прямонакально разогретую до 1600 °C лодочку испарителя. При этом удалось оперативно, практически безынерционно разогреть испаряемый материал до его температуры плавления, минуя стадию разложения.

Было изготовлено несколько соответствующих образцов с заданной прозрачностью. Замер поверхностного сопротивления сформированной пленки *NiO* показал, что его значение удовлетворяет характерному для полупроводников значению в $R \approx 10^7$ Ом при расстоянии между электродами 7 см. На рисунке 3 представлены фото данных слоев, нанесенных на стеклянные подложки.

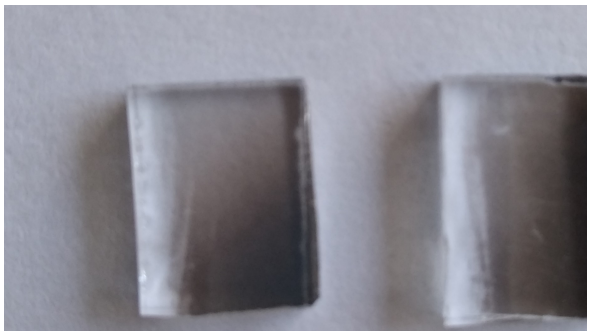
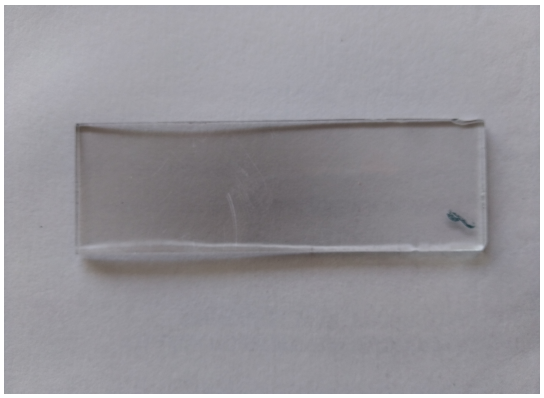
а)  б) 

Рисунок 3 – Сформированные методом термического распыления нанослослои: а) слой ZnO; б) слой NiO

Наблюдения с использованием спектрофотометра показали, что пропускающая способность сформированной посредством термического распыления структуры весьма низка (≤30 %) и довольно неравномерна по поверхности подложки на всем протяжении диапазона видимого излучения (λ=380÷780 нм). Для увеличения равномерности пленок по прозрачности толщине в дальнейшем вероятно следует прибегнуть к магнетронному способу распыления оксидов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 23-13-20012).

Литература

1. Yusoff A.R.b.M., Vasilopoulou M., Georgiadou D.G., Palilis L.C., Abate A., Nazeeruddin M.K. Energy Environ. Sci., 2021, 14, 2906.
2. Huang L., Xing Z., Tang X., Li D., Meng X., Hu X., Hu T., Chen Y. J. Mater. Chem A, 2021, 9, 16178.
3. Bi H., Liu B., He D., Bai L., Wang W., Zang Z., Chen J. Chem. Eng. J., 2021, 418, 129375.
4. Burschka J., Pellet N., Moon S.-J., Humphry-Baker R., Gao P., Nazeeruddin M.K., Grätzel M. Nature 2013, 499, 316.
5. Reese M.O., Gevorgyan S.A., Jørgensen M., Bundgaard E., Kurtz S.R., Ginley D.S., Olson D.C., Lloyd M.T., Morvillo P., Katz E.A., Elschner A. Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 2011, 95, 1253.

APPROACHES TO THE FORMATION OF SELECTIVE LAYERS OF A SOLAR CELL

Kozyrev E.N.[1], Goncharov I.N.[1,2], Berezov A.V.[2], Askerov R.O.[1], Tlekhugov A.M.[1], Kabisov G.S.[1], Kalaev A.N.[1] Totikova D.Z.[1]

[1]North Caucasian Mining and Metallurgical Institute, Vladikavkaz
[2]North Ossetian State University, Vladikavkaz

The article considers some technological approaches to the formation of semiconductor nanolayers of metal oxides on a glass substrate used in the manufacture of solar energy generators based on perovskite. The methods for obtaining these films using the sol-gel method and thermal evaporation are compared. Results of the corresponding experiments on the synthesis of transport-selective layers of the structure of the element based on zinc and nickel oxides with different types of conductivity are proposed for consideration.

УДК 538.911 25-40

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ОСАЖДЕНИЯ МЕТАЛЛОВ В ПОРЫ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Кодзасова Т.Л., Асланов М.А., Дзестелова А.А., Карданов А.Н., Тотиев С.Т.

Северо-Кавказский горно-металлургический институт, Владикавказ

В работе представлены результаты исследования механизма осаждения различных металлов в поры наноструктурированного анодного оксида алюминия. Проведены исследования оптических характеристик полученных образцов на спектрофотометре и получены фото с помощью растровой микроскопии.

Ценность изучения фотонных структур заключается в исследовании физических явлений с новой точки зрения, следующей из традиционных идей физики твердого тела и электромагнетизма. Благодаря наличию, вследствие периодичности, фотонных запрещенных зон, фотонные кристаллы позволяют реализовать ряд интересных режимов распространения электромагнитных волн.

Фотонные кристаллы являются сверхрешеткой, в которой искусственно создан дополнительный период, на порядки превышающий период основной решетки. Такой кристалл получают периодическим изменением показателя преломления среды в одном, двух или трех измерениях.

Фотонные кристаллы представляют существенно новые возможности для нелинейных оптических явлений.[2]

На основе фотонных кристаллов создаются и разрабатываются оптические фильтры, волноводы (в частности, в волоконно-оптических линиях связи), устройства, позволяющие осуществлять управление тепловым излучением, на основе фотонных кристаллов были предложены конструкции лазеров с пониженным порогом накачки.

Помимо изменения спектров отражения, прохождения и поглощения металлодиэлектрические фотонные кристаллы обладают специфической плотностью фотонных состояний. Измененная плотность состояний может существенным образом влиять на время жизни возбужденного состояния атома или молекулы, помещенных внутрь фотонного кристалла, и, следовательно, менять характер люминесценции.

На основе наноструктурированного пористого алюминия можно получить образцы фотонных кристаллов, поскольку данный материал имеет большие перспективы использования для нанотехнологий и для создания фотоннокристаллических структур и преобразователей солнечной энергии в электрическую [4].

Исследования показали, что наряду с т. н. «регулярными» порами в пористой пленке присутствуют и поры, расположенные в объеме оксида случайным образом. Очевидно, что вводимые в алюминий легирующие

элементы способны оказывать решающее влияние на физико-химические характеристики пористых Al_2O_3, на их пористость и проводимость. Природа электролита, а также состав исходного материала способны оказать существенное влияние на кинетические особенности электрохимического анодного окисления алюминия, состав и свойства получаемого оксида.

Эффективным методом осаждения металлов в поры наноструктурированного оксида алюминия является метод электрохимического осаждения определенных металлов на внутреннюю поверхность поры Al_2O_3 с последующим их отжигом.

Одновременное осаждение нескольких металлов на катоде из водных растворов их солей может произойти лишь при равенстве потенциалов их выделения. При этом теоретически потенциалы выделения каждого из металлов равны электродным потенциалам металлов именно в тех растворах, из которых производится их электрохимическое осаждение.

На скорость электрохимической реакции оказывает влияние плотность тока. При этом, чем она выше, тем с большей скоростью выделяется металл при равенстве других условий. Процесс осаждения металлов из водных растворов их солей зависит от состояния поверхности катода. При наличии в растворах поверхностно активных веществ часть поверхности катода может быть занята адсорбированными молекулами этих веществ и тем самым препятствовать процессу кристаллизации металлов, замедляя рост частиц осадка. Повышение концентрации электролита способствует совместной разрядке ионов железа и при этом уменьшается количество выделяемого водорода.

Проведенные эксперименты показывают, что при электролитическом анодировании алюминия при напряжении 120 В в 4 % водном растворе ортофосфорной кислоты при температуре раствора в 21 °С, толщина барьерного слоя структуры оксида алюминия достигает 143 нм, а диаметр пор равен 300 нм.

Установлено, что пленки, выращенные в растворе фосфорной кислоты, обладают существенным преимуществом, которое заключается в том, что образуемые в ходе процесса анионы PO_4^{3-} препятствуют закупориванию пор, что позволяет ионам металлов проникать глубоко в поры.

Анодированный алюминий имеет сложную структуру и включает в себя два слоя: нижний барьерный (запирающий) прилегающий непосредственно к металлу, и верхний пористый.

Нередко электроосаждение металлов в поры анодированных структур на алюминии проводят с параллельным окрашиванием пленки, проводимым в декоративных целях или для защиты алюминия от коррозии. Носителями окраски могут послужить частицы металлической меди, если электролиз проводить в кислых растворах. Из щелочных растворов электролитически осаждается металлическая медь и оксид меди. Величиной pH

водных растворов сернокислой кислоты можно регулировать интенсивностью данного процесса.

При возрастании времени электролиза количество осажденного металла на переменном токе возрастает. Во время электролиза осаждение металлов происходит не сразу во всех порах АОП. В катодный полупериод увеличивается количество металла, осажденного в прибарьерном слое АОП. Данные проводимого анализа на содержание осаждаемых металлов в прибарьерном слое толщиной 1 мкм показывают, что с увеличением продолжительности электролиза на переменном токе количество пор, в которых протекает процесс электроосаждения частиц металла увеличивается. При этом его можно разделить, как минимум, на два этапа: 1 – наибольшая скорость заполнения прибарьерного слоя металлическими частицами достигается после определенного времени их осаждения и некоторое время остается постоянной; 2 – в дальнейшем, вследствие заполнения этого слоя, скорость осаждения частиц металла падает до нуля.

Если говорить о количественных показателях режима процесса, то можно отметить, что при осаждении в структурах на алюминии электрохимическим методом в растворах солей никеля электролиз необходимо проводить переменным током при плотности тока 0,1÷5 А/дм^2, напряжении 5÷80 В в течение 1÷10 мин. При этом концентрации соли должна составлять от 10 до 30 г/л в расчете на металл, а температура ванны может соответствовать диапазону 18÷50 °С.

Эксперименты показывают, что допускается полностью изменять составы электролитов на разных стадиях получения структуры. Например, выращивать пористую пленку в одном электролите, а производить различные этапы осаждения в других. Так возможно осаждение металлов никеля, кобальта, олова из растворов их солей на пористую пленку, полученную анодированием алюминия в серной кислоте. Режим осаждения таков: напряжение 9÷20 В, плотность тока 0.13÷0.3 А/дм^2 время осаждения течение 0.5÷12 мин. Далее возможно наращивание пористой окисной пленки анодированием в фосфорной кислоте. Осаждение металлов никеля и кобальта с параллельным окрашиванием алюминиевой АОП электрохи-мическим осаждением меди, никеля, кобальта, олова, железа, кадмия, можно проводить в течение 1÷10 мин при 15÷30 $^{\circ}$С, плотности тока 0.3÷1 А/дм^2, напряжении 8÷50 В. Степень окрашивания и цвет пленки может свидетельствовать о достигаемой проводимости пор, которая также определяется степенью дисперсности металла.

Исследование полученных образцов проводили на растровом микроскопе до осаждения металла и после. Результаты представлены на рисунках 1 и 2.

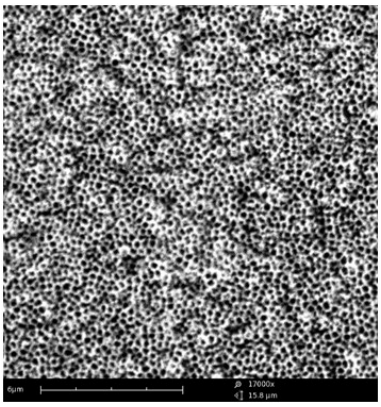


Рисунок 1 - Поверхность образца НПАОА до введения в поры металла

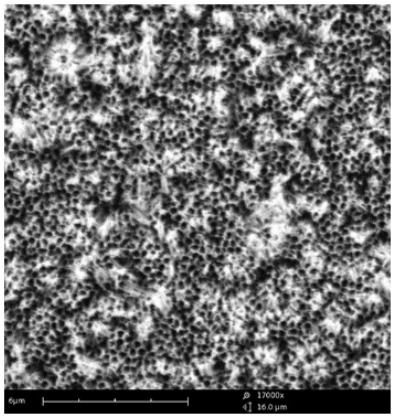


Рисунок 2-Поверхность образца НПАОА после введения в поры металла

Так же анодирование образцов алюминия площадью 4,5 *см*^{2} проводилось в растворах щавелевой кислоты разных концентраций, в течение - различных временных промежутков. Толщина образцов измерялась микрометром. Произведенный инструментальный контроль торцевых участков анодированных образцов показал, что они имеют каналы с диаметром не меньше 300 Å.

При времени анодирования от 30 до 60 мин в электролите на основе щавелевой кислоты толщина пористого анодного слоя варьируется от 30 до 90 мкм. На 1 мм^2 поверхности находится $4 \cdot 10^6$ пор, а на 1 см^2 – $4 \cdot 10^8$ пор, с учетом диаметра пор в 400 Å, а также толщины слоя в 20÷30 мкм ($(20 \div 30) \cdot 10^{-4}$ см) можно подсчитать объем пор на 1 см^2. Зная плотность осадка, можно определить массу металла, который возможно осадить в порах АОП.

Исследования показали, что пленки АОП с оптимальными геометрическими размерами получаются при анодировании алюминия в растворах смеси борной кислоты, буры, щавелевой кислоты и щавелевокислого аммония. В зависимости от соотношения компонентов такой смеси при одинаковом напряжении, плотности тока и температуры электролита можно получить оксидные пленки с толщиной от 20 мкм до 0,8 мм. Диаметр пор в таких пленках зависит от напряжения и составляет 0,3-0,4 мкм. Электролит должен активно взаимодействовать с анодной окисной пленкой, при этом скорость растворения оксида должна быть намного меньше скорости ее роста.

В ходе последующих экспериментов удалось произвести совместное осаждение двух металлов из водных растворов их солей. Эти два металла должны быть близко расположены на шкале электроотрицательности и соответственно осаждаться при близких значениях их электродных потенциалов. Электродные потенциалы железа и кобальта имеют близкие значения, поэтому можно ожидать, что оба металла будут осаждаться из растворов их солей.

С целью получения структур с пониженным значением электрического сопротивления было принято в качестве осаждаемого металла использовать один из лучших проводников металлов – медь. В ходе экспери-

ментов было установлено, что высушенные на воздухе АОП не годятся для электрохимического осаждения меди, поскольку поры после длительной сушки плохо пропитываются электролитом. Только после длительной выдержки в растворах, в течение порядка 4÷6 *ч*, при комнатной температуре, наблюдается осаждение меди и других металлов на этих АОП.

Следует отметить, что для равномерного осаждения меди в порах АОП важное значение имеет отсутствие дефектов в пористом оксиде алюминия.

Выводы

В процессе исследования электрохимического осаждения металлов в поры анодного оксидного алюминия выявлены условия получения и управления осаждением металлов в поры анодного оксида алюминия.

Литература

1. Козырев Е.Н., Филоненко В.И., Беляева Т.Н., Кодзасова Т.Л., Гордеев Г.О.Многослойные структуры для одномерных фотонных кристаллов на основе наноструктурированного оксида алюминия / Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы IX Международной НТК; Нальчик, 2017, 303 с.
2. Мухуров Н И., Трофимов Ю.В., Манего С.А., Котова И.Ф. Пропускание некоторых модификаций анодного оксида алюминия в диапазоне длин волн 0,3–2 мкм // Оптический журнал. 2002. Т. 69. С. 81.
3. Кодзасова Т.Л., Кабулова Т.Р., Кодзасов В.А., Асланов М.А., Сабанов В.Х. Исследование свойств фотонных кристаллов на основе пористого оксида алюминия / Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы XI Международной НТК; Нальчик, 2019, 460 с.
4. Заявка на патент. Козырев Е.Н. Сабанов В.Х., Беляева Т.Н. и др. Способ изготовления преобразователя солнечной энергии в электрическую на основе перовскитов № 2017143 071 от 08.12.2017.
5. Кодзасова Т.Л., Асланов М.А., Кодзасов В.А., Дзестелова А.А., Цаликова В.К. Влияние температуры электролита на формирование наноструктурированного пористого оксида алюминия / Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы XII Международной НТК; Нальчик, 2021, 411 с.

STUDY OF THE MECHANISM OF METAL DEPOSITION INTO PORES OF NANOSTRUCTURED ALUMINUM OXIDE

Kodzasova T. L., Aslanov M.A., Dztstelova A. A., Kardanov A.N., Totiev S.T.

North Caucasian Institute of Mining and Metallurgy, Vladikavkaz

The paper presents the results of a study of the mechanism of deposition of various metals into the pores of nanostructured anodic aluminum oxide. The optical characteristics of the obtained samples were studied using a spectrophotometer and photos were obtained using scanning microscopy.

УДК 621.797 25-42

ГАЗОВЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА С АДДИТИВАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Сарач О.Б., Баринов А.Д., Зезин Д.А., Котов В.А.

Национальный исследовательский университет "МЭИ", Москва

Нанокристаллические пленки диоксида олова с аддитивами редкоземельных металлов и сурьмы получали реактивным магнетронным напылением методом составной мишени. Газовые сенсоры на основе полученных пленок имеют высокую чувствительность и избирательность к целому ряду органических растворителей.

Резистивные газовые сенсоры на основе тонких пленок диоксида олова являются одним из наиболее перспективных типов сенсоров. Они отличаются высокими чувствительностью и быстродействием, небольшими размерами, просты в использовании, хорошо сочетаются с полупроводниковой технологией [1, 2], но проблема обеспечения селективности и стабильности сенсоров по-прежнему остается актуальной. Для модификации свойств тонких пленок диоксида олова в их состав вводятся различные аддитивы, что позволяет повышать чувствительность к отдельным реактивам, обеспечивая тем самым селективность сенсоров, а также добиваться лучшей стабильности газочувствительных и электрофизических свойств [3]. Нами были выбраны аддитивы редкоземельных металлов тяжелой иттриевой подгруппы (Yb, Gd, Lu, Tb), поскольку их влияние на газочувствительные свойства диоксида олова малоизучено, тем не менее имеются сообщения о высокой чувствительности оксидов редкоземельных металлов к содержанию в атмосфере паров спирта [4].

Сенсоры были изготовлены на подложках из шероховатого кварца толщиной 300 мкм. С одной стороны подложки расположен чувствительный элемент толщиной около 100 нм, размером 2×2 мм^2 и платиновые контакты к нему, с другой стороны – платиновый нагреватель, обеспечивающий температуру рабочей области сенсора 350 °С при мощности нагрева 0,6 Вт. Платину для нагревателя и контактов наносили магнетронным напылением, для повышения адгезии использовался подслой молибдена. Общий размер сенсора 5×5 мм^2. Газочувствительные пленки диоксида олова получали реактивным магнетронным напылением. Оловянная мишень распылялась в газовой смеси, содержащей 90 % аргона и 10 % кислорода при давлении от $4\cdot10^{-4}$ до $8\cdot10^{-4}$ Торр. Легирование проводилось методом составной мишени. Для повышения стабильности сопротивления сенсоров при повторных нагревах, при длительной работе и при хранении в их состав помимо основного аддитива вводилась сурьма, являющаяся донором так же, как и вакансии кислорода. Сурьма вводилась в количестве 0,4–1

атомарных процентов, а содержание редкоземельных металлов в составе газочувствительной пленки варьировалось от 0,4 до 5 атомарных процентов. После напыления пленки отжигались на воздухе при температуре 350–400 °С. Более подробное описание технологии изготовления сенсоров приведено в сообщениях [5, 6].

Газочувствительные пленки имеют состав SnO_{2-X}, где значение X варьируется в зависимости от режимов получения. Выбор давления газовой смеси при реактивном магнетронном напылении позволяет плавно регулировать соотношение олова и кислорода в получающихся пленках, меняется количество вакансий кислорода в пленках и их электропроводность. Установлено, что пленки с большим сопротивлением обладают более высокой газовой чувствительностью, но динамический диапазон линейной зависимости чувствительности от дозы реагента у таких сенсоров оказывается небольшим. На рисунке 1 показаны зависимости относительной чувствительности сенсоров с аддитивом Tb с различными сопротивлениями от дозы изопропилового спирта, измеренные при рабочей температуре 270 °С. Относительная чувствительность определялась как отношение изменения сопротивления сенсора при введении в камеру паров спирта к исходному сопротивлению сенсора, $(R_0\text{-}R)/R_0$. У сенсоров с исходным сопротивлением 900 кОм наблюдается почти линейная зависимость чувствительности от дозы изопропилового спирта в диапазоне от 5 до 35 ppm, а у пленок с исходным сопротивлением 1,8 МОм чувствительность после 23 ppm реагента входит в насыщение. Таким образом, для пороговых датчиков, которые должны сработать при превышении допустимой концентрации обнаруживаемого реагента, наилучшим образом подойдут сенсоры с высоким сопротивлением, а для датчиков, предназначенных для анализа состава атмосферы, предпочтительнее использовать сенсоры с меньшим сопротивлением.

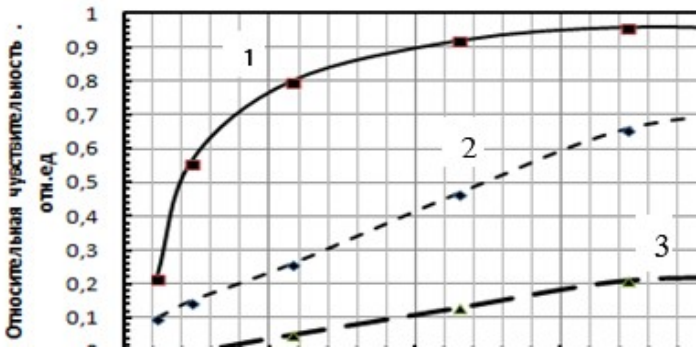


Рис. 1. Зависимость относительной чувствительности сенсоров с аддитивом Tb при рабочей температуре 270 °С с сопротивлениями: 1 – 1,8 МОм; 2 – 0,9 МОм; 3 – 0,35 МОм от дозы изопропилового спирта

Было установлено, что сенсоры с аддитивами редкоземельных металлов обладают высокой чувствительностью к 14 органическим реагентам, что с одной стороны, открывает широкие возможности их использования, но с другой стороны, вызывает вопросы, связанные с необходимостью обеспечения селективности. Использование матрицы, состоящей из

сенсоров с различными аддитивами, позволяет с достаточной степенью достоверности различать вещества, относящиеся к различным классам соединений. На рисунке 2 показана реакция сенсоров на ацетон, бензол и толуол. В данном случае показаны значения абсолютной чувствительности, рассчитанные делением относительной чувствительности на вводимую дозу реагента. Соотношение чувствительности различных сенсоров дает возможность определить, какое вещество введено в камеру, а значение чувствительности – дозу вещества.

Рис. 2. Абсолютная чувствительность сенсоров к ацетону, бензолу и толуолу при оптимальных рабочих температурах: 1 – Lu 280 °C; 2 – Gd 290 °C; 3 – Tb 300 °C; 4 – Yb 350 °C

При введении в камеру веществ, относящихся к одному классу, различий в реакциях сенсоров наблюдается гораздо меньше. На рисунке 3 показана реакция того же набора сенсоров на метиловый, этиловый и изопропиловый спирты. Все типы сенсоров имеют высокую чувствительность к спиртам, соотношения чувствительностей различается несущественно. То, что чувствительность растет с увеличением молекулярного веса спиртов, не может помочь с распознаванием веществ, поскольку в условиях реальной работы сенсоров неизвестны ни действующее вещество, ни его дозировка.

Для распознавания спиртов можно использовать температурные зависимости чувствительности. Чувствительность ко всем исследованным спиртам растет с увеличением температуры, но ход зависимости может несколько отличаться. На рисунке 4 показаны температурные зависимости абсолютной чувствительности сенсора с аддитивом Yb к метиловому, этиловому и изопропиловому спирту. Используя набор сенсоров, работающих при разной температуре, можно определить не только класс веществ, воздействующих на сенсорную матрицу, но и различить вещества внутри одного класса.

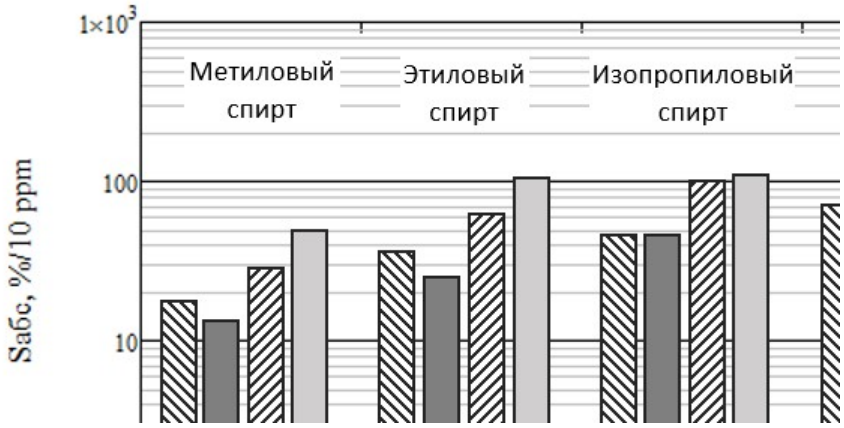


Рис. 3. Абсолютная чувствительность сенсоров к спиртам при оптимальных рабочих температурах. 1 – Lu 280 °C; 2 – Gd 290 °C; 3 – Tb 300 °C; 4 – Yb 350 °C

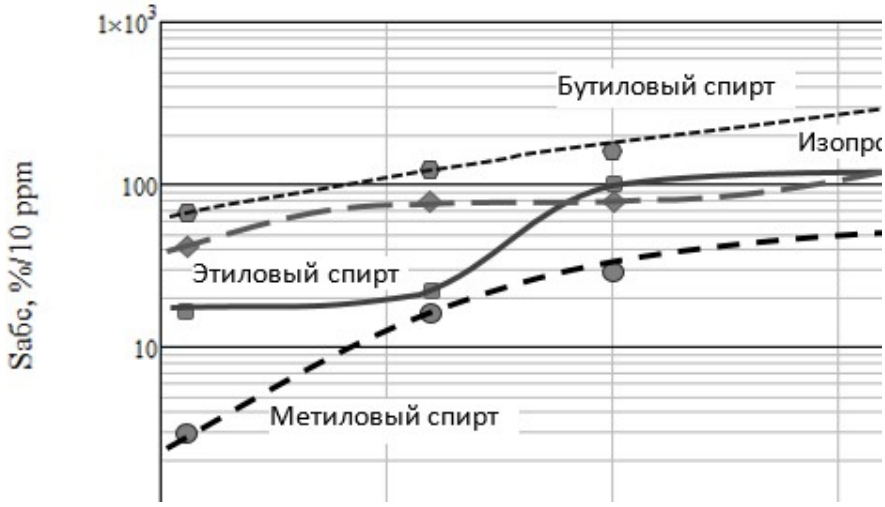


Рис. 4. Температурная зависимость абсолютной чувствительности сенсора SnO_{2-x}:Yb:Sb к спиртам

Выбор более высокой рабочей температуры сенсоров позволяет не только увеличить чувствительность к большинству исследованных реагентов, но и уменьшить время срабатывания сенсора при введении в камеру реагента и время восстановления сопротивления до исходных значений, что еще более важно, поскольку время восстановления после воздействия больших доз реагентов может достигать десятков минут. Тем не менее выбор рабочей температуры выше 300 °C нежелателен, поскольку исследования показали ухудшение долговременной стабильности сопротивления и чувствительности при использовании более высоких рабочих температур.

Более подробные исследования динамики процессов, происходящих на поверхности сенсоров при взаимодействии с газовым окружением, могут быть полезны как для понимания сущности происходящих химических реакций, так и для практических целей распознавания веществ. Другим направлением дальнейших исследований должно стать установление связи

между структурой пленок и их газочувствительными свойствами. В зависимости от количества вводимых аддитивов и режимов получения кристаллиты в пленках могут иметь размеры от 10–15 нм до 100 нм, в ряде случаев имеется четко выраженная огранка [6].

Литература

1. Sun YF, Liu SB, Meng FL, Liu JY, Jin Z, Kong LT, et al. Metal oxide nanostructures and their gas sensing properties: a review. Sensors 2012;12:2610.
2. Korotcenkov G., Cho B.K, Metal oxide composites in conductometric gas sensors: achievements and challenges, Sensors and Actuators B:Chemical http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2016.12.117.
3. Кривецкий В.В., Румянцева М.Н., Гаськов А.М. Химическая модификация нанокристаллического диоксида олова для селективных газовых сенсоров // Успехи химии 2013. 82 (10) 917–941.
4. ChiTsang Shik, Bulpitt Colin / Rare earth oxide sensors for ethanol analysis // Sensors and Actuators 1998/ B 52 P.226-23.
5. Guljaev A.M., Sarach O.B., Vanin A.A., Slepneva M.A. "The Electronic Nose" on the base of nanocrystalline films of tin and rare earth oxides SPITSE 2014 Simposium Spitse Enable at the Technishe Universitet Ilmenau.Sensors Ilmenau 7.06-18.06. 2014, N 64, P. 75-80.
6. Guljaev A.M., Sarach O. B., Barinov A. D., Anufriev Yu. V., and Kotov V.A. Surface Properties of Nanocrystalline SnO_{2-x} Thin Films with Yband Sb Additives for Resistive Gas Sensors ISSN 1027-4510, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, Vol. 14, No. 5, pp. 951–955.

GAS SENSORS BASED ON NANOCRYSTALLINE TIN DIOXIDE FILMS WITH ADDITIVES RARE EARTH METALS

Sarach O.B., Barinov A.D., Zezyn D.A., Kotov W.A.

National Research University "MPEI"

Nanocrystalline tin dioxide films with additives of rare earth metals and antimony were obtained by reactive magnetron sputtering using the composite target method. Gas sensors based on the obtained films have high sensitivity and selectivity to a number of organic solvents.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79 25-44

ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЛИЯНИЯ ТИПА РАСФОКУСИРОВКИ НА ПРОЦЕССЫ ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НА НЕЕ СЕРИЯМИ СДВОЕННЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

Ермалицкая К.Ф., Красноперов Н.Н., Воропай Е.С., Зажогин А.П.

Белорусский государственный университет, Минск

Изучено влияние энергии импульсов, величины и типа расфокусировки лазерного пучка и количества сдвоенных лазерных импульсов на целенаправленное формирование развитой поверхности титановой мишени сериями сдвоенных лазерных импульсов в воздушной атмосфере. Для проведения исследований использовали лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1. Проведенные исследования продемонстрировали возможность формирования наноструктур из оксидов титана на поверхности титана при ее обработке расфокусированными сдвоенными лазерными наносекундным импульсами.

На сегодняшний день диоксиды титана являются одними из самых востребованных сорбентов и фотокатализаторов благодаря высокой фотокоррозионной устойчивости, малой стоимости и каталитической активности. Последняя связана с относительно большим временем жизни фотогенерированных носителей заряда (-250 нс) [1-4]; однако при этом TiO_2 обладает низкой квантовой эффективностью из-за слабого разделения фотогенерированных носителей заряда, ограниченным спектром поглощения в ультрафиолетовой области, что делает невозможным использование энергии солнечного света. В последнее десятилетие увеличился интерес к получению и изучению наноразмерных мезопористых порошков диоксида титана. Связано это с тем, что при уменьшении размеров частиц сокращается расстояние до зоны поверхностной реакции, что приводит к более эффективному переносу носителей заряда и лучшему разделению электроннодырочной пары. Также за счет уменьшения размеров частиц возрастает удельная поверхность диоксида титана, что позволяет количественно повысить число реакций, происходящих на поверхности [1,2].

Высокодисперсные порошки TiO_2, производимые химической промышленностью, непригодны для этих целей, так как по завершении процесса очистки возникает необходимость их выделения из очищаемой среды. Поэтому более целесообразно использование TiO_2 в виде высокопористых покрытий [3, 4].

Цель работы состояла в том, чтобы показать возможность и определить условия для получения на поверхности титана микро- и наноразмерных структур из оксидов титана методом плавления-абляции сериями расфокусированных сдвоенных лазерных импульсов. Для получения структур

с характерными размерами меньше нескольких микрон нужно использовать импульсы короче нескольких десятков наносекунд.

Существенным недостатком, ограничивающим применение моноимпульсного лазерного воздействия для получения качественных НП является механизм объемного испарения, который может быть источником конденсированного вещества и капель в продуктах испарения [3]. В отличие от этого, при использовании режима сдвоенных импульсов на первичные процессы плазмообразования будут накладываться процессы нагрева и испарения аэрозолей, нанокластеров, фракталов, образовавшихся при воздействии на поверхность объекта излучения первого импульса, вторым импульсом излучения. При использований серий последовательных расфокусированных импульсов на поверхности образуется область расплава, на которую последовательно воздействуют следующие друг за другом импульсы.

Последние эффекты позволяют существенно уменьшить размеры продуктов абляции, образующихся на поверхности, в результате быстрого охлаждения в расширяющемся облаке, вплоть до нанометровых. Образование нанопорошков оксидов титана достигается при взаимодействии паров металла с кислородом воздуха в условиях интенсивного турбулентного перемешивания образующихся продуктов на поверхности мишени. Интенсивное охлаждение не только тормозит рост частиц, но и увеличивает скорость образования зародышей конденсированной фазы.

Для проведения исследований использовали лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1. Лазер может работать с частотой повторения импульсов до 10 Гц на длине волны 1,064 мкм. Длительность импульсов ≈ 15 нс. Временной сдвиг между сдвоенными импульсами может изменяться от 0 до 100 мкс с шагом 1 мкс. Лазерное излучение фокусировалось на образец с помощью ахроматического конденсора с фокусным расстоянием 104 мм. Размер пятна фокусировки примерно 50 мкм.

Исследована динамика процессов формирования развитой поверхности, при воздействии серий последовательных сдвоенных лазерных импульсов на пластинки из титанового сплава ВТ1-0 (толщина 500 мкм). Для уменьшения плотности мощности воздействующей на поверхность использовался вариант расфокусировки лазерного пучка. На рис. 1а, в качестве примера, приведена зависимость интенсивности линии титана Ti I (430,591 нм, $E_в$=3,727 эВ) от величины расфокусировки, при энергии импульсов 5 мДж и интервале между импульсами 10 мкс. Использовались серии из 10 сдвоенных импульсов на отдельную точку.

Как видно из приведенного на рис. 1а графика при расфокусировке на величину порядка ±5 мм и более процессы абляции поверхности сравнительно малы.

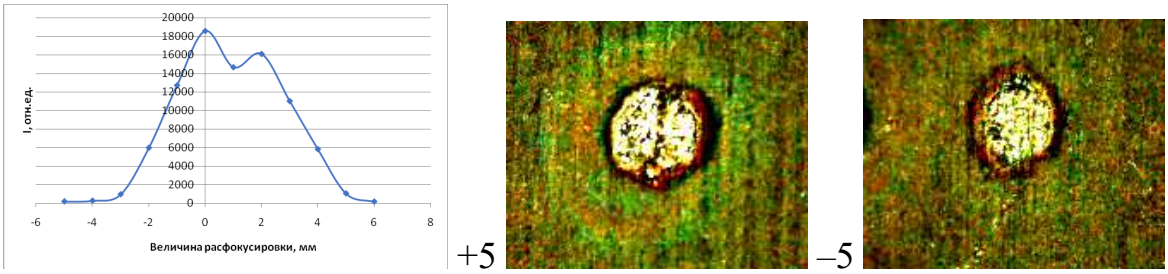


Рис. 1. а – Зависимость интенсивности атомной линии титана от величины расфокусировки лазерного пучка; б и в – снимки при расфокусировке +5 и –5 мм соответственно (размер кадра 1,5 на 1,25 мм)

Изображения поверхности оксидированного титана с нанесенным рельефом, полученным с использованием выше указанных параметров, приведены на рис. 1б и 1в. Снимки сделаны с помощью оптического микроскопа Webbers, совмещенного с цифровой камерой (отраженный свет).

Как видно из последних снимков в зоне сильного поражения на поверхности пластинки видна развитая структура. Островки имеют размер порядка нескольких десятков микрометров, покрытых тонким слоем окислов титана. Толщина оксидного слоя определяет цвет, который отражается от пленки. Толщина слоев изменяется примерно в пределах 10-100 нм. Интенсивность лазерного излучения была максимальной в центре пятна облучения и спадала к его периферии. При многократном импульсном воздействии на один и тот же участок поверхности в центре пятна возникал слаборазвитый кратер из которого произошло удаление материала. Однако на периферии, где интенсивность лазерного излучения снижалась, наблюдалось только оплавление поверхности.

Для получения образцов с большой площадью использовался метод построчного последовательного сканирования строчек с перекрытием точек. Для перекрытия был использован шаг 150 мкм. Использовались вышеприведенные параметры установки. Изображения поверхности оксидированного титана с нанесенными пленками, полученные с помощью оптического микроскопа Webbers, и микроскопа МИИ 4, совмещенного с цифровой камерой (отраженный свет) приведены на рис. 2.

Как видно из анализа снимков, на поверхности мишени, образуется регулярная структура из выступов с шагом 150 мкм, покрытых окрашенными нанопленками. Поверхность, обработанная импульсами с положительной расфокусировкой, более интенсивно окрашена. Последнее может быть обусловлено дополнительным получением оксидов титана при небольшой абляции поверхности (см. рис. 1а).

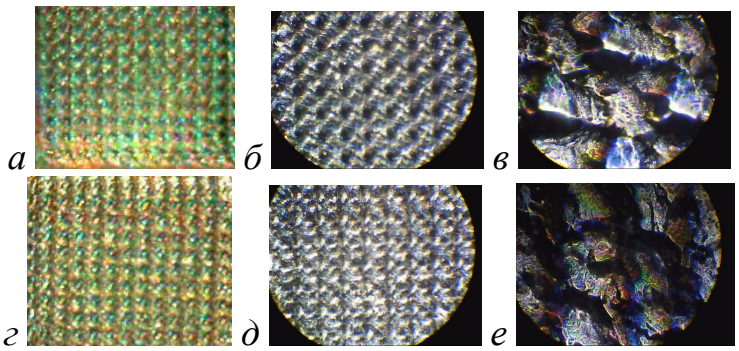


Рис. 2. Изображение поверхности оксидированного титана после обработки лазером по площади: *а, б* – энергия импульсов 5 мДж, расфокусировка +5 и –5 мм, соответственно; (*а, г*– увеличение в 10 раз, *в, д,* в 160 и *в, е* – 25х20 раз МИИ 4)

При лазерном нагревании титана на воздухе на ее поверхности образуются окрашенные продукты, имеющие различные цвета: прозрачные оксиды TiO_2, серебряный Ti_2O (толщина 19-43 нм), золотой -смесь TiO, Ti_2O (толщина 52–69 нм), а также смесь оксидов TiO_2, Ti_2O_3,TiO, Ti_2O которые в зависимости от толщины и температуры поверхности могут иметь цвета: коричневый (толщина 72-88 нм), фиолетовый (99-120 нм), голубой (142–307 нм) [5, 6]. Условия образования каждого из оксидов, а также толщина возникающих пленок окислов соответствуют своему температурному диапазону. Поэтому наиболее вероятной причиной такого лазерного окрашивания поверхности металлов является образование интерференционных пленок (по толщине соизмеримых с длиной волны лазера) в результате химического взаимодействия атомов и ионов титана с атмосферными газами при их нагревании. Этому способствует то, что титан имеет низкие величины теплопроводности κ=18,85 Вт/м·К, температуропроводности a=1,9·10^{-6} m^2/s и коэффициента отражения R=0,7. Все эти значения способствуют сохранению довольно высокой температуры подложки в промежутке между импульсами (100 мс) и естественно более благоприятным условиям для образования оксидов.

Необходимо отметить, что в отдельных случаях на поверхности титана возникают и цветовые пигменты. Так, например, при нагревании до температуры 1700–1790 К, то-есть чуть-чуть выше температуры плавления ($T_{пл}$=1668 К, $T_{кип}$ = 3280 К), на поверхности титана могут образовываться оксиды титана (II), имеющие непрозрачный зеленоват-золотисто-желтый цвет [7.]. Как видно из анализа снимков (см. рис. 1б и 1в) такие оксиды могут образовываться и в области вне зоны плавления-абляции. Особенно это заметно в случае положительной расфокусировки пучка. Размер окрашенной части примерно равен теоретическому размеру расфокусированного гауссового пучка (≈ 1 мм).

Таким образом, выполненные спектроскопические исследования характеристик приповерхностной лазерной плазмы, образуемой при воздействии

расфокусированных сдвоенных лазерных импульсов на титановую мишень, позволили определить оптимальное количество и параметры лазерных импульсов (энергию, интервал между импульсами, количество импульсов, величину расфокусировки) позволяющими продемонстрироватьи возможность формирования развитой поверхности титана и микро- и наноструктур из оксидов титана на ней при ее обработке сериями расфокусированных сдвоенных лазерных наносекундных импульсов в атмосфере воздуха.

Литература

1. Mills A., Hunte S. L. An overview of semiconductor photocatalysis // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 1997. V.108. №1. P. 1–35.
2. Linsebigler A. L., Lu G., Yates J. T. Photocatalysis on TiO_2 Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results // Chemical Reviews. 1995. V. 95. P. 735-758.
3. Завестовская И.Н., Игошин В.И., Канавин А.П.и др.. Теоретическое и численное исследование процессов лазерной аморфизации и получения мелкокристаллических структур. //Труды Физического института им. П.Н. Лебедева, 1993. Т.217. С. 3–12.
4. П.С. Кулешов, С.И. Миколуцкий, Ю.В. Хомич, Механизмы формирования поверхностного нанорельефа при лазерной абляции // ТВТ, 2024. Т. 62, выпуск 1. С. 112–120.
5. С. Горный, В. Вейко, Г. Одинцова и др. Цветная лазерная маркировка поверхности металлов // Фотоника. 2013. № 6. С. 34-44.
6. Вейко В. П., Одинцова Г. В., Андреева Я. М. и др. Метод изменения цвета поверхности титана при локальном окислении наносекундными лазерными импульсами. // Изв. вузов. Приборостроение, 2016. Т. 59, № 3. С. 243-248.
7. Самсонов Г.В., Борисова А.Л. и др. Физико-химические свойства окислов: Справочник. – М.: Металлургия, 1978.

RESEARCH OF THE FEATURES OF THE INFLUENCE OF THE TYPE OF DEFOCUSING ON THE PROCESSES OF FORMATION OF THE SURFACE OF TITANIUM WHEN EXPOSED TO IT BY SERIES OF DOUBLE LASER PULSES IN THE AIR ATMOSPHERE

Ermalitskaia K.F., Krasnoperov N.N., Voropay E.S., Zazhogin A.P.

Belarusian State University, Minsk

The influence of pulse energy, the magnitude and type of laser beam defocusing and the number of double laser pulses on the targeted formation of a developed surface of a titanium target by series of double laser pulses in an air atmosphere was studied. A laser multichannel atomic emission spectrometer LSS-1 was used to conduct the studies. The studies demonstrated the possibility of forming nanostructures from titanium oxides on the titanium surface when it is processed by defocused double laser nanosecond pulses.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79 25-45

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ НАПЫЛЕНИЯ НАНОПЛЕНОК ИЗ ОКСИДОВ ТИТАНА, ЛЕГИРОВАННЫХ АЛЮМИНИЕМ,ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ТИТАНА И АЛЮМИНИЯ СДВОЕННЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

Ермалицкая К.Ф., Красноперов Н.Н., Воропай Е.С., Зажогин А.П.

Белорусский государственный университет, Минск

Изучены возможности получения нанопленок из оксидов титана, легированных алюминием, при абляции сдвоенными лазерными импульсами гибридной мишени, состоящей из пластинок титана и алюминия, склеенных между собой Для проведения исследований использовали лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1. Проведены исследования влияния интервала между сдвоенными импульсами, количества импульсов и угла воздействия излучения на мишень на процессы при целеенаправленном формирование компонентного и зарядового состава лазерного факела направляемого на подложку.

В настоящее время тонкие слои диоксида титана широко используются в качестве тонкопленочных фотокатализаторов [1, 2]. Тонкопленочные системы на основе диоксида титана могут применяться для фотодеградации токсичных соединений, изготовления самоочищающихся поверхностей и т.д. Все достоинства оксидов титана связаны с относительно большим временем жизни фотогенерированных носителей заряда (250 нс) [1–3]; однако при этом TiO_2 обладает низкой квантовой эффективностью из-за слабого разделения фотогенерированных носителей заряда, ограниченным спектром поглощения в ультрафиолетовой области, что ограничивает возможности использование энергии солнечного света. Оксид титана имеет большую ширину запрещенной зоны (3,2 эВ), практически для всех кристаллических модификаций. В последнее десятилетие увеличился интерес к получению и изучению наноразмерных мезопористых порошков диоксида титана. Связано это с тем, что при уменьшении размеров частиц сокращается расстояние до зоны поверхностной реакции, что приводит к более эффективному переносу носителей заряда и лучшему разделению электроннодырочной пары. Также за счет уменьшения размеров частиц возрастает удельная поверхность диоксида титана, что позволяет количественно повысить число реакций, происходящих на поверхности [1, 2]. В последние годы было установлено, что в результате допирования тонких покрытий TiO_2, такими металлами, как Fe, Cu, Al, в количестве порядка 1 моль % образуются тонкопленочные системы с высокой фотокаталитической активностью [2].

Одним из возможных подходов к формированию пористых структур с максимально развитой поверхностью является синтез фрактальных струк-

тур [4]. Формированию кластеров металлов в лазерном факеле посвящен ряд работ [4]. Авторами показаны возможности синтеза фрактальных нитей, кластеров и многослойных структур при лазерном воздействии на металлические мишени в буферных газах, обсуждаются принципы формирования фрактальных структур при распространении плазмы в воздухе.

Тонкие пленки оксидов титана и прежде всего оксидов 4-валентного титана TiO_2 в их различных модификациях можно получать разными методами. Химические методы требуют нескольких стадий для получения наноразмерного объекта и утилизации отходов производства.

Разрабатываемый в данной работе подход, для напыления пленок с пористой поверхностью, основан на использовании высокоинтенсивных сдвоенных лазерных импульсов для распыления (абляции) в атмосфере воздуха гибридной мишени состоящей из пластинок титана (толщина 0,5 мм) и алюминия (толщина 0,23 мм) склеенных между собой. Возникающий в этом случае относительно небольшой (порядка несколько имлиметров) плазменный факел характеризуется высокой температурой, давлением, большой степенью ионизации элементов, поэтому он вполне способен обеспечить интенсивный поток частиц желаемой (высокой) энергии на близко расположенную подложку.

Для проведения исследований использовался лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1. Лазер обладает широкими возможностями как для регулировки энергии импульсов (до 80 мДж), так и временного сдвига между сдвоенными импульсами (0-100 мкс) излучения. Частота импульсов 10 Гц, средняя длительность импульса 15 нс. Лазерное излучение фокусировалось на образец с помощью ахроматического конденсора с фокусным расстоянием 104 мм. Размер пятна фокусировки примерно 50 мкм.

В настоящей работе приведены результаты исследования динамики процессов образования атомов и ионов Ti и Al при воздействии серий последовательных сдвоенных лазерных импульсов на гибридную мишень, состоящую из склеенных между собой пластинок титана ВТ1-0 (толщина 500 мкм) и алюминия АД1, при энергии импульсов 35 и 43 мДж. Исследования процессов напыления от интервала между импульсами показали, что при интервалах от 0 до 4 мкс титан распыляется, но напыления пленки практически не наблюдается, интенсивность линий малая (рис. 1а). С увеличением интервала наблюдается заметный рост интенсивности атомных и ионных линий титана Ti I (430,591 нм, $E_{возб}$ =3,727 эВ) и иона Ti II (439,500 нм, $E_{возб}$=3,91 эВ) и качество пленки, особенно заметный в интервалах от 5 до 15 мкс (рис. 1б и 1в). При дальнейшем увеличении интервала качество пленки ухудшается.

В качестве примера на рис 1а и 1б приведены результаты исследований по зависимости интенсивности 2 линий атомов Ti I (388,346 нм и 399,919) и ионов Ti II (390,155 нм), алюминия Al I (394,488 нм) от величи-

ны между импульсного интервала (1 и 9 мкс) и количества импульсов (угол 90 град). На рис. 1в приведена зависимость интенсивности линий титана для интервалов.

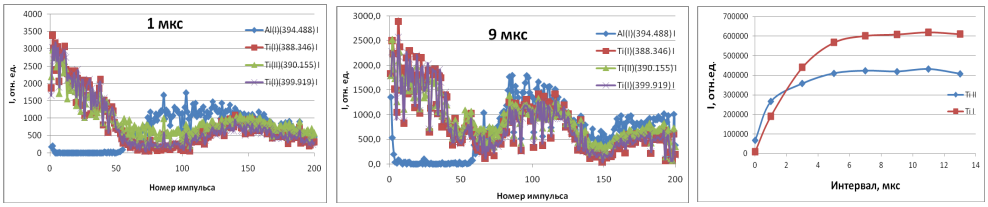


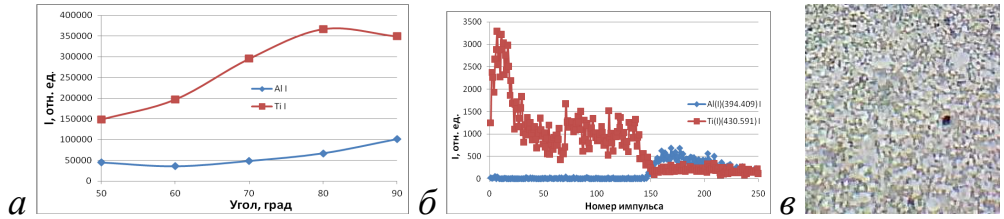
Рис. 1. Зависимость интенсивности линий Ti: а – от интервала; б – от угла; в – от количества импульсов для углов 50, 60 и 70 градусов

После пробивки пластинки из сплава титана ВТ1-0 в факел начинают поступать атомы и ионы алюминия совместно с атомами титана, испаряемые с боковой поверхности микроканала при абляции пластинки из алюминиевого сплава АД1.

Последние эффекты позволяют существенно уменьшить размеры продуктов абляции, образующихся на поверхности, в результате быстрого охлаждения в расширяющемся облаке, вплоть до нанометровых. Образование нанопорошков оксидов титана и алюминия достигается при взаимодействии паров металла с кислородом воздуха в условиях интенсивного турбулентного перемешивания образующихся продуктов как в канале, так на поверхности стекла. Интенсивное охлаждение не только тормозит рост частиц, но и увеличивает скорость образования зародышей конденсированной фазы.

Изменяя количество лазерных импульсов в серии и угол падения излучения на мишень возможно целенаправлено менять состав прекурсоров для изготовления тех или иных нанопленок.

Результаты исследований по зависимости интенсивности линий атомов Ti I и алюминия Al I для различных углов воздействия лазерных импульсов на мишень приведены на рис. 2а.



а *б* *в*

Рис. 2. Зависимости интенсивности линий атомов титана и алюминия: а – от углов: *б* – для угла 60 град; *в* – снимок поверхности образца после напыления оксидов титана и алюминия

При сравнении приведенных графиков видна четкая зависимость компонентного состава лазерного факела направляемого на подложку от угла падения лазерного луча. С увеличением угла падения большая доля

излучения отражается от поверхности мишени. Количество импульсов необходимых для пробивки мишени из титана увеличивается более чем в два раза при угле 60 градусов по сравнению с углом 90 град. (перпендикулярно поверхности мишени).

Используя полученные выше результаты, мы провели исследования процессов напыления нанопленок диоксида титана легированного алюминием. Напыление проводилось на поверхность стекла при воздействии серии из 200 сдвоенных лазерных импульсов на мишень, установленную под углом 60 градусов к падающему излучению и подложке на расстоянии 3 мм. Энергия импульсов излучения 35 и 43 мДж, интервал между импульсами 9 мкс (см. рис. 2*в*).

Изображение поверхности образца с напыленной пленкой, увеличенное с помощью микроскопа Микмед в 200 раз, приведено на рис. 1*г*.

Литература

1. Linsebigler A.L., Lu G., Yates J. T. Photocatalysis on TiO_2 Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results // Chemical Reviews. 1995. V. 95. P. 735-758.

2. A. Di Paola, S. Ikeda, G. Marc`ı, et al, Transition metal doped TiO_2: physical properties and photocatalytic behaviour // Int. J. Photoenergy, 2001. V. 3, P. 171–176.

3. Murashkina A.A., Murzin P.D., Rudakova A.V. et al. Influence of the Dopant Concentration on the Photocatalytic Activity: Al-Doped TiO_2 // Journal of Physical Chemistry C. 2015. V. 119. P. 24695–24703.

4. Н.Е. Каск, С.В.Мичурин, Г.М.Федоров. Фрактальные структуры в лазерном факеле // Квантовая электроника. 2003. Т. 33, № 1. С. 437-442.

STUDY OF THE POSSIBILITY OF DEPOSITING NANOFILMS FROM TITANIUM OXIDES ALLOYED WITH ALUMINUM BY SPRAYING TITANIUM AND ALUMINUM WITH DOUBLE LASER PULSES IN AIR

Ermalitskaia K.F., Krasnoperov N.N., Voropay E.S., Zazhogin A.P.

Belarusian State University, Minsk

The possibilities of obtaining nanofilms from titanium oxides doped with aluminum were studied by ablation with double laser pulses of a hybrid target consisting of titanium and aluminum plates glued together. A laser multichannel atomic emission spectrometer LSS-1 was used for the studies. The influence of the interval between double pulses, the number of pulses and the angle of radiation impact on the target on the processes during the targeted formation of the component and charge composition of the laser torch directed to the substrate were studied.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79 25-46

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕЖДУИМУЛЬСНОГО ИНТЕРВАЛА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ ПОРОШКОВ ПРИ АБЛЯЦИИ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ1-0 СДВОЕННЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

Ермалицкая К.Ф., Красноперов Н.Н., Воропай Е.С., Зажогин А.П.

Белорусский государственный университет, Минск

Изучено влияние энергии импульсов, интервала между сдвоенными лазерными импульсами на эффективность процессов образования порошков при абляции поверхности титановой мишени сериями сдвоенных лазерных импульсов в воздушной атмосфере. Для проведения исследований использовали лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1. Проведенные исследования продемонстрировали возможность формирования наноструктур из оксидов титана при абляции титана сдвоенными лазерными наносекундным импульсами.

Нанопорошковые технологии являются одними из самых распространенных направлений в нанотехнологиях. Получаемые с их помощью НП, находят применение в электронике, медицине, биологии, химическом катализе и других областях науки и техники, а также используются для конструирования объемных изделий. Поэтому развитие методов синтеза наночастиц с требуемыми свойствами, главными из которых являются размер, форма, химический состав, структура и степень агломерации НЧ, является очень важной практической задачей [1].

Основная проблема технологии наноматериалов – сохранение у элементов структуры химического состава и размеров, позволяющих относить их к наноструктуре. При взаимодействии с окружающей средой могут наблюдаться нежелательные химические превращения, агрегация и рост элементов структуры за пределы наноразмеров, приводящие к потере их уникальных свойств.

Лазерная абляция твердых тел наносекундными импульсами умеренной интенсивности используется во многих научных и практических приложениях. При использовании схем и методов двухимпульсного лазерного воздействия при различных углах падения на мишень и плазму возможно одновременное проведение высокочувствительного спектрального анализа [2], контроля концентрации возбужденных и заряженных частиц плазмы и управлением составом плазмы, направляемой на подложку.

Роль образующейся лазерной плазмы при импульсной лазерной абляции металлов является определяющей с точки зрения достижения эффективности их обработки. Несмотря на обилие результатов, есть еще и не достаточно освещенные вопросы. Одним из них является вопрос: как влияет величина микросекундного интервала времени между сдвоенными ла-

зерными импульсами (высокая частота повторения импульсов) на эффективность формирования состава лазерного факела при абляции металлических мишенях.

При проведении экспериментов использовался лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1. Лазер может работать с частотой повторения импульсов до 10 Гц на длине волны 1064 нм. Длительность импульсов ≈ 15 нс. Временной сдвиг между сдвоенными импульсами может изменяться от 0 до 100 мкс с шагом 1 мкс. Лазерное излучение фокусировалось на образец с помощью ахроматического конденсора с фокусным расстоянием 104 мм. Размер пятна фокусировки примерно 50 мкм.

Динамика формирования состава лазерного факела исследовалась методом многоканальной атомно-эмиссионной спектрометрии при воздействии одиночных и сдвоенных лазерных импульсов на пластинку из титанового сплава марки ВТ1-0 (толщина 500 мкм) от энергии (5–50 мДж) и временного интервала между сдвоенными импульсами в атмосфере воздуха.

Динамика пробоя исследована по поступлению вещества в плазму при воздействии серий из 200 сдвоенных лазерного импульсов на точку. В качестве примера на рис.1 приведены зависимости интенсивности линий титана в спектрах плазмы от числа сдвоенных лазерных импульсов при временных задержках между ними равных 1, 5 и 9 мкс, при энергии импульсов 35 мДж (плотности мощности одного канала ≈ $10^9 \div 5.10^9$ Вт.см$^{-2}$). На образование сквозного канала указывает начало резкого падения интенсивности линии титана (λ=388,3 нм) в последовательных спектрах испускания плазмы. Следует обратить внимание на то, что через некоторое число импульсов интенсивность линии немного возрастает, что свидетельствует о том, что начинают испаряться стенки канала, с переносом вещества к центру его.

Количество импульсов, соответствующих пробою отверстия, позволяет определить среднюю линейную скорость абляции для образца сплава титана (толщины 0,5 мм). Следует отметить, что при нулевой задержке между импульсами необходимое количество импульсов для пробоя образцов превышает несколько тысяч, что хорошо коррелирует с результатами работ [1-4]. При малых энергиях импульсов картина резко отличается. Для сравнения на рисунках 1 и 2 приведен картина режима практического чистого плавления и выдавливания расплава из лунки при энергии импульсов менее 5 мДж (рис. 1а, режим кинжального проплавления).

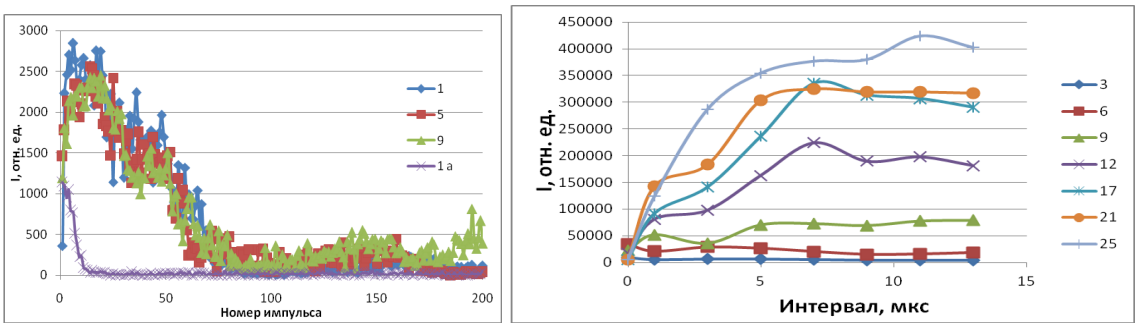
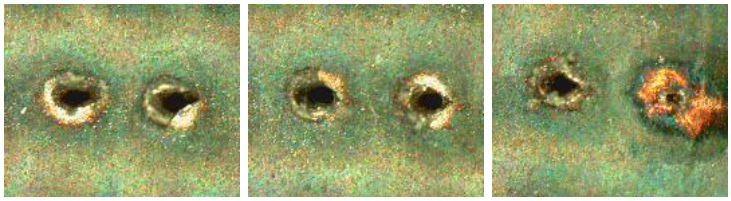


Рис. 1. Зависимость интенсивности линии титана: а – от количества импульсов на точку для времени интервалов между первым и вторым импульсом 1, 5 и 9 мкс при энергии импульсов 35 мДж (1, 5 и 9, соответственно) и 1 а – 1 мкс, энергия 5 мДж; б – от интервала для разных энергий импульсов

Существенным недостатком, ограничивающим применение моноимпульсного лазерного воздействия для получения качественных НП является механизм объемного испарения, который может быть источником конденсированного вещества и капель в продуктах испарения [3]. В отличие от этого, при использовании режима сдвоенных импульсов на первичные процессы плазмообразования будут накладываться процессы нагрева и испарения аэрозолей, нанокластеров, фракталов, образовавшихся при воздействии на поверхность объекта излучения первого импульса, вторым импульсом излучения.

При импульсно-периодическом высокоинтенсивном лазерном воздействии в одну точку мишени, в результате процесса лазерной абляции, происходит вынос массы вещества мишени и образуется микроканал. При увеличении глубины кратера, формируемого при импульсно-периодическом лазерном воздействии на мишень, образующийся конический микроканал может служить аналогом сопла, проходя через которое, вещество мишени будет более эффективно кластеризоваться. Концентрация кластеров и их распределение за срезом сопла будет определяться геометрией сопла. Сопло с коническим профилем имеет преимущество: распределение плотности кластеров за его срезом является наиболее однородным. При расширении газа сквозь сопло, кластеризации подвергается не все атомы или молекулы газа, а только определенный их процент. На рис. 2 приведены снимки входных отверстий (форма сопла) при воздействии импульсов с энергией 30 мДж.



9 7 5 3 1 0 мкс

Рис. 2. Фотографии кратеров на поверхности алюминиевой фольги после воздействия сдвоенных лазерных импульсов

Наличие резкого временного порога скорости абляции указывает на то, что причину наблюдаемых явлений необходимо искать в особенностях плазмообразования внутри образующегося достаточно глубокого канала. Картина плазмообразования в воздушной среде существенно усложняется из-за явления последействия, практически неизбежного при формировании глубоких отверстий сдвоенными импульсами, что вызывается накоплением аблированных микрочастиц и кластеров в атмосфере образующихся полостей.

При этом воздействие последующего импульса, следующего через небольшой интервал времени, приводит к низкопороговому оптическому пробою воздуха, насыщенного микрочастицами металла, и появлению одновременно двух разнесенных в пространстве плазменных образований. Одним из них является обычный факел лазерной плазмы на аблируемой поверхности и затем на дне формируемого отверстия, а другим – плазменно-пылевое облако, также возникающее на оси лазерного пучка, но отстоящее от поверхности на определенное расстояние. В этом случае появление плазменно-пылевой области, отстоящей на определенное расстояние от поверхности, приводит с одной стороны к дополнительной экранировке, а с другой, по видимому более важной, к созданию высокотемпературного плазменного облака высокого давления, разлетающегося преимущественно по направлению отверстия. Последний эффект и обуславливает увеличение скорости пробивки по сравнению с одиночными или редко повторяющимися импульсами. Так, к примеру, в работе [2] скорость пробивки менее 1 мкм/импульс при сравнимых плотностях мощности одиночного импульса в режиме редко повторяющихся импульсов, что примерно на порядок меньше (≈10 мкм/импульс) для высокой частоты повторения (10–200 кГц).

Подтверждением указанного механизма может служить и тот факт, что при увеличении задержки между импульсами скорость пробивки отверстия уменьшается. Результаты этих экспериментов позволяют полуколичественно определить среднее время существования и средний размер микрочастиц металла, образующихся в воздушной среде в канале.

Последние эффекты позволяют существенно уменьшить размеры продуктов абляции, образующихся на поверхности, в результате быстрого охлаждения в расширяющемся облаке, вплоть до нанометровых. Образование нанопорошков оксидов титана достигается при взаимодействии паров

металла с кислородом воздуха в условиях интенсивного турбулентного перемешивания образующихся продуктов на выходе из сопла. Интенсивное охлаждение не только тормозит рост частиц, но и увеличивает скорость образования зародышей конденсированной фазы.

Таким образом, выполненные спектроскопические исследования характеристик приповерхностной лазерной плазмы, образуемой при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на титановую мишень, позволили определить параметры лазерных импульсов (энергию, интервал между импульсами, количество импульсов) позволяющими продемонстрироватьи возможность формирования нанопорошков из оксидов титана при абляции титановой мишени сериями сдвоенных лазерных наносекундных импульсов в атмосфере воздуха.

Литература

1. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев – М., 2005. – 416 с.
2. Климентов С.М., Гарнов С.В., Конов В.И., Кононенко Т.В. // Труды ИОФ им. А.М. Прохорова РАН. – 2004. –Т. 60. – С. 13-29.
3. Завестовская И.Н., Игошин В.И., Канавин А.П. и др. Теоретическое и численное исследование процессов лазерной аморфизации и получения мелкокристаллических структур. // Труды Физического института им. П.Н. Лебедева, 1993. Т. 217. С. 3–12.

STUDY OF THE INFLUENCE OF INTERPULSE INTERVAL ON THE EFFICIENCY OF POWDER FORMATION PROCESSES DURING ABLATION OF TITANIUM ALLOY VT1-0 BY DOUBLE LASER PULSES

Ermalitskaia K.F., Krasnoperov N.N., Voropay E.S., Zazhogin A.P.

Belarusian State University, Minsk

The effect of pulse energy and interval between double laser pulses on the efficiency of powder formation processes during ablation of a titanium target surface by series of double laser pulses in an air atmosphere was studied. A laser multichannel atomic emission spectrometer LSS-1 was used for the studies. The studies demonstrated the possibility of forming nanostructures from titanium oxides during titanium ablation by double laser nanosecond pulses.

УДК 621.382 25-47

ВЛИЯНИЕ ОКИСЛИТЕЛЕЙ НА ПАРАМЕТРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК СУЛЬФИДА СВИНЦА

Мирошникова И.Н.[1], Мирошников Б.Н.[1], Маскаева Л.Н.[2,3], Попов А.И.[1], Макарук К.С.[1,4], Горячев А.В.[4], Едельбекова П.А.[4]

[1]Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва
[2]Уральский институт ГПС МЧС России, Екатеринбург
[3]Уральский федеральный университет, Екатеринбург
[4]Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, Москва

В настоящей работе представлены результаты сравнения параметров поликристаллических пленочных структур сульфида свинца PbS, полученных химическим методом с добавлением в реакционную ванну окислителей: перманганата калия $KMnO_4$ и дихромата калия $K_2Cr_2O_7$. Было установлено, что кривые релаксации фототока для структур с $K_2Cr_2O_7$ описываются одной экспонентой, и наблюдается увеличение времени жизни носителей заряда (с 0,84 до 1,26 мс) при увеличении концентрации прекурсора. Кривые релаксации структур с $KMnO_4$ описываются двумя экспонентами: наибольшее время релаксации составляет 0,5 мс и не изменяется в зависимости от концентрации окислителя, тогда как меньшая составляющая времени увеличивается в 2,5 раза при увеличении прекурсора в реакционной ванне.

Сульфида свинца PbS – узкозонный полупроводниковый материал, востребованный в качестве устройства регистрации излучения в ИК-области спектра от 1 до 3 мкм [1]. Поликристаллические пленочные структуры получают как физическими, так и химическими методами, однако последний в настоящее время наиболее востребован, поскольку дает возможность для модификации параметров путем добавления в реакционную ванну прекурсоров различной природы.

Ранее отмечалось, что добавление в реакционную ванну окислителей при химическом осаждении ведет к увеличению обнаружительной способности (основного параметра для фотоприемников первого поколения) за счет включения кислорода в решетку PbS в виде фаз PbO, $PbSO_4$$PbSO_3$, PbO·$PbSO_4$·$PbSO_4$ и других. Наличие связанного кислорода в структуре способствует увеличению времени жизни основных носителей заряда (дырок) за счет создания сенсибилизирующих центров внутри запрещенной зоны [2].

В качестве окислителей при рассматриваемом методе осаждении могут выступать: пероксид водорода (H_2O_2)H_2O_2 [3], смеси пероксодисульфата калия $K_2S_2O_8$$K_2S_2O_8$ и H_2O_2 [4] и др. Однако ранее не было проведено исследований по сравнению влияния окислителей дихромата калия

$K_2Cr_2O_7$ и перманганата калия $KMnO_4$ $KMnO_4$ на времена жизни носителей заряда и их связи с послойным элементным составом.

В настоящей работе было проведено исследование элементного состава по глубине методом Оже-электронной спектроскопии с послойным травлением и времени жизни носителей заряда для структур PbS, осажденных на подложки из аморфного предметного стекла (SiO_2) из реакционной ванны с добавлением окислителей $K_2Cr_2O_7$ в молярном содержании от 10^{-5} до 10^{-4} моль/л и $KMnO_4$ в молярном содержании от 0.5 до 5 ммоль/л. Все образцы были получены при одинаковой температуре реакционной ванны T = 80 °C и при одинаковом времени осаждения t = 90 мин.

Исследование элементного состава по глубине было проведено методом Оже-электронной спектроскопии на приборе Jeol Jamp-9510F. Порог чувствительности составляет 0.5 ат. %. Рассчитанная средняя скорость травления составляет 63 нм/мин для прекурсора перманганата калия и 9,2 нм/мин для прекурсора дихромата калия.

На рис. 1 представлены профили распределения по глубине основных элементов структуры: свинца Pb, серы S и кислорода O для типичных образцов групп: с прекурсором $KMnO_4$ (рис. 1,а), добавленного в реакционную ванну в содержании 5 ммоль/л и $K_2Cr_2O_7$ (рис. 1,б) в содержании $5 \cdot 10^{-5}$ моль/л.

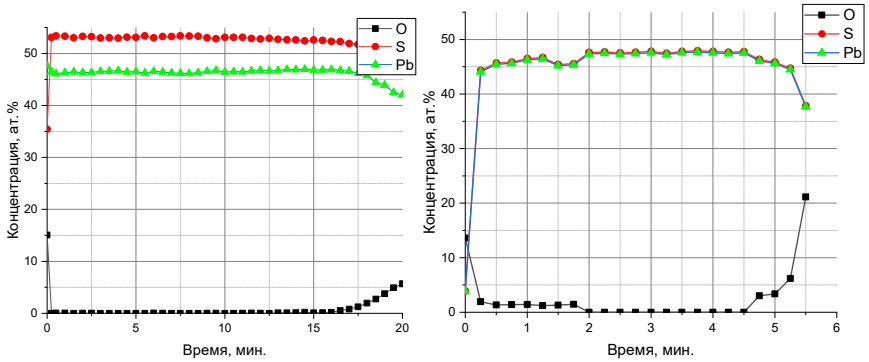


Рис. 1. Профиль распределения относительной концентрации атомов по глубине от времени травления для образов: а) $KMnO_4$ = 5 ммоль/л.; б) $K_2Cr_2O_7$ = 5 10^{-5} моль/л

Наличие атомов кислорода на поверхности всех образцов в нулевой момент времени травления связано с его адсорбцией при контакте с воздушной средой и окислением самой поверхности. Для образца с прекурсором перманганата калия после 25 секунд после начала ионного травления концентрации O резко уменьшается, концентрация S и Pb становится приблизительно постоянной: Pb – ~47.3…47.5 ат. % и S – 45.4…47.8 ат. %. Незначительные уменьшения концентраций этих элементов связаны с локальным увеличением концентрации углеводородных загрязнений. Относительная атомарная концентрация кислорода непостоянна на протяжении всего времени травления: в промежуток времени от 25 секунд до 2 минут

варьируется от 1.2 до 1.4 ат. %. Для образца с $K_2Cr_2O_7$ после 25 секунд концентрация серы и свинца становится приблизительно постоянной: S – ~52.5…53.3 ат. % и Pb – ~46.2…46.9 ат. %.

В конце измерения профилей распределения зафиксирован рост кислорода из подложки (начало границы раздела пленка/подложка) и спад концентрации свинца и серы. Увеличение кислорода может быть связано с подслоем гидроксида свинца $Pb(OH)_2$, который является центром кристаллизации и формируется на ранней стадии осаждения структур.

При сравнении двух групп образов можно отметить, что в образце с прекурсором $K_2Cr_2O_7$ концентрация серы превышает концентрацию свинца на протяжении всего времени травления структуры (без учета поверхности и подложки), в образцах с $KMnO_4$ концентрация основных элементов (Pb и S) практически одинаковая. Было замечено, что с увеличением концентрации $KMnO_4$ в реакционной ванне кислород локализуется не только на поверхности структур, но и проникает в толщу пленки. Скорость травления для групп образов сильно отличается, по этой причине стоит учитывать неравномерность травления (эффект кратерирования).

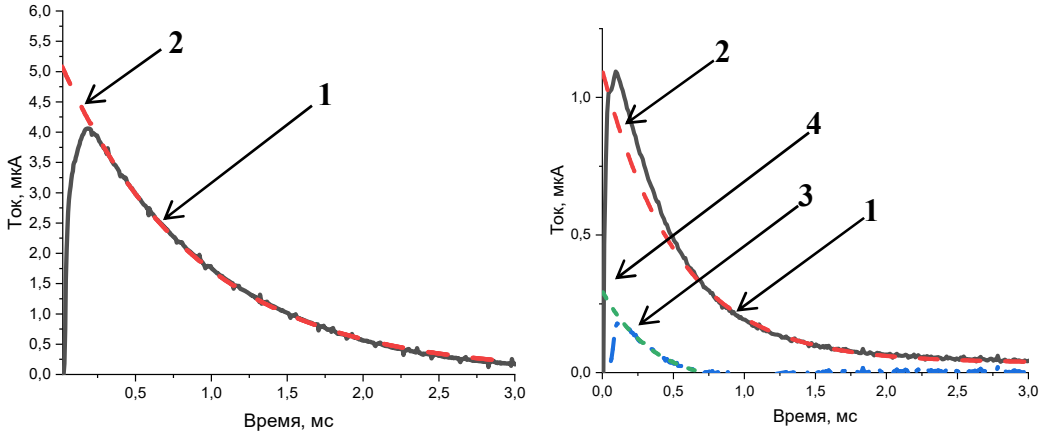
Постоянная времени релаксации фотопроводимости τ (время жизни основных носителей заряда) исследовалась на автоматизированной системе измерения электрофизических параметров полупроводников ASEC-03E (СКБ ИРЭ РАН, г. Фрязино) по релаксационным кривым после импульсного освещения фотовспышкой Unomat B24 LZ24/GN80 с температурой 5600 К и временем 0,01 с. Предел допустимой погрешности для измерений на ASEC-03 составляет около 0,1 мс.

На рис. 2 представлены кривые релаксации фототока для типичного образца с прекурсором $K_2Cr_2O_7$ (а) и $KMnO_4$ (б). Обработка кривых релаксации была проведена с помощью пакета численного анализа данных Origin Pro 2021.

Для типичного образца группы с прекурсором дихромата калия кривая релаксации описывается одной экспонентой (рис. 2,а), в то время как для образца с перманганатом калия (рис. 2,б) кривую можно описать двумя экспонентами с разными постоянными времени.

В таблице представлены данные по временам жизни носителей заряда (τ) и темновому сопротивлению (R_T) типичных образов исследуемых групп.

С увеличением концентрации $KMnO_4$ от 0,5 до 5 ммоль/л сопротивление увеличивается более чем в 2 раза, для $K_2Cr_2O_7$ от 10^{-5} до 10^{-4} моль/л. R_T увеличивается более чем в 3 раза.



(а) (б)

Рис. 2. Кривые релаксации фототока образцов с прекурсорами $K_2Cr_2O_7$ (а) и $KMnO_4$ (б): 1 – экспериментальная кривая; 2 – аппроксимация эксперимента экспоненциальной функцией в области больших времен; 3 – разница между кривыми 1 и 2; 4 – аппроксимация эксперимента экспоненциальной функцией в области малых времен

Таблица. Параметры исследуемых образцов

Состав	τ, мс	R_T, кОм
$[KMnO_4]$ = 0,5 ммоль/л	0,47 и 0,13	32
$[KMnO_4]$ = 5 ммоль/л	0,54 и 0,32	67
$[K_2Cr_2O_7] = 10^{-5}$ моль/л	0,84	4
$[K_2Cr_2O_7] = 10^{-4}$ моль/л	1,26	14

Включение кислорода в решетку структуры способствует образованию различных кислородосодержащих фаз, что может приводить к уменьшению концентрации равновесных носителей заряда за счет их захвата на ловушечные уровни. Таким образом, за счет уменьшения темновой проводимости σ_0 увеличивается темновое сопротивление, что приводит к увеличению отношения $\Delta\sigma/(\sigma_0 \cdot \Phi_э)$ – приращение фотопроводимости $\Delta\sigma$, отнесенное к темновой проводимости и к эффективному значению мощности излучения $\Phi_э$ при фиксированной частоте модуляции, что однозначно влияет на увеличение основных параметров фоточувствительных элементов (обнаружительной способности и чувствительности).

Наблюдается однозначная зависимость увеличения мольности прекурсора дихромата калия и увеличения времени жизни носителей заряда (с 0,84 до 1,26 мс), что свидетельствует об образовании акцепторных ловушечных уровней внутри запрещенной зоны сульфида свинца, которые способны уменьшать вероятность рекомбинации носителей заряда. Для образцов с прекурсором $KMnO_4$ наибольшее время релаксации составляет приблизительно 0,5 мс и не изменяется в зависимости от концентрации окислителя (в пределах погрешности), однако появляется вторая составляющая

времени жизни. Увеличение меньшей составляющей времени жизни в 2,5 раза происходит при увеличении мольности раствора с 0,5 до 5 ммоль/л, которое можно объяснить проникновение кислорода вглубь структуры.

По результатам работы можно сделать вывод, что прекурсор $K_2Cr_2O_7$ обладает большими окислительными свойствами по сравнению с $KMnO_4$, в следствие чего время жизни носителей заряда превосходит типичные показатели для поликристаллических пленок сульфида свинца, исследованные нами ранее.

Литература

1. Равич Ю.И., Ефимова Б.А., Смирнов И.А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS // М.: «Наука». 1968. – 383 с.
2. Blount, G.H., Schreiber P.J., Smith D.K., Yamada R.T. Variation of the properties of chemically deposited lead sulfide film with the use of an oxidant // J. Applied Physics. 1973. V. 44. N. 3. P. 978-981.
3. Wolten, G.M. A Note on the Chemistry of Lead Sulfide Sensitization for Infrared Detection // J. Electrochem. Soc. 1975. 122 (8), 1149.
4. Naşcu, C. The study of lead sulphide films. VI. Influence of oxidants on the chemically deposited PbS thin films // Materials Science and Engineering. 1996. B. 41(2). P. 235–240.

INFLUENCE OF OXIDIZING AGENTS ON THE PARAMETERS OF POLYCRYSTALLINE LEAD SULFIDE FILMS

Miroshnikova I.N.[1], Miroshnikov B.N.[1], Maskaeva L.N.[2,3], Popov A.I.[1], Makaruk K.S.[1,4], Goryachev A.V.[4], Edelbekova P.A.[4]

[1]National Research University "MPEI", Moscow
[2]Ural Institute of the State Fire Service, Yekaterinburg
[3]Ural Federal University, Yekaterinburg
[4]Institute of Nanotechnology and Microelectronics of the RAS, Moscow

Polycrystalline films of lead sulfide were obtained by a chemical method with the addition of oxidizing agents: potassium permanganate and potassium dichromate. It was found that the photocurrent relaxation curves for structures with potassium dichromate are described by a single exponential. In this case, an increase in the lifetime of charge carriers (from 0.84 to 1.26 ms) is observed with an increase in the precursor concentration. In contrast to this the relaxation curves of the structures with potassium permanganate are described by two exponentials: the longest relaxation time is 0.5 ms and this time does not change depending on the oxidizer concentration. While the smaller component of the relaxation time increases by 2.5 times with increasing precursor in the reaction bath. The paper draws conclusions about the effectiveness of the influence of precursors on the lifetime of charge carriers.

УДК 620.3: 681.586 25-56

СИНТЕЗ g-C_3N_4 И ЕГО КОМПОЗИТА С WS_2 ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СПИРТОВ

Буй К.Д.[1], Налимова С.С.[1], Шомахов З.В.[2,3], Гукетлов А.М.[2], Мошников В.А.[1]

[1]Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург
[2]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[3]Институт информатики и проблем регионального управления ФНЦ КБНЦ РАН, Нальчик

В работе представлены методика термической поликонденсации мочевины для получения объемного g-C_3N_4, способ формирования наполистовых плёнок на керамических сенсорных подложках и синтез композита g-C_3N_4/WS_2. Исследована хеморезистивная чувствительность к парам этанола и изопропанола при 1000–2000 ppm. Чистый g-C_3N_4 демонстрирует линейный отклик 1,1–7,6 при 150–250 °C. Композит g-C_3N_4/WS_2 работает при комнатной температуре, обеспечивая более низкие, но стабильные отклики. Показаны температурно-активируемый механизм через кислородные радикалы и перспективность материалов для недорогих ЛОС-сенсоров. Рентгенодифракционная характеризация подтвердила формирование фаз WS_2 и g-C_3N_4. Результаты расширяют перспективы дальнейшей оптимизации 2Д-наноматериалов.

Контроль паров спиртов важен для экологии, безопасности и медицины. Широко применяемые хеморезистивные сенсоры на оксидах требуют высоких температур [1]. Двумерные наноматериалы с большой поверхностью работают при комнатной температуре, экономя энергию [2, 3]. Особенно перспективен графитоподобный нитрид углерода g-C_3N_4 – термодинамически устойчивый, легко синтезируемый полимер из конденсированных триазиновых и гептазиновых слоёв, обладающий уникальными физико-химическими свойствами [4 – 6]. Подходит для мониторинга летучих органических соединений в реальном времени.

g-C_3N_4 получают термической поликонденсацией дешёвых прекурсоров – мочевины или меламина; последующая жидкофазная или ультразвуковая эксфолиация переводит объёмный продукт в тонкие двухмерные листы. Материал характеризуется шириной запрещённой зоны ≈2,7 эВ, высокой термической и химической стойкостью, а также избытком атомов азота на поверхности, активно адсорбирующей кислород [7]. В сенсоре адсорбированный O^-/O_2^- взаимодействует со спиртовыми молекулами с образованием электронов и соответствующим изменением сопротивления, что регистрируется как увеличенеи или уменьшение тока [8–10].

Для повышения чувствительности сенсоров на основе g-C_3N_4 в со-

временной литературе широко исследуются композитные структуры, содержащие данный материал, в том числе с оксидами металлов и углеродными наноматериалами. Такие гетероструктуры демонстрируют выраженный синергетический эффект: за счёт взаимного каталитического усиления и оптимизации переноса носителей заряда удаётся существенно повысить отклик и селективность сенсоров по отношению к парам спиртов [11, 12].

Прямое использование немодифицированного g-C_3N_4 в газовых сенсорах изучено недостаточно. Изучение его собственных характеристик нужно для определения пределов чувствительности при выявлении спиртов и понимания механизмов хеморезистивного отклика без влияния добавок. Полученные данные помогут создать эффективные наноструктурированные сенсоры. Также планируются разработка и проверка композитных чувствительных слоёв g-C_3N_4/WS_2, улучшая селективность и стабильность устройств.

Навеску мочевины помещали в закрытый фарфоровый тигель и подвергали термической поликонденсации в муфельной печи при 550 °C. Полученный рыхлый жёлтый продукт охлаждали до комнатной температуры и последовательно промывали раствором HNO_3, изопропанолом и дистиллированной водой до нейтрального pH. Осадок сушили при 80 °C (12 ч) в воздушной атмосфере, затем растирали в агатовой ступке, получая чистый однородный порошок g-C_3N_4.

Порошок g-C_3N_4диспергировали в воде, ультразвук обеспечил частичную эксфолиацию и стабильный коллоид. Полученную суспензию равномерно нанесли на керамическую межэлектродную подложку сенсора. После испарения воды плёнку термообработали при 450 °C, закрепляя адгезию и структуру, формируя готовый чувствительный элемент сенсора нанометрической толщины и повышенной прочностью.

На рисунке 1 приведена температурная зависимость отклика сенсора на основе чистого g-C_3N_4 при воздействии паров изопропанола (1000 ppm) в условиях различной температуры – 150 °C, 200 °C и 250 °C. С повышением температуры наблюдается отчётливый рост отношения сопротивлений R_a/R_g: от 1,2 при 150 °C до более чем 4,5 при 250 °C.

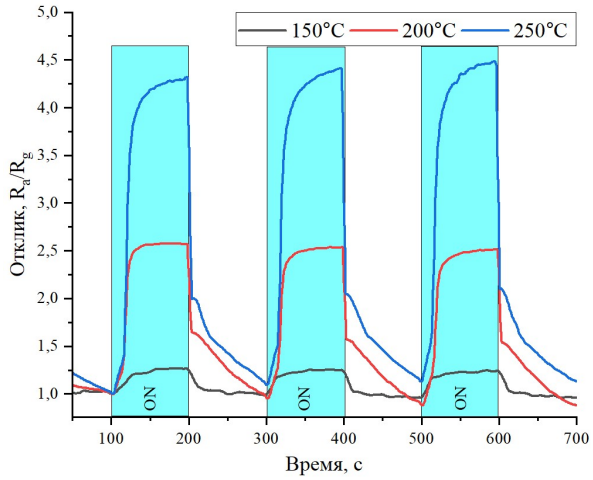
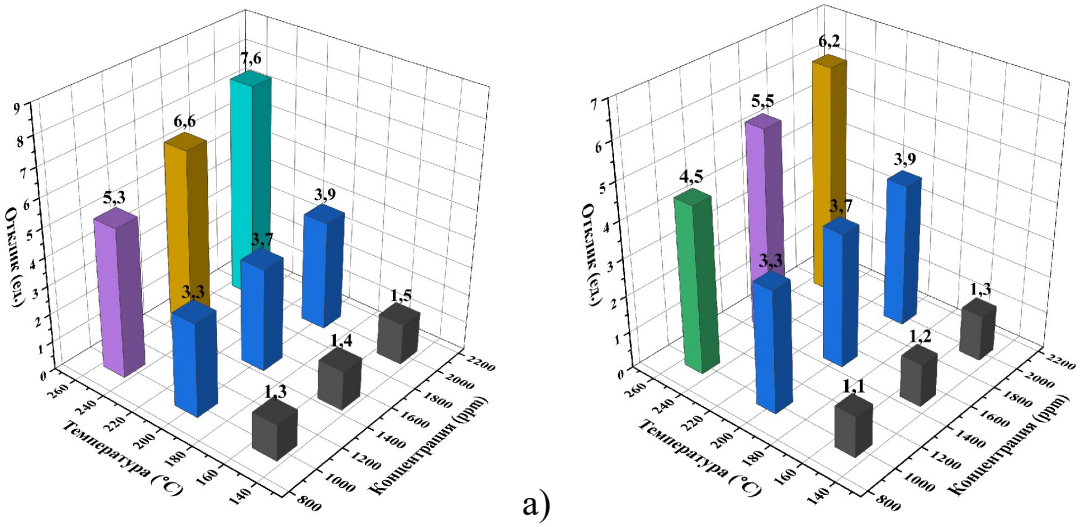


Рис. 1. Температурная зависимость отклика сенсора на изопропанол

Трёхмерные графики на рис. 2 демонстрируют совместное влияние температуры 150–250 °C и концентрации 1000–2000 ppm на отклик хеморезистивного сенсора из немодифицированного g-C_3N_4 при детектировании изопропанола и этанола. Для обоих пар наблюдается одинаковый двойной тренд: чем выше температура и содержание газа, тем больше чувствительность. При 150 °C значения R_a/R_g минимальны (≈1,1–1,5), что свидетельствует о слабой активации поверхностных центров. Нагрев до 200 °C увеличивает отклик до 3,3–3,9, а 250 °C обеспечивает максимальные ответы: 5,3–7,6 для изопропанола и 4,5–6,2 для этанола. Зависимость остаётся почти линейной во всём диапазоне, облегчая калибровку сенсора и подтверждая температурно-активируемый механизм через рост адсорбированных кислородных радикалов.



а) б)

Рис. 2 Температурно-концентрационная зависимость отклика сенсора g-C_3N_4 на а) изопропанол, б) этанол

Для формирования композита g-C_3N_4/WS_2 были использованы порошки Na_2WO_4 и CH_4N_2S, которые выдерживались в муфельной печи при температуре 550 °C в течение 2 часов.

Проведено исследование фазового состава полученного порошка при помощи рентгеновского дифрактометра ДРОН-6. Результаты представлены на рис. 3а.

На основе полученного композитного порошка были сформированы газочувствительные слои по методике, описанной выше. Результаты исследования отклика полученных слоев к парам этанола и изопропанола при комнатной температуре представлены на рис. 3б.

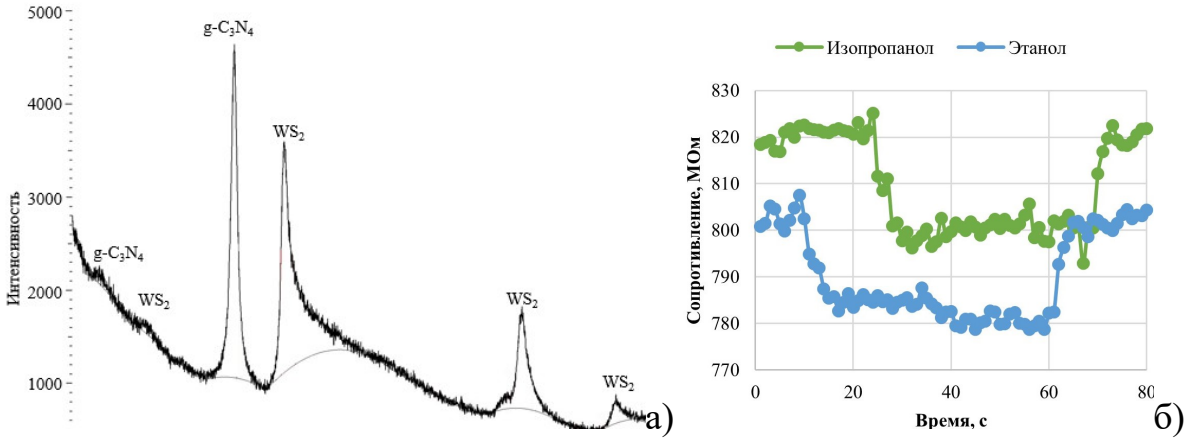


Рис. 3. Дифрактограмма (а) и временная зависимость отклика (б) композита g-C_3N_4/WS_2

В результате установлено, что немодифицированный g-C_3N_4 обеспечивает стабильный, линейный отклик на пары этанола и изопропанола при 150–250 °C. Температурная активация и воспроизводимость подтверждают перспективность материала для хеморезистивных ЛОС-сенсоров в мониторинговых системах летучих органических соединений при низкой стоимости изготовления. Отклик композитного газочуствительного слоя g-C_3N_4/WS_2 намного меньше, но при этом преимуществом является отсутствие необходимости в нагреве.

Литература

1. Патент № 2806670 C1 Российская Федерация, МПК G01N 27/12, B82Y 30/00, B82Y 40/00. Хеморезистивный газовый сенсор и способ его изготовления: № 2023113274: заявл. 23.05.2023: опубл. 02.11.2023 / С.С. Налимова, А.Ю. Гагарина, Ю.М. Спивак [и др.].
2. Налимова, С.С. Новые материалы наноархитектоники / С.С. Налимова, В.А. Мошников // Нано- и микросистемная техника. – 2025. – Т. 27, № 2. – С. 55-67.
3. Laera, A.M. Chemiresistive materials for alcohol vapor sensing at room temperature / A.M. Laera, M. Penza // Chemosensors. – 2024. – Vol. 12, No. 5. – P. 78.
4. Recent advances in g-C_3N_4 based gas sensors for the detection of toxic and flammable gases: A review / V.S. Bhati, R. Raliya, V. Takhar [et al.] // Nano Express. – 2022. – Vol. 3, No. 1. – P. 014003.
5. Recent advances in chemoresistive gas sensors using two-dimensional materials / Ja.K. Ko, In.H. Park, K. Hong, Ki.Ch. Kwon // Nanomaterials. – 2024. – Vol. 14, No. 17. – P. 1397.
6. Подходы к синтезу g-C_3N_4 для межфазного молекулярного дизайна в перовскитных солнечных элементах / К.Д. Буй, С. С. Налимова, В.А. Мошников [и др.] // Нано- и микросистемная техника. – 2024. – Т. 26, № 3. – С. 136-144.

7. Enhanced room-temperature ethanol detection by quasi 2D nanosheets of an exfoliated polymeric graphitized carbon nitride composite-based patterned sensor / Sh. Sahani, S. Ju. Park, Yu. Myung [et al.] // ACS Omega. – 2022. – Vol. 7, No. 46. – P. 41905-41914.
8. WO_{3-x}/WS_2 Nanocomposites for fast-response room temperature gas sensing / S.S. Nalimova, Z.V. Shomakhov, O.D. Zyryanova [et al.] // Molecules. – 2025. – Vol. 30, No. 3. – P. 566.
9. Газочувствительность нанокомпозитов WO_x/WS_2 при комнатной температуре и ультрафиолетовом облучении / З.В. Шомахов, С.С. Налимова, О.Д. Зырянова [и др.] // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – № 16. – С. 1060-1070.
10. VOC gas sensors based on zinc stannate nanoparticles decorated with silver / S.S. Nalimova, Z.V. Shomakhov, D. A. Kozodaev [et al.] // Nanomaterials. – 2024. – Vol. 14, No. 24. – P. 1993.
11. Sub-ppm level ethanol detection based on the gas sensor of g-C_3N_4-ZnO-Zn_2SnO_4 nanocomposite / Di. Wu, Sh. Sadaf, H. Zhang, A. Akhtar // Chemical Physics Letters. – 2023. – Vol. 817. – P. 140425.
12. Room-temperature chemiresistive g-C_3N_4/Ag_2ZrO_3 nanocomposite gas sensor for ethanol detection / S.P. Subin David, S. Veeralakshmi, M. Sakthi Priya [et al.] // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2022. – Vol. 33, No. 14. – P. 11498-11510.

SYNTHESIS g-C_3N_4 AND ITS COMPOSITE WITH WS_2 FOR ALCOHOL DETECTION

Bui C.D.[1], Nalimova S.S.[1], Shomakhov Z.V.[2], Guketlov A.M.[2], Moshnikov V.A.[1]

[1]Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI"
[2]Kabardino-Balkarian State University

The study describes a thermal polycondensation method using urea to obtain bulk g-C_3N_4, a procedure for depositing nanolayer films on ceramic sensor substrates, and the synthesis of a g-C_3N_4/WS_2 composite. Chemoresistive responses to ethanol and isopropanol vapors at 1000–2000 ppm were investigated. Pristine g-C_3N_4 shows a linear response of 1.1–7.6 at 150–250 °C. The g-C_3N_4/WS_2 composite operates at room temperature, delivering lower but stable signals. A temperature-activated mechanism via oxygen radicals is demonstrated, highlighting the promise of materials for low-cost VOC-sensors. X-ray diffraction confirms the formation of WS_2 and g-C_3N_4 phases, broadening prospects for further optimization of 2D nanomaterials.

УДК: 537.9, 621.793 25-64

ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ ДОМЕННЫХ СТЕНОК ПОД ДЕЙСТВИЕМ ТОКА В СТРУКТУРЕ МУЛЬТИФЕРРОИК/ПОЛУЛУПРОВОДНИК: ПЕРЕХОД К МЕМРИСТОВНОМУ ПОВЕДЕНИЮ

Рамазанов Ш.М., Гаджиев Г.М., Зейналов Р.З.

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала
ramazanv@mail.ru

В гибридной структуре BiFeO3/TiO_2(NTs)/Ti, где мультиферроик $BiFeO_3$ осажден на массивы нанотрубок TiO_2, сформированные на титановом подслое, под действием тока происходит смещение и переключение доменных стенок. Это вызывает изменение поляризации и локальной проводимости, формируя память сопротивления, характерную для мемристоров. Такой переход от сегнетоэлектрического поведения к мемристивному открывает путь к созданию энергоэффективных элементов памяти и логики на основе мультиферроиков. Изучено поведение токов деполяризации пленочной структуры после снятия внешнего напряжения в зависимости от его длительности и амплитуды. Установлена сложная, неоднозначная связь между временем релаксации и временем поляризации, что связано с конкуренцией токов утечки и захватом/эмиссией носителей на дефектные уровни. Это подчеркивает важность интерфейсных состояний и дефектной инженерии в управлении переключением и памятью в таких гетероструктурах.

Введение

Гибридные структуры, сочетающие функциональные оксиды и наноструктурированные подложки, такие как $BiFeO_3/TiO_2$(NTs)/Ti, представляют собой перспективные системы для реализации элементов памяти нового поколения. Мультиферроик $BiFeO_3$ (BFO) обладает одновременно сегнетоэлектрическими и антиферромагнитными свойствами, что делает его особенно интересным для мультифункциональной электроники [1]. Доменные стенки в BFO подвержены смещению под действием внешнего электрического поля, и это смещение сопровождается изменением локальной поляризации и проводимости [2]. В ряде работ было показано, что движение доменных стенок может индуцироваться не только полем, но и током, что особенно важно для структур с токоуправляемым переключением [3].

Нанотрубки TiO_2(NTs) обладают высокой площадью поверхности и хорошей проводимостью при модификации кислородными вакансиями [4]. В структуре BFO/TiO_2(NTs)/Ti они обеспечивают эффективный контакт и могут служить как путём тока, так и зоной локализации зарядов. Работы показали, что интерфейс между BFO и TiO_2 играет критическую роль в резистивном переключении [5].

После снятия напряжения наблюдаются токи деполяризации, обусловленные релаксацией остаточной поляризации. Их поведение зависит от длительности и величины предварительного напряжения, а также от механизмов захвата и эмиссии носителей на дефектные уровни [6,7]. Подобные процессы приводят к задержке в установлении состояния и формируют эффект памяти, свойственный мемристорам [8].

Переход от чисто сегнетоэлектрического поведения к резистивному переключению (мемристивному) был подробно рассмотрен в работе [9], где подчеркивается, что именно взаимодействие между поляризацией и ловушками на границе играет ключевую роль. В частности, в BFO наблюдалось, что захват зарядов на дефектных уровнях может стабилизировать определённую поляризационную конфигурацию, изменяя токовую проводимость [10]. Для усиления магнитоэлектрического эффекта, улучшения электрофизических и электрохимических свойств пленок на основе BFO можно использовать буферные слои (в частности, нанотубулярный TiO_2(NTs), что расширяет возможности практического применения этих материалов. В данной работе исследовано поведение структуры $BiFeO_3/TiO_2$(NTs)/Ti, в том числе процессы электроформовки и переход от высокоомного состояния к состоянию с резистивным переключением.

Образцы и методика эксперимента

Пленки BFO выращивалось методом атомно-слоевого осаждения (АСО) на установке ALDCERAM ML-200. В качестве подложки использовалась титановая пластина, на которой предварительно электрохимическим методом была получена пленка TiO_2(NTs) в виде вертикальных нанотрубок. Метод АСО позволяет получать пленки со 100% конформностью, что актуально для выбранной системы. Толщина слоя TiO_2(NTs) составляла ~2.5 мкм. В качестве источников прекурсоров использовали $Bi(mmp)_3$ и ферроцен $Fe(cp)_2$. Для проведения электрических измерений контакты наносили методом магнетронного распыления на поверхности, а нижним электродом служила титановая подложка.

Результаты и их обсуждение

Электрические измерения выполнялись на источнике-измерителе Keithley 2400. Работа источника-измерителя была автоматизирована в среде LabVIEW. Верхний электрический контакт создавался прижимным (пружинящим) платиновым электродом с диаметром 0.3 мм, нижним контактом служила титановая подложка. На рисунке 1 представлены ВАХ пленочной структуры Pt-BFO/TiO_2(NTs)/Ti, измеренные при развертке напряжения в форме двунаправленного сигнала треугольной формы (рис.1, *a*, *b*) и при линейной развертке (рис. 1, *c*) с увеличением предела напряжения в каждом следующем цикле ВАХ. В каждой точке развертки измерение

проводилось по схеме: генерация напряжения – задержка (ожидание) – измерение тока [11].

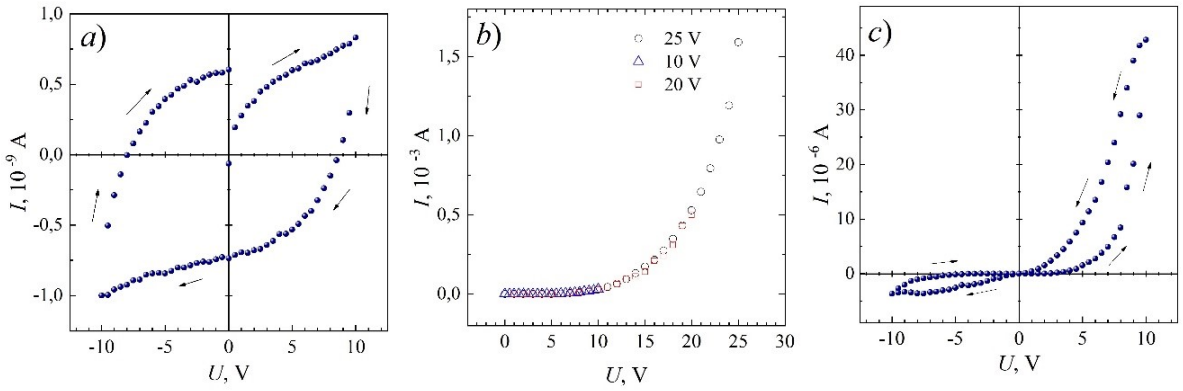


Рисунок 1. a) ВАХ образца до электроформовки с задержкой измерения 0.1 с, b) процесс электроформовки пленки с задержкой измерения 1 с. Значения предельных напряжений в каждом цикле ВАХ указаны. c) ВАХ после электроформовки с временем задержки 0.1 с

Наличие петли гистерезиса ВАХ в высокоомном состоянии (рис. 1, *a*) обусловлено максвелл-вагнеровской поляризацией (МВП), которая состоит в накоплении заряда на границе раздела слоев вследствие протекания токов проводимости в двухслойном образце, вызывающем перераспределение электрических полей и падений напряжения в слоях [12]. Процесс заканчивается при $t >> \tau$ (время релаксации МВП), когда остается лишь сквозная составляющая проводимости. При выключении внешнего напряжения наблюдается деполяризация. В результате МВП в образце возникает внутреннее поле, направленное навстречу внешнему, тогда ток через структуру при развертке напряжения, определяется соотношением $I = (V–VP)/R_0$, где V – внешнее напряжение; VP – напряжение, соответствующее внутреннему полю; R0 – сопротивление образца [12].

Электроформовка образца (рис. 1, *b*) подразумевает образование токопроводящих нитей (филаментов) при высоких значениях электрического поля. ВАХ образца после электроформовки (рис. 1, *c*) демонстрирует эффект резистивного переключения, которое происходит при формировании или разрушении токопроводящих нитей в диэлектрике. Образование филаментов связывают перераспределением кислородных вакансий, неизбежно, возникающих в процессе отжига на определенной технологической стадии изготовления образца, при приложении внешнего электрического поля. Возникает цепь положительно заряженных кислородных вакансий вдоль поля. Накопление кислородных вакансий на границе гетероперехода и в области контакта электрод-пленка, приводит к изменению ширины и высоты соответствующих энергетических барьеров, что, в конечном счете, сказывается на сопротивлении образца. ВАХ после электроформовки (рис. 1c) демонстрирует эффект резистивного переключения, происходя-

щий за счет формирования и разрушения филаментных путей в диэлектрике. Диодоподобный характер кривой может быть связан с гетеропереходом на границе фаз пленочной структуры, как ранее отмечалось в аналогичных системах $BiFeO_3$/ZnO [13, 14].

Таким образом, в исследуемой структуре реализуется переход от сегнетоэлектрического поведения, где доминируют эффекты деполяризации и МВП, к мемристивному режиму с устойчивыми состояниями сопротивления. Этот переход обусловлен взаимодействием токов утечки, движением зарядов, захватом/эмиссией носителей на дефектные уровни и перераспределением кислородных вакансий, что позволяет использовать такие структуры в качестве функциональных элементов памяти.

Заключение

Проведенное исследование ВАХ структуры $BiFeO_3/TiO_2$(NTs)/Ti позволило выделить два режима проводимости: высокоомный, обусловленный максвелл-вагнеровской поляризацией и эффектами деполяризации, и низкоомный, возникающий в результате электроформовки. Установлено, что формирование токопроводящих филаментов связано с миграцией кислородных вакансий и модификацией интерфейсных барьеров. Переход к резистивному переключению сопровождается появлением диодоподобной асимметрии в ВАХ, что подтверждает важную роль гетероперехода. Наблюдаемый переход от сегнетоэлектрического поведения к мемристивному режиму открывает перспективы для реализации элементов памяти на основе мультиферроиков с управляемыми интерфейсами и дефектной инженерией.

Литература

1. Catalan, G., & Scott, J. F. Physics and applications of bismuth ferrite. Adv. Mater. 21, 2463–2485 (2009).
2. Seidel, J. et al. Conduction at domain walls in oxide multiferroics. Nat. Mater. 8, 229–234 (2009).
3. Wang, J. et al. Epitaxial $BiFeO_3$ multiferroic thin film heterostructures. Science 299, 1719–1722 (2003).
4. Mor, G. K. et al. A review on highly ordered, vertically oriented TiO_2 nanotube arrays: Fabrication and applications. Langmuir 23, 3106–3113 (2007).
5. Zhu, X. et al. Interface-engineered resistive switching in $BiFeO_3$-based ferroelectric tunnel junctions. Nat. Commun. 8, 14176 (2017).
6. Chiu, F.-C. A review on conduction mechanisms in dielectric films. Adv. Mater. Sci. Eng. (2014).
7. Zafar, A. et al. Depolarization field driven resistive switching in $BiFeO_3$ thin films. Appl. Phys. Lett. 104, 233504 (2014).
8. Yang, J. J., Strukov, D. B., & Stewart, D. R. Memristive devices for computing. Nat. Nanotechnol. 8, 13–24 (2013).

9. Gao, P. et al. Atomic-scale mechanisms of ferroelastic domain-wall-mediated ferroelectric switching. Nat. Commun. 4, 2791 (2013).
10. Lee, D. et al. Polarity control of carrier injection at ferroelectric/metal interfaces for electrically switchable diode and photovoltaic effects. Phys. Rev. B 84, 125305 (2011).
11. Гаджиев Г.М., Рамазанов Ш.М., Абакарова Н.С., Эфендиева Т.Н. Влияние внешнего поля и температуры на временную эволюцию тока утечки в пленочной структуре BiFeO3/TiO2(Nt)Ti // Физика твердого тела. 2024. Т. 66. № 2. С. 259-265.
12. Богородицкий Н.П., Волокобинский Ю.М., Воробьев А.А., Тареев Б.М. Теория диэлектриков. Энергия, М.-Л. (1965). С. 344.
13. Wu J., Wang J. Diodelike and resistive hysteresis behavior of heterolayered BiFeO3/ZnO ferroelectric thin films //Journal of Applied Physics. 2010. V. 108. № 9.
14. Wu, J., Lou, X., Wang, Y., & Wang, J. Resistive hysteresis and diodelike behavior of BiFeO3/ZnO heterostructure // Electrochemical and Solid-State Letters. 2009. V. 13. № 2. P. G9.

RESISTIVE SWITCHING IN A BISMUT/TITANIUM FERRITE HETEROSTRUCTURE, ADAPTABILITY OF THE AURIVILUS PHASE AT THE FILM-SUBSTRATE INTERFACE

Ramazanov Sh.M., Gajiev G.M., Zeynalov R.Z.

Amirkhanov Institute of Physics DFRC RAS, Makhachkala
ramazanv@mail.ru

In the hybrid structure $BiFeO_3/TiO_2(NTs)/Ti$, where the multiferroic $BiFeO_3$ is deposited onto arrays of TiO_2 nanotubes formed on a titanium substrate, the application of electric current induces domain wall displacement and switching. This leads to changes in polarization and local conductivity, resulting in resistive memory behavior characteristic of memristive devices. Such a transition from ferroelectric to memristive behavior paves the way for the development of energy-efficient memory and logic elements based on multiferroics. The behavior of depolarization currents in the thin-film structure was studied after the removal of the external voltage, as a function of its duration and amplitude. A complex, nontrivial relationship was found between the relaxation time and the polarization time, which is attributed to the competition between leakage currents and charge carrier trapping/emission at defect levels. This highlights the critical role of interface states and defect engineering in controlling switching dynamics and memory functionality in such heterostructures.

УДК 621.382 25-74

ТЕХНОЛОГИЯ ПОДАВЛЕНИЯ ЭФФЕКТА ИНЖЕКЦИИ ГОРЯЧИХ НОСИТЕЛЕЙ В МДП-СТРУКТУРАХ

Черкесова Н.В.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В работе исследованы характеристики МДП-структур при воздействии дестабилизирующих факторов, таких как горячие электроны и рентгеновское излучение. Приведены зависимости напряжения в середине запрещенной зоны от потока инжектированных горячих электронов и деградации крутизны ВАХ для стандартных приборов и для повторного окисления азотированного оксида приборов, также изменение плотности межслойных состояний при воздействии рентгеновского излучения. Деградация характеристик приборов под воздействием облучения и горячих электронов существенно зависят от температуры и длительности азотирования.

Элементы на основе структур металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) составляют основу современной электронной компонентной базы микро -и наноэлектроники. В свою очередь, комплементарные МДП транзисторы являются ключевой составляющей МДП-технологий. Поэтому особое значение приобретают вопросы разработки и обеспечения надежного функционирования комплементарных МДП-транзисторов под воздействием дестабилизирующих факторов. Дестабилизирующие факторы приводят к зарядке окисла и образованию поверхностных состояний, что, в свою очередь, обуславливает изменение порогового напряжения и крутизны, определяющих такие важнейшие функциональные характеристики приборов, как токи потребления и быстродействие.

В связи с этим решение проблемы по разработке способов и технологии создания элементов МДП-схем, устойчивых к воздействию горячих носителей является актуальным.

Инжекция горячих носителей в канал полевого транзистора вызывает деградацию таких их параметров, как крутизна и пороговое напряжение, что связано с захватом электронов на образующиеся при этом в объеме полупроводника ловушки. Для подавления этого эффекта, который является основным механизмом деградации в р-канальных полевых транзисторов, предложено использовать азотирование затворного оксида с последующим его оксидированием.

Результаты исследований представлены на рис. 1. Зависимость напряжения в середине запрещенной зоны Vmg от потока инжектированных горячих электронов характеризуются небольшим отрицательным сдвигом для стандартных приборов и положительным для повторного окисления азотированного оксида приборов [1, 2].

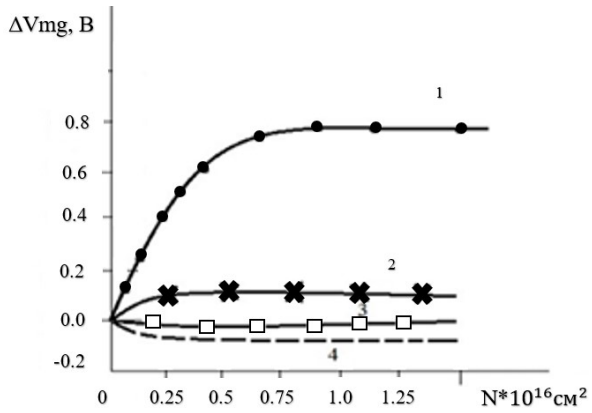


Рис. 1. Зависимость напряжения в середине запрещенной зоны Vmg от потока инжектированных горячих электронов, 1 – для повторного окисления азотированного оксида при окислении 10 мин; 2 – то же, что и первое, только при окислении 30 мин; 3 – то же, что и первое только при окислении 60 мин; 4 – для стандартного прибора (с оксидом)

Характер этой зависимости при разных значениях времени повторного окисления свидетельствует о том, что с его ростом плотность электронных ловушек падает; небольшие отрицательные сдвиги при больших потоках и длительности повторного окисления указывают на генерацию суммарного положительного заряда [3, 4].

С ростом длительности повторного окисления плотность возникающих при азотировании ловушек падает, следовательно, будет захватываться меньшее число электронов, изменяющих поле у поверхности раздела, что подавляет дальнейшую инжекцию носителей, тем самым захват электронов будет в меньшей степени снижать ток затвора. Таким образом, более низкий ток затвора для повторного окисления азотированного оксида приборах обусловлен совместным влиянием пониженной подвижности носителей в инверсном слое и захвата электронов ловушками.

Графики зависимости деградации крутизны ВАХ полевого транзистора с различными диэлектриками от величины напряжения V_{max} приведены на рис. 2.

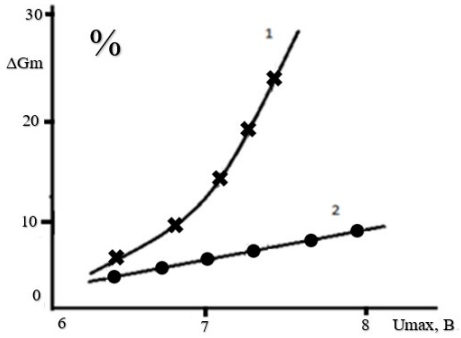
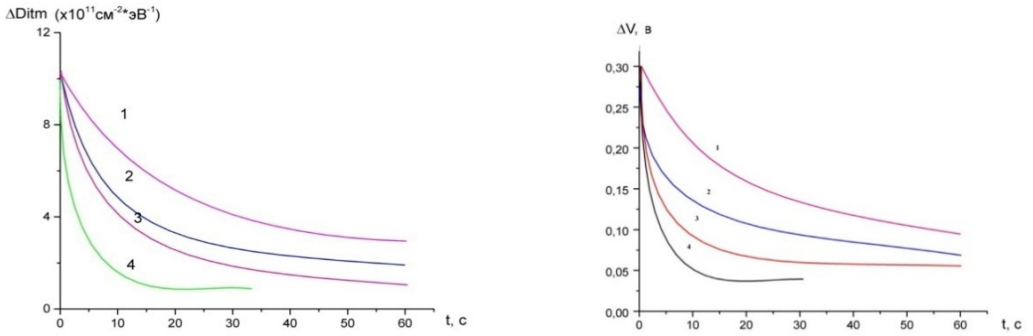


Рис. 2. Зависимость деградации крутизны ВАХ полевого транзистора с различными диэлектриками от величины V_{max}: 1 – с оксидом; 2 – с повторным окислением азотированного оксида

Видно, что при использовании с повторным окислением азотированного оксида скорость деградации уменьшается, а также меньший показатель степени, характеризующий скорость деградации во времени.

Затем оценивали воздействие рентгеновского излучения (50 КэВ). Результаты исследования представлены на рис. 3.



а) б)

Рис. 3. Зависимость: а – изменения плотности межслойных состояний, вызванного облучением 0,5 Мрад при разных температурах нитрирования и разной длительности нитрирования, б – изменение напряжения ΔV_T в результате облучения, также для образцов, подвергавшихся нитрирования: 1 – при температуре 900 °С, 2 – при температуре 1000 °С, 3 – при температуре 1100 °С, 4 – при температуре 1200 °С

Генерация межслойных состояний уменьшается как при увеличении температуры, так и при увеличении длительности азотирования. Для сильно азотированных образцов изменение почти на порядок. Как видно из рис. 3 б и температура азотирования, и длительность уменьшают величину изменения напряжения ΔV_T [5].

Наблюдающиеся изменения напряжения могут быть следствием либо увеличения воздействия ловушек электронов. Либо уменьшением воздействия ловушек дырок.

По мере увеличения длительности азотирования связки кремний-кислород заменяются связками кремний-азот. Влияние азотирования на радиационную стойкость определяется генерацией промежуточных состояний, обусловленных распространением дефектов, вызванных облучением в направлении границы двуокись кремния-кремний [6].

Зависимость изменения плотности межслойных состояний, вызванная облучением, по площади затвора для оксида (1) и для азотирования при температуре 1100 °С в течение 60 с (2) показана на рис. 4.

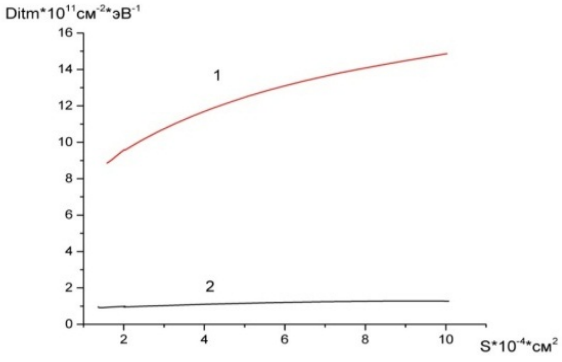


Рис. 4. Изменение плотности межслойных состояний, вызванное облучением для оксида (1) и для азотирования при температуре 1100 °С в течение 60 с (2)

На рис. 4 показан результат исследования при температуре 1100 °С в течение 60 с. Также отсюда видно, что стойкость прибора к радиации увеличилась [7, 8].

Видно, что деградация характеристик приборов под воздействием облучения и горячих электронов существенно зависят от температуры и длительности азотирования.

В последние годы широко используется конструкция МОП-транзистора со слаболегированными областями, удлиняющими истоковую и стоковую области и уменьшающими длину канала. Исследование эффектов совместной диффузии As и P показали, что созданные в процессе имплантации As кристаллические нарушения в подложке в дальнейшем, в процессе активационного отжига, способны вызвать ускоренную диффузию P в слаболегированных областях и приборы характеризуются утечками. Этот нежелательный эффект отсутствует в том случае, если активационный отжиг для имплантированного As проводят до имплантации P. Нами разработана технология КМДП – приборов для создания истока и стока, причем имплантацию As и отжиг проводят до имплантации P. В результате создаются сильнолегированные области и при этом устраняются кристаллические дефекты от имплантации As, в последующем отсутствует ускоренная диффузия P, что обеспечивает малую глубину слаболегированных участков стока и улучшение характеристик полевых транзисторов [9].

В результате при малой глубине слаболегированных переходных участков токи утечек (краевых и по площади перехода) снижаются более чем на два порядка величины, сравнительно с традиционной технологией; заметный эффект снижения утечек достигается уже при продолжительности активационного отжига для As всего 30 минут, а увеличение продолжительности отжига до 90 минут дополнительно снижает утечки. Изучение паразитных биполярных структур в конструкции КМДП- приборов показало, что технология с активационным отжигом для As до имплантации P обеспечивает (с увеличением продолжительности отжига) прогрессивное снижение тока, базы, что свидетельствует о повышении устойчивости к эффекту защелки [10, 11, 12]. Экспериментальная технология с разделением формирования сильнолегированных и слаболегированных областей позволяет обеспечить необходимое увеличение глубины n^+-областей и уменьшение толщины n-слоя для оптимизации силицидных контактов и характеристик МДП-ПТ в целом. При изготовлении приборов по рассмотренной экспериментальной технологии появилась возможность использования P взамен As для создания слаболегированного переходного участка стока; такая замена существенно повышает устойчивость приборов к инжекции горячих носителей, пиковый ток в подложку снижается вдвое.

Литература

1. Снижение влияния эффектов горячих носителей на параметры МДП-транзисторов / Г. А. Мустафаев, Н. В. Черкесова, А. И. Хасанов [и др.] // Вестник Академии наук Чеченской Республики. – 2019. – № 4(47). – С. 18-24. – DOI 10.25744/vestnik.2020.47.4.004.

2. Мустафаев, А.Г. Снижение эффектов горячих носителей в субмикронных КМОП интегральных схемах / А.Г. Мустафаев, Н.В. Черкесова, Г.А. Мустафаев // Современные проблемы радиоэлектроники : сборник научных трудов участников ежегодной Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых и студентов, посвященной 122-й годовщине Дня радио, Красноярск, 04–05 мая 2017 года / Сибирский федеральный университет, Институт инженерной физики и радиоэлектроники. – Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2017. – С. 515-518.

3. Wang Z., Huang W., Chen C., Arakawa H. and Lin C.J. Improvement of Bottom Oxide Thickness Scaling of Inter-Poly Dielectric by Floating Gate Top Plasma Nitridation. IEEE Electron Device Letters, vol. 35, no. 2, pp. 190–192, Feb. 2014.

4. Wang Szu-Yu et al. Mechanisms and solutions to gate oxide degradation in flash memory by tunneloxide nitridation engineering. IEEE Electron Device Letters, vol. 26, no. 6, pp. 363–365, June 2005.

5. Черкесова, Н.В. Процессы нитризации подзатворного диэлектрика и их влияние на изменение плотности межслойных состояний МДП-структур / Н.В. Черкесова, Г.А. Мустафаев, А.Г. Мустафаев // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – № 15. – С. 1070-1079. – DOI 10.26456/pcascnn/2023.15.1070. – EDN MXGNFI.

6. Miyazaki S., Tamura T., Ogasawara M., Itokawa H., H. Murakami, M. Hirose. Influence of nitrogen incorporation in ultrathin SiO2 on the structure and electronic states of the SiO2/Si (100) interface. Appl. Surface Science, 2000, v. 75, p. 159-160.

7. Naumova O.V., Fomin B.I., Sakharova N.V., Ilnitsky M.A., Popov V.P. Impact of implantation on the properties of N2O-nitrided oxides of p+- and n+-gate MOS devices. -Nucl. Instrum. and Methods B, 2009, v. 267, N 8-9, p. 1564-1567.

8. Проектирование МДП-элементов устойчивых к воздействию дестабилизирующих факторов / Н.В. Черкесова, Г. Мустафаев, А.Г. Мустафаев, А.И. Хасанов // Актуальные проблемы развития современной науки: Материалы Международной научной конференции «Актуальные проблемы развития современной науки», посвященной 30-летию Академии наук Чеченской Республики, Грозный, 15–17 марта 2023 года. – Грозный: Академия наук Чеченской Республики, 2023. – С. 489-496.

9. Патент № 2733924 C1 РФ, МПК H01L 21/265. Способ изготовления сверхмелких переходов: заявл. 14.01.2020: опубл. 08.10.2020 /

Г.А. Мустафаев, А.Г. Мустафаев, А.Г. Мустафаев, Н.В. Черкесова; заявитель ФГБОУ ВО "Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова" (КБГУ).

10. Мустафаев, А.Г. Исследование устойчивости КМОП СБИС к эффекту "защелкивания" / А.Г. Мустафаев, Г.А. Мустафаев, Н.В. Черкесова-Калинина // Электроника и электротехника. – 2018. – № 4. – С. 1-7. – DOI 10.7256/2453-8884.2018.4.28130. – EDN VUBBWO.

11. Стойкость МОП-структур к гамма-облучению / Г.А. Мустафаев, Н.В. Черкесова-Калинина, А.Г. Мустафаев, А.И. Хасанов // Актуальные проблемы современного материаловедения: Коллективная монография / РФФИ; Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН; Академия наук Чеченской Республики; Грозненский государственный нефтяной технический университет им. акад. М.Д. Миллионщикова; Чеченский государственный университет; Чеченский государственный педагогический университет. Том 1. – Грозный: ИП "Бисултанова П.Ш.", 2015. – С. 124-127. – EDN XEGYUR.

12. Мустафаев, А.Г. Учет воздействия полной дозы излучения в компактных моделях КМОП-транзисторов / А.Г. Мустафаев, Г.А. Мустафаев, Н.В. Черкесова // Нано- и микросистемная техника. – 2018. – Т. 20, № 7. – С. 396-402. – DOI 10.17587/nmst.20.396-402. – EDN XTWGIH.

TECHNOLOGY FOR SUPPRESSING THE INJECTION EFFECT OF HOT CARRIERS IN MDS STRUCTURES

N.V. Cherkesova

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik

This work investigates the characteristics of MDS structures under the influence of destabilizing factors such as hot electrons and X-ray radiation. Dependencies of the voltage in the middle of the forbidden gap on the flux of injectted hot electrons and the degradation of the slope of the I-V characteristic are presented for standard devices and for the re-oxidation of nitrogen-oxidized devices. Additionally, the change in the density of interlayer states under X-ray irradiation is analyzed. The degradation of device parameters due to irradiation and hot electrons significantly depends on temperature and the duration of nitrogenation.

УДК 541.135 25-75

СОВМЕСТНОЕ ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЕ ИОНОВ ГОЛЬМИЯ И НИКЕЛЯ В РАСПЛАВЕ KCl-NaCl ПРИ 973 К

Карданова Р.А., Кушхов Х.Б.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
ranetta89@mail.ru; hasbikushchov@yahoo.com

В данной работе с применением циклической вольтамперометрии изучены процессы совместного электровосстановления ионов Ho^{3+} и Ni^{2+} в эквимольном расплаве NaCl-KCl при температуре 973 К. Обнаружены значительные различия в потенциалах восстановления ионов гольмия и никеля, а также деполяризация при выделении металлического гольмия на ранее осевшем на вольфрамовом электроде никеле с образованием интерметаллидных соединений HoxNiy.

Ключевые слова: *ионные расплавы, электровосстановление, электрохимический синтез, интерметаллические соединения, гольмий, никель.*

В последние годы проведено множество исследований, посвященных созданию и улучшению технологий получения сплавов редких металлов в сочетании с металлами триады железа. Это объяснено их уникальными физическими и химическими характеристиками, такими как высокая активность в каталитических и сорбционных процессах, сверхпроводимость, выдающиеся магнитные свойства и улучшенная жаростойкость.

Таким образом, интерметаллиды, содержащие редкие металлы и металлы триады железа, открывают обширные перспективы для разработки компактных автономных источников постоянного магнитного поля, которые на сегодняшний день демонстрируют наилучшие магнитные свойства среди всех известных магнитотвердых материалов. Применение сплавов-покрытий системы Ln-Ni на поверхности никелевых изделий значительно увеличивает их устойчивость к коррозии и жаростойкость, что находит применение в производстве узлов газотурбинных установок и авиационных двигателей.

В настоящее время основными методами получения материалов на основе редкоземельных металлов (РЗМ) и металлов триады железа являются способы термического восстановления стехиометрических смесей оксидов или галогенидов РЗМ с металлургическими компонентами, такими как металлический кальций или гидрид кальция [1]. В то же время, для синтеза соединений и материалов на основе интерметаллидов тугоплавких металлов и РЗМ, открываются новые возможности благодаря высокотемпературному электрохимическому синтезу (ВЭС) в солевых расплавах [2]. Такой подход позволяет значительно улучшить качество и свойства полу-

чаемых материалов, расширяя горизонты их применения в различных отраслях промышленности.

Исследователи [3] осуществили получение интерметаллидов гольмия и никеля Ho_2Ni_{17}, $HoNi_5$, $HoNi_3$, $HoNi_2$, HoNi, с помощью электролиза на никелевом катоде. Этот процесс включал в себя диффузионное насыщение никелевой подложки металлическим гольмием. В другом исследовании [4] были проведены расчеты свободных энергий образования этих интерметаллических соединений, а также определены коэффициент диффузии и энергия активации для диффузии атомов гольмия в интерметаллидной фазе.

Для выявления потенциала электрохимического синтеза указанных интерметаллидов нами были проанализированы процессы совместного восстановления ионов гольмия и никеля в эквимольном расплаве, состоящем из KCl и NaCl.

На рисунке 1 представлены циклические вольтамперограммы, полученные на вольфрамовом электроде с добавлением $HoCl_3$ и $NiCl_2$ в эквимольном расплаве KCl-NaCl при температуре 973 К. Исследования проводились при различных реверсивных потенциалах: от 0,1 до 0,2 В – для выделения никеля и от 1,8 до 2,0 В – для выделения гольмия, относительно хлорсеребряного электрода. В ходе эксперимента по совместному электровосстановлению ионов никеля и гольмия в расплаве KCl-NaCl было установлено, что необходимая концентрация хлорида никеля (0,25 мол. %) значительно меньше концентрации трихлорида гольмия (1,5 мол. %). В результате, ток восстановления ионов никеля оказался ниже тока восстановления ионов гольмия в системе KCl-NaCl-$HoCl_3$-$NiCl_2$.

На катодной части циклической вольтамперограммы (рис. 1, кривая 4) фиксируется пять восстановительных волн. Мы связываем появление волны A с восстановлением ионов Ni^{2+}, что соответствует данным из источника [5]. Волны B, C и D отражают совместное восстановление ионов Ho^{3+} и Ni^{2+}, происходящее на предварительно образовавшемся на вольфрамовом электроде металлическом никеле, с некоторой степенью деполяризации. Волна E интерпретируется как восстановление ионов Ho^{3+} на интерметаллидной фазе Ho_xNi_y. В анодной части циклической вольтамперограммы также зарегистрировано пять волн, соответствующих окислению продуктов, образующихся на катодной ветви. Мы подтвердили соответствие между катодными восстановительными волнами и анодными окислительными волнами продуктов через получение вольтамперных кривых при различных потенциалах возврата, что совпадает с завершением каждой из восстановительных катодных волн (рис. 1).

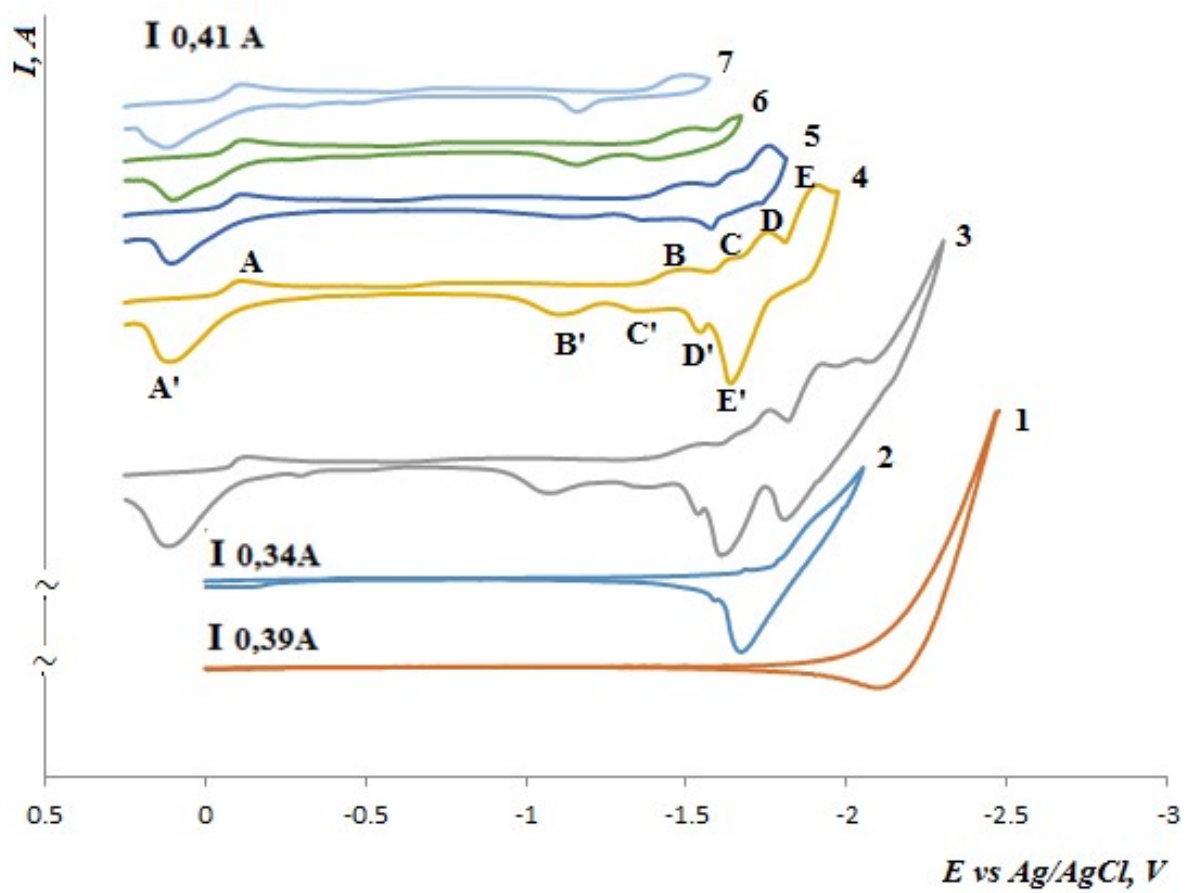


Рис. 1. Циклические вольтамперограммы расплава KCl-NaCl-$HoCl_3$ – $NiCl_2$ на вольфрамовом электроде при различных потенциалах возврата – E, В: 1 – 2,45 (KCl-NaCl); 2 – 2,15; 3 – 2,3; 4 – 1,97; 5 – 1,81; 6 – 1,67; 7 – 1,57. C($HoCl_3$)=1,5 мол. %, C($NiCl_2$)=0,25 мол. %. V=0,2 В/с. T=973 К. S=0.7 $см^2$

Результаты исследований показывают, что восстановительные волны, отображаемые на вольтамперограммах при разных значениях потенциала, относятся к процессам синтеза интерметаллидов различного состава. При этом более отрицательные потенциалы связаны с фазами, содержащими большее количество гольмия. Также было установлено, что потенциалы выделения никеля и гольмия на вольфрамовом электроде, предварительно покрытом никелем, имеют разницу свыше 1,0 В. Это указывает на то, что электролиз интерметаллических соединений, основанных на гольмии и никеле, может проходить лишь в кинетическом режиме.

Электролиз проводился в электрохимической кварцевой ячейке, в атмосфере аргона при температуре 973 К. В качестве катода использовался вольфрамовый стержень с высокой чистотой и диаметром 3 мм. Стеклоуглеродный тигль одновременно выполнял роль контейнера для расплава и анода.

В ходе электролиза расплавленной смеси KCl–NaCl, содержащей трихлорид гольмия (от 0,5 до 2,5 мол. %) и дихлорид никеля (от 0,1 до 2,5 мол. %) при плотности тока от 0,5 до 2,0 А/$см^2$, на вольфрамовом элек-

троде сформировалась металло-солевая «груша». В большинстве случаев полученный продукт оседал на дне тигля на алундовую подложку.

После нескольких промываний в горячей дистиллированной воде, осадок был подвергнут обезвоживанию в вакуумной сушилке при температурах от 373 до 423 К. Фазовый анализ катодного осадка показал, что полученное соединение является смесью металлического никеля и интерметаллических фаз HoNi, $HoNi_5$ и $HoNi_3$.

Для установления оптимальных соотношений концентраций $HoCl_3$ и $NiCl_2$ следует учитывать, что на начальной стадии синтеза преобладает выделение более электроположительного никеля. Наиболее эффективная концентрация хлорида никеля составляет примерно 0,5 мол.%. Как показали экспериментальные данные, при увеличении концентрации хлорида никеля в катодном осадке начинает проявляться никель в металлическом состоянии. Изучалась зависимость состава компонентов катодных от содержания хлорида никеля и хлорида гольмия, а также их соотношения в расплаве KCl-NaCl (1:1).

Содержание интерметаллических соединений возрастает как при увеличении хлорида гольмия, так и с изменением соотношений хлоридов. При соотношении $[HoCl_3]$:$[NiCl_2]$ = 1:1 в осадке преобладает металлический никель, но при увеличении этого соотношения доля никеля снижается, а концентрация интерметаллидов возрастает. При соотношении $[HoCl_3]$:$[NiCl_2]$=5:1 – никель отсутствует, образуя лишь интерметаллические фазы с преобладанием гольмия (рис. 2).

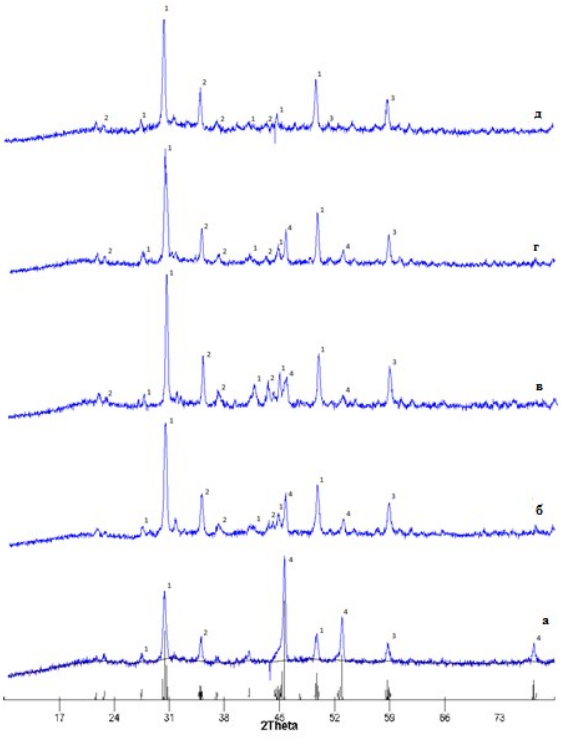


Рис. 2. Зависимость состава продуктов гальваностатического электролиза от соотношения компонентов электролизной ванны KCl-NaCl-$HoCl_3$-$NiCl_2$. i_k=1,2 А/см^2. T=973 К. S=2,43 см^2. Концентрационные соотношения $[NiCl_2]$: $[HoCl_3]$: а – 1:1; б – 1:2; в – 1:3; г –1:4; д – 1:5. Стандартные линии:1 – HoNi, 2 – $HoNi_5$, 3 – $HoNi_3$, 4 – Ni

Литература

1. Итин В.И., Найбороденко Ю.С. Высокотемпературный электрохимический синтез интерметаллических соединений. – 3 изд. – Томск: Издательство Томского университета, 1989. – 209 с.
2. Шаповал В.И., Малышев В.В., Новоселова И.А., Кушхов Х.Б. Современные проблемы высокотемпературного синтеза соединений переходных металлов IV-VI групп // Успехи химии. – 1989. – № 2, Т. 64. – С. 133-141.
3. Su YZ, Yang QQ, Liu GK. Electroreduction of Ho3+ on nickel catode in molten KCI-HoCI3ов IV-VI групп // J. Rare Earths. – 2000. – №. V.18. – N 1. – С. P.34-38.
4. Mamantov M., Manning D.L., Dale J.M. Reversible deposition of metals on solid electrodes by voltammetry with linearyvaring potential // J.Electroanal. Chem. – 1965. – № 9. – С. 253 – 259.
5. Кушхов Х.Б., Виндижева М.К., Мукожева Р.А., Кишева Ф.А. Изучение совместного электровосстановления ионов La^{3+} И Ni^{2+} в эквимольном расплаве KCl–NaCl при 973 K // Расплавы. – 2022. – №. 6 – С. 640-650.

JOINT ELECTROREDUCTION OF HOLMIUM AND NICKEL IONS IN KCl-NaCl MELT AT 973 K

Kardanova R.A., Kushkhov Kh. B.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
ranetta89@mail.ru; hasbikushchov@yahoo.com

In this work, using cyclic voltammetry, the processes of joint electrical recovery of Ho^{3+} and Ni^{2+} ions in an equimolar NaCl-KCl melt at a temperature of 973 K were studied. Significant differences were found in the reduction potentials of holmium and nickel ions, as well as depolarization during the release of metallic holmium on nickel previously deposited on a tungsten electrode with the formation of HoxNiy intermetallic compounds.

Keywords: *ionic melts, electrical recovery, electrochemical synthesis, intermetallic compounds, holmium, nickel.*

УДК 621.3.049.76/678.01:537.311 25-80

ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТА ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФОРМОВКИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ МЕЖСОЕДИНЕНИЙ В ИЗОЛИРУЮЩИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОЯХ

Гаев Д.С.[1], Бойко А.Н.[2], Рехвиашвили С.Ш.[3], Тимошенков С.П.[2], Ахкубекова С.Н.[1]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2]Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва
[3]Кабардино-балкарский научный центр РАН, Нальчик

Проведено исследование электрофизических характеристик композитного материала на основе полиимидного лака ПИ-ЛК2В и порошка CuO/CuO_2. Проведены измерения вольтамперных характеристик образцов с содержанием наполнителя 20, 30 и 40 % по массе. Показано, что после применения процесса электроформовки, в зависимости от концентрации наполнителя образцы демонстрируют различные типы ВАХ: линейный, нелинейный, нелинейный с гистерезисом. Результаты работы могут быть использованы в электронике для создания многоуровневой разводки и перераспределительных слоев.

Применение композитных материалов на основе полимеров соответствует тенденциям создания многофункциональных материалов электроники и микроэлектроники, полимерные композиты применяются в гибкой электронике [1], сенсорике [2], технологиях 3D интеграции [3]. Электропроводящие композиты, формируемые внедрением проводящих наполнителей в полимерные матрицы [4], могут служить альтернативой традиционным металлическим межсоединениям, в том числе в технологиях трехмерной интеграции и TSV (through-silicon via, сквозные соединения в кремнии) [5]. Управляемого изменения проводимости композитов можно добиться приложением сильного электрического поля в ходе процесса, который называется электроформовкой [6]. Данный процесс сопровождается образованием проводящих каналов в материале и имеет сходство с электрическим пробоем.

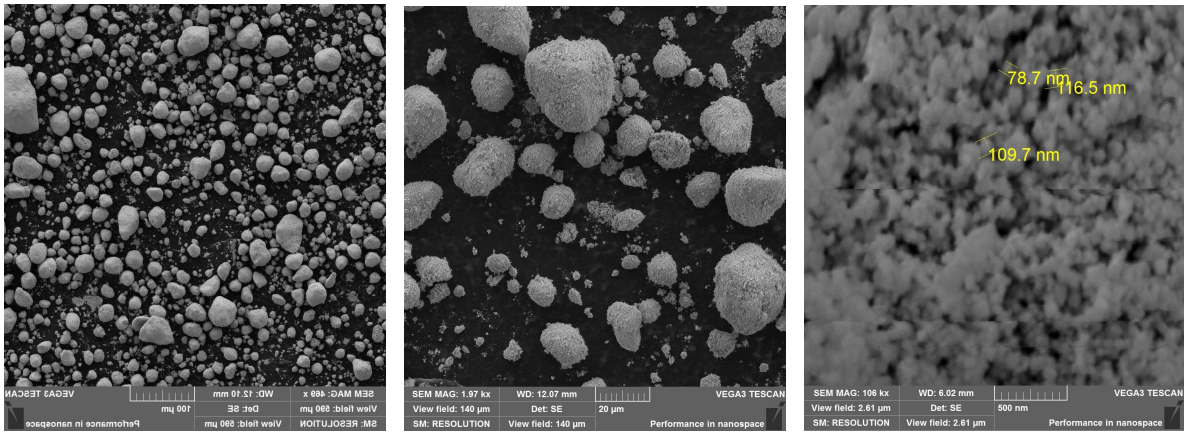
Объектом исследования в настоящей работе были композиты на основе полиимидного лака ПИ-ЛК2В и порошка CuO/Cu_2O. Наполнитель CuO/Cu_2O, полученный методом электрического взрыва медного проводника в атмосфере воздуха [7], добавлялся в лак в объемной доле 20, 30 и 40 %. Размешивание лака с наполнителем производилось в миксере, композитный материал в жидком виде наносился ракелем или прокаткой валиком на поверхность ситалловой подложки с предварительно сформированными на поверхности электрическими контактами.

На рис. 1 приведено схематическое изображение тестовых образцов с расположением контактных площадок для исследования электрических

характеристик. 1-й и 2-й контакты – пленочные, сформированы из меди магнетронным распылением, 3-й контакт – прижимной.

Рисунок 1. Схематическое изображение тестовых образцов с измерительными контактами

Исследования порошка CuO/Cu_2O методом растровой электронной микроскопии показали (рис. 2), что порошок состоит из микронной и субмикронной фракций. Микронная фракция является следствием агломерации, в насыпном состоянии порошок «слипается» в сферические частицы диаметром до нескольких десятков мкм (рис. 2, а, б). При значительном увеличении (см. рис. 2, в) различимы наноразмерные сферические частицы диаметром менее 100 нм.



(а) (б) (в)

Рисунок 2. РЭМ-изображения частиц порошка CuO/Cu_2O в различных масштабах

Исследования электрических свойств образцов проводилось с применением измерителя характеристик полупроводниковых приборов Л2-56. Для снятия экспериментальных вольтамперных характеристик (ВАХ) на образцы подвергались воздействию зондирующим сигналом синусоидальной формы на частоте 50 Гц с возможностью варьирования амплитуды до 2000 В и ограничением по мощности.

На начальном этапе процесса электрической формовки наблюдаются ВАХ со следующими отличительными признаками: гистерезис; *S*-образный участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением

(ОДС); наличие порогового напряжения, при котором композит переходит в токопроводящее состояние (рис. 3). В качестве примера на рис. 3 представлена ВАХ образца с 20 % наполнителя, другие образцы имеют аналогичные характеристики и отличаются только напряжением перехода в проводящее состояние. Как показали измерения, переход структур с 20, 30 и 40 % наполнителя в проводящее состояние произошел при воздействии формующих импульсов в 65, 42 и 15 В, соответственно. Измерения проводились пропусканием тока через композитную пленку в вертикальном направлении через 2-й и 3-й контакты (см. рис. 1), пропускание тока в продольном направлении не дало качественных отличий, что указывает на изотропию электрических свойств композита.

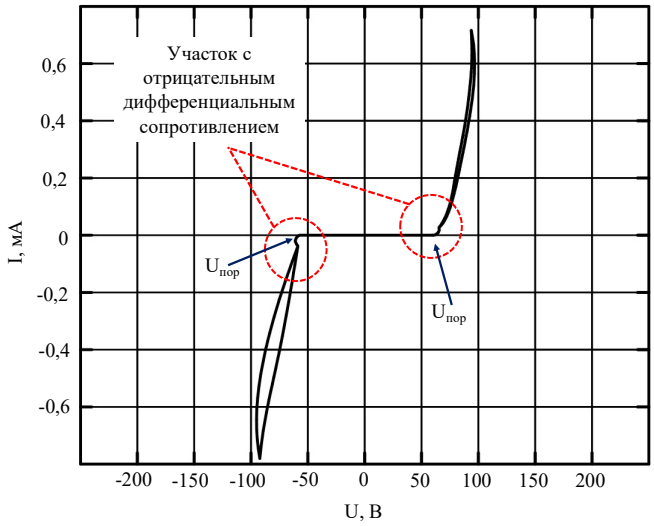
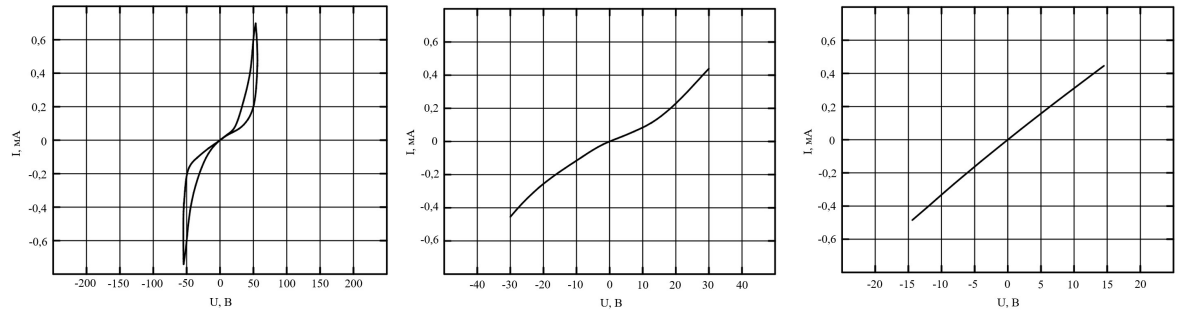


Рисунок 3. ВАХ в начальный момент электрической формовки с отрицательным дифференциальным сопротивлением и гистерезисом (содержание наполнителя – 20 %, прохождение тока – в вертикальной цепи между 2-м и 3-м контактами, амплитуда напряжения смещения – 100 В)

После завершения электрической формовки ВАХ приобретают новые особенности: гистерезис электрической характеристики при концентрации CuO/Cu_2O 20 % (рис. 4, а); нелинейность характеристики при концентрации наполнителя 30 % (рис. 5,б); выраженный линейный (омический) характер ВАХ при концентрации наполнителя 40 % (рис. 5, в). Отметим также, что ВАХ всех трех типов образов имеют симметричный вид. Возникновение ОДС при электрической формовке (рис. 3) можно объяснить появлением в высокоомной матрице нитевидных проводящих каналов (филаментов) [8-10]. Выраженный омический вид ВАХ при концентрации наполнителя 40 % (рис. 4, в), вероятнее всего, свидетельствует о достижении перколяционного перехода и формировании токопроводящих цепочек из частиц наполнителя. При содержании наполнителя 20 и 30 % перколяционный порог не достигается (рис. 4, а, б) и характеристики имеют нели-

нейный вид. При 20 % наполнителя наблюдается мемристорный эффект (рис. 4, а).



(а) (б) (в)

Рисунок 4. Эволюция ВАХ композитной структуры полиимид-CuO/Cu_2O при увеличении концентрации наполнителя: а) – 20 %; б) – 30 %; в) – 40 %

Таким образом, исследования показывают, что добавление в полиимидный лак порошка CuO/Cu_2O позволяет получать мультифункциональный материал с вольтамперными характеристиками различных типов – линейной, нелинейной, гистерезисной, *S*-образной характеристикой с отрицательным дифференциальным сопротивлением. Полученные результаты демонстрируют возможности по управлению электрическими свойствами композитов локальным воздействием электрического поля, что может служить эффективным инструментом для создания переходных контактов между функциональными слоями в технологиях многоуровневой разводки и перераспределительных слоев. Также обнаруженные эффекты могут быть использованы при формировании функциональных слоев с заданными электрическими свойствами в электронике и микроэлектронике.

Литература

1. Li, Lixia & Han, Lijing & Hu, Haiqing & Zhang, Ruoyu. (2022). A review on polymers and their composites for flexible electronics. Materials Advances. 4. 10.1039/D2MA00940D.

2. Esteves, D.S.; Durães, N.; Pedroso, R.; Melo, A.; Paiva, M.C.; Sequeiros, E.W. Fabrication of Low Electrical Percolation Threshold Multi-Walled Carbon Nanotube Sensors Using Magnetic Patterning. Appl. Sci. 2023, 13, 1437. https://doi.org/10.3390/app13031437.

3. Lu, W., Han, J., Luo, J.B., Ding, G.F., & Chen, R. (2014). Fabrication of Redistribution Layer (RDL) Based on AlN/Sodium Silicate Composite for TSV Interposers. Applied Mechanics and Materials, 543-547, 3914–3917. doi:10.4028/www.scientific.net/amm.543-547.3914.

4. Badrul, F., Halim, K.A.A., Salleh, M.A.A.M., Omar, M.F., Osman, A.F., & Zakaria, M.S. (2019). Current advancement in electrically conductive polymer composites for electronic interconnect applications: A short re-

view. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 701, 012039. doi:10.1088/1757-899x/701/1/012039.

5. Horváth, Barbara & Kawakita, Jin & Chikyow, Toyohiro. (2014). Through silicon via filling methods with metal/polymer composite for three-dimensional LSI. Japanese Journal of Applied Physics. 53. 06JH01. 10.7567/JJAP.53.06JH01.

6. Dearnaley, G., Stoneham, A.M., & Morgan, D.V. (1970). Electrical phenomena in amorphous oxide films. Reports on Progress in Physics, 33 (3), 1129–1191. doi:10.1088/0034-4885/33/3/306

7. Электронный ресурс: http://www.nanosized-powders.com/production/nanopowders/cuo.php (дата обращения 03.08.2024)

8. Gibbons, J.F., and W.E. Beadle. "Switching properties of thin NiO films". Solid-State Electronics 7.11 (1964): 785-790.

9. Dearnaley, G., Morgan, D.V., & Stoneham, A.M. (1970). A model for filament growth and switching in amorphous oxide films. Journal of Non-Crystalline Solids, 4, 593–612. doi:10.1016/0022-3093(70)90097-9.

10. Pender, L.F., & Fleming, R.J. (1975). Memory switching in glow discharge polymerized thin films. Journal of Applied Physics, 46(8), 3426–3431. doi:10.1063/1.322063

APPLICATION OF THE ELECTRIC FORMING EFFECT TO CREATE TRANSITIONAL INTERCONNECTS IN INSULATING DIELECTRIC LAYERS

Gaev D.S.[1], Boyko A.N.[2], Rekhviashvili S.Sh.[3], Timoshenkov S.P.[2], Ahkubekova S.N.[1]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]National Research University of Electronic Technology, Moscow
[3]Kabardino-Balkarian Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Nalchik

The electrophysical characteristics of a composite material based on PI-LK2V polyimide varnish and CuO/CuO2 powder were studied. Current-voltage characteristics of samples with a filler content of 20, 30 and 40 % by weight were measured. It was shown that after applying the electroforming process, depending on the filler concentration, the samples demonstrate different types of current-voltage characteristics: linear, nonlinear, nonlinear with hysteresis. The results of the work can be used in electronics to create multi-level wiring and redistribution layers.

УДК 35:621 25-83

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЕ ГАЗОВЫДЕЛЕНИЕ СВИНЦОВО-СИЛИКАТНОГО СТЕКЛА С87-2 ПОСЛЕ ОТЖИГА В ВОДОРОДЕ

Лосанов Х.Х.[1], Шомахов З.В.[1], Молоканов О.А.[1], Сергеев И.Н.[1], Кармоков А.М.[1], Хасанов А.И.[2]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2]Чеченский государственный университет, Грозный

Изучено термостимулированное газовыделение стекла С87-2 при температуре 390 ºС. На основе динамики потока газовыделения определены значения коэффициентов диффузии, компонентов, характерных для предыстории образца.

Ключевые слова: *стекла, вакуум, газовыделение, коэффициент диффузии*

Введение

В связи с особенностями функциональных свойств свинцово-силикатное стекло С87-2 широко применяется в вакуумной электронике, рентгеновской оптике, оптоэлектронике и других областях электроники. Газосодержащие и газовыделение стекол, используемых в электронной технике, оказывают существенное влияние на электрофизические свойства и надежность работы приборов назначения. В частности, в вакуумной электронике, газовыделение стекол приводит к ухудшению вакуума в вакуумных приборах и к деградации поверхносто-чувствительных элементов, таких как катоды, фотокатоды, вторично эмиссионные слои в микроканальных пластинах и др. [1-5]. В связи с этим нами проведены исследования газовыделения и газосодержания свинцово-силикатного стекла С87-2, применяемого в качестве основного функционального материала, например, в производстве микроканальных пластин.

Методика измерения

Изучение газовыделения проводились в сверхвысоковакуумной камере объемом V=1,3 л с помощью разработанной нами измерительной ячейке, позволяющей нагревать исследуемые образцы от комнатной температуры до 900 ºС. Камера откачивалась магниторазрядным насосом. Предельный вакуум в камере с образцом соответствовал давлению $1 \cdot 10^{-6}$ Па. Исследования проводились на образцах свинцово силикатного стекла С87-2 изготовленных при различных технологических условиях во Владикавказском технологическом центре Баспик.

Термообработка образцов проводилась по режиму, приближенному к режиму дегазации приборов применения. Нагрев образца проводился в нагревательной ячейке проводился ступенчато по ~20 ºС, и на каждой сту-

пеньке проводились измерения, при этом средняя скорость нагрева составляла ~1 ºС/мин, и максимальная температура 390 ºС достигалась в течение 5 часов. Измерения интенсивности газовыделения и расчет газосодержания проводили на образцах с мелкодисперсными структурами, что увеличивало площадь эмиттирующей поверхности во много раз. Исследованные образцы предварительно подвергались восстанавливающему отжигу в водороде при температуре 450 ºС в течение 2 часов. При расчетах учитывалось фоновое газовыделение камеры и измерительной ячейки без образца, для чего проводилась серия измерений без помещения образца в измерительную ячейку – так называемый холостой опыт.

Измерения газовыделения проводились по методу накопления, то есть путем измерения приращения давления в измерительной камере при перекрытой откачке вакуумной системы. Одновременно проводились записи парциального состава накопленного газа в камере с помощью омегатронноготронного масспектрометра ИПДО-2. Выходные данные фиксировались в виде масс-спектров и в виде кинетических зависимостей давления от времени. Основными газами, выделяющимися при термовакуумной обработке образцов, являлись ионные компоненты с массовыми числами 2 (H_2^+), 18 (H_2O^+), 28 (CO^+ и N_2^+), 40 (Ar^+ и C_2O^+), 44 (CO_2^+).

Необходимо отметить, что состав газа, фиксируемый масс-спектрометром, существенно зависит от методики анализа. Селективность откачки вакуумного насоса многократно (иногда на несколько порядков) искажает соотношение амплитуд масс-пиков по сравнению с истинным составом. Режим накопления дает более достоверные результаты.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 показаны зависимости от времени эксперимента t значений интегральных потоков g: фонового газовыделения рабочей камеры без образца – **Холостой опыт**; зарегистрированного общего газовыделения исследованного образца с наложенным влиянием газовыделения материалов ячейки и стенок камеры – **Образец**; результат вычитания – **Разность**.

Во всех случаях анализировались временные зависимости интегрального давления в камере, величины интегрального газового потока, общее количество выделившегося в эксперименте газа, а также парциальные значения этих величин.

Как видно из графика потока, на кривой $g=g(t)$ имеется выраженный максимум, приходящийся на момент достижения температуры 390 ºС. Поток газлвыделенив этот момени составляет ~0,44 г·см^2/с^3 ($6{,}2\cdot10^{-8}$ л·тор/с). Спустя один час значение потока уменьшается в ~2 раза и к концу высокотемпературной части эксперимента доходит до ~0,02 г·см^2/с^3 ($0{,}3\cdot10^{-8}$ л·тор/с). При этом общее количество выделившегося газа составило ~$7\cdot10^3$ г·см^2/с^2 ($1\cdot10^{-3}$ л·тор).

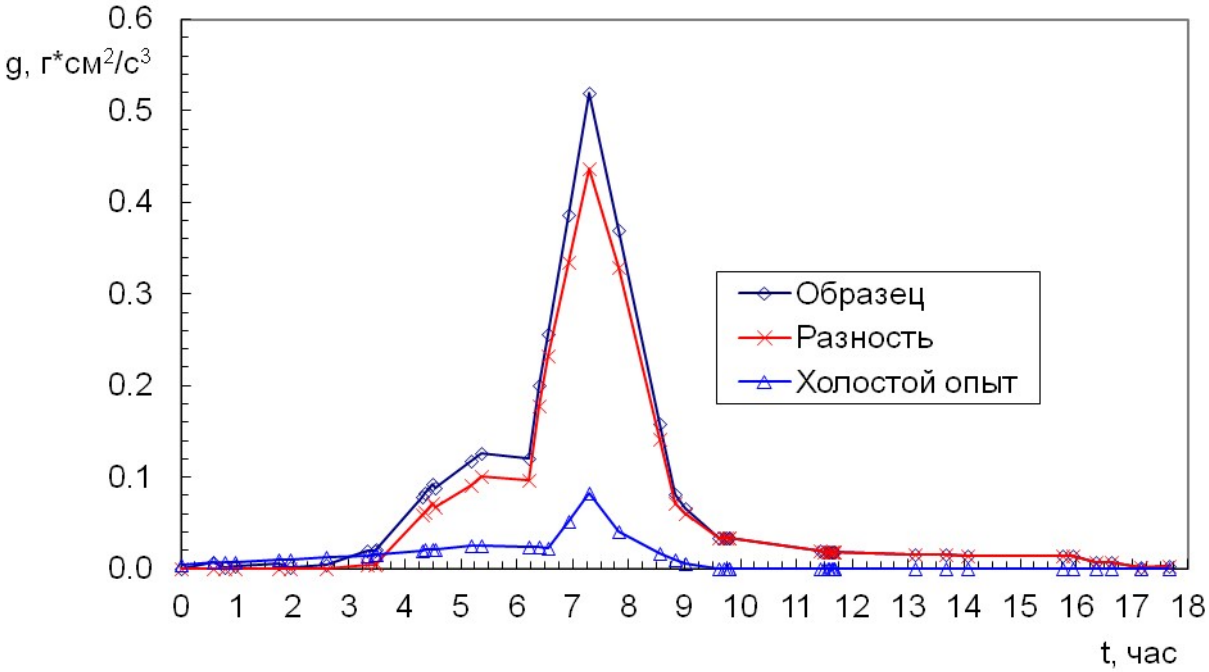


Рис. 1. Интегральные потоки: **Холостой опыт** – фоновое газовыделение рабочей камеры без образца; **Образец** – зарегистрированное общее газовыделение исследованного образца с наложенным влиянием газовыделения материалов ячейки и стенок камеры; **Разность** – результат вычитания фона из общегое газовыделения исследованного образца с наложенным влиянием ячейки и камеры

Поведение наиболее интенсивных компонент качественно совпадает с ходом интегрального давления. В течение всего эксперимента преобладающим являлся масс-пик с M=28, соответствующий ионам CO^+ и N_2^+. При этом, интенсивность пика M=18 (H_2O^+) меньше в три раза, а пиков M=40 (Ar^+ и C_2O^+) и M=44 (CO_2^+) – в 6 раз, чем M=28.

Перемещение растворенных атомов газов в объеме твердого тела к его поверхности происходит за счет диффузии. Диффузия возможна тогда, когда колеблющиеся атомы газов приобретают энергию, достаточную для "расталкивания" соседних атомов. На основе уравнения Фика для нестационарного режима можно получить коэффициент диффузии газов в стекле.

На рисунке 2 представлена экспериментальная зависимость $\ln[g(t)]$ для исследованного свинцовосиликатного стекла С87-2 в процессе отжиг при температуре 390 ºС. [6]. На графике выявляются два прямлинейных участка, с точкой излома при времени отжига ~10600 с ≈ 3 часа. Численное значение тангенс угла наклона на первом прямолинейном участке этой зависимости составляет минус $3{,}1\cdot10^{-4}$, а на втором – минус $1{,}3\cdot10^{-5}$. С учетом этого, при размере половины толщины слоя исследованной структуры a≈0,5 мкм, получаем средние значения коэффициентов диффузии при температуре 390 ºС для первого и второго участков, равные $3{,}1\cdot10^{-14}$ и $1{,}3\cdot10^{-15}$ см^2/с, соответственно.

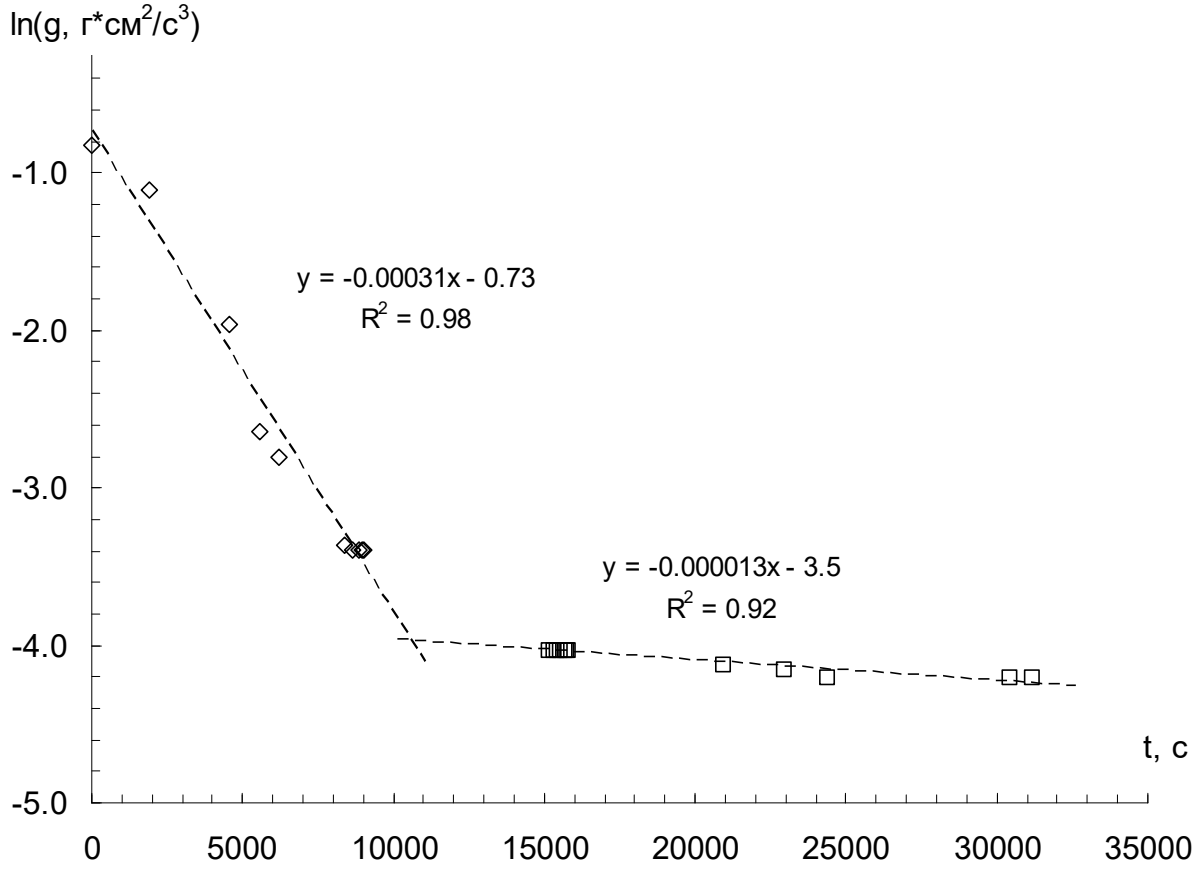


Рис. 2. Зависимость ln*g* от времени отжига при температуре 390 ºС

Литература

1. Шомахов З.В., О.А. Молоканов А.М. Кармоков Электрофизические свойства стекол С87-2, С78-4, С78-5 с. // Физика и химия стекла. 2018, т. 44, № 3, 286-289.
2. Кулов, С.К. Микроканальные пластины / С.К. Кулов. – Владикавказ: СевероКавказский технологический университет, 2001. – 86 с.
3. А.В. Бурдакова, А.В. Варанда, А.А. Краснова, О.И. Мешкова, М.А. Михайленков, А.М. Семенова, Б.П. Толочкоа, А.А. Шошин. Исследование термического газовыделения материалов, используемых в вакуумных системах // Приборы и техника эксперимента. Лабораторная техника. 2022, № 3, с. 146–151.
4. Корепин Г.Ф., Пугнин В.И., Юнаков А.Н. Определение источника газовыделения в процессе высоковольтной тренировки ЭВП // Наукоемкие технологии 2005. - Т. 6, № 5. - С. 47-50.
5. ITER Vacuum Handbook. Reference: ITR-19-004. https://www.iter.org/doc/www/content/com/Lists/ITER%20Technical%20Reports/Attachments/10/ITER_Vacuum_Handbook.pdf.
6. Орликов Л.Н. Исследование процессов газовыделения материалов в вакууме. Методические указания, Томск: ТУСУР, 2011. - 13 с.

THE TEMPERATURE STIMULATED BY THE GAS EXPULSION OF LEAD-SILICATE GLASS C87-2 AFTER ANNEALING IN HYDROGEN

Losanov H.Kh.[1], *Shomakhov Z.V.*[1], *Molokanov O.A.*[1], *Sergeev I.N.*[1], *Karmokov A.M.*[1], *Khasanov A.I.*[2]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]Chechen State University, Grozny

Gas breeding of glass C87-2, stimulated by a temperature of 390 ºC studied. The values of the diffusion coefficients of the components characteristic of the background of the sample are determined on the basis of the dynamics of the gas stream.

Keywords: *glass, vacuum, gas emission, diffusion coefficient*

УДК 35:621 25-84

ВЗАИМОСВЯЗЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ И ГАЗОВЫДЕЛЕНИЯ В СТЕКЛЕ С87-2 В ПРОЦЕССЕ ОТЖИГА

Лосанов Х.Х.[1], Шомахов З.В.[1], Молоканов О.А.[1], Сергеев И.Н.[1], Кармоков А.М.[1], Хасанов А.И.[2]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2]Чеченский государственный университет, Грозный

Исследованы изменение электропроводности и газовыделение стекла С87-2 при отжиге до температуры 450 °С. Выявлены корреляции между процессом газовыделения и изменением удельной электропроводности, обусловленные формированием и ростом наноразмерных кристаллических фаз в стекле.

Свинцово-силикатное стекло С87-2 достаточно широко используется в изделиях электронной техники [1], в частности, как основное стекло при производстве стеклянных микроканальных пластин [2]. В настоящей работе исследованы электрофизические свойства и газовыделение стекла С87-2 в процессе нагревов и изотермических отжигов при температурах до 450 °С, в сопоставлении со структурными изменениями в следствие отжигов по данным рентгеноспектрального анализа.

Сравнение результатов исследования электропроводности стекла С87-2 после отжига и после повторного отжига показывает идентичность характера температурных зависимостей (рис. 1). При нагреве до 450 °С и изотермической выдержке в течение 5 часов удельные электропроводности возрастают затем монотонно уменьшаются в процессе отжига. Повторный отжиг образцов не приводит к изменению хода зависимостей, и они совпадают для обоих образцов. Изменение электропроводности связано с структурными изменениями стекла в процессе отжига. В исследуемом стекле при высокотемпературном отжиге обнаружено образование и рост наноразмерных частиц новой фазы, которые оказывают влияния на проводимость [3]. Энергия активации электропроводности $E_{акт}$ стекла в процессе нагрева, изотермической выдержки в течение 5 часов и охлаждения, уменьшается от 0,047 до 0,0214 эВ, то есть, в результате нагрева, отжига и охлаждения $E_{акт}$ уменьшается больше чем в 2 раза. В высокотемпературной области зависимости энергия активации в стекле составляет 1,49 эВ и при температурах выше 300 °С наблюдается отклонение зависимости от линейности. В процессе изотермического отжига при температуре 450 °С наблюдается монотонное понижение электропроводности на два порядка величины.

Как видно из рисунка при первом нагреве значение энергии активации проводимости в области низких температур составляет 0,047 эВ. В высокотемпературной области зависимости энергия активации составляет 1,49 эВ и при температурах выше 300 °С наблюдается отклонение зависимости от ли-

нейности. В процессе изотермической выдержки при температуре 450 °С наблюдается монотонное понижение проводимости на два порядка.

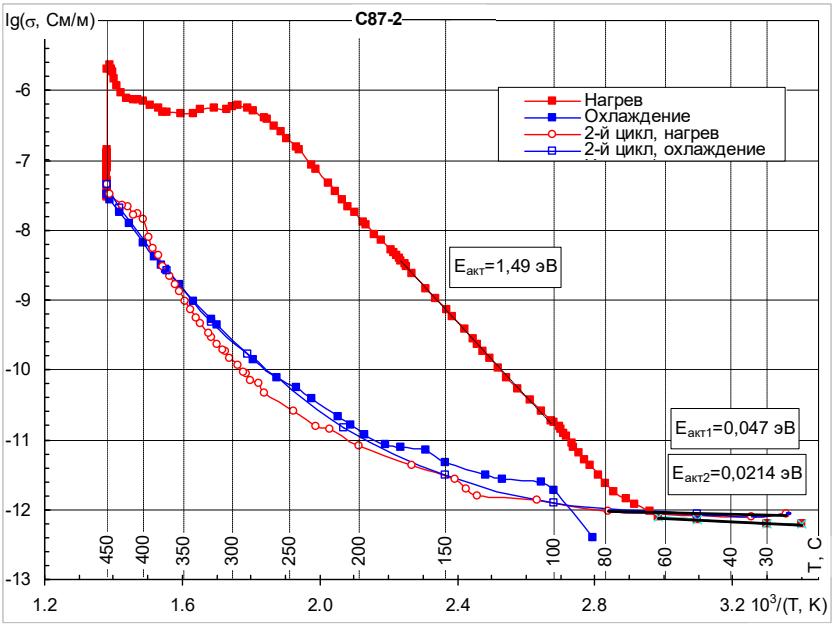


Рис. 1. Температурная зависимость удельной электропроводности стекла С87-2 в процессе нагрева, выдержки при 450 °С в течение 5 часов и охлаждения

При повторном нагревании этого образца в низкотемпературной области энергия активации проводимости снижается до 0,0214 эВ. Это же значение $E_{акт}$ повторяется и на кривой охлаждения. Таким образом, в процессе нагрева, изотермической выдержки в течение 5 часов и охлаждения, $E_{акт}$ уменьшается от 0,047 до 0,0214 эВ.

Максимальное значение потока газовыделения при отжиге рассматриваемого образца приходится на температуру390 °С. На рис. 2 показана временная зависимость потока газовыделения стекла С87-2 в процессе нагрева и последующего отжига при температуре 390 °С. Этой температуре соответствует излом на графике зависимости электропроводности от температуры при первом цикле нагрева образца (см. рис. 1) и, в меньшей степени, при втором нагреве.

Рентгеноспектральный анализ объясняет отмеченную особенность. На рис. 3 и 4 показаны рентгенограммы, полученные при рентгеноспектральном анализе образцов до и после отжига, соответственно. Спектр на рис. 3 показывает полную аморфность образцов до высокотемпературных отжигов. В отличие от этого, спектрограмма на рис. 4, то есть после отжига, демонстрирует образование наноразмерных кристаллических фаз, в основном свинца и его оксидов, при высокотемпературном отжиге. Причем, с течение времени отжига интенсивнось рентгенопиков возрастает, что говорит об увеличении объемов кристаллофаз.

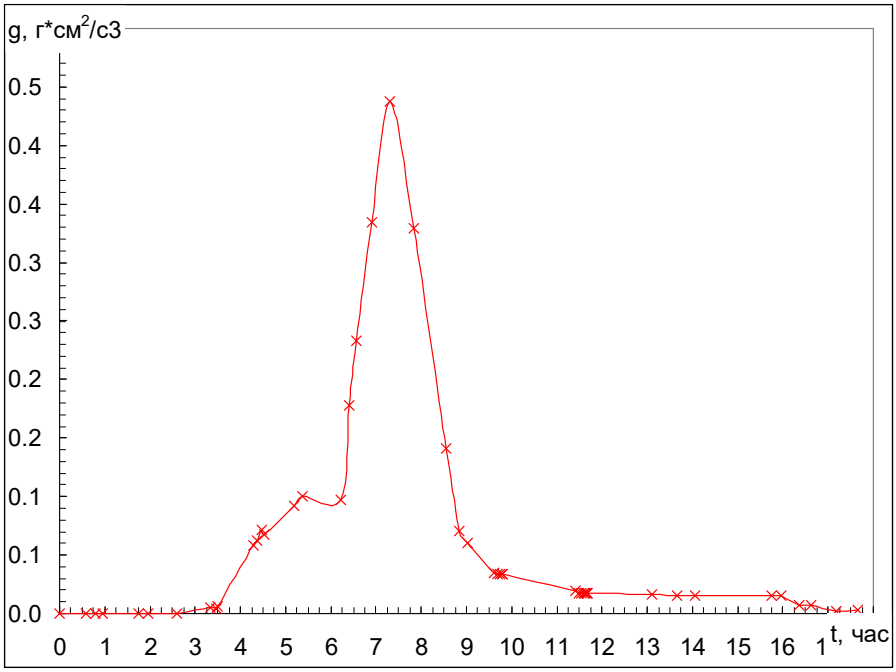


Рис. 2. Зависимость потока газовыделения стекла С87-2 в процессе нагрева и последующего отжига при температуре 390 °С

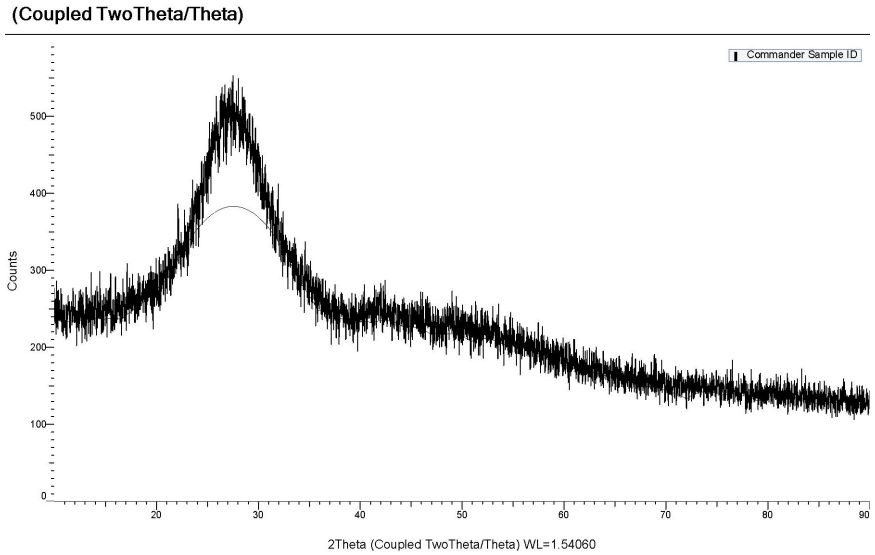


Рис. 3. Рентгеноспектральный анализ стекла С87-2 до отжига

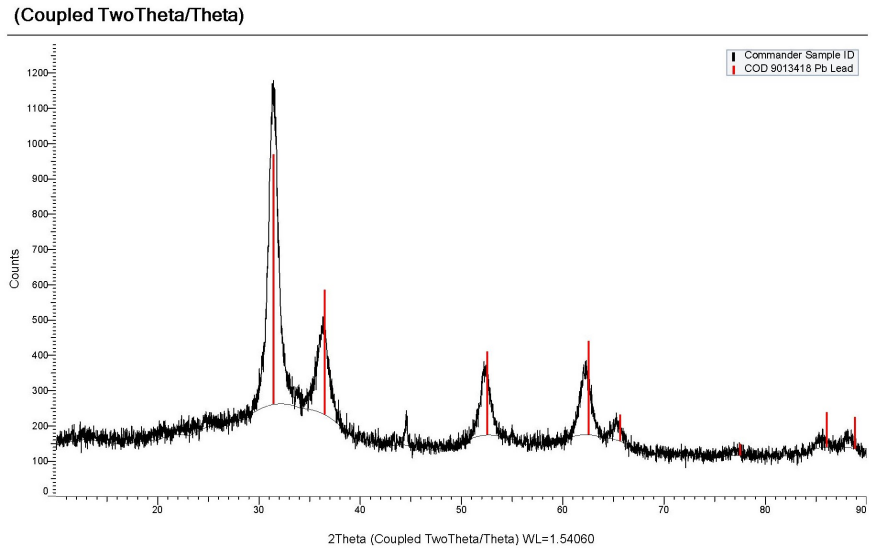


Рис. 4. Рентгеноспектральный анализ стекла С87-2 после изотермического отжига при температуре 450 С в течение 5 часов

Таким образом, установлено, что в стеклах С87-2 при повышении температуры наблюдаются повышение электропроводности ~ 6 раз, одновременно наблюдается интенсивное газовыделения в основном компонентов газов 18 (H_2O), 28 (CO, N_2), 40 (Ar, C_2O), 44 (CO_2), Сравнительный рентгеноспектральный анализ образцов до и после термообработки показывает образование наноразмерных кристаллические фазы свинца в стекле. Температура изломов на зависимостях электропроводности и газовыделения, а также образование кристаллофаз в образцах согласуются.

Литертура

1. Линза Кумахова. Авторское свидетельство СССР № 1322888, кл. G 21 K 7/00, 1985.
2. Кулов, С.К. Микроканальные пластины / С.К. Кулов. – Владикавказ: СевероКавказский технологический университет, 2001. – 86 с.
3. Шомахов, З.В. Влияние температуры изотермического отжига на образование нанокристаллов в стекле С78 5 – / З.В. Шомахов, В.И. Альмяшев, А.М. Кармоков, Р.Ш. Тешев, О.А. Молоканов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2011. – Т. 1. – № 4. – С. 5-7

THE RELATIONSHIP OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY AND GAS EMISSIONS IN GLASS C87-2 DURING ANNEALING PROCESS

Losanov H.Kh.[1], Shomakhov Z.V.[1], Molokanov O.A.[1], Sergeev I.N.[1], Karmokov A.M.[1], Khasanov A.I.[2]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]Chechen State University, Grozny

The change in electrical conductivity and gas carrier of the glass C87-2 with annealing to a temperature of 450 ° C are investigated. The correlations between the gas extension process and the change in the specific electrical conductivity, due to the formation and growth of nano -sized crystalline phases in the glass, were detected.

СЕКЦИЯ 4

ИНФОРМАЦИОННЫЕ И ЦИФРОВЫЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

УДК 681.772.7 25-17

КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ ИНФОРМАТИВНОСТИ И ЭФФЕКТИВНОСТИ УСТРОЙСТВ ФОРМИРОВАНИЯ ВИДЕОИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ДИСКРЕТНЫХ МАТРИЧНЫХ МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Волхонский В.В.[1], Калиберда И.В.[2]

[1]Университет ИТМО, Санкт-Петербург
[2]Пятигорский институт (филиал) СКФУ, Пятигорск

Анализируются существующие критерии и методы оценки информативности видеоизображения и эффективности устройства формирования видеосигналов на основе дискретных матричных микроэлектронных преобразователей оптического излучения разных спектральных диапазонов. Сделаны рекомендации по использованию и предложен критерий оценки информационной избыточности видеоизображения и экономической эффективности.

В настоящее время широкое распространение получили разнообразные системы и устройства формирования видеосигналов (УФВС), использующие дискретные матричные микроэлектронные преобразователи оптического излучения разных спектральных диапазонов (ПЗС, КМОП, микро болометрические и др.) [1]. К ним можно отнести УФВС, использующие видимый спектральный диапазон; видимый диапазон совместно с ближним инфракрасным; ближний и средний, а также дальний инфракрасный. Также необходимо отметить такое направление, как формирование мультиспектральных видеоизображений (ВИ). В частности, это эффективный способ повышения надежности решения в первую очередь таких задач, как идентификация и аутентификация пользователей информационных систем. Эффективность (как результативную, так и экономическую) таких устройств можно оценивать с использованием разных критериев и различными способами. С этой точки зрения представляет интерес более детальная проработка вопросов выбора критериев и методов оценивания информативности ВИ и эффективности УФВС, что особенно важно при разработке алгоритмов автоматического выбора параметров установки УФВС при заданных ограничениях и критериях для решения требуемой задачи наблюдения. Вышесказанное свидетельствует об актуальности задачи анализа существующих и формулировки новых критериев и методов оценивания информативности ВИ и эффективности УФВС.

Рассмотрим существующие критерии оценки информативности ВИ. Учтем, что информативность видеосигнала, сформированного мультиспектральными УФВС, напрямую зависит как от параметров матриц (прежде

всего разрешения), так и от параметров установки этих устройств [2]. Поэтому необходим взаимный учет обеих упомянутых характеристик.

Плотность пикселей. Известно, что возможность решения той или иной задачи наблюдения зависит от степени детализации ВИ. Основной критерий оценки степени детализации, характеризующий в наибольшей степени информативность, это D_p – плотность пикселей (ПП) на ВИ [2-3]. Для решения требуемой задачи наблюдения необходимо определённое значение ПП. Это критерий наиболее широко используемый в настоящее время.

Распределение плотности пикселей. Критерий достижения требуемой ПП, не учитывает перепад ПП в различных частях зоны обзора (ЗО), что приводит к информационной избыточности изображения. Решить эту проблему позволяет использование критерия распределения $D_p(l)$ плотности пикселей по ЗО [4-5].

Коэффициент информативности зоны обзора. С точки зрения решения задач наблюдения информативной будет только часть ЗО, где может находится объект наблюдения, а точнее его изображение. Коэффициент информативности ВИ ЗО [2] определяется как $K_{\text{изо}} = S_{\text{и}}/S_0$, где $K_{\text{изо}}$ – коэффициент информативности ЗО; $S_{\text{и}}$ – площадь информативной части ВИ; S_0 – общая площадь ВИ. Это интегральная оценка всего ВИ в целом, свидетельствующая о том, есть ли области ВИ, где объект принципиально не может находиться. А это области избыточные, не несущие полезную информацию. Например, на рис. 1 приведены изображения прямоугольного помещения и место расположения и ориентации камеры. Часть видеоизображения на рис. 1, *а* с прямой штриховкой не несет полезной информации и обусловлена, в частности, некорректной ориентацией камеры. Верхнюю неинформативную часть ВИ изображения в этом примере легко устранить просто наклоном камеры. Однако в общем случае минимизация неинформативной части ВИ, это многоальтернативная, многопараметрическая задача [5].

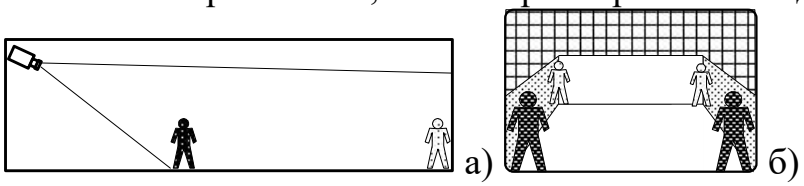


Рис. 1. Положение камеры и видеоизображение зоны обзора

По своей сути, $K_{\text{изо}}$ – это бинарный коэффициент, учитывающий только возможность наличия полезной информации в той или иной части видеоизображения или ее отсутствие. При этом детально информативность конкретного объекта наблюдения не учитывается. Это приводит к недостаточной точности оценки. Однако использование этого параметра весьма полезно для оценки корректности установки УФВС, в первую очередь, ориентации в пространстве.

Если этот параметр $K_{\text{ИЗО}}$ использовать несколько иначе, как коэффициент избыточности ВИ $K_{\text{Изб}} = 1 - K_{\text{ИЗО}}$, то он может служить также оценкой *избыточности ВИ* и, следовательно, использоваться как один из критериев экономической эффективности.

Коэффициент неравномерности $K_{\text{НР}}$ видеоизображений одинаковых объектов наблюдения на разных дальностях существенно влияет на условия решения задачи, поскольку зрительное восприятие оператора сильно зависит от размеров наблюдаемых объектов на экране. Этот коэффициент определяется как отношение $K_{\text{НР}} = h_{\text{Б}} / h_{\text{Д}}$ – высоты изображений $h_{\text{Б}}$ и $h_{\text{Д}}$ одного и того же объекта (рис. 2, а) на ближней и дальней границах ЗО (рис. 2, б).

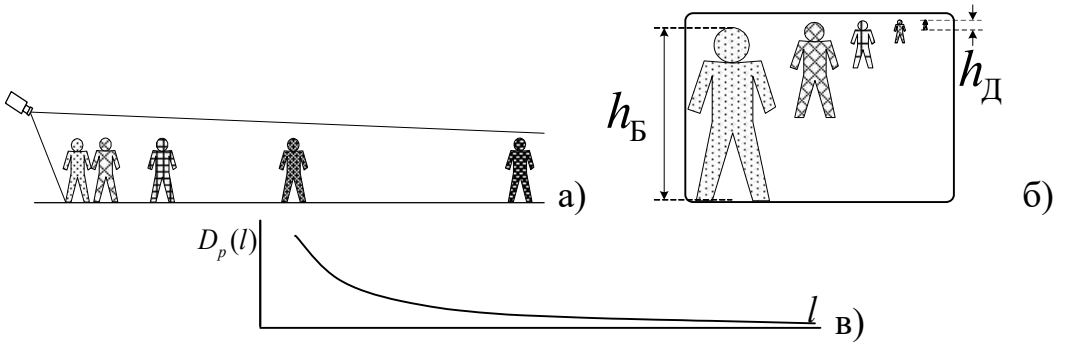


Рис. 2. Неравномерность видеоизображений

Заметим, что коэффициент неравномерности $K_{\text{НР}}$ непосредственно связан с распределением $D_p(l)$ ПП (рис. 2, в) – один и тот же объект на разной дальности, будет отображаться разным количеством пикселей. Поэтому соотношение $K_{\text{НР}} = D_p^{\max} / D_p^0$ минимально требуемого D_p^0 для решения задачи наблюдения и максимального $D_p^{\max}$ в ближней части ЗО будет также определять коэффициент неравномерности ВИ. По сути, это тоже самое, что и отношение плотности пикселей в начале и конце ЗО.

Результативная эффективность. Основным параметром, определяющим результативную эффективность, можно считать достижение значения ПП, необходимого для решения задачи наблюдения [2, 3], при выполнении соответствующих ограничений.

Экономическая эффективность систем важная характеристика. А учитывая сложность и высокую стоимость систем наблюдения, вопросы повышения экономической эффективности становятся еще более актуальными. Выбор параметров УФВС напрямую связан с экономической эффективностью системы наблюдения. Поскольку последняя определяется прежде всего затратами на создание системы, имеющей необходимые ресурсы по формированию, обработке, передаче, хранению и отображению ВИ и зависящими, в первую очередь, от объема видеосигнала, который будет определяться количеством пикселей, формирующих ВИ. Стоимостные показатели экономической эффективности в значительной степени определяются ресурсами системы наблюдения, необходимыми и достаточными для решения

задачи наблюдения. При этом не должно быть избыточности в ресурсах, а необходимые ресурсы зависят от функциональных параметров системы. К основным ресурсам системы можно отнести непосредственно параметры УФВС, в первую очередь, разрешение; объём памяти для хранения видеоинформации; вычислительные ресурсы по формированию и обработке видео сигналов, по сжатию и декомпрессии, работой средств автоматизированного видеоанализа и др.; пропускную способность каналов связи.

Проанализируем недостатки существующих критериев и методов оценки. Критерий достижения требуемой ПП, не учитывает значительный перепад ПП в различных частях ЗО, что приводит к информационной избыточности ВИ. Коэффициент избыточности $K_{\text{Изб}} = D_p^{\max} \big/ D_p^0$ дает представление только о соотношении максимального и минимального значений ПП и не учитывает реальный вид распределения $D_p(l)$ ПП от минимальной $L_{\min}$ до максимальной $L_{\max}$ границ ЗО (рис. 3), поэтому не позволяет сделать корректную оценку избыточности.

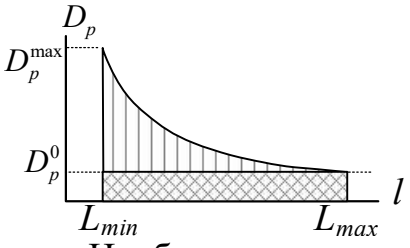


Рис. 3. Информативная (сетчатая штриховка) и избыточная (вертикальная штриховка) составляющих распределения плотности пикселей

Наиболее детально критерии оценки избыточности ПП рассмотрены в [4]. Все они, а именно, минимум максимального значения $\min\{\max D_p^{\max}\}$, минимальный диапазон изменения $\min\{D_p^{\max} - D_p^{\min}\}$, равнозначные максимумы $D_p^{n\max} = D_p^{m\max}$, и равнозначные минимумы $D_p^{n\min} = D_p^{m\min}$ учитывают лишь экстремальные значения ПП. Поэтому необходимы новые критерии, более детально учитывающие избыточность ВИ с точки зрения влияния на необходимые ресурсы.

Показанные на рис. 2 и 3 распределения ПП, соответствуют построчной структуре пикселей видеоизображений. А обработка ведется обычно покадрово. Поэтому критерии, перечисленные выше, в большей степени служат оценкой равномерности ВИ, но лишь отчасти соответствуют критерию экономической эффективности. Таким образом для оценки избыточности необходим другой критерий. В качестве такого критерия предлагается оценивать избыточность, используя следующее выражение:

$$K_{\text{Изб}} = \int_{L_{\min}}^{L_{\max}} D_p(l)dl - D_p^0(L_{\max} - L_{\min}).$$

Для повышения общности результатов выполним нормировку $D_p^{\text{Н}} = D_p \big/ D_p^0$ значений $D_p(l)$ распределения плотности пикселей к минимально требуемой D_p^0. Тогда получим выражение:

$$K_{\text{Изб}}^{\text{Н}} = \int_{L_{\min}}^{L_{\max}} D_p^{\text{Н}}(l)dl - (L_{\max} - L_{\min}),$$

которое позволяет сравнивать различные варианты использования УФВС.

Предложенный критерий позволяет точнее оценивать информационную избыточность ВИ и, тем самым, оптимизировать распределение ПП, а также выполнять оценку экономической эффективности.

Литература

1. Петраков А.В. ТелеультраинфраВизуализация как защищенное телевидение. – М.: Academia, 2015. – 642 с.
2. Волхонский В. В. Системы телевизионного наблюдения: основы проектирования и применения. – М.: Горячая линия – Телеком, 2022. – 392 с.
3. IEC 62676-4 (2014) Video surveillance systems for use in security applications - Part 4: Application guidelines. 29.04.2014, 148 с.
4. Волхонский В. В., Ковалевский В. А. Методика оптимизации распределения плотности пикселов по зоне наблюдения // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 6. С.1055–1062.
5. Волхонский В.В., Ковалевский В.А. Метод оптимизации параметров установки камеры для видеоконтроля зоны наблюдения произвольной формы // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 5. С. 927–934.

CRITERIA FOR ESTIMATION OF THE INFORMATIVENESS AND EFFICIENCY OF VIDEO IMAGE FORMING DEVICES BASED ON MATRIX MICROELECTRONIC TRANSDUCERS OF OPTICAL RADIATION

Volkhonskiy V.V.[1], Kaliberda I.V.[2]

[1]ITMO University, Saint-Petersburg
[2]Pyatigorsk Institute (branch) of NCFU

The existing criteria and methods for evaluating the informativeness of video image and the effectiveness of video signal forming devices based on discrete matrix microelectronic transducers of optical radiation converters of different spectral ranges are analyzed. Recommendations on the use are made and a criterion for evaluating the information redundancy of the video image and economic efficiency is proposed.

УДК 681.772.7 25-18

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ УСТРОЙСТВ ФОРМИРОВАНИЯ ВИДЕОСИГНАЛОВ НА ОСНОВЕ МАТРИЧНЫХ МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ПРОТЯЖЁННЫХ ЗОН

Бакиров Р.М.[1], Волхонский В.В.[1], Калиберда И.В.[2]

[1]Университет ИТМО, Санкт-Петербург
[2]Пятигорский институт (филиал СКФУ), Пятигорск

Рассматриваются вопросы оптимизации параметров устройств формирования видеосигналов различных спектральных диапазонов для контроля протяжённых зон. Анализируется избыточность плотности пикселей по зоне обзора, снижающая экономическую эффективность систем наблюдения. Предложены критерии оценки информативности и избыточности видеоизображений, а также способ оптимизации распределения плотности пикселей за счёт выбора параметров установки камер. Сформулированы рекомендации по выбору параметров, позволяющее повысить результативную и экономическую системы.

Широкое распространение устройств формирования видеосигналов (УФВС), использующих дискретные матричные микроэлектронные преобразователи оптического излучения разных спектральных диапазонов (телекамеры и видеокамеры, тепловизоры, приборы ночного видения) [1] требует решения задач оптимизации параметров для повышения эффективности их использования. Для оценки как результативной, так и экономической эффективности, необходимы соответствующие критерии. Оценкой результативной эффективности УФВС служит возможность решения требуемой задачи наблюдения - мониторинга, обнаружения, обзора, распознавания, идентификации [2]. В свою очередь для решения задачи наблюдения как критерий широко используется плотность пикселей (ПП). Корректный выбор этого параметра позволяет обеспечить визуализацию с требуемым качеством и возможность решения задачи наблюдения.

Специфика использования различных УФВС состоит в том, что значения ПП существенно меняются в пределах зоны обзора (ЗО). Учитывая, что требуемое значение ПП должно выполняться в самой дальней точке ЗО, в остальных частях и особенно в ближних, значения ПП могут на порядок и более превышать требуемое значение ПП. Особенно это касается протяженных зон, где различия в ПП наиболее велики. Как следствие, возникает избыточность информативности видеоизображений (ВИ) объектов, находящихся вблизи УФВС. Это требует дополнительных ресурсов по обработке, передаче, хранению и отображению видеоинформации и приводит к снижению экономической эффективности. Вопросам оптимизации распределения ПП посвящены ряд работ [2-3], но в них рассматриваются

отдельные вопросы, не позволяющие сделать практические рекомендации по повышению эффективности УФВС. Методика, предложенная в [5], требует аппаратных новых решений. Поэтому задача оптимизации параметров УФВС для контроля протяжённых зон является актуальной.

Для решения поставленной задачи целесообразно выбрать критерии оценки информативности и избыточности ВИ. Наиболее эффективное использование функциональных возможностей УФВС, невозможно без учета аргументированного выбора параметров установки таких устройств, позволяющих, как сохранить требуемую информативность ВИ, так и повысить экономическую эффективность.

Рассмотрим задачу видеоконтроля протяжённой зоны двумя наиболее часто используемыми УФВС как телекамеры. В качестве критериев установки камер [2] выберем типичные для подобных задач. Это основной критерий – необходимый уровень информативности - достижение минимально требуемого значения плотности пикселей D_p^0 во всей ЗО. А также дополнительные - отсутствие не просматриваемых зон и односторонний обзор.

На рис. 1 показано расположение камер, обычно используемое на практике - встречная установка на краях зоны обзора, а на рис. 2 – кривые $D_p(l)$ распределения ПП по зоне для первой и второй камер.

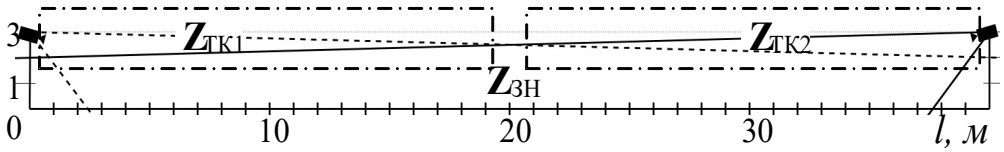


Рис. 1. Расположение камер для контроля протяженной зоны

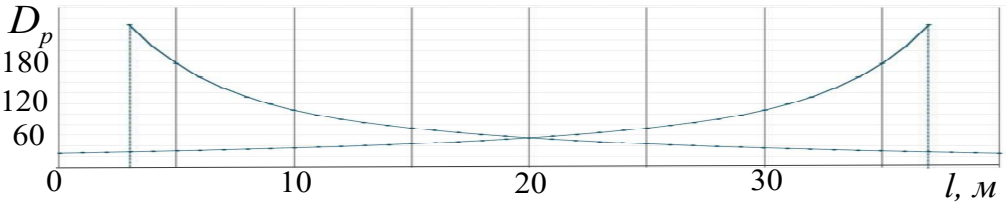


Рис. 2. Распределение плотности пикселей

В не просматриваемых зонах под камерами плотность пикселей определяется противоположной камерой. В остальных итоговая плотность пикселей будет соответствовать выражению:

$$D_p(l) = \begin{cases} D_p^{ТК1}(l), & D_p^{ТК1}(l) \geq D_p^{ТК2}(l) \\ D_p^{ТК2}(l), & D_p^{ТК1}(l) < D_p^{ТК2}(l) \end{cases}.$$

Анализируя распределение ПП для выбранного примера, видно, что значения ПП на краях зоны обзора (под камерами) будут минимальны. А максимальное и минимальное (заданное) значения ПП отличаются более

чем на порядок, т.е. имеет место существенная избыточность, требующая неоправданного увеличения ресурсов системы наблюдения.

Использование модели системы наблюдения, предложенной в [3] позволяет определить возможные подпространства расположения каждой камеры $\mathbf{Z}_{ТК1}$ и $\mathbf{Z}_{ТК2,}$ соответствующие половинам длины общей зоны наблюдения $\mathbf{Z}_{ЗН}$. Это позволяет сделать вывод о возможности оптимизации информативности и избыточности исследованием распределения ПП при изменении положения камер в пределах упомянутых подпространств в сторону центра с учетом ограничений выбранных критериев.

На рис. 3 показано распределение ПП для угла обзора 50° и разных положений камеры в пределах левой половины ЗО. Видно, что смещение приводит к росту ПП в дальней зоне (рис. 3, а).

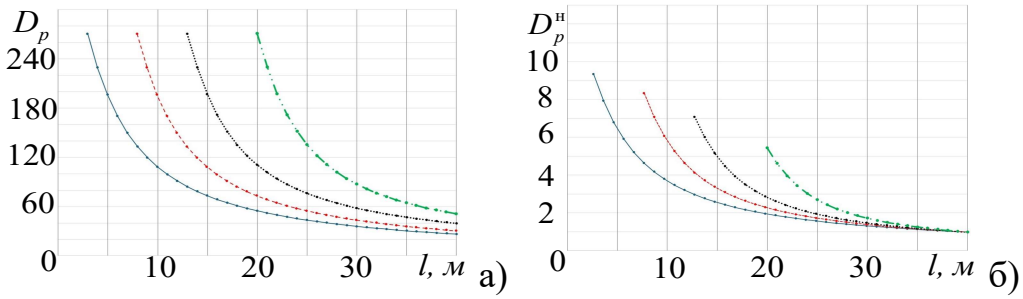


Рис. 3. Распределение ПП первой камеры для разных положений (а – без нормировки, б – с нормировкой)

Для повышения общности результатов выполним нормирование значений D_p ПП к минимально необходимой $D_p^{\text{Н}} = D_p / D_p^0$. Тогда нормированному значению $D_p^{\text{Н}}$ -равному единице будет соответствовать значение D_p^0. А переход к конкретно требуемому числовому значению ПП для выбранной задачи может быть осуществлен умножением всех значений ПП на D_p^0. На рис. 3, б показаны результаты расчетов распределения нормированной ПП при разных значениях расстояния от начала зоны наблюдения. Значениям ПП большим единицы будет соответствовать чрезмерная избыточности.

Для оценки избыточности ВИ воспользуемся коэффициентом избыточности K_u, определяемым как отношение реальной плотности пикселей D_p к требуемой D_p^0. Значение K_u больше единицы соответствует излишне большой, а меньше единицы - недостаточной для решения задачи наблюдения. Численно значение избыточности можно характеризовать нормированной ПП имеющий максимальное значение [4]. Таким образом нормировка позволяет оценить избыточность ВИ по сравнению с другими вариантами параметров, влияющими на экономическую эффективность.

Используя критерий минимума максимального (избыточного) значения ПП $\min\{\max D_p^{\max}\}$ при сохранении требуемой плотности пикселей

$D_p \geq D_p^0$ можно оценить выигрыш в экономической эффективности при той же результативной.

На рисунке 4 показаны результаты расчетов для углов обзора пары камер 30, 50 и 70°, расположенных на разных расстояниях от краев ЗО.

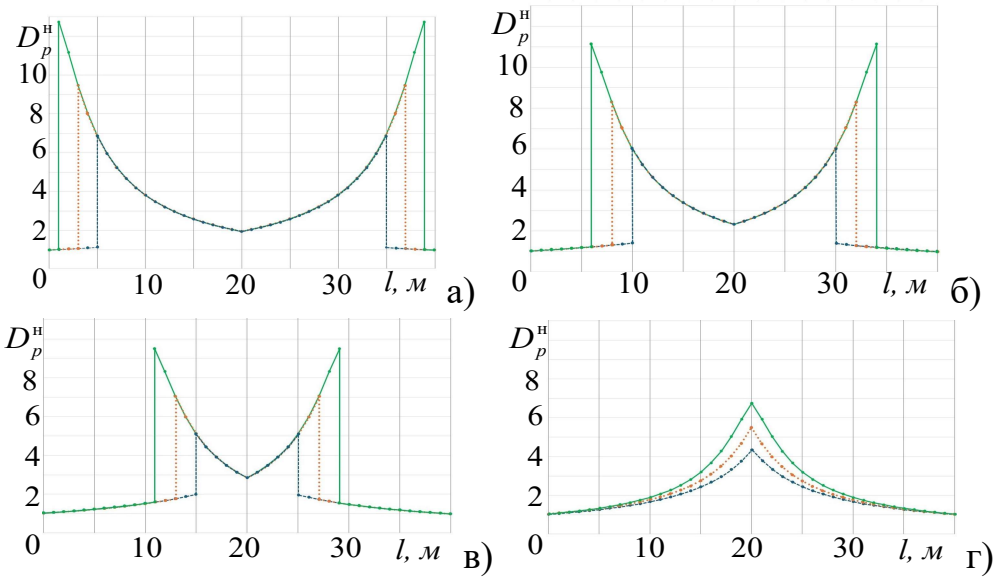


Рис. 4. Распределение ПП по зоне обзора (а – камеры по краям ЗО; б – расстояние от края 5 м, в – 10 м; г – предельное; угол обора 30° – пунктирная линия, 50° – точечная, 70°– сплошная)

Обобщенную оценку иллюстрируют графики на рис. 5.

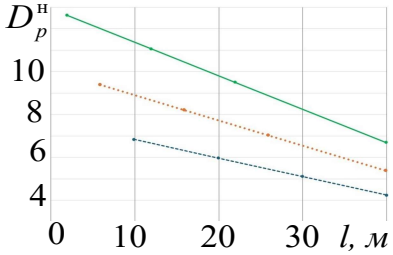


Рис. 5. Зависимости избыточности от угла обзора и положения камер

Анализируя результаты расчетов, можно сделать следующие выводы.

1. Минимальные значения ПП достигаются при совпадении границ не просматриваемых зон под камерами. Выигрыш в снижении избыточности, который составлял 6,8; 9,4 и 12,7 для углов 30, 50 и 70°, соответственно, уменьшился до значений 4,2; 5,3 и 6,7 (на 62, 77 и 89 %).

2. Смещение камер в сторону центра зоны обзора, приводит к увеличению значений плотности пикселей под камерами и уменьшению максимальных значений ПП. Это соответствует уменьшению избыточности степени детализации видео изображения, при сохранении минимально требуемой плотности пикселей для решения заданной задачи наблюдения.

3. Целесообразно использование при оптимизации в качестве параметра не только минимально требуемого значения ПП, но и распределения ПП с оптимизацией по критерию, зависящему от задачи наблюдения.

4. При смещении камер также улучшается степень соответствия и другим критериям [2] - минимизации эффекта загораживания и равномерности информативности одного и того же объекта на разных расстояниях.

5. С точки зрения оценивания результата оптимизации рекомендуется использовать критерий максимально достижимой плотности пикселей без нормировки ПП, а критерий минимум избыточности с нормировкой ПП.

6. Полученные результаты применимы для широкого класса задач, учитывая возможность использования «коридорного» формата камер.

Литература

1. Петраков А.В. ТелеультраинфраВизуализация как защищенное телевидение. – М.: Academia, 2015. – 642 с.
2. Волхонский В.В. Системы телевизионного наблюдения: основы проектирования и применения. – М.: Горячая линия – Телеком, 2022. – 392 с.
3. Волхонский В.В., Ковалевский В.А. Метод оптимизации параметров установки камеры для видеоконтроля зоны наблюдения произвольной формы // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 5. С. 927–934. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-5-927-934.
4. Волхонский В.В., Ковалевский В.А. Методика оптимизации распределения плотности пикселов по зоне наблюдения // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 6. С. 1055–1062. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-6-1055-1062.

OPTIMIZATION OF PARAMETERS OF VIDEO SIGNAL FORMATION DEVICES BASED ON MATRIX MICROELECTRONIC TRANSDUCERS OF OPTICAL RADIATION FOR EXTENDED ZONES MONITORING

Bakirov R.M.[1], Volkhonskiy V.V.[1], Kaliberda I.V.[2]

[1]ITMO University, Saint-Petersburg
[2]Pyatigorsk Institute (NCFU branch), Pyatigorsk

Abstract. The article explores the optimization of parameters for video signal generation devices operating in various spectral ranges to monitor extended zones. The problem of excessive pixel density across the observed zone, which reduces the economic efficiency of surveillance systems, is analyzed. Criteria are proposed for evaluating the informativeness and redundancy of video images, along with methods for optimizing pixel density distribution by selecting camera installation parameters. Recommendations are formulated for parameter selection to improve both operational effectiveness and economic efficiency in such systems.

УДК 621.315.592 25-26

РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ В КРЕМНИЙ НА ЯЗЫКЕ ПРОГРАММИРОВАНИЯ MS VISUAL C#

Плотникова Е.Ю., Арсентьев А.В., Винокуров А.А.

Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж

Рассматривается моделирование процесса диффузии примеси в кремниевую пластину с использованием одномерного уравнения диффузии Фика. Расчет проводится из бесконечного и ограниченного источника. Анализируется изменение коэффициента диффузии D_0 в зависимости от температуры T. Программа разработана на языке программирования высокого уровня C#.

Диффузия – это перенос атомов примеси (вещества), возникающий из-за хаотического теплового движения атомов. Процесс возникает при наличии градиента концентрации примеси, который направлен в сторону уменьшения данной концентрации.

С помощью диффузии можно задать:

- тип проводимости (электронная или дырочная);
- концентрацию примеси в локальной области полупроводника.

Перемещение атомов примеси происходит по одному из механизмов:

- по вакансиям (дефектам кристаллической решетки) – после охлаждения вакансия исчезает, а примесный атом «фиксируется»;
- по междоузлиям – после охлаждения межузельный атом может вернуться в узел, заместив основной атом и став электрически активным.

Активация процесса диффузии в зависимости от полупроводника и примеси происходит при температуре t~1000 °C. Атомы по кристаллической решетке перемещаются скачками, поэтому для расчёта рассматривается суммарный поток – статистически усредненный за определенный период времени.

Моделирование процесса диффузии можно изучать с двух позиций: на постоянной температуре и с изменением температуры процесса.

В табл. приведены основные параметры наиболее распространенных примесей, используемых в кремниевой технологии. В зависимости от вводимой примеси меняются параметры моделирования.

Зная величину энергии активации примеси (Ea) и выбрав температурный диапазон (T=1000...1600 К), можно рассчитать температурную зависимость коэффициента диффузии ($D(T)$) (рис. 1, а). Здесь же рассчитывается коэффициент диффузии при заданной ранее температуре диффузии T_1=1473 К.

Таблица. Основные акцепторные и донорные примеси для Si

Акцепторы			Доноры		
Элемент	*Do*, см^2/с	*Ea*, эВ	Элемент	*Do*, см^2/с	*Ea*, эВ
B	5,1	3,7	P	3,85	3,66
Al	1,385	3,39	As	24	4,08
In	0,785	3,63	Sb	12,9	3,98
Ga	0,374	3,41	Bi	1,08	3,85

В коде для расчета температурной зависимости коэффициента диффузии создается отдельный метод. В качестве *x* будет подставляться температура в Кельвинах:

```
private static double D(double x)
{
    return D0 * Math.Exp(-Ea / (k * x));
}
```

Процесс диффузии проводится в два этапа. Сначала примесь диффузанта из потока в трубе установки внедряется в узкий приповерхностный слой пластины – это процесс загонки примеси, он рассчитывается через функцию ошибок:

```
private static double C1(double x) // источник бесконечной мощности
{
    return Cc + (C0 - Cc) * (1 - Erf(x/(2*Math.Sqrt(D(T)*t)))); //
Формула модифицирована под случай, когда формируется слой p-p+ или n-
n+ типа, когда концентрацией примеси в исходном полупроводнике нельзя
пренебречь
}
```

Далее примесь из узкой приповерхностной области распределяется при высокой температуре вглубь пластины без приточки из окружающей среды – она разгоняется на заданную глубину:

```
private static double C2(double x) // источник ограниченного мощности
{
    return C0*Math.Exp(-Math.Pow(x, 2.0)/(4*D(T)*t));
}
```

Глубина залегания p-n перехода рассчитывается методом Ньютона как корень нелинейного уравнения с заданием первого приближения непосредственно в интерфейсе программы:

```
  private static double Newth(double x)
  {
      double eps = 1e-6;
      double x1;
      x1 = x - (F(x) / dF(x));
      while (Math.Abs(F(x)) >= eps)
      {
```

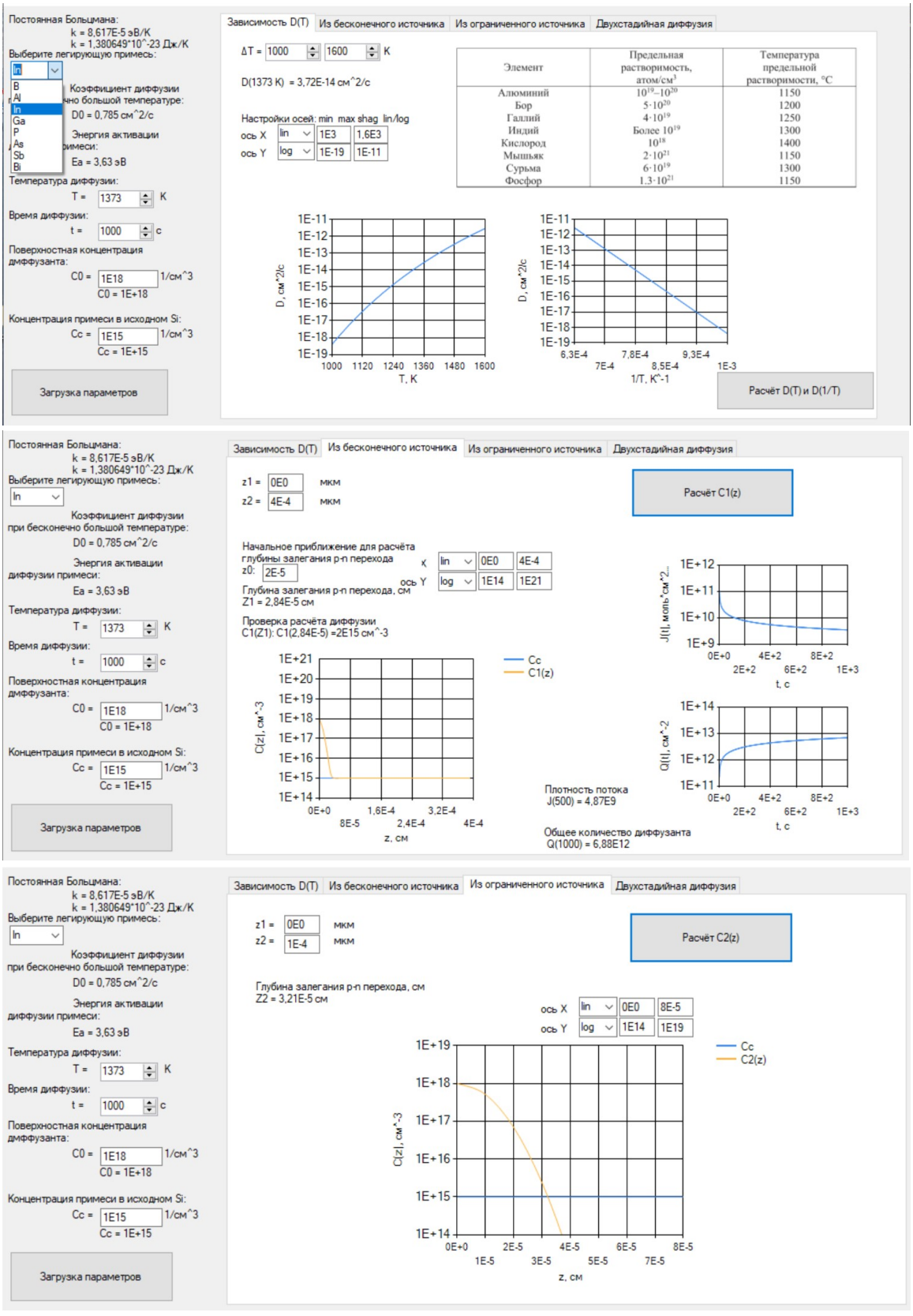


Рис. 1. Пример расчёта диффузии индия в кремний (а) с выбором легирующей примеси и загрузкой параметров в программу, а также расчет коэффициента диффузии *D(T)*, (б) распределение примеси в пластине во время процесса загонки (из бесконечного источника), (в) распределение примеси в пластине во время процесса разгонки (из ограниченного источника, с поверхности пластины)

```
            x1 = x - (F(x) / dF(x));
            x = x1;
        }
        return x;
    }
```

В метод подставляется формула глубины залегания p-n перехода:

```
private static double F(double x)
 {
     return C0/Cc* (1 - Erf(x / (2 * Math.Sqrt(D(T) * t))))-1;
 }
```

Также для расчета используется первая производная от этой функции:

```
 private static double dF(double x)
 {
     return -C0*Math.Exp(-
Math.Pow(x,2.0)/(4*t*D(T)))/(Math.Sqrt(Math.PI)*Cc*Math.Sqrt(t*D(T)));
 }
```

Точная глубина залегания первого p-n перехода Z1 = 2,84·10^{-5} см показана на рис. 1, б.

При расчете процесса загонки примеси можно определить плотность потока диффузанта, входящего в полупроводник, в момент времени *T*:

```
  private static double J1(double x) // источник бесконечной мощности
  {
      return C0*Math.Sqrt(D(T)/(Math.PI*x));
  }
```

Если последовательно создаются два *p-n* перехода, их глубины залегания также можно рассчитать с использованием разработанной программы (рис. 2).

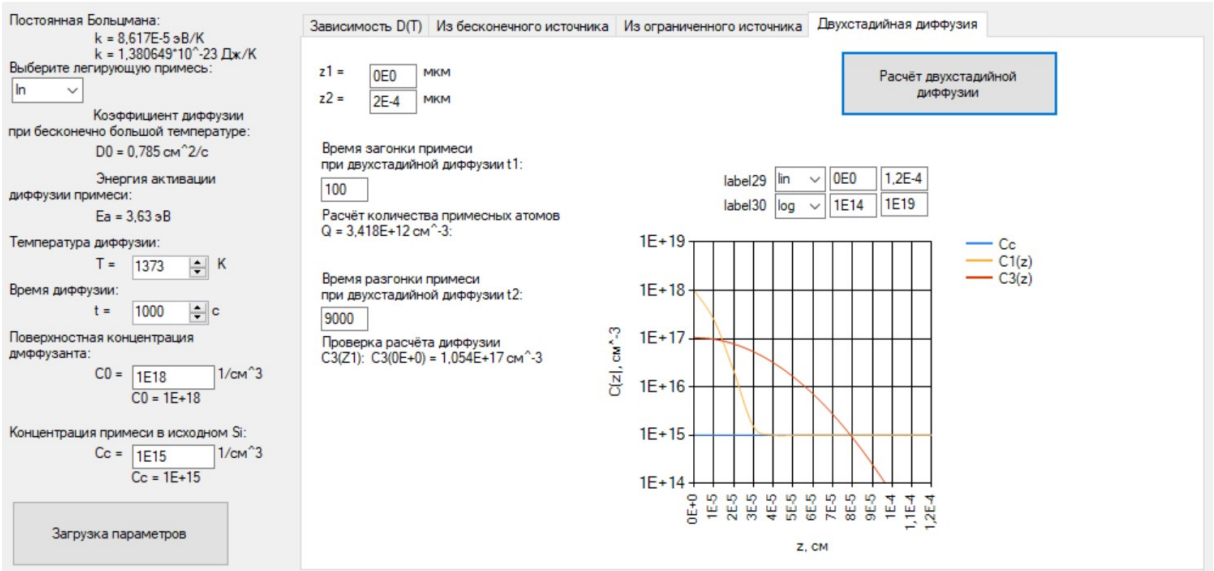


Рис. 2. Моделирование распределения двухстадийной диффузии (загонка + разгонка примеси)

Общее количество загнанной примеси, введенной через единицу поверхности полупроводника за время *T*, рассчитывается по формуле и строится как график (см. рис. 1, б):

```
private static double Q1(double x) // источник бесконечной мощности
{
    return 2*C0 * Math.Sqrt(D(T)*x / Math.PI);
}
```

Таким образом, была разработана комплексная программа, позволяющая исследовать поведение диффундирующей примеси при её внедрении в кремниевую пластину. Можно анализировать процессы загонки из бесконечного источника и разгонки из ограниченного, а также строить графики внедрения примесей разного типа проводимости для создания последовательных p-n переходов.

Литература

1. Технологическое проектирование интегральных схем. Программа SSuprem 4: Учеб. пособие для курсов лекций и лаб. работ по дисц. “Расчет и проектирование элементов интегральных схем и полупроводниковых приборов”, “Основы САПР в микроэлектронике”, “Моделирование технологических процессов микроэлектроники” для студ. спец. 41 01 02 “Микро- и наноэлектронные технологии и системы”, 41 01 03 “Квантовые информационные системы” всех форм обучения / В.В. Нелаев, В.Р. Стемпицкий.- Мн.: БГУИР, 2004.- 102 с.: ил.

2. Математическое моделирование технологических процессов: учеб. пособие / Н. В. Холодкова, С. А. Смирнов; Иван. гос. хим.-технол. ун-т.– Иваново, 2019. – 88 с

THE HIGH-LEVEL PROGRAMMING MS VISUAL C# OF THE DIFFUSION MODEL FOR SILICON

Plotnikova E.Yu., Arsentev A.V., Vinokurov A.A.

Voronezh State Technical University, Voronezh

The modeling of the process of impurity diffusion into a silicon wafer using the one-dimensional Fick diffusion equation is considered. The calculation is performed from an infinite and limited source. The change in the diffusion coefficient D0 depending on the temperature T is analyzed. The program is developed in the high-level programming language C#.

538.93 25-27

МОДЕЛИРОВАНИЕ УВЕЛИЧЕНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕЛЛУРИДА СУРЬМЫ ПРИ ЛЕГИРОВАНИИ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Кульбачинский В.А., Апрелева А.С., Кытин В.Г.

МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Целью данной работы является теоретическое моделирование термоэлектрических свойств Sb_2Te_3 p-типа, легированного переходными металлами (ПМ=Fe, Co, Ni) и сравнение расчетов с экспериментальными результатами. Экспериментальные данные, а именно, коэффициент Зеебека S(T), сопротивление ρ(T) и холловская концентрация дырок p_H(T), моделируются с помощью уравнения переноса Больцмана (УПБ). Получено хорошее количественное согласие между экспериментальными и рассчитанными данными.

Теллурид сурьмы принадлежит к семейству традиционных термоэлектрических (ТЕ) материалов V_2VI_3 (V = Bi, Sb, As и VI = S, Se, Te), привлекающих внимание благодаря своим хорошим термоэлектрическим свойствам при комнатной температуре. Sb_2Te_3 обладает узкой запрещенной зоной ~0,2 эВ. Выращенный стехиометрически теллурид сурьмы имеет концентрацию дырок $\approx 10^{19}$ $см^{-3}$ из-за заряженных точечных антиструктурных дефектов. Исследования тепловых, а также электрических свойств стехиометрических и нестехиометрических материалов на основе Sb_2Te_3 являются активной областью исследований [1-3]. Легирование вносит дефекты в систему и влияет не только на сопротивление, но и фононную теплопроводность [4]. Необходимо найти надлежащие легирующие элементы, чтобы можно было точно модулировать характеристики Sb_2Te_3. Заметное влияние на структурные, химические и физические свойства наблюдалось при использовании переходных металлов (ПМ) в качестве легирующего элемента. Легирование ПМ также влияет на электронное и магнитное состояние исходного материала, может возникнуть примесная зона [5]. Легирование Ni в Sb_2Te_3 модулирует фононные колебательные свойства и играет значительную роль в улучшении ТЕ свойств [6]. Легирования Fe и Co в термоэлектрике BiSbTe приводит к более высоким значениям коэффициента Зеебека S и безразмерной термоэлектрической эффективности $ZT=S^2T/\rho\kappa\approx 1$ [7], где ρ(T) – сопротивление, S(T) – коэффициент Зеебека, κ(T) – теплопроводность. Увеличение фактора мощности $PF=S^2/\rho$ также наблюдается для материалов на основе $Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$, Bi_2S_3, при легировании ПМ [7,8]. Что касается Sb_2Te_3, большая часть работ по легированию ПМ сосредоточена на изучении его магнитных и топологических свойств [9]. Однако роль легирования ПМ в ТЕ свойствах Sb_2Te_3 исследована недостаточно.

Согласно данным магнетотранспорта [10], подтвержденным расчетами ab initio зонной структуры [11] существует два максимума валентной зоны, соответствующие легким и тяжелым дыркам в Sb_2Te_3 с энергетическим расстоянием между максимумами валентной зоны ΔE_V. Мы смоделировали зависящую от температуры концентрацию носителей Холла, электрическое сопротивление и коэффициент Зеебека в рамках изотропной модели, включающей легкие и тяжелые дырки. Теоретическое моделирование выполняется с помощью уравнения переноса Больцмана (УПБ). Для расчетов электрической проводимости σ, холловской концентрации дырок p_H и коэффициента Зеебека использовались следующие выражения:

$$\sigma = N_V(\sigma_{lh} + \sigma_{hh});\ p_H = \frac{1}{e}\frac{\sigma^2}{\sigma_H};\ S = \frac{\sigma_S}{\sigma},$$

где $\sigma_H = N_V(\sigma_{Hlh} + \sigma_{Hhh})$ и $\sigma_S = N_V(\sigma_{Slh} + \sigma_{Shh})$.

Индексы lh и hh относятся к легким и тяжелым дыркам соответственно, N_V=6 вырождение зон.

$$\sigma_{lh(hh)} = \frac{e^2}{m_{lh(hh)}}\langle\tau_{lh(hh)}\rangle;\ \sigma_{Hlh(hh)} = -\frac{e^3}{m^2_{lh(hh)}}\langle\tau^2_{lh(hh)}\rangle.$$

$$\sigma_{Slh(hh)} = \frac{e}{Tm_{lh(hh)}}\langle(\epsilon - \xi_{plh(hh)})\tau_{lh(hh)}\rangle.$$

Здесь e – заряд электрона, T – температура, $m_{lh(hh)}$ – эффективная масса легких (тяжелых) дырок. $\epsilon = E_V - E$ энергия дырок, E_V – энергия потолка валентной зоны. Выражения $\xi_{p(lh)} = E_V - E_F$, $\xi_{p(hh)} = E_V - \Delta E_V - E_F$ – энергии Ферми для легких и тяжелых дырок соответственно, E_F – энергия Ферми, $\Delta E_V = E_{Vlh} - E_{Vhh}$, k_B – константа Больцмана, $\tau_{lh(hh)}$ – время релаксации по импульсу для легких (тяжелых) дырок соответственно. Вышеприведенные усреднения проводились по формулам (A – одна из величин в формулах выше)

$$\langle A_{lh(hh)}\rangle = \frac{(2m_{lh(hh)}T)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty A_{lh(hh)}(\epsilon)\frac{exp\left(\frac{\epsilon - \xi_{plh(hh)}}{k_BT}\right)}{\left(exp\left(\frac{\epsilon - \xi_{plh(hh)}}{k_BT}\right)+1\right)^2}\epsilon^{3/2}d\epsilon$$

Время релаксации по импульсу $\tau_{lh(hh)}$ вычислялось следующим образом

$$\frac{1}{\tau_{lh(hh)}} = \frac{1}{\tau^{ac}_{lh(hh)}} + \frac{1}{\tau^{sd}_{lh(hh)}} + \frac{1}{\tau^{ca}_{lh(hh)}}$$

Для рассеяния на акустических фононах (ac)

$$\frac{1}{\tau^{ac}_{lh(hh)}} = \frac{V_d^2\sqrt{2}m^{3/2}_{lh(hh)}k_BT}{\pi\hbar^4\rho v_S^2\sqrt{\epsilon}},$$

где V_d – деформационный потенциал, ρ – плотность, υ_s – скорость звука.

Для рассеяния на статических дефектах (sd) предполагалось, что длина свободного пробега l_{MF} фиксирована

$$\frac{1}{\tau^{sd}_{lh(hh)}} = \frac{1}{l_{MF}}\sqrt{\frac{2\epsilon}{m_{lh(hh)}}}.$$

И для рассеяния на заряженных точечных акцепторах (ac):

$$\frac{1}{\tau^{ca}_{lh(hh)}} = \frac{e^4 N_A}{16\pi(\varepsilon_0\varepsilon)^2\sqrt{2m_{lh(hh)}}}\epsilon^{3/2}F_s(\epsilon),$$

где $F_s(\epsilon) = ln(1+x) - \frac{1}{1+x};\ x = \frac{\sqrt{2m_{lh(hh)}\epsilon}}{\hbar}r_s;\ r_s = \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{e^2\left(-\frac{\partial(p_{lh}+p_{hh})}{\partial F}\right)}},$

N_A – концентрация акцепторов, ε_0 – электрическая постоянная, ε – диэлектрическая проницаемость, p_{lh}, p_{hh} – концентрации легких и тяжелых дырок соответственно. Энергия Ферми рассчитывалась из уравнения нейтральности в предположении, что все акцепторы ионизированы.

$N_A = p_{lh} + p_{hh}$, где $p_{lh(hh)} = \frac{N_V\left(m_{lh(hh)}k_BT\right)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar^3}F_{1/2}\left(\xi_{plh(hh)}\right)$ и $F_{1/2}\left(\xi_{plh(hh)}\right)$ – интеграл Ферми.

Эффективные массы плотности состояния (DOS) m* и относительные положения зон варьировались для соответствия экспериментальным данным. Включены следующие механизмы рассеяния: 1) Рассеяние фононов с параметрами: скорость звука - 2900 мс$^{-1}$, плотность – 6500 кгм$^{-3}$, температура Дебая - 160 К и потенциал деформации (V_d). 2) Рассеяние статических дефектов микроструктуры, предполагающее постоянную длину свободного пробега, l_{MF}, для этого механизма рассеяния. Обратное время релаксации импульса рассчитывается как $\tau_s = l_{MF}/v$ где v$= \sqrt{2E/m}$; l_{MF} варьируется для соответствия данным. Наблюдаемое уменьшение l_{MF} обозначает большее рассеяние фононов в $Sb_{1.97}TM_{0.03}Te_3$. 3) Рассеяние на заряженных акцепторах в предположении, что концентрация дырок не зависит от температуры и равна концентрации акцепторов N_A. Кроме того, N_A подгоняется во время расчета транспортных данных, а именно, $p_H(T)$, $\rho(T)$ и $S(T)$ – рис. 1 и 2. Теоретически смоделированные результаты находятся в хорошем количественном согласии с соответствующими экспериментальными данными. Увеличение $p_H(T)$ при легировании ПМ можно объяснить изменением числа заряженных дефектов. Положительное значение S показывает, что все образцы обладают *p*-типом проводимости. Значения параметров подгонки перечислены в таблице. Наиболее подходящие значения эффективных масс дырок больше в легированном ПМ Sb_2Te_3 по сравнению с чистым Sb_2Te_3. Значение энергетического расстояния между максимумами валентной зоны $\Delta E_V = E_{V,hh} - E_{V,lh}$, полученное из двухзонного моде-

лирования, меньше в легированных ПМ материалах, чем в исходном теллуриде сурьмы.

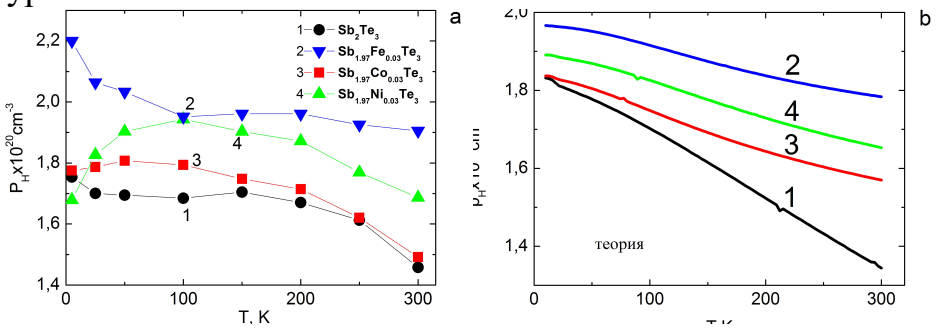


Рис. 1. Зависимости от температуры концентрации дырок $p_H(T)$ в Sb_2Te_3 и $Sb_{1.97}ПМ_{0.03}Te_3$ (ТМ = Fe, Co, Ni). a) эксперимент, b) теория

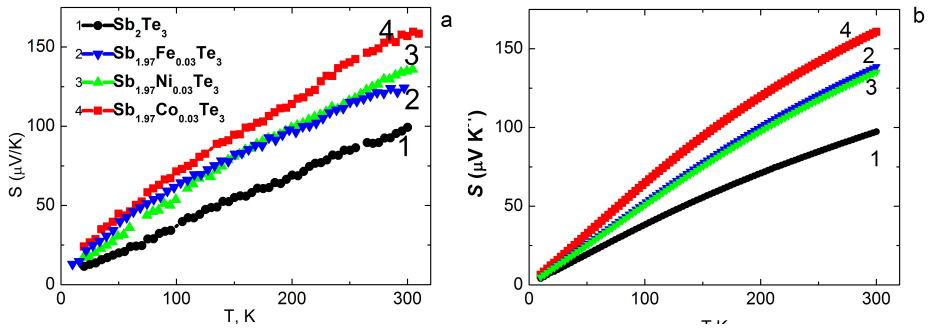


Рис. 2. Зависимости от температуры коэффициента Зеебека: a – эксперимент, b – теория

Таблица. Моделируемые параметры, полученные с помощью уравнения переноса Больцмана для образцов Sb_2Te_3 и $Sb_{1.97}ПМ_{0.03}Te_3$

Состав	$m^*_{lh}(m_0)$	$m^*_{hh}(m_0)$	ΔE_V (eV)	V_d (eV)	l_{MF} (нм)
Sb_2Te_3	0.1	0.6	0.1	13	20
$Sb_{1.97}Fe_{0.03}Te_3$	0.35	0.62	0.002	8	20
$Sb_{1.97}Co_{0.03}Te_3$	0.2	0.7	0.1	8	19
$Sb_{1.97}Ni_{0.03}Te_3$	0.35	0.78	0.002	8	19

Последнее указывает на значительное увеличение плотности состояний вблизи основного максимума валентной зоны. Полученное значение ΔE_V для образца легированного Co является одним из самых низких среди синтезированных образцов, что согласуется с увеличением S и PF. Концентрация акцепторов, N_A, полученная при двухзонном моделировании, изменяется незначительно для чистого и легированного ПМ Sb_2Te_3. Это говорит о том, что легирование Sb_2Te_3 Fe, Co и Ni в основном вызывает изменение зонной структуры и слабо влияет на концентрацию акцепторных дефектов. Монотонно растущее поведение ρ(T) с температурой, т. е. $d\rho(T)/dT>0$, указывает на типичную металлическую природу проводимо-

сти. Такая зависимость ρ(T) соответствует вырожденной проводимости с рассеянием носителей заряда на фононах.

PF всех образцов p-типа монотонно увеличивается с температурой – рис. 3. Значение PF=21 мкВ*см$^{-1}$K^{-2} достигается в образце, легированном Co, что можно отнести к оптимизированной концентрации дефектов, увеличенным S и m*. PF увеличивается примерно на 150 % в образце $Sb_{1.97}Co_{0.03}Te_3$ по сравнению с исходным нелегированном образцом.

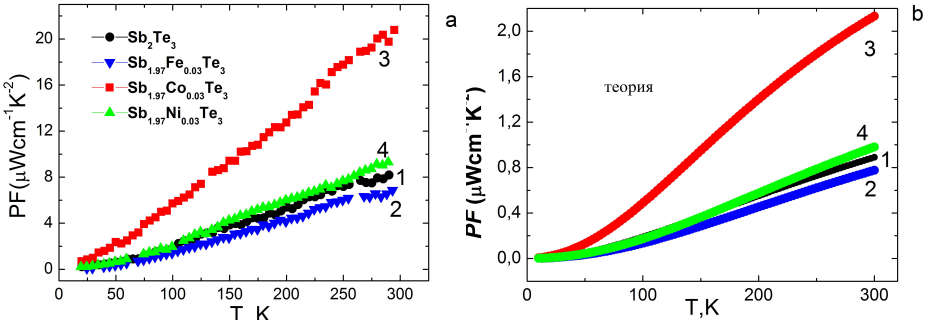


Рис. 3. a) экспериментальные и b) и теоретические факторы мощности PF в Sb_2Te_3 и $Sb_{1.97}TM_{0.03}Te_3$ (TM= Fe, Co, Ni)

Литература

1. Das Subarna, Singha P., et.al. J. of Materiomics, V.7, № 3, 545 (2021).
2. Das Subarna, Singha P., Deb A.K., et.al., JAP, V. 125, 195105 (2019).
3. Кульбачинский В.А., Кытин В.Г., и др., ФТП, Т. 53, № 5, 645-647 (2019).
4. Z. Chen, X. Zhang, and Y. Pei, Adv. Mater. 30, 1705617 (2018).
5. M.F. Islam, C.M. Canali, A. Pertsova,et.al., Phys. Rev. B 97, 155429 (2018).
6. S. Mukherjee, N. Rana, et.al., J. Phys.: Condens. Matter 36 365701 (2024).
7. Z. Wei, C. Wang, et.al., ACS Appl. Mater. Interfaces 12, 20653 (2020).
8. R. Singh, K.K. Shukla, et.al., J. Phys.: Cond. Mat. 28, 376001 (2016).
9. W. Zhao, D. Cortie, L. Chen, et.al., Phys. Rev. B, 99, 165133 (2019).
10. V.A. Kulbachinskii, N. Miura, H. Nakagawa, J. Phys.: CM, 11, 5273 (1999).
11. G. Wang and T. Cagin, Phys. Rev. B 76, 075201 (2007).

MODELING THE INCREASE IN THERMOELECTRIC EFFICIENCY OF ANTIMONY TELLURIDE BY DOPING WITH TRANSITION METALS

V.A. Kulbachinskii, A.S. Apreleva, V.G. Kytin

Lomonosov Moscow State University, Moscow

The aim of this work is theoretically modeling of the thermoelectric properties of p-type Sb_2Te_3 doped with transition metals (TM=Fe, Co, Ni) and compare the calculations with the experimental results. The experimental data, namely, the Seebeck coefficient S(T), resistance ρ(T) and the Hall hole concentration pH(T), are modeled using the Boltzmann transport equation (BTE). Good quantitative agreement between the experimental and calculated data is obtained.

УДК 621.3.049.75 25-30

РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОТОТИПА МНОГОКАНАЛЬНОГО БЛОКА РЕГИСТРАЦИИ

Бодин А.Ю.

Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва

В настоящее время печатные платы (ПП) являются основой любой радиоэлектронной аппаратуры. В статье рассматривается разработка аппаратно-программного модуля для многоканальной регистрации, в частности, для регистрации множественный отведений электрокардиосигнала. Для этого приведена функциональная схема устройства, описан процесс проектирования и разработки специализированной печатной платы, предназначенной для высокоточной многоканальной регистрации. Описаны ключевые технологические решения, направленные на снижение электромагнитных помех и повышения чувствительности при регистрации. Показана возможность дальнейшего расширения аппаратно-программного модуля для многоканальной регистрации. Разработка ориентирована на использование в составе современных комплексов, в том числе медицинских.

Современные тенденции в микро- и наноэлектронике предполагают, что устройство будет малогабаритным, надежным, высокоточным и не будет источником сильных электромагнитных помех. В условиях многоканальной регистрации возрастает необходимость в обеспечение достоверной регистрации [1].

На сегодняшний день существует ряд технологических решений, направленных на многоканальную регистрацию с повышенной чувствительностью, однако большинство их них не способно регистрировать требуемое количество сигналов (до 64), либо имеют завышенную стоимость, несоизмеримую с ценовым сегментом конечного устройства.

Целью статьи является разработка печатной платы многоканального модуля регистрации, а также проверка её работоспособности.

Основные требования к модулю многоканальной регистрации: оцифровка 64 входных каналов, частота дискретизации 1 кГц, скорость обмена данными с сервером 1 Мбайт/с, разрядность АЦП 24 бит для обеспечения повышенной чувствительности [2].

Основной задачей при разработке ПП многоканального модуля регистрации являлось обеспечение высокой чувствительности, обеспечение целостности сигналов, снижение электромагнитных помех. При этом особое внимание уделялось минимизации паразитных наводок и оптимизации трассировки сигнальных и силовых цепей.

Функциональная схема ПП представлена на рисунке 1 [3], рассмотрим каждый элемент функциональной схемы.

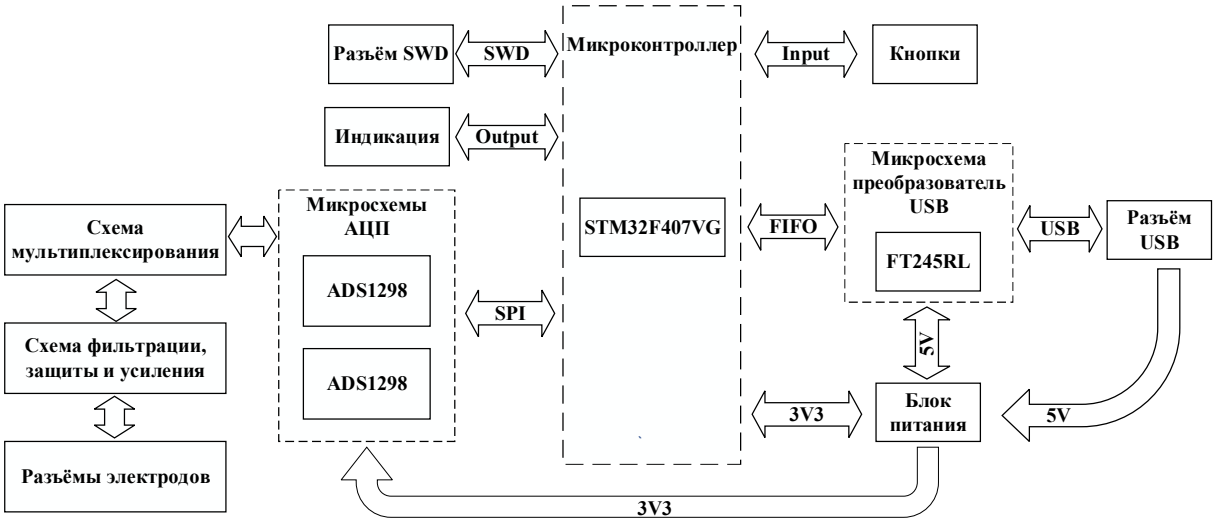


Рисунок 2 – Функциональная схема аппаратно-программного модуля для многоканальной регистрации

Управляющим элементом электронного блока регистрации множественных отведений, представленного на рисунке 1, является микроконтроллер. По проводному интерфейсу SPI микроконтроллер осуществляет опрос 2 микросхем аналого-цифровых преобразователей (АЦП). Каждый канал АЦП подключен к схеме мультиплексирования, благодаря которой возможно увеличение количества каналов регистрации без увеличения количества АЦП. После схемы мультиплексирования каждый канал подключен к схеме фильтрации, защиты и усиления, для удаления паразитных частот, защиты от статического напряжения и усиления сигнала. Далее каждый канал подключается к соответствующему контакту на разъёме.

В аппаратно-программном модуле для многоканальной регистрации предусмотрен комплекс визуального контроля работы прибора.

Для загрузки и обновления программного обеспечения на ПП выведен интерфейс SWD (Serial Wire Debug).

Также в блоке регистрации множественных отведений предусмотрена кнопка для перезагрузки программного обеспечения.

Для проводного подключения к серверу в приборе предусмотрен разъём USB и микросхема преобразователь USB – FIFO [4].

Блок питания выполняет функцию формирования нескольких значений опорных напряжений для элементов блока регистрации и обеспечивает защиту от скачков напряжений и пульсаций.

Для обеспечения стабильной работы ПП, повышения помехоустойчивости и уменьшения электромагнитных помех при проектировании использовались следующие подходы:

1. Группировка компонентов по функциям и классам. Аналоговые и цифровые компоненты должны быть в своих отдельных областях, разделены друг от друга.

2. Компоненты с различными уровнями напряжений должны быть в своих областях. Таким образом дорожки с разными напряжениями не бу-

дут проходить рядом и наводить друг на друга помехи, и можно будет разделить один слой питания на несколько сегментов с разными напряжениями, чтоб залить каждый из них полигоном.

3. Микросхемы, подключенные к разъёму, должны располагаться как можно ближе к соответствующему разъёму. Если от разъёма будут, например, длинные провода и при этом от разъёма до компонента будут идти длинные дорожки, в цепях будут возникать синфазные токи

4. При разделении земли на несколько участков необходимо обеспечить их объединение в одной точке.

5. Сигнал каждого слоя должен опираться на слой питания, либо слой земли. Для этого хорошим выборов конструкции многослойной печатной платы будет: 1 слой – питание/сигнал, 2 слой – сплошной полигон земли, 3 слой – сплошной полигон земли,4 слой – питание/ сигнал.

6. Необходимо реализовать симметричную длину каналов для обеспечения временных задержек, при этом максимальная длина проводника не должна превышать четверти длины волны.

Проектирование печатной платы (рис. 2) осуществлялось в среде Altium Designer [5, 6]. Компоновка элементов и трассировка осуществлялась в соответствии с описанными выше правилами.

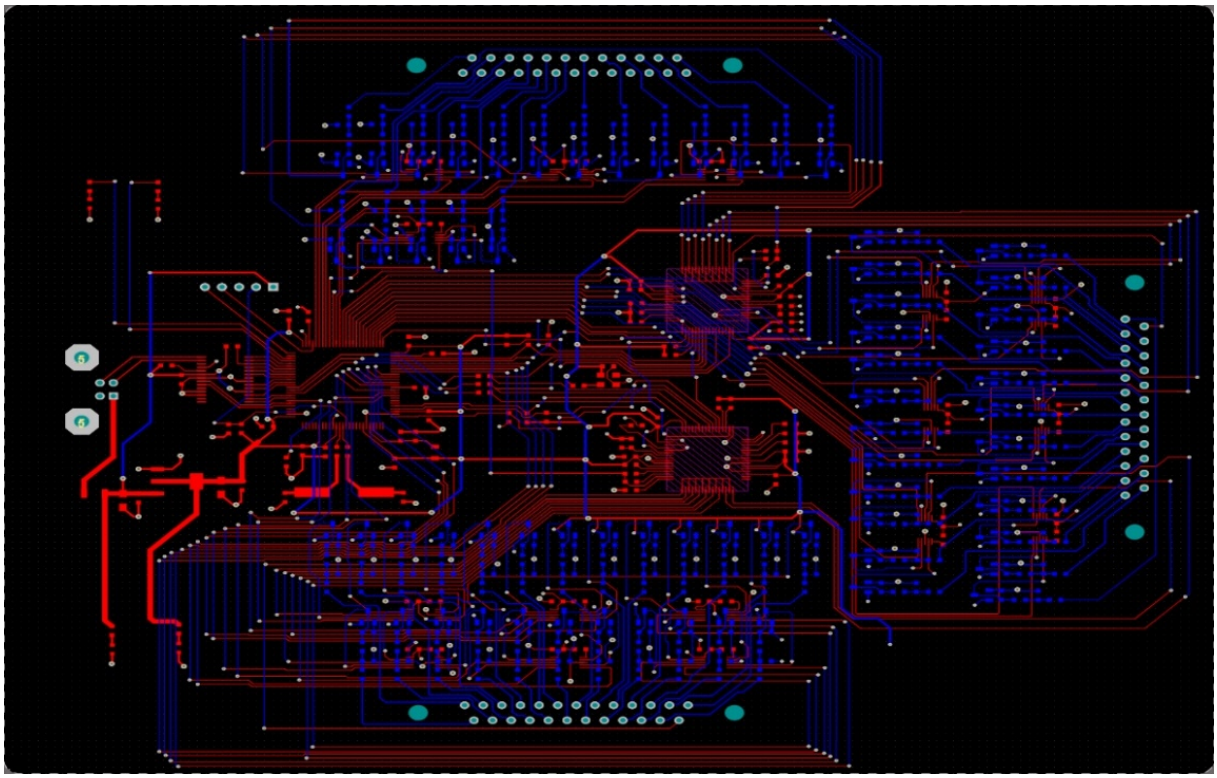


Рисунок 3 – Рисунок печатной платы

Входные каналы рассчитаны на регистрацию сигналов амплитудой до 0.23 мкВ, что потребовало высокоточного согласования входного импеданса и выбора специализированных аналого-цифровых преобразователей.

В результате была изготовлена 4 слойная ПП со сквозной металлизаций, материал препрега – FR4 2116, материал ядра FR4 Tg150, толщина фольги 35мкм (рис. 3).

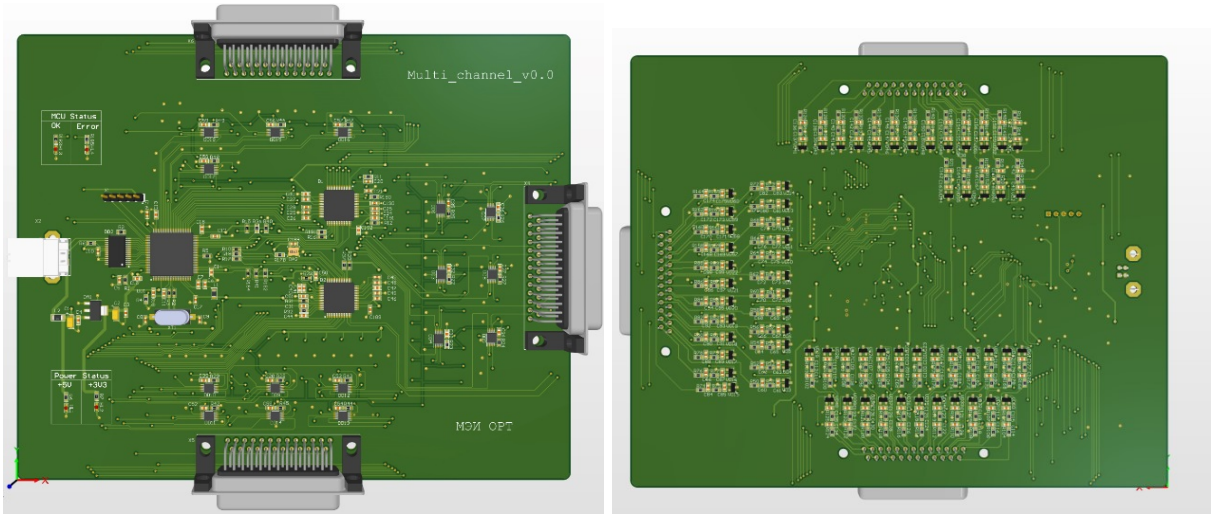


Рисунок 4 – 3D-модель печатной платы

Программное обеспечение реализует стабильную, бесперебойную регистрацию 64 каналов с частой 1кГц, выходные данные передаются на сервер по проводному интерфейсу USB со скоростью до 1 Мбайс/с [7].

Результаты тестирования подтвердили работоспособность всех каналов и соответствие заявленному быстродействию (рисунок 4).

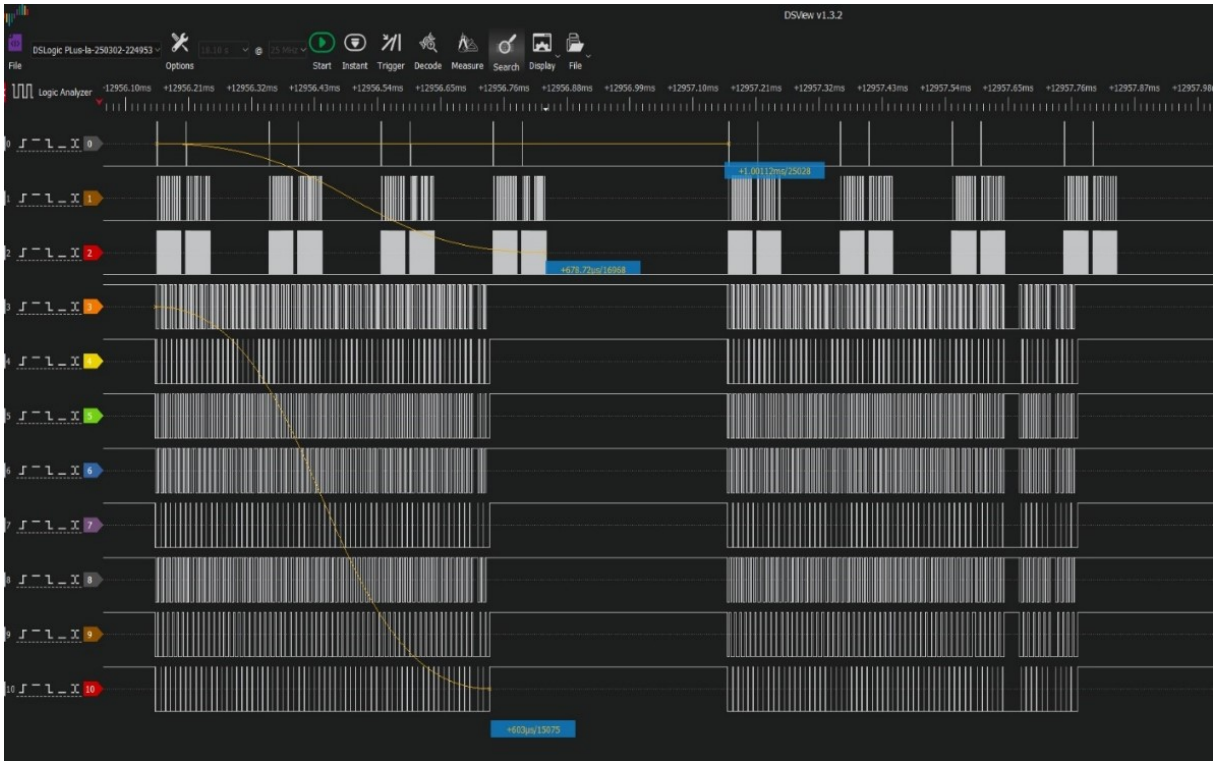


Рисунок 5 – Результаты тестирования ПО электронного блока регистрации

На временной диаграмме на рисунке 4 каналы 0, 1 ,2 – подключены к цифровому интерфейсу SPI, каналы 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 – подключены к параллельной шине преобразователя USB.

На временной диаграмме видно, что интервал дискретизации электронного блока регистрации составляет 1000 Гц – 1мс. За интервал дискретизации 4 раза происходит опрос 16 каналов АЦП и переключение мультиплексоров, суммарное время получении данных о мгновенном значении потенциалов составило 678 мкс.

Время передачи мгновенных значений потенциалов на сервер составило 603 мкс, что соответствуйте завяленной скорости передачи в 1 Мбайт/с.

Литература

1. Degerstrom, M.J., Smutzer, C.S., Gilbert, B.K., Daniel, E.S., “Practical Design Considerations for Dense, High-Speed, Differential Stripline PCB Routing Related to Bends, Meanders and Jog-Outs,” DesignCon 2014, Santa Clara Convention Center, 28-31 January 2014.

2. Бодин А.Ю., Крамм М.Н., Бодин О.Н., Чыонг Тхи Лан Нхи, Гомзин Д.С. Особенности регистрации множественных отведений электрокардиосигналов. ФРЭМЭ XV Международная научная конференция "Физика и радиоэлектроника в медицине и экологии", 2022.

3. Бодин А.Ю., Крамм М.Н., Бодин О.Н., Сержантова Н.А. Радиоэлектронная подсистема регистрации множественных отведений электрокардиосигнала. Радиоинфоком-2024: Сборник научных статей VIII Международной научно-практической конференции. — Москва, 2024.

4. Бодин А.Ю. Передача данных с электронного устройства на компьютер с использованием микросхемы FTDI при решении задачи многоканальной регистрации ЭКС. Радиоэлектроника, электротехника и энергетика, Тезисы докладов Двадцать девятой Международной научно-технической конференции студентов и аспирантов. Москва, 2023.

5. Сабунин А.Е. Altium Designer. Новые решения в проектировании электронных устройств / А.Е. Сабунин. – М.: Солон-Пресс, 2009. – 432 с.

6. Официальный сайт производителя системы автоматизированного проектирования Altium Designer. Раздел для начинающих [Электронный ресурс]. URL: https://www.altium.com/altium-designer. (дата обращения 23.04.2025)

7. Бодин А.Ю., Крамм М.Н. Программа для проведения многоканальной регистрации электрокардиосигналов. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ. — RU 2024617414, 01.04.2024. Заявка от 17.03.2024.

УДК 621.396.6 25-31

РАЗРАБОТКА КЛЮЧЕВЫХ УЗЛОВ МНОГОКАНАЛЬНОГО БЛОКА РЕГИСТРАЦИИ

Бодин О.Н.[1], Крамм М.Н.[2], Бодин А.Ю.[2]

[1]Пензенский государственный технологический университет, Пенза
[2]Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва

Представлена разработка многоканального блока регистрации, предназначенного для применения в составе неинвазивной скрининговой электрокардиодиагностической системы. Реализация предлагаемого решения позволяет создать основу для построения доступных и масштабируемых многоканальных диагностических устройств, применимых в медицине, научных исследованиях и других областях, где необходима надёжная регистрация сигналов.

Современные измерительные системы стремительно развиваются, и вместе с этим возрастают требования к их техническим характеристикам – в частности, к точности, скорости обработки и количеству одновременно обслуживаемых входных каналов. Эти требования особенно актуальны в таких критически важных и наукоёмких областях, как промышленная автоматизация, медицинская диагностика, научные исследования, а также в других сферах, где необходима высокая надёжность и достоверность получаемых данных.

Многоканальные блоки регистрации аналоговых сигналов позволяют обеспечить точное измерение параметров различных физических величин, таких как температура, давление, биомедицинские сигналы. Основные задачи, решаемые такими системами – это усиление, фильтрация, аналого-цифровое преобразование, структурирование и последующая передача данных на сервер по каналу связи.

На сегодняшний день существует ряд технологических решений [1], направленных на многоканальную регистрацию с повышенной чувствительностью, однако большинство их них не способно регистрировать требуемое количество сигналов (до 64), либо имеют завышенную стоимость, несоизмеримую с ценовым сегментом конечного устройства.

Работа посвящена разработке принципиальной схемы ключевых узлов многоканального блока регистрации, предназначенного для использования в скрининговой системе неинвазивной электрокардиодиагностики (ССНЭКД) [2], способного удовлетворить современным требованиям микро- и наноэлектроники.

Разрабатываемый модуль включает в себя целый ряд функциональных узлов, среди которых – входные каскады защиты и фильтрации, специализированные 24-битные аналого-цифровые преобразователи, вычислительный управляющий блок (на базе микроконтроллера), схема мульти-

плексирования аналоговых каналов, модуль питания, а также преобразователи для обеспечения связи с внешними цифровыми системами.

Рассмотрим ключевые компоненты блока регистрации с ядра устройства, представленного на рисунке 1 – микроконтроллера на базе которого осуществляется координация работы всех элементов блока регистрации.

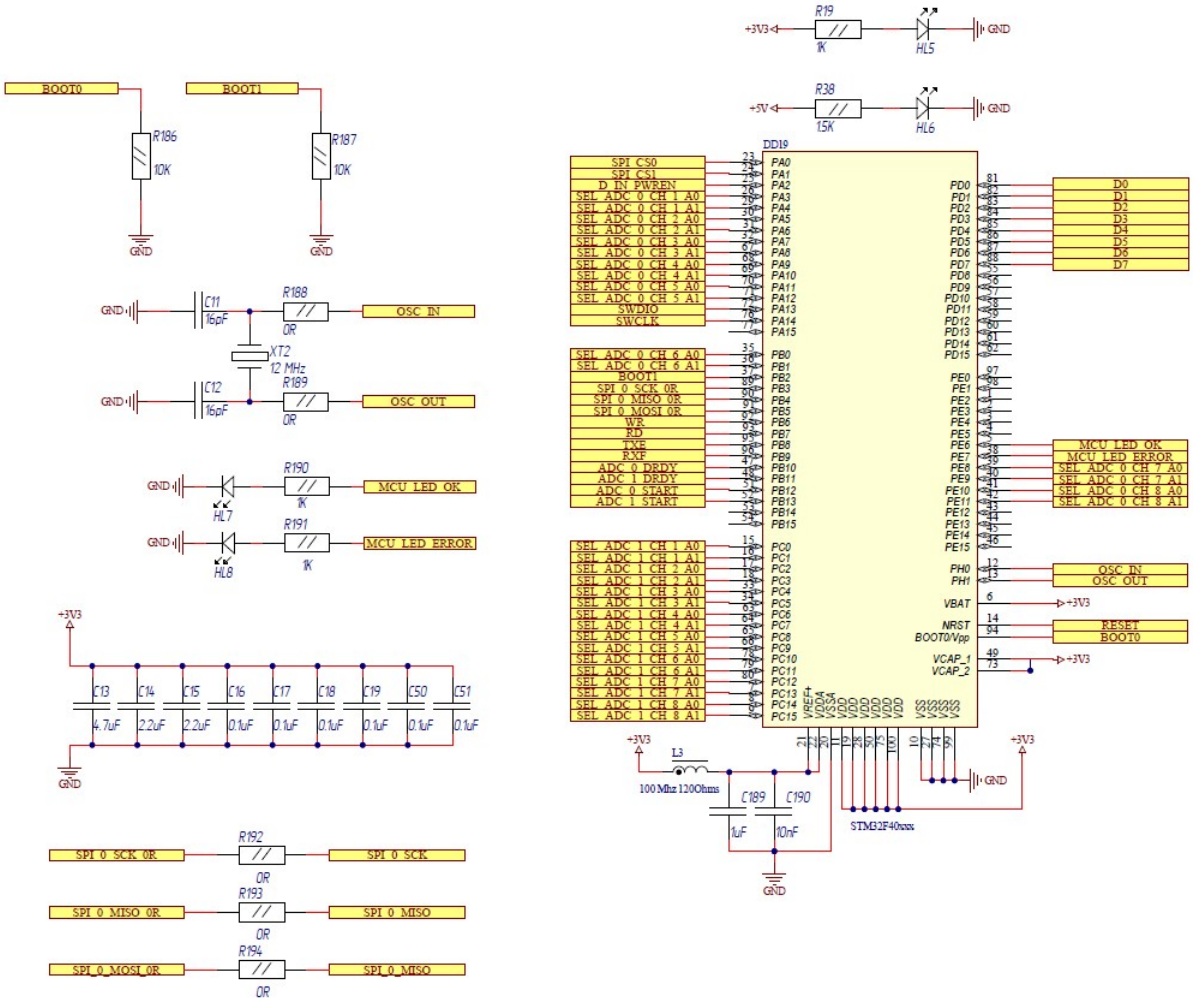


Рисунок 1 – Принципиальная схема управляющего узла

Управляющий модуль – МК STM32F407 [3] обладающий достаточным количеством периферийных интерфейсов, тактовой частотой, надежностью и количеством памяти. В составе ССНЭКД микроконтроллер выполняет следующие функции:

–конфигурирование, синхронизация и опрос внешних АЦП с нужными интервалами времени;

–синхронное с опросом АЦП переключение 16ти мультиплексоров;

–взаимодействие с каналом связи с использованием микросхемы преобразователя FTDI245R, соблюдение требуемой скорости передачи, соответствие протоколу связи;

–обработка внешних воздействий и считывание состояния дискретных входов (кнопок), управление световой индикацией;

–диагностика внутренних неисправностей, ошибок канала связи, ошибок АЦП;

Для обеспечения высокой точности измерения аналоговых сигналов в устройстве применяются специализированные 24–битные АЦП ADS1298 [4], которые высокой точностью, высокой скоростью выборки и низким уровнем шума (рис. 2).

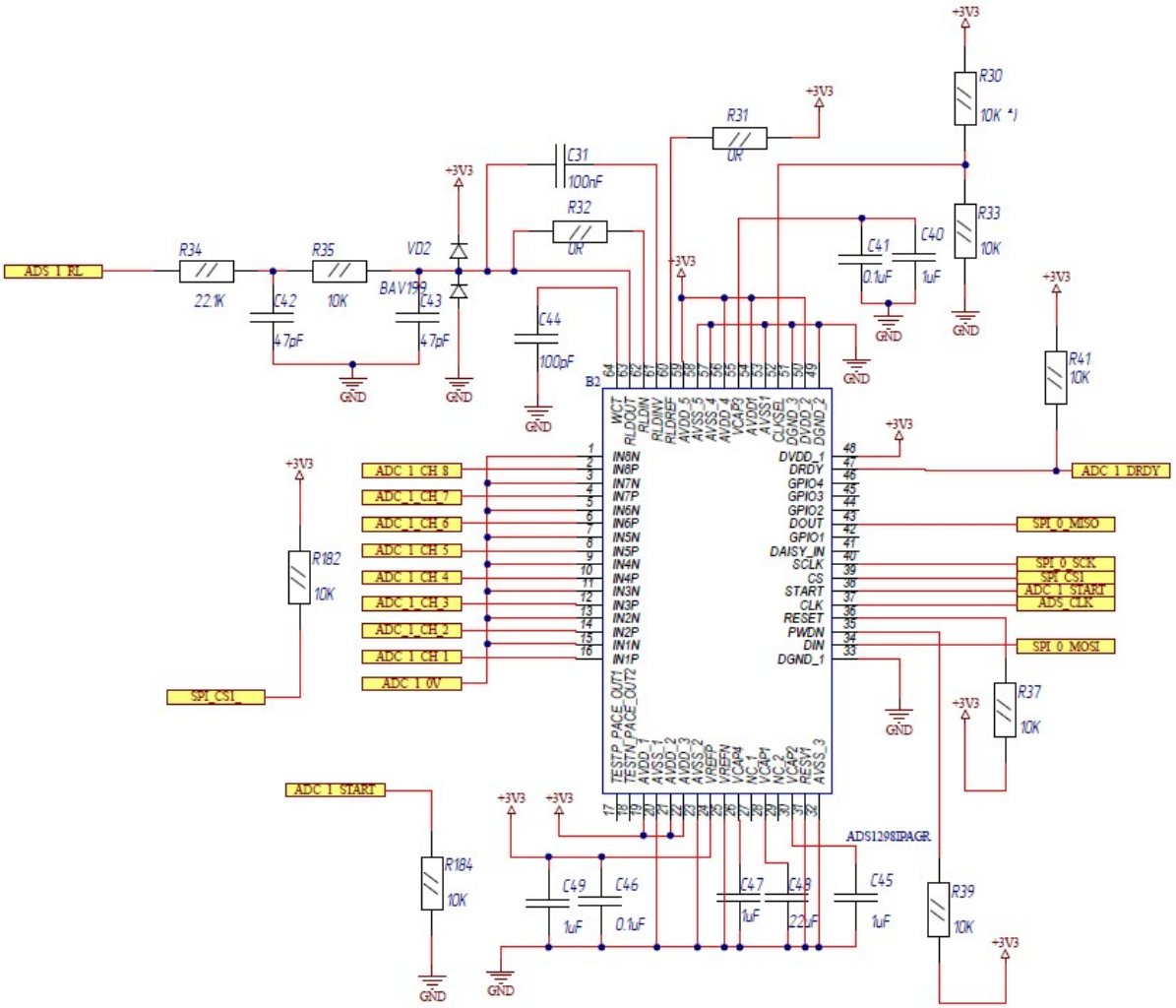


Рисунок 2 – Принципиальная схема узла ADC

На рисунке 3 показана схема питания устройства, которое осуществляется от внешнего источника питания 5 В. Стабилизация питания реализуются с помощью линейных стабилизаторов [5]. Для прошивки и отладки микроконтроллера используется стандартный отладочный интерфейс SWD, показанный на рисунке 4.

На рисунке 5 показана схема подключению USB–FIFO, обеспечивающая соединение с сервером со скоростью 8 Мбит/с [6].

Для расширения количества аналоговых входов применяются аналоговые мультиплексоры, представленные на рисунке 6. Они позволяют поочерёдно подключать сигналы различные сигналы к входу АЦП.

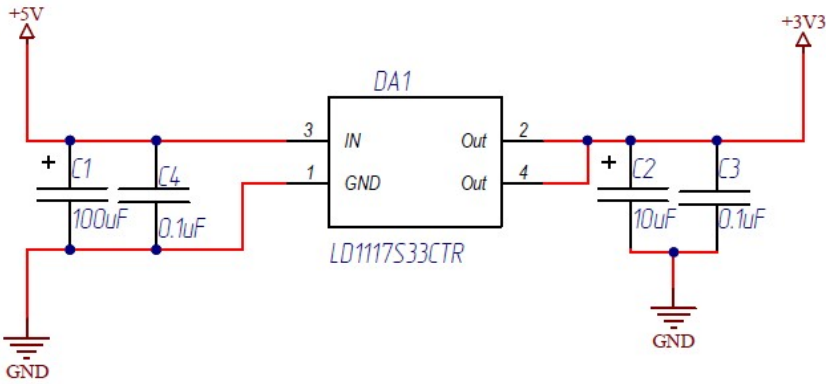


Рисунок 3 – Обвязка блока питания

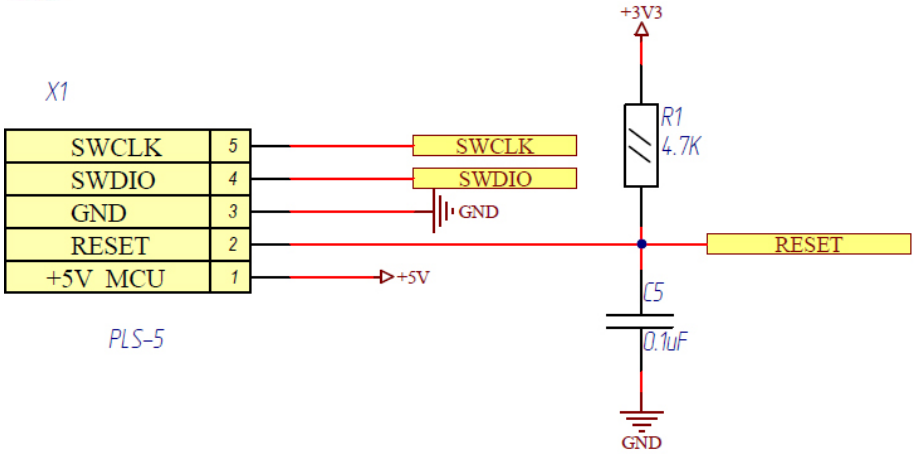


Рисунок 4 – Узел интерфейса SWD

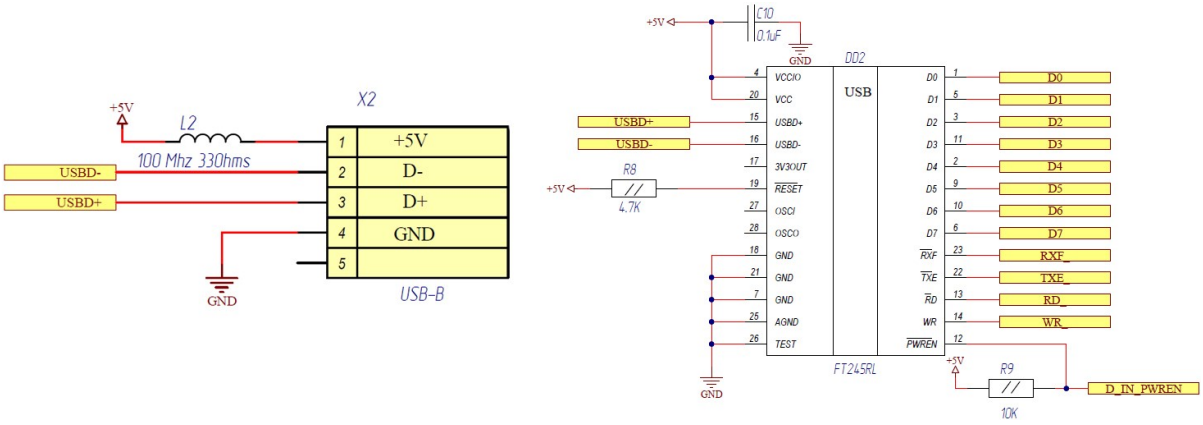


Рисунок 5 – Преобразователь USB

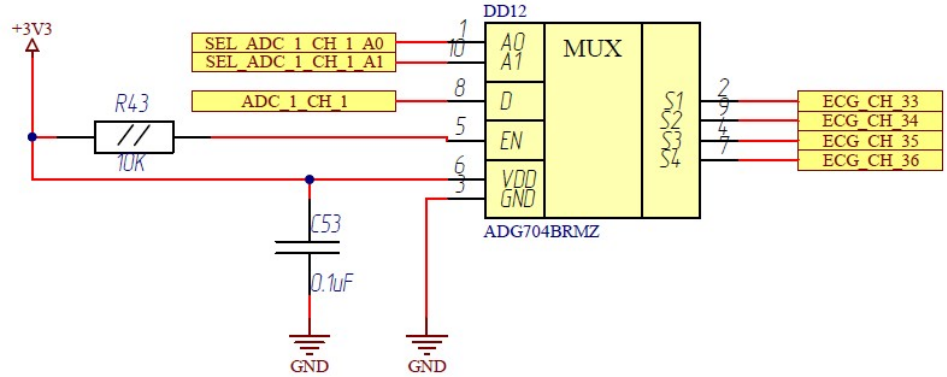


Рисунок 6 – Обвязка мультиплексора

На рисунке 7 представлена схема предварительной фильтрации и защиты от статического напряжения, использующая RC – цепочки и диодные сборки [5].

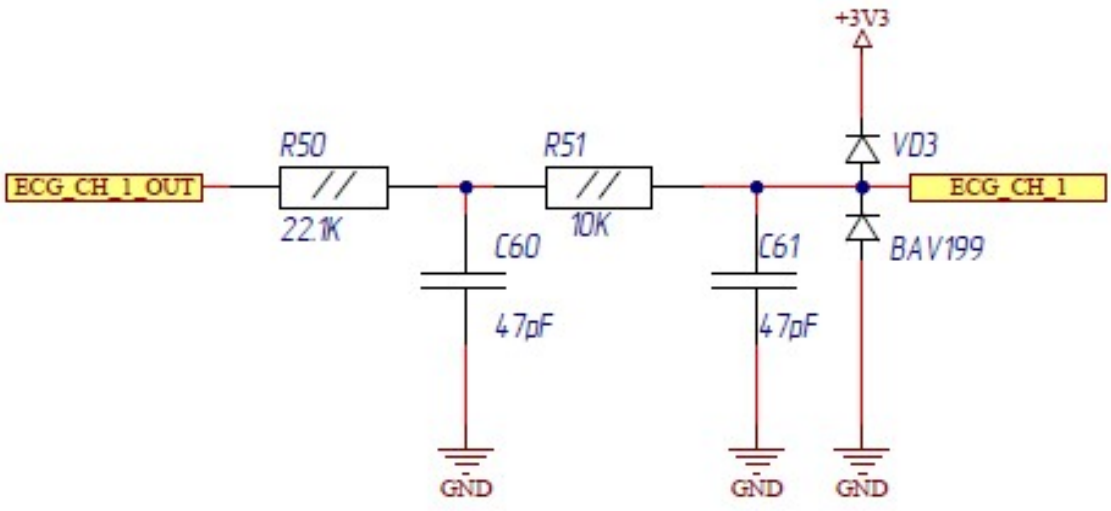


Рисунок 7 – Схема входного фильтра

Литература

1. Медицинское оборудование. Амикард 01 К Комплекс аппаратно-программный для неинвазивного электрофизиологического исследования сердца [Электронный ресурс]. URL: https://schag.ru/brands/amycard/medprim-light-editing.pdf (дата обращения: 24.04.2025).
2. Бодин А.Ю., Крамм М.Н., Бодин О.Н., Сержантова Н.А. Радиоэлектронная подсистема регистрации множественных отведений электрокардиосигнала. Радиоинфоком-2024: Сборник научных статей VIII Международной научно-практической конференции. — Москва, 2024.
3. Официальный сайт компании STMicroelectronics. Микроконтроллеры / STM32F407 / Datasheet [Электронный ресурс]. URL: https://www.st.com/resource/en/datasheet/stm32f405rg.pdf (дата обращения 16.11.2024)
4. Официальный сайт компании Texas Instrument. Специализированные АЦП / ADS1298 / Datasheet [Электронный ресурс. URL: https://www.ti.com/lit/ds/symlink/ads1296r.pdf (дата обращения 16.11.2024)
5. Семенов Б.Ю. Силовая электроника: от простого к сложному. М.: СОЛОН-Пресс, 2005. 416 с. ил. (Серия Библиотека инженера).
6. Бодин А.Ю. Передача данных с электронного устройства на компьютер с использованием микросхемы FTDI при решении задачи многоканальной регистрации ЭКС. Радиоэлектроника, электротехника и энергетика, Тезисы докладов Двадцать девятой Международной научно-технической конференции студентов и аспирантов. Москва, 2023.

УДК 538.9 25-38

БАЗОВЫЕ КВАНТОВЫЕ ЛОГИЧЕСКИЕ ВЕНТИЛИ С НАНОКРИСТАЛЛАМИ НА ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ЧИПЕ

Жуков Н.Д., Сучков С.Г., Сучков Д.С.

Саратовский госуниверситет, Саратов

Рассматриваются варианты логических вентилей с квантоворазмерными нанокристаллами на топологическом чипе. Чип сформирован на диэлектрической подложке методами оптической и электронной литографии. Нанокристаллы синтезированы коллоидной химией и нанесены на чип-подложку методом плёнок Ленгмюра-Блоджетт.

Фундаментальной тенденцией современного развития информационных технологий являются исследования в альтернативных направлениях – квантовых и фотонных технологиях. Это развитие происходит по определённой схеме, в основе которой лежат исследования и разработки электронной элементной базы. Существенный прогресс в этом направлении наметился в 80-х годах прошлого века, когда учёными разных стран теоретически были обоснованы модели базовых элементов квантовой логики. Такие элементы, получившие название «вентиль» («ворота», Gates, гейт), предназначены для преобразования по заданному алгоритму входных состояний кубитов в выходные [1, 2].

В данной статье строится логическая схема, которая позволит создать эскиз базового квантового логического вентиля в виде электронной схемы, выполняющей элементарную логическую операцию над входными сигналами и формирующую результирующий сигнал на выходе.

Для построения квантового логического вентиля мы исходим из того, что в основе должен быть квантовый элемент, в котором реализуются главные необходимые свойства – суперпозиция и когеренция (коррелированность или, что то же, запутанность) электронных состояний. То есть, мы должны рассматривать, как минимум, два одинаковых элемента, в которых электроны могут быть связанными электромагнитным и обменным взаимодействием.

Элемент является квантоворазмерным объектом, то есть таким, который можно описать квантовыми схемами с определёнными ограничениями и упрощениями. Главным при этом является некая периодическая трансляция элементарного элемента (ячейки), образующая нанокристалл, что позволяет «сконструировать» удобный для решений гамильтониан в уравнении Шрёдингера с заданием потенциала в виде периодических функций от координат.

Состояния электрона в атоме имеют фундаментальное описание: главное квантовое число, определяющее энергию электрона, орбитальное квантовое число, определяющее величину момента вращательного д18

\вижения электрона вокруг ядра, азимутальное квантовое число, определяющее проекцию этого момента на какую-либо ось, спиновое квантовое число, определяющее собственный механический момент электрона.

Любое из этих свойств может быть выбрано как базовое для квантовых вычислений. Обычно выбирают спин как наиболее удобный вариант [3]. Спиновый вариант, однако, не удобен с точки зрения квантового элемента, требующего определённых специальных условий, значительно усложняющих процедуры применений. Некоторые упрощения могут быть при использовании квантовых точек [4]. Однако они не носят принципиального характера, так как квантовая точка рассматривается как большой атом, в котором электрон имеет орбитальный момент как в обычном атоме.

Квантоворазмерная модель нанокристалла обусловливает одноэлектронный и одномерный характер движения в нём электрона. В этих моделях электронного процесса из указанных свойств наиболее важными являются те, которые связаны с квантовым электронным транспортом. В квантоворазмерных нанокристаллах нами впервые обнаружены резонансы тока на вольтамперной характеристике (ВАХ) [5]. Такое поведение объяснено в рамках модели электронного квантово-волнового транспорта. Такая модель основана на использовании суперпозиции состояний. Электрон в квантово-волновом процессе транспорта в нанокристалле ввиду суперпозиции состояний реализует дискретный набор наиболее вероятных состояний. Практически это отображается на экспериментальной ВАХ в виде резонансных пиков, соответствующих размерным дистанциям.

На рис. 1 представлены типичные ВАХ и кривая резонанса проводимости нанокристаллов на примере антимонида индия NC-InSb, имеющего самые высокие параметры размерного квантования. Отличия в ВАХ мы объясняем зависимостью волновой функции электрона и, соответственно, его энергии, от размеров дистанций a_n движения между кристаллографическими плоскостями и границами нанокристаллов.

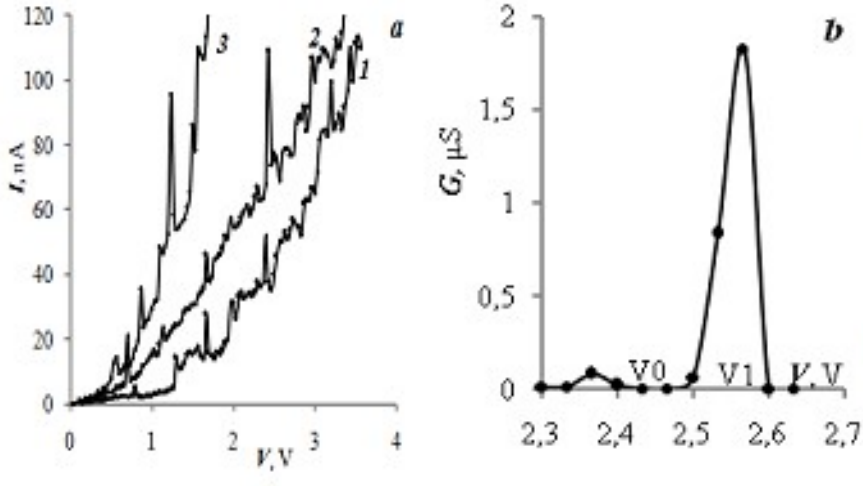


Рисунок 1 –

a: виды вольтамперных характеристик нанокристаллов NC-InSb;

b – резонанс квантовой проводимости NC-InSb

Очевидно, что отбор состояний и образование стоячих волн, и, соответственно, вид ВАХ являются многообразными и, в какой-то мере, хаотичными, а проявление «хороших» ВАХ (кр. 2 рис. 1а) имеет вероятностный характер. Экспериментально нами проверено, что эта вероятность прямо зависит от типа полупроводника, размеров и структурного совер-

шенства нанокристалла, его расположения в поле, достигая для самого «квантоворазмерного» NC-InSb значений 70 %.

В основе компьютерных вычислений в двоичной системе лежат логические цифровые схемы для осуществления математических операций. Базовыми элементами таких схем являются логические вентили. Для квантовых систем создаются квантовые логические вентили, которые по заданному алгоритму преобразуют входные сигналы в выходные.

Здесь мы рассматриваем наиболее простые варианты, являющиеся аналогами квантовым вентилям «НЕ», «ИЛИ-НЕ», «И-НЕ», которые необходимы для реализации любого блока элементов квантового вычислителя.

Необходимо рассмотреть, по меньшей мере, два нанокристалла с одиночными квазисвободными электронами, чтобы создать логический элемент. При их сближении должно появиться взаимодействие этой пары электронов. В варианте со спином взаимодействие возможно при абсолютном минимуме энергии электронов, для чего необходимо состояние при абсолютном нуле температуры. В нашем варианте мы исходим из того, что взаимодействие электронов в нанокристаллах происходит благодаря явлению квантовой когерентности (запутанности), когда одинаковые одномоментные состояния разрушаются [6]. Тогда, если в одном нанокристалле будет состояние электрона с волновым вектором «вперёд», то в другом – обязательно «назад».В этом случае реализуются обе строчки таблицы истинности для элемента «НЕ» (табл 1).

Таблица 1 – Таблица истинности элементов

«НЕ»		«ИЛИ»				«И»			
X	Y	X_1 (t_1)	X_2(t_2)	Y		X_1(t_1)	X_2(t_2)	Y	
0	1	0(V_0)	0 (V_0)	0 (V_0)	t_1+t_2	0 (V_0)	0 (V_0)	0 (V_0)	t_1+t_2
1	0	0 (V_0)	1 (V_t)	0 (V_0)	t_1+t_2	1 (V_t)	0 (V_0)	1 (V_t)	t_2
		0 (V_0)	1 (V_t)	1 (V_t)	t_1	0 (V_0)	1 (V_t)	0 (V_t)	t_1+t_2
		1(V_t)	1 (V_t)	1 (V_t)	t_3	1 (V_t)	1 (V_t)	1 (V_t)	t_3

Для реализации всех вариантов (табл. 1) необходимо задать входные сигналы X_1, X_2 и условия съёма выходного сигнала Y – время (момент) подачи сигнала t и напряжение сигнала V. Моменты времени, соответственно, для $X_1 \rightarrow t_1$, для $X_2 \rightarrow t_2$ и для $Y \rightarrow t_3$. Напряжение выбирается по кривым ВАХ– резонансного пикаV_t или его отсутствия $-V_0$. Величины резонанса тока при этом соответствуют логическим значениям: наличие резонансного пика – единице, его отсутствие – нулю.

Однокубитный вентиль X может находиться в одном из двух базовых состояний: $|0\rangle$ $|0\rangle$ или $|1\rangle$ $|1\rangle$, либо в их линейной комбинации (суперпозиции): $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$, $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$, где α, α и β, β – комплексные коэффициенты, удовлетворяющие условиям нормировки: $|\alpha|2+|\beta|2=1$; $|\alpha|2+|\beta|2=1$.

Вентиль X представляет собой битовую инверсию, то есть он меняет значения с $|0\rangle$ на $|1\rangle$ и наоборот, и соответствует логической операции «НЕ». Его можно использовать для решения интересной для практики задачи кодирования обычной цифровой информации, её передачи и регистрации её квантового варианта в условиях криптографии (назовём её «НЕ»cod). При этом могут быть использованы свойства квантовой запутанности и информационной телепортации.

Для варианта использования кубита как пары одинаковых нанокристаллов таблица истинности может быть той, которая отображена в табл. 2. В ней: $X_1=X_{11}+X_{12}$, где X_{11} – сигнал «смещение» («квантовый», V_0 илиV_t), X_{12} – сигнал кодируемой цифровой информации («кодируемый», 0 или 1), X_2 – сигнал «смещение» («квантовый», V_0 илиV_t), Y_2 – цифровой декодируемый (0 или 1) сигнал-результат.

Таблица 2 – Таблица истинности для варианта «НЕ»cod

X_{11}	X_{12}	X_2	Y_2
0	0	1	1
0	1	1	0

Схемотехнические варианты квантовых логических вентилей отличаются многообразием и сложностью исполнений. Вариант вентиля X (Паули) является простейшим, но, тем не менее, позволяет исследовать основные процессы. На рис. 2 представлена схема аналога вентиля X (Паули), где DA1 – активный элемент, в нашем случае нанокристалл. Простейший топологический вариант представляет собой наноячейку, выполненную на диэлектрической подложке как два электрода с нанозазором, в котором помещён нанокристалл. Ячейка соединяется с элементами схемы так, как это делается в микросхемах.

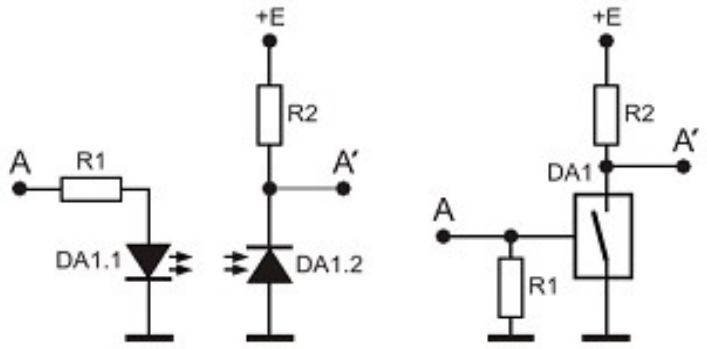


Рисунок 2 –

Схема фотонного (слева) и ключевого (справа) вентиля X (Паули). DA1 – нанокристалл.

Технологический процесс изготовления такой ячейки требует применения электроннолучевой литографии для выполнения нанозазора и наноманипулятора для размещения в нем нанокристалла.

Для изготовления необходимых металлических электродов и нанозазора применяется электронно-лучевая литографияи установка плазмохимического травления в индуктивно связанной плазме позволяющие изготавливать элементы с минимальным размеромдо 10 нм (рис. 3.).

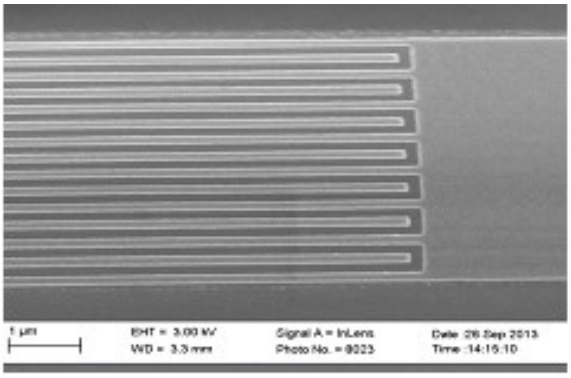


Рисунок 3 –

Структура из металлических электродов с минимальным размером 150 нм, изготовленная электронно-лучевой литографией на подложке ниобата лития [7].

В качестве наноманипулятора обычно применяется туннельный микроскоп, что в практическом плане представляет большие трудности. Нами разрабатывается технология адресного нанесения наночастиц методами плёнок Ленгмюра-Блоджетт.

Литература

[1] Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. Изд-во М: МИР. 2006. 824 с.

[2] К.А. Валиев. Квантовые компьютеры и квантовые вычисления. УФН, **175** (1), 3 – 39 (2005).

[3] Ю.А. Юсипова, А.И. Попов. Спиновые вентили в микроэлектронике. Известия вузов. Электроника, **26**(1),7-29 (2021). DOI: 10.24151/1561-5405-2021-26-1-7-29.

[4] Л.А. Опёнов. Спиновые логические вентили на основе квантовых точек. Соросовский образовательный журнал, том 6, №3, 2000.

[5] Н.Д. Жуков, М.В. Гавриков. Электронный транспорт в одиночных коллоидных квантово-размерных частицах в межэлектродном нанозазоре. Письма в ЖТФ, 2022, том 48, вып. 8, с. 18 – 22. DOI: 10.21883/PJTF.2022.08.52361.19090.

[6] Н.Д. Жуков. Квантовая когеренция и запутанность электронных состояний в квантоворазмерныхнанокристаллах. «Аллея Науки» № 12 (99) 2024. https://alley-science.ru/domains_data/files/December24/ KVaNTOVaYa-KOGERENTSIYa-.

[7] Ю.В. Гуляев, С.Г. Сучков, С.С. Янкин, С.А. Никитов, Д.С. Сучков, В.П. Плесский. Радиочастотная идентификационная метка на поверхностных акустических волнах в диапазоне 6 ГГц // Радиотехника и электроника, 2015, том 60, № 4, с. 429.

BASIC QUANTUM LOGIC GATES WITH NANOCRYSTALS ON A TOPOLOGICAL CHIP

N.D. Zhukov, S.G. Suchkov, D.S. Suchkov

STC "Micro- and Nanoelectronics" of Saratov State University

Two variants of basic logic gates with quantum-sized nanocrystals on a topological chip are considered. The chip is formed on a dielectric substrate by optical and electronic lithography methods. The nanocrystals were synthesized by colloidal chemistry and deposited on a chip substrate using the Langmuir-Blodgett film method.

УДК 536.12; 536.37 25-57

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ РОЖДЕНИИ И РЕКОМБИНАЦИИ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ И ИОНОВ В МЕТАЛЛООКСИДНОМ МЕМРИСТОРЕ

Габдулин Б.Н., Бусыгин А.Н., Удовиченко С.Ю.

Тюменский государственный университет, Тюмень

Развита теплофизическая модель металлооксидного мемристора, позволяющая определить изменение во времени температурного поля, полученного в условиях джоулева нагрева электронным током оксидной плёнки. Показано, что учет процессов генерации и рекомбинации ионов и вакансий кислорода заметно сказывается на изменении вольт-амперной характеристики мемристора. Эти процессы влияют на перераспределение концентраций вакансий и ионов кислорода, что приводит кроме увеличения плотности электронного тока к изменению электрического поля и, соответственно, величины джоулева источника тепла.

В [1-5] представлена физико-математическая модель тепло- и массопереноса при транспорте заряженных частиц в электрическом поле для металлооксидного мемристора. Для упрощения в этой модели отказались от решения уравнения Пуассона для электрического потенциала из-за сложности расчета концентрации захваченных в кислородные вакансии электронов. При формовке в условиях высокого напряжения на электродах, превосходящего напряжение резистивного переключения, в оксидном слое мемристора создаются филаменты с высокими электропроводностью и плотностью электронного тока. Модель включает нестационарное уравнение непрерывности для концентрации кислородных вакансий (1) без учета их рекомбинации с ионами, стационарное уравнение непрерывности для плотности тока электронов (3) и уравнение теплопроводности (4). С помощью этой модели найдены распределения температуры поперёк и вдоль оксидной плёнки в результате джоулевого нагрева при протеканий электронного тока по этим филаментам.

Представленная модель является упрощённой. В настоящей работе рассмотрена более полная теплофизическая модель меристора, которую в одномерном приближении можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{dN}{dz} - NV_E\right) + G(N) - R(N.N_{ox}), \tag{1}$$

$$\frac{\partial N_{ox}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{ox}\frac{dN_{ox}}{dz} + N_{ox}V_{Eox}\right) + G(N) - R(N.N_{ox}). \tag{2}$$

$$\frac{d}{dz}(\sigma E) = 0. \tag{3}$$

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(N)\frac{\partial T}{\partial z}\right) + J \cdot E,$$

(4)

В уравнении (1) по сравнению с работой [1] введена скорость рекомбинации пар ион-вакансия $R(N, N_{ox})$ [6], а для скорости их генерации $G(N)$ взято более точное выражение из [6]; введено уравнение непрерывности концентрации ионов кислорода (2), необходимое для определения скорости рекомбинации пар; более точные коэффициенты диффузии D и D_{ox} , а также выражения для скорости дрейфа V_E и V_{Eox} вакансий и ионов заимствованы из [7].

$$E$$

Здесь N, N_{ox} – концентрации вакансий и ионов, E = - $d\varphi$ /dz – напряженность электрического поля; $\varphi|_{z=0} = 0$, $\varphi|_{z=d} = u$ – потенциалы электродов; $D = \frac{1}{2}a_0^2 f_0 exp\left(-\frac{E_{avac}}{kT}\right)cosh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right)$ – коэффициент диффузии вакансий, $D_{ox} = \frac{1}{2}a_0^2 f_0 exp\left(-\frac{E_{aox}}{kT}\right)cosh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right)$ – коэффициент диффузии ионов, $V_E = a_0 f_0 exp\left(-\frac{E_{avac}}{kT}\right)sinh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right)\left(1 - \frac{N}{N_{max}}\right)$ – скорость дрейфа вакансий, $V_{Eox} = a_0 f_0 exp\left(-\frac{E_{aox}}{kT}\right)sinh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right)\left(1 - \frac{N}{N_{max}}\right)$ – скорость дрейфа ионов, $f_0 = \frac{W_{ph}}{h}$ – частота колебаний атомов, а W_{ph} – энергия фононов; $G = (N_{max} - N)f_0 exp\left[\frac{-E_g + \sqrt{\frac{q^3E}{\pi\varepsilon\varepsilon_0}}}{kT}\right]$ – скорость генерации и $R = min(N, N_{ox})f_0 \exp\left[\frac{-E_r - \sqrt{\frac{q^3E}{\pi\varepsilon\varepsilon_0}}}{kT}\right]$ – скорость рекомбинации пар Френкеля, N_{max} – максимальная концентрация кислородных вакансий, $a_i = N_i max^{\uparrow}(-1/3)$ – длина прыжка для частицы (иона или вакансии), q – модуль заряда вакансий и ионов, k – постоянная Больцмана, E_{avac} и E_{aox} – соответственно энергии активации движения вакансий и ионов и E_g – энергия генерации и E_r – энергия рекомбинации пары ион-вакансия, c – удельная теплоемкость и ρ – плотность оксида, электрическая проводимость σ и энергия активации проводимости E_{AC}:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_{AC}}{kT}\right).$$

$$\sigma_0 = \frac{(\sigma_{Ta} - \sigma_{Ta_2O_5})}{N_{\max}} N + \sigma_{Ta_2O_5},$$

$$E_{AC}(N) = \frac{E_{AC}^{Ta} - E_{AC}^{Ta_2O_5}}{N_{\max}} N + E_{AC}^{Ta_2O_5}.$$

При расчете в модели [1] величина $E_{AC}^{Ta_2O_5}$ изменяется в пределах от 0.015 до 0.052 эВ, однако экспериментально полученный диапазон значений составляет от 0.015 до 0.34 эВ [8]. Для коэффициента теплопроводности λ использовалась линейная зависимость от концентрации вакансий N [4]:

$$\lambda(N) = \lambda_{Ta_2O_5} + \frac{(\lambda_{TaO_x} - \lambda_{Ta_2O_5})N}{N_m}.$$

Граничные условия второго рода для уравнений (1), (2) определяют равенство нулю плотности потоков вакансий и ионов, обусловленные непроницаемостью электродов:

$$\left(D\frac{\partial N}{\partial z} - NV_E\right)\Big|_{z=0,d} = 0, \qquad \left(D_{ox}\frac{\partial N_{ox}}{\partial z} + N_{ox}V_{Eox}\right)\Big|_{z=0,d} = 0. \tag{6}$$

Граничные условия для уравнения теплопроводности (4) следуют из предположения равенства температуры и тепловых потоков на контакте металл-диэлектрик (квадратные скобки означают разницу с разных сторон контакта):

$$[T|_{z=0,d}] = 0; \left[\lambda\frac{dT}{dz}\Big|_{z=0,d}\right] = 0. \tag{7}$$

На рис. 1 приведены экспериментальная [1] и расчетные кривые вольт-амперной характеристики (ВАХ) на участке переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние без и при учете процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов.

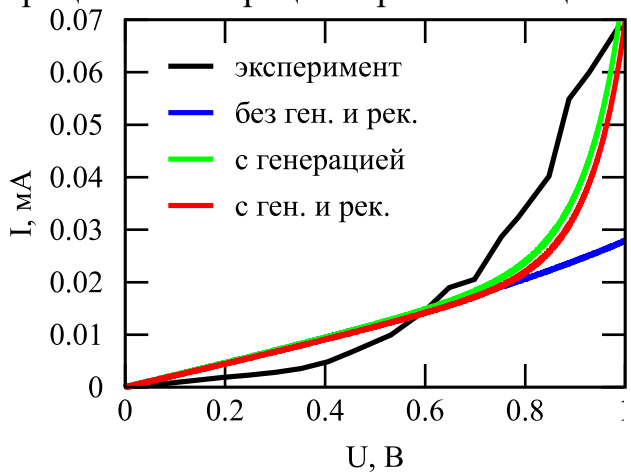


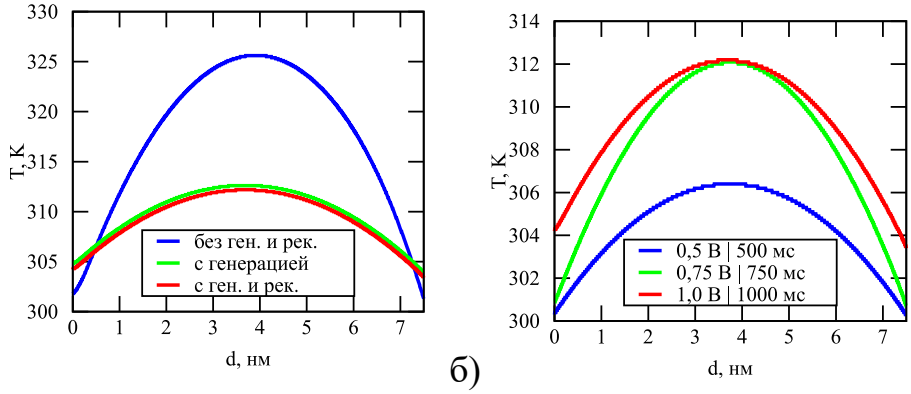
Рис. 1. Влияние процессов генерации и рекомбинации пар ионов и вакансий кислорода на ВАХ мемристора

Вольт-амперные кривые построены при следующих параметрах: $N_{max} = 10^{22}$ см$^{-3}$, $a_0 = 0{,}05$ нм [1], $E_g = 1{,}0$ эВ [1], $E_r = 0{,}01$ эВ,

$E_{avac} = 0{,}1$ эВ [1], $E_{aox} = 0{,}35$ эВ [9], $E_{AC}^{Ta} = 0{,}016$ эВ, $E_{AC}^{Ta_2O_5} = 0{,}052$ эВ, $\lambda_{Ta_2O_5} = 0{,}12$ Вт/(м·К), $\lambda_{TaO_x} = 57{,}5$ Вт/(м·К), ^{c} = 309 Дж/(кг·К), $^{c}{}_{TaO_x} = 144$ Дж/(кг·К), $\rho_{Ta_2O_5} = 8{,}2$ г/см^3, $\rho_{TaO_x} = 16{,}6$ г/см^3. Длина и диаметр филамента составляют 7,5 нм и 45 нм.

Лучшее совпадение с экспериментальной ВАХ показывают расчеты с учетом генерации. Процесс рекомбинации сказывается незначительно.

На рис. 2а приведены профили температуры по толщине пленки, рассчитанные без учета и с учетом процессов генерации и рекомбинации. Рис. 2б показывает изменение профиля температуры с учетом всех процессов во времени при соответствующем рис.1. изменении напряжения на мемристоре.



а) б)

Рис. 2. Профили температуры по толщине пленки без и при учете процессов генерации и рекомбинации (а), изменение температурного поля во времени при моделировании ВАХ (б)

Исключение процессов генерации и рекомбинации приводит только к перераспределению имеющихся вакансий и ионов кислорода без увеличения их суммарного количества.

Общее малое количество вакансии соответствует низкому электронному току и более высокому нагреву. Добавление генерации приводит к резкому увеличению электронного тока и некоторому уменьшения нагрева. Рекомбинация незначительно снижает концентрацию вакансий и, соответственно, электронный ток, что проявляется в более низкой температуре. Более высокая температура в случае перераспределения вакансий обусловлена изменением параметров в уравнении теплопроводности. При большем количестве вакансий значительно увеличивается теплопроводность и плотность обедненного оксида, что приводит к более медленному нагреву.

Влияние процессов генерации и рекомбинации вакансий и ионов на вольтамперную важно учитывать при выборе материалов мемристоров для обеспечения требуемых параметров при проектировании электронных устройств.

Работа выполнена при финансировании Министерством науки и высшего образования в рамках НИР ГЗ (шифр FEWZ-2024-0020).

Литература

1. Kim S., Kim S-J., Kim K.M., Lee S.R., Chang M., Cho E., Kim Y.B., Kim C.J., Chung U.I., Yoo I.K. Physical electro-thermal model of resistive switching in bi-layered resistance-change memory // Scientific reports. – 2013. – V. 3. – P. 1680. https://doi.org/10.1038/srep01680.
2. Larentis S., Nardi F., Balatti S., David C. Gilmer D.C., Ielmini D. Resistive Switching by Voltage-Driven Ion Migration in Bipolar RRAM–Part II: Modeling // IEEE Transactions on electron devices. – 2012. –V. 59. –No. 9. – P. 2468-4275. https://doi.org/10.1109/TED.2012.2202320.
3. Basnet P., Pahinkar D.G., West M.P. et.al. Substrate dependent resistive switching in amorphous-HfOx memristors: an experimental and computational investigation // Journal of Materials Chemistry C. – 2020. – V. 8. – P 5092-5101. https://doi.org/10.1039/c9tc06736a.
4. Pahinkar D.G., Basnet P., West M.P., Zivasatienraj B., Weidtnbach A., Doolittle W.A., Vogel E.M., Graham S. Experimental and computational analysis of thermal environment in the operationof HfO2 memristors // AIP Advances. – 2020. –V. 10. –Art. 035127. https://doi.org/10.1063/1.5141347.
5. Parit A.K., Yadav M.S., Gupta A.K., Mikhaylov A., Rawat B. Design and modeling of niobium oxide-tantalum oxide based self-selective memristor for large-scale crossbar memory // Chaos, Solitons and Fractals. – 2021. – V. 145. – Art. 110818. https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.110818.
6. Zeumault A., Alam S., Omar Faruk M., Aziz A. (2022). Memristor compact model with oxygen vacancy concentrations as state variables // Journal of Applied Physics. – 2022. –V. 131 (12). – Article 124502. https://doi.org/10.1063/5.0087038.
7. Noman M., Jiang W., Salvador P.A., Skowronski M., Bain J.A. Computational investigations into the operating window for memristive devices based on homogeneous ionic motion // Applied Physics. A. – 2011. – V. 102. – P. 877-883 https://doi.org/10.1007/s00339-011-6270-y.
8. Bao K., Meng J., Jonathan D., Poplawsky J.D., M. Skowronski. Electrical conductivity of TaO_x as function of composition and temperature // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2023. – V. 617. – № 1. – Article 122495. https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2023.122495.
9. Duenas S., Castan H., Barbolla J., Kola R.R., Sullivan P. A. Electrical characteristics of anodic tantalum pentoxide thin films under thermal stress // Microelectronics reliability. – 2000. – V. 40(4-5). – P.659-662. https://doi.org/10.1016/S0026-2714(99)00310-8.

THERMOPHYSICAL PROCESSES DURING THE CREATION AND RECOMBINATION OF OXYGEN VACANCIES AND IONS IN A METAL OXIDE MEMRISTOR

Gabdulin B.N., Busygin A.N., Udovichenko S.Yu.

A thermophysical model of a metal-oxide memristor is developed, which makes it possible to evaluate the time variation of the temperature field obtained under conditions of Joule heating by electron current in an oxide film. It is shown that considering the processes of generation and recombination of ions and oxygen vacancies noticeably affect the redistribution of their concentrations, which leads to a change in the electric field and, accordingly, the value of the Joule heat source.

УДК 004.94 25-58

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВЫХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И МОДЕЛИРОВАНИЯ В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

Колесников С.Е.[1], Донец М.А.[2]

[1]ГУМРФ имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург
[2]Донской государственный аграрный университет, Персиановский

В статье рассматриваются ключевые направления применения цифровых интеллектуальных технологий и математического моделирования в микро- и наноэлектронике. Особое внимание уделяется использованию искусственного интеллекта и симуляционных методов в проектировании и оптимизации электронных компонентов.

Микро- и наноэлектроника – одна из наиболее динамично развивающихся отраслей высоких технологий, обеспечивающая основу для всей современной цифровой инфраструктуры. Сложность проектируемых устройств, высокая плотность компонентов и жесткие требования к точности и надежности стимулируют внедрение интеллектуальных цифровых технологий и методов математического моделирования на всех этапах жизненного цикла изделий. Современные электронные компоненты требуют особого подхода к их проектированию и производству, что невозможно без использования прогрессивных цифровых инструментов.

Интеллектуальные цифровые технологии играют всё более важную роль в развитии микро- и наноэлектронных систем. Искусственный интеллект и машинное обучение используются для анализа и оптимизации топологии микросхем, что позволяет существенно повысить эффективность проектирования. Кроме того, эти технологии позволяют предсказывать возможные отказы компонентов ещё на стадии их разработки, что повышает надёжность конечных изделий.

Развитие автоматизированных систем проектирования (EDA – Electronic Design Automation) существенно упростило процесс логического и физического проектирования микросхем. Современные EDA-инструменты не только ускоряют цикл разработки, но и учитывают технологические ограничения на уровне материалов и производственных процессов, что особенно важно при работе с наномасштабами.

Внедрение концепции цифрового двойника стало важным этапом в цифровизации микроэлектроники. Виртуальное представление устройства, с помощью которого можно моделировать его поведение, проводить тестирование и оптимизацию ещё до фактического производства, открывает новые горизонты для снижения стоимости и сроков разработки, а также для повышения качества продукции.

Математическое моделирование является основой научного подхода к проектированию микро- и наноэлектронных компонентов. С его помо-

щью возможно описывать сложные физические процессы, происходящие в наноразмерных структурах, с учётом их многомерной природы и междисциплинарных взаимосвязей.

Одним из наиболее значимых направлений является моделирование физических процессов, в том числе тепловых, электрических и квантовых явлений. Эти процессы оказывают значительное влияние на характеристики и стабильность работы электронных компонентов. Кроме того, важно учитывать взаимодействие между слоями, материалы, диэлектрические свойства и электромагнитные поля, особенно при разработке высокочастотных устройств [1].

Не менее важным направлением является моделирование технологических процессов, таких как литография, травление, осаждение и другие стадии производства. Такие модели позволяют прогнозировать геометрию получаемых структур и их соответствие заданным параметрам, а также оценивать влияние технологических изменений на функциональные характеристики устройств.

Схемотехническое моделирование представляет собой ещё один важный аспект, поскольку позволяет анализировать поведение электрических схем, определять время отклика, энергопотребление, чувствительность к внешним воздействиям и устойчивость к сбоям. Использование специализированных программных пакетов, таких как COMSOL Multiphysics, ANSYS, Synopsys Sentaurus, значительно расширяет возможности исследователей и инженеров в этой области [2].

Современное развитие микро- и наноэлектроники тесно связано с дальнейшей интеграцией интеллектуальных цифровых подходов. В перспективе ожидается расширение применения нейросетевых моделей, способных с высокой точностью прогнозировать поведение наноструктур и адаптироваться к новым условиям функционирования. Интерес к квантовым вычислениям также нарастает, и в будущем они могут быть интегрированы в задачи проектирования электронных систем.

Цифровые двойники будут применяться не только на уровне отдельных устройств, но и на уровне микросистем в целом, что откроет возможности для комплексной оптимизации всех этапов жизненного цикла изделия. Ещё одним перспективным направлением является создание самонастраивающихся интеллектуальных систем проектирования, способных автоматически адаптироваться к изменениям проектных требований и условий производства [3].

Среди ключевых вызовов остаются высокая вычислительная сложность задач моделирования, особенно в многомерных и мультифизических постановках. Также существует необходимость в верификации и валидации полученных моделей, особенно при переходе на новые технологические режимы и архитектуры. Кроме того, ограниченность данных для обучения ИИ-моделей требует разработки новых методов синтетической гене-

рации и расширения обучающих выборок [4].

Интеллектуальные цифровые технологии и математическое моделирование становятся неотъемлемыми компонентами современной микро- и наноэлектроники. Их синергия позволяет не только ускорить цикл разработки, но и повысить точность проектирования, надёжность изделий и снизить производственные издержки. В условиях стремительного роста сложности и миниатюризации компонентов развитие этих подходов будет определяющим фактором технологического прогресса [5].

Понимание физических процессов, цифровизация проектирования и использование искусственного интеллекта создают мощную основу для появления новых поколений микро- и наноэлектронных устройств. В ближайшие десятилетия именно интеграция интеллектуальных цифровых решений и математического моделирования будет играть ключевую роль в обеспечении конкурентоспособности и инновационного развития этой критически важной отрасли науки и техники.

Литература

1. Использование цифровых технологий в финансовой сфере / Н. А. Бородина, Е. В. Гракушин, А. А. Сергеев, Е. Р. Раилян // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций: сборник статей X Международной научно-практической конференции, Пенза, 20–21 октября 2022 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2022. – С. 35-38.
2. Современный подход к изучению облачных технологий необходимых для развития цифровой экономики / Н.А. Бородина, Е.В. Гаркушин, А.А. Сергеев, Е.Р. Раилян // Наука, образование и бизнес: новый взгляд или стратегия интеграционного взаимодействия: Сборник научных трудов по материалам II Международной научно-практической конференции, посвященной памяти первого Президента Кабардино-Балкарской Республики Валерия Мухамедовича Кокова, Нальчик, 20–22 октября 2022 года. Том Часть 1. – Нальчик: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет имени В.М. Кокова", 2022. – С. 29-32.
3. Сергеев, А.А. Современный подход к анализу актульных проблем стандартизации / А.А. Сергеев, М.А. Донец, А.И. Осипова // Формирование и реализация стратегии устойчивого экономического развития Российской Федерации : Сборник статей XII Международной научно-практической конференции, Пенза, 09–10 декабря 2022 года / Под научной редакцией В.Н. Лазарева, Б.Я. Татарских. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2022. – С. 356-360.

4. Искусственный интеллект и транспорт: новые технологии безопасности и комфорта / А. А. Сергеев, М. С. Кобякова, М. А. Донец, В. М. Коробова // Транспорт. Экономика. Социальная сфера (Актуальные проблемы и их решения) : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 16–17 апреля 2024 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2024. – С. 225-227.
5. Применение микроорганизмов в нанотехнологии / А. А. Сергеев, М.А. Донец, Е.В. Гаркушин [и др.] // Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России : Сборник статей XXI Международной научно-практической конференции, Пенза, 23–24 января 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 239-241.

INTELLIGENT DIGITAL TECHNOLOGIES AND MATHEMATICAL MODELING IN MICRO- AND NANOELECTRONICS: MODERN APPROACHES AND PERSPECTIVES

Kolesnikov S.E.[1], *Donets M.A.*[2]

[1] State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg
[2]Don State Agrarian University, Persianovsky

The article discusses the key areas of application of digital intelligent technologies and mathematical modeling in micro- and nanoelectronics. Special attention is paid to the use of artificial intelligence and simulation methods in the design and optimization of electronic components.

УДК 004.8 25-59

РОЛЬ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Колесников С.Е.[1], Донец М.А.[2]

[1]ГУМРФ имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург
[2]Донской государственный аграрный университет, Персиановский

В статье рассматриваются ключевые аспекты цифровой трансформации микро- и наноэлектроники с акцентом на применение искусственного интеллекта и математического моделирования. Анализируются современные подходы к проектированию электронных компонентов, а также перспективы развития отрасли.

Микро- и наноэлектроника являются краеугольным камнем современной цифровой инфраструктуры. С каждым годом растёт спрос на более производительные, энергоэффективные и миниатюрные электронные устройства. Это вызывает необходимость пересмотра традиционных подходов к разработке и производству микросхем. Цифровая трансформация становится ответом на вызовы времени, предлагая новые методы, инструменты и парадигмы, способные радикально изменить производственные процессы и инженерные практики.

Интеграция информационных технологий, развитие облачных вычислений, искусственного интеллекта, интернета вещей и цифровых двойни ков кардинально меняют правила игры. Сегодня создание сложных элек тронных систем требует междисциплинарных знаний, включая физику твёрдого тела, вычислительную механику, прикладную математику и когнитив ные технологии. В этих условиях роль ИИ и математического моделирования возрастает многократно, становясь основой инновационного проектирования.

Искусственный интеллект в микро- и наноэлектронике находит применение в самых разнообразных задачах. Одним из ключевых направлений является автоматизация проектирования интегральных схем (IC design automation). Использование ИИ позволяет значительно ускорить процессы логического синтеза, физического размещения и трассировки, улучшая при этом показатели плотности, скорости и энергопотребления устройств [1].

Кроме того, ИИ применяется для предиктивного анализа и обнаружения дефектов на этапе производственного контроля. Алгоритмы компьютерного зрения и глубокого обучения позволяют в реальном времени выявлять микроскопические отклонения и классифицировать потенциальные дефекты, предотвращая выход бракованных изделий. Также активно исследуются возможности использования ИИ для самокалибровки и самообучения электронных систем в процессе эксплуатации.

Другим важным направлением является разработка адаптивных мо-

делей, способных подстраиваться под меняющиеся параметры производственного процесса. Такие модели особенно актуальны в условиях масштабного производства и необходимости индивидуального подхода к каждому кристаллу, например, в системах массовой кастомизации.

Математическое моделирование служит не только инструментом анализа, но и основой понимания фундаментальных процессов, протекающих в микро- и наноразмерных структурах. Оно позволяет исследовать влияние различных факторов – от материалов и геометрии до условий эксплуатации – на поведение устройств. В условиях, когда физический эксперимент становится дорогостоящим или невозможным, моделирование приобретает решающее значение [2].

Физическое моделирование охватывает процессы теплопереноса, электропроводности, диффузии, квантовомеханических эффектов и электромагнитных взаимодействий. Важно учитывать междисциплинарные аспекты, например, влияние механических напряжений на электрические характеристики при многослойной упаковке микросхем (3D IC).

Схемотехническое моделирование позволяет оценить взаимодействие компонентов в составе сложных цепей, выявить узкие места, провести анализ отказов и смоделировать работу устройства в различных условиях. Это критически важно при проектировании энергонезависимой памяти, высокочастотных усилителей и цифровых процессоров [3].

Всё более актуальными становятся мультифизические модели, объединяющие тепловые, механические и электрические явления. Такие модели позволяют проектировать устройства с учётом реальных условий эксплуатации, включая тепловые нагрузки, электромиграцию и деградацию материалов.

Совмещение возможностей искусственного интеллекта и математического моделирования даёт мощный эффект. ИИ способен обрабатывать огромные массивы результатов симуляций, выявлять закономерности и автоматизировать выбор оптимальных решений. Он может выступать в роли интеллектуального помощника инженера, предлагая улучшения в конструкции и предупреждая потенциальные ошибки [4].

Одним из перспективных направлений является использование ИИ для генерации параметров моделей на основе экспериментальных данных и предсказания поведения устройств в ранее неизученных режимах. Таким образом, происходит постоянное самообучение моделей, их уточнение и адаптация под новые условия. Это особенно ценно в условиях быстрого обновления технологических процессов и появления новых материалов.

Технология цифровых двойников, активно развивающаяся в машиностроении и энергетике, находит применение и в микроэлектронике. Создание виртуальных прототипов, способных в реальном времени имитировать поведение физического устройства, позволяет сократить цикл НИОКР, повысить точность прогнозов и обеспечить непрерывную оптимизацию.

Цифровая трансформация микро- и наноэлектроники открывает уни-

кальные возможности для ускоренного технологического развития. Благодаря использованию ИИ и моделирования становится возможным создание электронных систем нового поколения – интеллектуальных, самонастраивающихся и устойчивых к отказам. Особенно важно это в условиях развития интернета вещей, автономных транспортных систем и квантовых вычислений [5].

Однако перед отраслью стоят и серьёзные вызовы. Один из них – необходимость высокой точности моделей и алгоритмов. Небольшая ошибка в симуляции может привести к сбоям в работе конечного изделия. Кроме того, модели ИИ часто страдают от недостатка интерпретируемости, что затрудняет их применение в критически важных системах. Требуются стандарты, протоколы и верификационные процедуры, обеспечивающие достоверность и воспроизводимость результатов.

Ещё одним вызовом является проблема нехватки кадров, обладающих как инженерными, так и ИТ-компетенциями. Для успешной цифровой трансформации необходимо развитие новых образовательных программ, нацеленных на подготовку специалистов междисциплинарного профиля. Также требуется тесное взаимодействие между академической средой, индустрией и государством.

Цифровая трансформация микро- и наноэлектроники невозможна без широкого внедрения искусственного интеллекта и математического моделирования. Эти технологии позволяют решать задачи высокой сложности, автоматизировать процессы и создавать интеллектуальные электронные устройства, отвечающие требованиям времени. Их синергия открывает путь к новым технологическим укладам, в которых гибкость, масштабируемость и надёжность становятся ключевыми характеристиками.

В будущем цифровая трансформация продолжит углубляться, охватывая не только проектирование, но и производство, эксплуатацию и утилизацию устройств. Успешное преодоление текущих вызовов потребует усилий всех участников инновационного процесса и формирования единой цифровой экосистемы, способной поддерживать устойчивое развитие отрасли.

Литература

1. Современный подход к изучению облачных технологий необходимых для развития цифровой экономики / Н.А. Бородина, Е.В. Гаркушин, А.А. Сергеев, Е.Р. Раилян // Наука, образование и бизнес: новый взгляд или стратегия интеграционного взаимодействия : Сборник научных трудов по материалам II Международной научно-практической конференции, посвященной памяти первого Президента Кабардино-Балкарской Республики Валерия Мухамедовича Кокова, Нальчик, 20–22 октября 2022 года. Том Часть 1. – Нальчик: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кабардино-

Балкарский государственный аграрный университет имени В.М. Кокова", 2022. – С. 29-32.
2. Сергеев, А.А. Современный подход к анализу актуальных проблем стандартизации / А.А. Сергеев, М.А. Донец, А.И. Осипова // Формирование и реализация стратегии устойчивого экономического развития Российской Федерации: Сборник статей XII Международной научно-практической конференции, Пенза, 09–10 декабря 2022 года / Под научной редакцией В.Н. Лазарева, Б.Я. Татарских. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2022. – С. 356-360.
3. Искусственный интеллект и транспорт: новые технологии безопасности и комфорта / А.А. Сергеев, М.С. Кобякова, М.А. Донец, В.М. Коробова // Транспорт. Экономика. Социальная сфера (Актуальные проблемы и их решения): Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 16–17 апреля 2024 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2024. – С. 225-227.
4. Применение микроорганизмов в нанотехнологии / А.А. Сергеев, М.А. Донец, Е.В. Гаркушин [и др.] // Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России: Сборник статей XXI Международной научно-практической конференции, Пенза, 23–24 января 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 239-241.
5. Искусственный интеллект и аналитика данных в онлайн-медиации / А.А. Сергеев, С.О. Гапон, М.А. Донец, В.М. Коробова // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 10–11 октября 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 387-391.

DIGITAL TRANSFORMATION OF MICRO- AND NANOELECTRONICS: THE ROLE OF AI AND MATHEMATICAL MODELING

Kolesnikov S.E.[1], Donets M.A.[2]

[1]State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg
[2]Don State Agrarian University, Persianovsky

The article discusses the key aspects of the digital transformation of micro- and nanoelectronics with an emphasis on the use of artificial intelligence and mathematical modeling. Modern approaches to the design of electronic components are analyzed, as well as prospects for the development of the industry.

УДК 004.8 25-60

СИМБИОЗ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ПРОЕКТИРОВАНИИ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Колесников С.Е.[1], Донец М.А.[2]

[1]ГУМРФ имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург
[2]Донской государственный аграрный университет, Персиановский

Статья раскрывает потенциал объединения искусственного интеллекта и математического моделирования в разработке микро- и наноэлектронных систем. Рассматриваются преимущества автоматизации проектирования и повышения надёжности устройств, а также перспективы развития отрасли в условиях цифровой трансформации.

Микро- и наноэлектроника — одна из самых наукоёмких и быстроразвивающихся отраслей современной промышленности, формирующая технологическую базу цифровой трансформации. Постоянное уменьшение размеров электронных компонентов, рост плотности интеграции, внедрение новых материалов и архитектур усложняют процессы проектирования и требуют инновационных подходов к разработке. Традиционные методы проектирования уже не обеспечивают достаточную скорость, точность и гибкость. В ответ на эти вызовы всё большую роль начинают играть интеллектуальные цифровые технологии, в частности, искусственный интеллект (ИИ) и математическое моделирование. Их симбиоз формирует новое качество инженерного труда, позволяя объединить аналитическую точность с адаптивной интеллектуальностью.

Математическое моделирование занимает ключевое место в микро- и наноэлектронике, обеспечивая предсказуемость поведения систем ещё до их физической реализации. Оно включает моделирование электрических, тепловых, механических и квантовых процессов на различных масштабах. Модели устройств, основанные на уравнениях Максвелла, уравнениях теплопереноса и методах конечных элементов, позволяют исследовать распределение токов, напряжений, температуры и механических напряжений в структурах нанометрового масштаба [1].

Особое значение приобретает многомасштабное моделирование, соединяющее атомарный, мезоскопический и макроскопический уровни. Например, моделирование транзисторов FinFET требует учёта квантово-механических эффектов на уровне каналов, в то время как схемотехнические симуляции зависят от обобщённых моделей компонентов. Связь между уровнями достигается путём параметризации и верификации моделей на основе экспериментальных данных и вычислительных экспериментов [2].

Моделирование также играет важную роль в анализе надёжности и устойчивости устройств к внешним воздействиям, включая радиацию, пе-

репады температур, электромиграцию и механические деформации. Развитие методов статистического моделирования позволяет учитывать разброс параметров при производстве, повышая точность оценки поведения систем в реальных условиях эксплуатации.

ИИ трансформирует традиционные процессы проектирования, внедряя интеллектуальные инструменты в каждый этап разработки. Машинное обучение и нейросетевые подходы используются для анализа больших массивов данных, генерируемых при симуляциях, испытаниях и эксплуатации устройств. Это позволяет выявлять сложные закономерности, которые невозможно обнаружить стандартными аналитическими методами [3].

Применение ИИ охватывает логический синтез, проверку функциональной корректности, размещение и трассировку, генерацию тестов, верификацию временных характеристик и оптимизацию энергопотребления. Алгоритмы глубокого обучения, обученные на исторических данных, способны предсказывать потенциальные ошибки и узкие места в проектах ещё до завершения симуляционного цикла.

В сфере производственного контроля ИИ применяется для интеллектуального мониторинга процессов, дефектоскопии и предиктивного обслуживания оборудования. Благодаря обработке изображений, ИИ-системы способны выявлять микроскопические дефекты на пластинах и чипах с высокой точностью и скоростью.

Интеграция ИИ с математическим моделированием открывает новые горизонты в создании интеллектуальных систем проектирования, адаптирующихся к изменяющимся требованиям и условиям. Одним из ключевых направлений является создание цифровых двойников – виртуальных моделей устройств, отражающих их поведение в реальном времени. Такие двойники формируются путём интеграции физических моделей с данными, получаемыми от сенсоров или в ходе эксплуатации, и позволяют проводить прогнозирование отказов, планирование технического обслуживания и оптимизацию рабочих параметров [4].

ИИ также активно применяется для создания редуцированных моделей, которые сохраняют точность полноценных физических симуляций при значительно меньших вычислительных затратах. Это особенно важно для задач, связанных с встраиваемыми системами, интернетом вещей и автономной электроникой, где необходимы компактные и быстрые модели.

В задачах оптимизации проектных решений ИИ и моделирование работают в тесной связке. Алгоритмы машинного обучения направляют выбор параметров моделей, а симуляции обеспечивают обратную связь о качестве полученных решений. Такие итеративные циклы позволяют достигать лучших показателей надёжности, энергоэффективности и производительности при меньших ресурсных затратах.

Симбиоз ИИ и математического моделирования открывает путь к новой инженерной парадигме — интеллектуальному проектированию, в

котором большинство задач автоматизировано, а принятие решений базируется на совокупности симулированных и реальных данных. Это сулит значительное сокращение времени выхода новых продуктов на рынок, снижение стоимости разработки и повышение надёжности изделий.

Тем не менее, путь к полной интеграции этих технологий сопряжён с рядом вызовов. Среди них — необходимость создания унифицированных платформ, обеспечивающих взаимодействие между моделями, данными и алгоритмами ИИ; обеспечение доверия к интеллектуальным системам за счёт прозрачности и объяснимости их решений; вопросы защиты интеллектуальной собственности и конфиденциальности данных. Немаловажно и развитие кадрового потенциала: специалисты должны обладать знаниями как в области микроэлектроники, так и в сферах ИИ и вычислительной мАтематики [5].

Интеграция искусственного интеллекта и математического моделирования в проектирование микро- и наноэлектронных систем становится основой новой технологической эры. Эти технологии дополняют друг друга, формируя интеллектуальные, адаптивные и эффективные подходы к разработке. В условиях стремительной миниатюризации компонентов и усложнения архитектур такой симбиоз уже не является роскошью, а становится необходимым инструментом устойчивого развития и конкурентоспособности микроэлектронной отрасли.

Литература

1. Сергеев, А. А. Современный подход к анализу актульных проблем стандартизации / А. А. Сергеев, М. А. Донец, А. И. Осипова // Формирование и реализация стратегии устойчивого экономического развития Российской Федерации : Сборник статей XII Международной научно-практической конференции, Пенза, 09–10 декабря 2022 года / Под научной редакцией В.Н. Лазарева, Б.Я. Татарских. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2022. – С. 356-360.
2. Искусственный интеллект и транспорт: новые технологии безопасности и комфорта / А.А. Сергеев, М.С. Кобякова, М.А. Донец, В.М. Коробова // Транспорт. Экономика. Социальная сфера (Актуальные проблемы и их решения) : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 16–17 апреля 2024 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2024. – С. 225-227.
3. Применение микроорганизмов в нанотехнологии / А.А. Сергеев, М.А. Донец, Е.В. Гаркушин [и др.] // Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России : Сборник статей XXI Международной научно-практической конференции, Пенза, 23–24 января 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 239-241.

4. Искусственный интеллект и аналитика данных в онлайн-медиации / А. А. Сергеев, С. О. Гапон, М. А. Донец, В. М. Коробова // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций: Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 10–11 октября 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 387-391.
5. Бокарев, В.П. Роль поверхности в технологии микро- и наноэлектроники / В. П. Бокарев, Г. Я. Красников // Наноиндустрия. – 2021. – Т. 14, № S7(107). – С. 247-249. – DOI 10.22184/1993-8578.2021.14.7s.247.249.

THE SYMBIOSIS OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND MATHEMATICAL MODELING IN THE DESIGN OF MICRO- AND NANOELECTRONIC SYSTEMS

Kolesnikov S.E.[1], Donets M.A.[2]

[1] State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg
[2]Don State Agrarian University, Persianovsky

The symbiosis of artificial intelligence and mathematical modeling in the design of micro- and nanoelectronic systems reveals the potential of combining artificial intelligence and mathematical modeling in the development of micro- and nanoelectronic systems. The advantages of design automation and improving device reliability are considered, as well as the prospects for the development of the industry in the context of digital transformation.

УДК 004.94 25-61

ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Воропаев С.Е.[1], Коробова В.М.[2]

[1]ГУМРФ имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург
[2]Донской государственный аграрный университет, Персиановский

Статья рассматривает применение интеллектуальных технологий и математического моделирования в микро- и наноэлектронике. Описаны методы моделирования и роль искусственного интеллекта в оптимизации проектирования и производства электронных устройств, а также моделирование квантовых эффектов в наноразмерах.

Современная микро- и наноэлектроника активно развивается благодаря достижениям в области информационных технологий, математического моделирования и интеллектуальных систем. Эти технологии открывают новые возможности для проектирования, оптимизации и анализа сложных электронных устройств, а также для разработки новых материалов и технологий производства.

Математическое моделирование является неотъемлемой частью разработки новых микро- и наноэлектронных устройств. Процесс моделирования позволяет создавать виртуальные модели, которые могут предсказать поведение электронных компонентов и систем еще до начала их физического изготовления. Это особенно важно в микро- и наноэлектронике, где точность и миниатюризация играют решающую роль [1].

Математическое моделирование в этом контексте включает в себя различные методы, такие как решение дифференциальных уравнений, методы конечных элементов, а также моделирование процессов на уровне атомов и молекул. С помощью этих методов инженеры и ученые могут предсказать электрические, тепловые, механические и оптические свойства материалов, что позволяет значительно ускорить процесс разработки и минимизировать затраты на экспериментальные исследования.

Интеллектуальные технологии, такие как искусственный интеллект (ИИ), машинное обучение (МО) и обработка больших данных, также играют важную роль в микро- и наноэлектронике. Эти технологии позволяют решать задачи, которые раньше требовали бы значительных временных и вычислительных ресурсов. Например, ИИ и МО могут быть использованы для анализа больших объемов данных, полученных в ходе экспериментов, или для оптимизации параметров проектируемых устройств [2].

Один из ярких примеров применения ИИ в микро- и наноэлектронике – это оптимизация процесса производства полупроводниковых компонентов. Современные методы машинного обучения могут предсказывать

дефекты в производственных процессах, что позволяет оперативно корректировать параметры и снижать количество брака. Также ИИ используется для разработки новых материалов с улучшенными характеристиками, таких как высокоэффективные полупроводники для квантовых вычислений или наноструктуры для сенсоров.

Численные методы играют ключевую роль в моделировании процессов в микро- и наноэлектронике, так как позволяют решать сложные задачи, для которых аналитическое решение невозможно или слишком трудоемко. Одним из таких методов является метод конечных элементов (МКЭ), который широко используется для моделирования электрических, тепловых и механических характеристик микро- и наноэлектронных систем [3].

Например, в разработке микросхем, включая процессоры и другие интегрированные схемы, моделируются электрические поля, токи и распределение тепла в различных компонентах устройства. Математические модели позволяют прогнозировать поведение системы при различных нагрузках и температурных условиях, а также оптимизировать расположение компонентов на чипе для повышения его производительности и долговечности.

Симуляции с использованием численных методов также применяются для разработки новых типов наноматериалов, таких как углеродные нанотрубки, графен или квантовые точки. Эти материалы обладают уникальными свойствами, которые могут быть использованы в различных областях, от энергетики до медицины. Математическое моделирование позволяет исследовать их поведение на атомном уровне и предсказать их эксплуатационные характеристики [4].

С развитием наноэлектроники все большую роль играет моделирование квантовых эффектов, таких как туннелирование, квантовое вмешательство и квантовая интерференция. Эти явления становятся значимыми на наноразмерах, где традиционные методы физики и инженерии уже не могут дать точных прогнозов.

Математическое моделирование квантовых эффектов в наноэлектронных устройствах требует использования квантовой механики и численных методов для решения уравнений Шрёдингера и других связанных уравнений. Это позволяет разрабатывать устройства, такие как квантовые компьютеры и квантовые датчики, которые используют квантовые свойства для выполнения вычислений с высокой скоростью и точностью.

Перспективы применения интеллектуальных технологий и математического моделирования в микро- и наноэлектронике не ограничиваются текущими достижениями. С развитием квантовых технологий, а также с учетом глобальных тенденций к увеличению вычислительных мощностей и сокращению размеров компонентов, роль этих технологий будет только возрастать [5].

Одним из наиболее перспективных направлений является использование искусственного интеллекта для создания адаптивных систем, которые

смогут автоматически оптимизировать свои параметры в реальном времени в зависимости от внешних условий. В микро- и наноэлектронике это может привести к созданию более эффективных и надежных устройств, таких как интеллектуальные сенсоры и устройства с самовосстановлением.

Кроме того, математическое моделирование и ИТ могут быть использованы для разработки новых производственных технологий, которые будут способны на более точном уровне контролировать изготовление наноструктур и материалов, обеспечивая высокий уровень качества и устойчивости к внешним воздействиям.

Применение интеллектуальных технологий и математического моделирования в микро- и наноэлектронике открывает новые горизонты для разработки высокоэффективных, миниатюрных и надежных электронных устройств. Эти технологии позволяют ускорить процесс разработки, снизить затраты на эксперименты и создавать устройства с уникальными характеристиками, которые могут применяться в самых различных областях, от медицины и экологии до информационных технологий и энергетики. В будущем роль математического моделирования и интеллектуальных технологий будет только возрастать, способствуя дальнейшему прогрессу в области микро- и наноэлектроники.

Литература

1. Искусственный интеллект и транспорт: новые технологии безопасности и комфорта / А.А. Сергеев, М.С. Кобякова, М.А. Донец, В.М. Коробова // Транспорт. Экономика. Социальная сфера (Актуальные проблемы и их решения) : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 16–17 апреля 2024 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2024. – С. 225-227.
2. Применение микроорганизмов в нанотехнологии / А.А. Сергеев, М.А. Донец, Е.В. Гаркушин [и др.] // Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России: Сборник статей XXI Международной научно-практической конференции, Пенза, 23–24 января 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 239-241.
3. Искусственный интеллект и аналитика данных в онлайн-медиации / А.А. Сергеев, С.О. Гапон, М.А. Донец, В.М. Коробова // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 10–11 октября 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 387-391.
4. Бокарев, В.П. Роль поверхности в технологии микро- и наноэлектроники / В.П. Бокарев, Г.Я. Красников // Наноиндустрия. – 2021. – Т. 14, № S7(107). – С. 247-249. – DOI 10.22184/1993-8578.2021.14.7s.247.249.

5. Нанофизика и наноэлектроника : Труды XXVI Международного симпозиума, Нижний Новгород, 14–17 марта 2022 года. Том 2. – Нижний Новгород: Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2022. – 1146 с. – ISBN 978-5-91326-720-7.

APPLICATION OF INTELLIGENT TECHNOLOGIES AND MATHEMATICAL MODELING IN MICRO- AND NANOELECTRONICS

Voropaev S.E.[1], Korobova V.M.[2]

[1]State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg
[2]Don State Agrarian University, Persianovsky

The article examines the application of intelligent technologies and mathematical modeling in micro- and nanoelectronics. Modeling methods and the role of artificial intelligence in optimizing the design and manufacture of electronic devices, as well as modeling quantum effects in nanoscale are described.

УДК 004.94 25-62

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНИКИ

Воропаев С.Е.[1], Коробова В.М.[2]

[1]ГУМРФ имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург
[2]Донской государственный аграрный университет, Персиановский

Статья рассматривает роль наноматериалов в микро- и наноэлектронике, их свойства и применение в электронных устройствах. Описаны методы математического моделирования, такие как молекулярная динамика и теория функционала плотности. Рассматриваются перспективы наноматериалов в квантовых вычислениях и энергоэффективных технологиях.

В последние десятилетия наноматериалы стали неотъемлемой частью современного научного и технологического прогресса. Их уникальные физико-химические свойства, которые существенно отличаются от свойств обычных материалов, открывают новые возможности для разработки высокоэффективных электронных устройств. Математическое моделирование играет ключевую роль в исследовании и проектировании наноматериалов, позволяя предсказывать их поведение в различных условиях и ускоряя процесс создания новых устройств.

Наноматериалы обладают множеством уникальных свойств, которые делают их привлекательными для применения в электронике. Например, углеродные нанотрубки и графен имеют исключительные проводящие и механические свойства, которые позволяют создавать более быстрые и эффективные электронные компоненты. Наноматериалы могут использоваться для создания новых типов транзисторов, сенсоров, аккумуляторов и других компонентов, которые необходимы для развития миниатюризации и повышения производительности электроники [1].

Одним из самых перспективных направлений является использование наноматериалов в полупроводниковых устройствах, таких как транзисторы, которые являются основой большинства современных электронных приборов. Например, углеродные нанотрубки могут заменить кремний в транзисторах, что обеспечит повышение их скорости и уменьшение потребления энергии.

Математическое моделирование играет важную роль в исследовании наноматериалов, поскольку позволяет предсказать их поведение до того, как они будут синтезированы и протестированы. Современные методы моделирования включают использование квантовой механики, теории поля и молекулярной динамики, которые помогают исследовать структуры и свойства наноматериалов на атомном уровне.

Одним из ключевых методов является молекулярная динамика (MD), которая позволяет моделировать поведение атомов и молекул в различных

условиях. Это особенно важно для изучения наноматериалов, где на микроскопическом уровне проявляются новые эффекты, такие как квантовые явления и сильные взаимодействия между частицами [2].

Кроме того, методы теории функционала плотности (DFT) применяются для вычисления электронных свойств материалов, таких как проводимость, электроотрицательность и реакционная способность. Эти методы позволяют предсказать, какие материалы будут иметь оптимальные свойства для конкретных электронных приложений.

С помощью численных методов, таких как метод конечных элементов (МКЭ), можно моделировать механические и тепловые свойства наноматериалов, что особенно важно для их использования в устройствах, которые работают при высоких температурах или в условиях интенсивных нагрузок.

Математическое моделирование помогает не только исследовать существующие наноматериалы, но и разрабатывать новые материалы с улучшенными свойствами. Например, с помощью моделирования можно оптимизировать структуру углеродных нанотрубок для повышения их проводимости или механической прочности. Также можно разрабатывать новые материалы на основе графена, который обладает уникальными электрическими и механическими характеристиками [3].

Одной из актуальных задач является моделирование поведения наноматериалов в условиях работы в электронике, где важно учитывать взаимодействие материала с электрическими и магнитными полями, а также его термические и механические свойства. С помощью математических моделей можно предсказать, как изменятся эти характеристики при изменении условий эксплуатации, например, при изменении температуры или давления.

Математическое моделирование также используется для разработки новых типов квантовых точек и наноструктур, которые могут быть использованы в квантовых компьютерах и других устройствах, использующих квантовые эффекты. Например, можно моделировать взаимодействие между квантовыми точками, что позволяет создавать более эффективные устройства для хранения и обработки информации.

Будущее электроники напрямую связано с развитием наноматериалов, поскольку они позволяют создавать устройства, которые превосходят по эффективности и возможностям традиционные компоненты. Одним из главных преимуществ наноматериалов является их высокая миниатюризация, что позволяет создавать более компактные и мощные устройства.

Одним из самых перспективных направлений является развитие квантовых вычислений, где наноматериалы играют ключевую роль. Квантовые компьютеры обещают революционизировать вычислительную технику, обеспечив сверхвысокую скорость обработки данных и возможность решения задач, которые невозможно решить с помощью традиционных компьютеров. Наноматериалы, такие как квантовые точки и нанотрубки, могут быть использованы в качестве основы для создания квантовых битов

(кьюбитов), которые являются основой квантовых вычислений [4].

Кроме того, наноматериалы могут быть использованы в области энергоэффективных технологий, таких как солнечные батареи и аккумуляторы. Например, наноматериалы, такие как наночастицы кремния, могут значительно повысить эффективность солнечных элементов, а углеродные нанотрубки могут быть использованы для создания более долговечных и эффективных аккумуляторов [5].

Наноматериалы открывают новые горизонты для развития электроники, благодаря своим уникальным свойствам и возможностям для миниатюризации. Математическое моделирование играет ключевую роль в исследовании и разработке наноматериалов, позволяя предсказывать их поведение и оптимизировать их свойства для конкретных приложений. Перспективы использования наноматериалов в электронике включают создание более эффективных транзисторов, сенсоров, квантовых вычислительных систем, а также развитие энергоэффективных технологий. Эти достижения обещают существенно изменить не только сферу электроники, но и многие другие отрасли науки и техники в ближайшем будущем.

Литература

1. Применение микроорганизмов в нанотехнологии / А.А. Сергеев, М.А. Донец, Е.В. Гаркушин [и др.] // Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России: Сборник статей XXI Международной научно-практической конференции, Пенза, 23–24 января 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 239-241.
2. Искусственный интеллект и аналитика данных в онлайн-медиации / А.А. Сергеев, С.О. Гапон, М.А. Донец, В.М. Коробова // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 10–11 октября 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 387-391.
3. Бокарев, В.П. Роль поверхности в технологии микро- и наноэлектроники / В.П. Бокарев, Г.Я. Красников // Наноиндустрия. – 2021. – Т. 14, № S7(107). – С. 247-249. – DOI 10.22184/1993-8578.2021.14.7s.247.249.
4. Нанофизика и наноэлектроника: Труды XXVI Международного симпозиума, Нижний Новгород, 14–17 марта 2022 года. Том 2. – Нижний Новгород: Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2022. – 1146 с. – ISBN 978-5-91326-720-7.

5. Использование цифровых технологий в финансовой сфере / Н.А. Бородина, Е.В. Гракушин, А.А. Сергеев, Е.Р. Раилян // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций : сборник статей X Международной научно-практической конференции, Пенза, 20–21 октября 2022 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2022. – С. 35-38.

MATHEMATICAL MODELING OF NANOMATERIALS FOR ELECTRONICS

Voropaev S.E.[1], Korobova V.M.[2]

[1] State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg
[2]Don State Agrarian University, Persianovsky

The article examines the role of nanomaterials in micro- and nanoelectronics, their properties and applications in electronic devices. Mathematical modeling methods such as molecular dynamics and density functional theory are described. The prospects of nanomaterials in quantum computing and energy-efficient technologies are considered.

УДК 004.94 25-63

ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ НАНОЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

Воропаев С.Е.[1], Коробова В.М.[2]

[1]ГУМРФ имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург
[2]Донской государственный аграрный университет, Персиановский

Статья рассматривает влияние квантовых эффектов, таких как туннелирование и квантовая интерференция, на производительность наноэлектронных компонентов и их применение в создании эффективных устройств, включая квантовые транзисторы.

Современная микро- и наноэлектроника претерпевает значительные изменения с развитием технологий на уровне нанометров. По мере уменьшения размеров компонентов электроники, таких как транзисторы, сенсоры и другие элементы, квантовые эффекты становятся все более значимыми и начинают влиять на их поведение.

Квантовые эффекты, такие как квантование энергии, туннелирование и квантовая интерференция, проявляются в том случае, когда размеры материалов уменьшаются до нанометров. На этом масштабе электроны и другие носители заряда начинают вести себя не как частицы, а как волны, что приводит к появлению новых, необычных свойств, которые невозможно объяснить с точки зрения классической физики.

С уменьшением размеров транзисторов и других компонентов на микро- и наноуровне, квантовые явления начинают определять их поведение. Эти эффекты могут как улучшить, так и ухудшить производительность устройства, в зависимости от их характера и степени проявления. Таким образом, понимание квантовых эффектов и их влияние на наноэлектронику является ключом к разработке новых высокоэффективных устройств [1].

Одним из наиболее важных квантовых эффектов, который существенно влияет на производительность наноэлектронных компонентов, является явление туннелирования. В наноразмерных устройствах электроны могут преодолевать потенциальные барьеры, которые по законам классической физики должны бы были быть непреодолимыми. Это явление известно как квантовое туннелирование.

Туннелирование является важным аспектом работы транзисторов, где оно может приводить к нежелательным утечкам тока в выключенном состоянии. В традиционных микроэлектронных компонентах, где размеры элементов значительно больше, туннелирование не имеет большого значения. Однако, с уменьшением размеров транзисторов на наноуровне, туннелирование становится все более выраженным и может привести к снижению производительности и увеличению энергопотребления устройства [2].

Другим важным явлением является квантовая интерференция, кото-

рая может оказывать как положительное, так и отрицательное влияние на работу наноэлектронных компонентов. В некоторых устройствах, например, в квантовых точках или квантовых битах, интерференция может быть использована для создания уникальных эффектов, таких как усиление сигнала или улучшение проводимости.

Однако, квантовая интерференция может также привести к нежелательным результатам, таким как помехи и нестабильность работы устройства. Например, в квантовых точках могут возникать неопределенности в поведении носителей заряда из-за фазовых изменений, что может ухудшить производительность устройства [3].

Когда компоненты становятся настолько маленькими, что начинают вести себя как квантовые системы, возникает эффект квантования энергии. Это означает, что энергия носителей заряда (например, электронов) в таких системах может быть дискретной, а не непрерывной. В результате, в наноразмерах меняется и сопротивление, и проводимость, что, в свою очередь, влияет на работу электронных компонентов.

Квантование энергии может иметь как положительный, так и отрицательный эффект на производительность наноэлектронных устройств. В некоторых случаях этот эффект может быть использован для улучшения характеристик устройства, например, для создания более эффективных полупроводников. В других случаях, из-за дискретных уровней энергии, может возникать повышенная чувствительность устройства к внешним воздействиям, что приводит к его нестабильности.

Одним из наиболее важных применений квантовых эффектов в наноэлектронике является разработка новых типов транзисторов, таких как транзисторы с эффектом туннелирования или квантовые транзисторы. Эти устройства работают на основе квантовых явлений и могут обеспечивать более высокую производительность при меньших размерах, что крайне важно для дальнейшей миниатюризации электроники [4].

Однако, как уже было сказано, квантовые эффекты могут также привести к нежелательным последствиям. Например, туннелирование в транзисторах может привести к утечке тока в выключенном состоянии, что увеличивает энергопотребление устройства. Для решения этой проблемы исследуются новые материалы и архитектуры, которые минимизируют влияние туннелирования и других квантовых эффектов на производительность устройства.

Кроме того, квантовые эффекты могут повлиять на работу других компонентов наноэлектроники, таких как квантовые точки, нанотрубки, графеновые материалы и нанокомпозитные материалы. Эти компоненты могут иметь уникальные свойства, такие как высокая проводимость или магнитная активность, которые можно использовать для создания новых типов сенсоров, аккумуляторов и других устройств.

Перспективы использования квантовых эффектов в наноэлектронике открывают новые горизонты для разработки более мощных и эффективных

устройств. Например, квантовые транзисторы и квантовые битовые устройства могут быть использованы для создания квантовых компьютеров, которые обещают революцию в вычислительной технике.

Однако для успешного внедрения квантовых эффектов в повседневные устройства необходимо преодолеть множество технических и теоретических проблем, таких как стабильность и надежность квантовых систем, их чувствительность к внешним воздействиям и энергетические потери, связанные с туннелированием [5].

Кроме того, для применения квантовых эффектов в электронике требуется разработка новых материалов, которые будут эффективно работать на наномасштабах, минимизируя побочные эффекты. Ведутся активные исследования в области наноматериалов, таких как углеродные нанотрубки, графен и другие двумерные материалы, которые могут стать основой для следующего поколения электронных компонентов.

Квантовые эффекты, такие как туннелирование, квантовая интерференция и квантование энергии, имеют существенное влияние на производительность наноэлектронных компонентов. Хотя эти эффекты открывают новые возможности для создания более эффективных и мощных устройств, они также могут привести к нежелательным последствиям, таким как утечка тока и нестабильность работы. Понимание этих эффектов и разработка новых материалов и технологий для минимизации их негативных проявлений являются ключевыми задачами для дальнейшего развития наноэлектроники и создания более совершенных электронных устройств.

Литература

1. Искусственный интеллект и аналитика данных в онлайн-медиации / А.А. Сергеев, С.О. Гапон, М.А. Донец, В.М. Коробова // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций : Сборник статей XI Международной научно-практической конференции, Пенза, 10–11 октября 2023 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2023. – С. 387-391.
2. Бокарев, В.П. Роль поверхности в технологии микро- и наноэлектроники / В.П. Бокарев, Г.Я. Красников // Наноиндустрия. – 2021. – Т. 14, № S7(107). – С. 247-249. – DOI 10.22184/1993-8578.2021.14.7s.247.249.
3. Нанофизика и наноэлектроника: Труды XXVI Международного симпозиума, Нижний Новгород, 14–17 марта 2022 года. Том 2. – Нижний Новгород: Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2022. – 1146 с. – ISBN 978-5-91326-720-7.

4. Использование цифровых технологий в финансовой сфере / Н.А. Бородина, Е.В. Гракушин, А.А. Сергеев, Е.Р. Раилян // Стратегическое развитие инновационного потенциала отраслей, комплексов и организаций: сборник статей X Международной научно-практической конференции, Пенза, 20–21 октября 2022 года. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет, 2022. – С. 35-38.
5. Современный подход к изучению облачных технологий необходимых для развития цифровой экономики / Н.А. Бородина, Е.В. Гаркушин, А.А. Сергеев, Е.Р. Раилян // Наука, образование и бизнес: новый взгляд или стратегия интеграционного взаимодействия : Сборник научных трудов по материалам II Международной научно-практической конференции, посвященной памяти первого Президента Кабардино-Балкарской Республики Валерия Мухамедовича Кокова, Нальчик, 20–22 октября 2022 года. Том Часть 1. – Нальчик: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет имени В.М. Кокова", 2022. – С. 29-32.

THE EFFECT OF QUANTUM EFFECTS ON THE PERFORMANCE OF NANOELECTRONIC COMPONENTS

Voropaev S.E.[1], *Korobova V.M.*[2]

[1] State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg
[2]Don State Agrarian University, Persianovsky

The article examines the impact of quantum effects such as tunneling and quantum interference on the performance of nanoelectronic components and their use in creating efficient devices, including quantum transistors.

УДК 616.12; 004.9 25-73

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭКГ-ЭЛЕКТРОДОВ ИЗ РАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ВЫСОКОМОБИЛЬНЫХ РЕГИСТРАТОРОВ ЭКГ

Кабардова Д.М.[1], Коков А.А.[1], Коков З.А.[1], Молоканов О.А.[1], Дышеков А.Х.[2]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2] РОО «Федерация конного спорта КБР», Нальчик

Проведен сравнительный анализ ЭКГ-электродов из разных материалов для использования в высокомобильных регистраторах ЭКГ с целью выявления особенностей в регистрации ЭКГ-сигнала. Результаты исследований позволят выбрать оптимальный материал для высокомобильных регистраторов ЭКГ.

Ключевые слова: *амплитуда, регистратор ЭКГ, ЭКГ-сигнал, ЭКГ-электрод*

Введение

Электрокардиография (ЭКГ) является одним из наиболее распространенных и важных методов диагностики состояния сердечно-сосудистой системы организма. Качество регистрации ЭКГ во многом зависит от используемых электродов, которые могут быть изготовлены из различных контактных материалов. Объектом нашего исследования являются ЭКГ-электроды, изготовленные из различных материалов, таких как металлические, углеродные и полимерные соединения. Предметом исследования является сравнительный анализ характеристик и эффективности электродов из различных материалов в контексте их применения в высокомобильных регистраторах ЭКГ.

Актуальность темы исследования обусловлена растущей потребностью в высококачественном съеме ЭКГ-сигнал с помощью высокомобильных устройств для целей спорта, фитнеса и самостоятельных наблюдений за состоянием здоровья [1, 2]. Кроме этого, до настоящего времени остаются высокоактуальными вопросы материалов и конструкции контактных электродов для регистрации ЭКГ-сигналов у животных в ветеринарии и в конном спорте [3–5].

Цель исследования. В работе ставилась задача проведения сравнительного анализа ЭКГ-электродов из разных контактных материалов, применяемых в высокомобильных регистраторах ЭКГ, для определения влияния материала на качество регистрации электрокардиосигнала.

Методика исследования

Для исследования эффективности регистрации ЭКГ нами были выбраны 10 образцов электродов (рис. 1), различающихся материалами и

конструкцией: 1) стандартная клипса для запястья и лодыжки с латунным контактом (позиция 1 по рисунку); 2) классический хлорсеребряный электрод – так называемый золотой стандарт для записи ЭКГ, электроэнцефалографии и электромиографии (позиция 2); 3) стандартный гелевый электрод из проводящей резины для акупунктуры (позиция 3); 4) трикотажная манжета с вплетенными нитями из нержавеющей стали 304 для стимуляции мышц в фитнесе (позиция 4); 5) электропроводящая резина для высокомобильных регистраторов ЭКГ (позиция 5); 6) трикотаж из углеродного волокна (позиция 6); 7) плетенный браслет из стали 304 (позиция 7); 8) пластинчатый электрод из стали 304; 9) стандартный гелевый электрод для электромассажа; 10) проволочно-спиральный браслет из стали 304.

Рис. 1. Общий вид некоторых исследованных электродов

Для регистрации ЭКГ-сигнала во всех случаях электроды накладывались для измерения первого отведения по Эйнтховену [6]. На рис. 2 показаны примеры наложения электродов во время измерения.

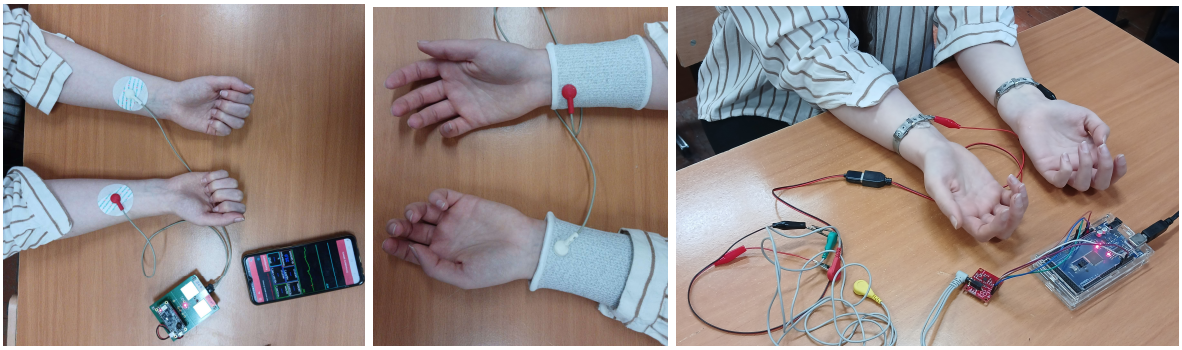


Рис. 2. Примеры наложения электродов (слева направо) № 2, 4 и 7 во время экспериментов

В качестве регистраторов ЭКГ нами были использованы: программно-аппаратный комплекс MAX86150EVSYS# [7, 8], мобильный регистратор AD8232 на программно-аппаратной платформе Arduino [9] и измерительный модуль «Регистрация электрокардиограмм», из состава учебного

комплекса «Система биомедицинских измерений KL-720» [10]. Использованные нами регистраторы показаны на рис. 3.

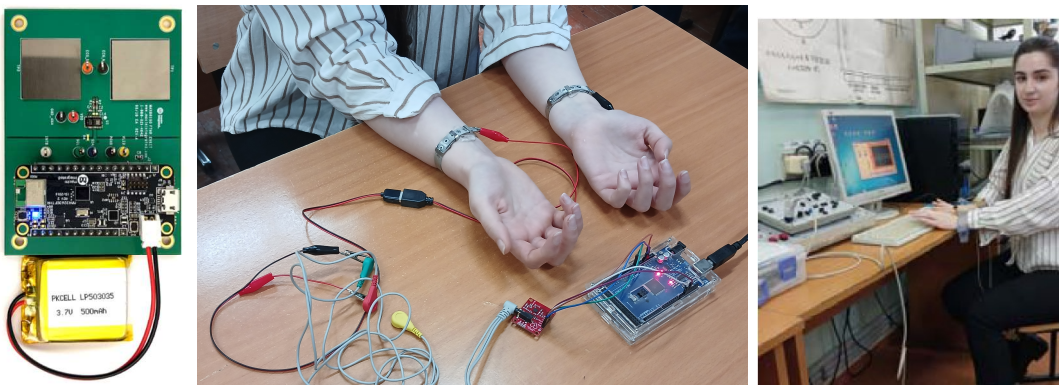


Рис. 3. Регистраторы ЭКГ (слева направо): MAX86150EVSYS#, AD8232, учебный комплекс «Система биомедицинских измерений KL-720»

Для сопоставления ЭКГ-сигналов в зависимости от материалов и конструкции электродов записывались короткие длительностью в 1 мин. одноканальные ЭКГ-сигналы, соответствующие первому отведению по Эйнтховену. Сетевая помеха с частотой 50 Гц подавлялась встроенными фильтрами.

Обработка полученных ЭКГ-сигналов проводилась в среде MatLab с помощью разработанного нами оригинального программного пакета.

Результаты исследования

Каждый цикл сердечной деятельности является индивидуальным как по его длительности (так называемый RR-интервал, отчитываемый как интервал времени между двумя последовательными R-зубцами), так и по амплитуде отдельных компонентов цикла. Поскольку частота пульса человека около 60 уд./мин., средний RR-интервал составляет около 1 секунды. Для выявления влияния материал электрода на форму сигнала необходимо выполнить нормализацию сигналов по времени и по амплитуде.

На первом шаге выполнялась нормировка циклов по времени. Для этого внутри каждого цикла сердечной деятельности проводится линейное перемасшабирование временной шкалы до значения, равного 1 секунде. На рис. 4 показан типичный вид ЭКГ-записи, нормализованной по длительности цикла.

Сердечные циклы, кроме длительности, в пределах одной и той же ЭКГ-записи различаются амплитудами и длительностями отдельных элементов – так называемых зубцов (P-, Q-, R-, S-, T-, U-зубцы). Вследствие этого после нормализации по длительности цикла всё еще невозможно выявить зависимость характеристик ЭКГ-сигнала от вида материала.

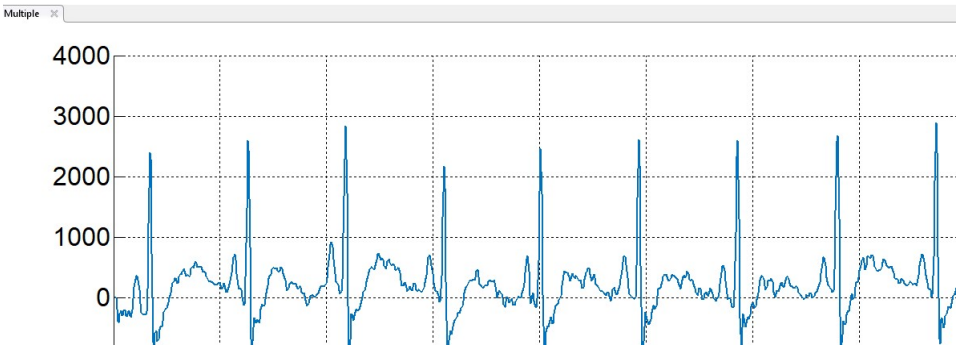


Рис. 4. Типичный вид ЭКГ-записи, нормализованной по длительности цикла (по абсциссе – перенормированное время в секундах, по ординате – отсчеты АЦП)

На втором шаге для каждого вида электродов было выполнено амплитудное усреднение по всем циклам записи:

$$y_i^*\left(t^*\right)=\frac{\sum_{i=1}^{N} y_i\left(t^*\right)}{N}$$

где символ * относится к перенормированным значениям, y_i – амплитуда сигнала в j-ой точке i-го цикла, N – число циклов записи и i – текущий номер цикла. Проведя такое усреднение для каждого j от 1 до M (M – число точек внутри цикла) получим некий усредненный по амплитудам цикл. Выровненные по R-зубцу усредненные нормированные ЭКГ-циклы для исследованных в работе 10 видов электродов показаны на рис. 5.

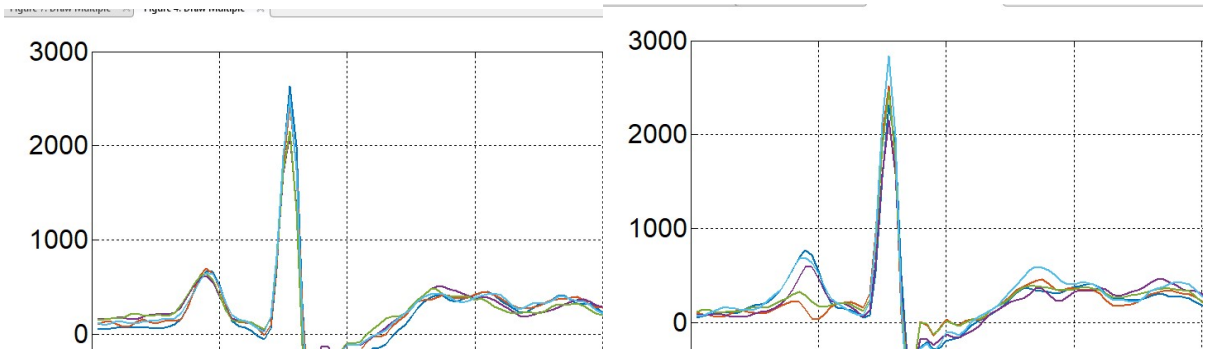


Рис. 5. Выровненные по R-зубцу усредненные нормированные ЭКГ-циклы для исследованных в работе 10 видов электродов (расшифровка выше в тексте,по абсциссе – перенормированное время в секундах, по ординате – отсчеты АЦП)

Как видно по рисунку образцы 1–6, 8 и 10 имеют практически совпадающий вид усредненного цикла ЭКГ. А образцы 7 (плетеный браслет из стали 304) и 9 (стандартный гелевый электрод для электромассажа) показывают явно уменьшенную амплитуду зубца Р. Для этих двух образцов в области зубца Р кривая имеет вид дифференциала (производной) от стан-

дартного зубца Р. Кроме этого, для образца 10 (проволочно-спиральный браслет из стали 304) амплитуда зубца Т заметно превышает соответствующие амплитуды всех остальных образцов. Отмеченные особенности образцов 7, 9 и 10 отличают их, в частности, от образца 2, то есть от стандартного хлорсеребряного электрода, принятого в кардиологии за «золотой стандарт). Причины этих аномальных контактных взаимодействий электрод–кожа выходят за рамки настоящего исследования.

Таким образом, можно сделать вывод, что с высокомобильными регистраторами ЭКГ в качестве контактных электродов могут быть использованы все исследованные образцы. При этом образцы 1, 3–6 и 8 мало отличаются друг от друга и от стандартного хлор-серебряного электрода (образец 2).

Литература

1. Краснов Л.А., Олейник В. П. Мониторирование и анализ ритма сердца. Технические средства электронной и компьютерной диагностики в медицине. – Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т им. Н.Е. Жуковского «Харьк. авиац. ин-т», 2014. – 84 с.
2. Хаудов А.Б.Д., Жанимова Д.А., Кишева Д.Б., Коков З.А., Синютин С.А. Апробация мобильного электрокардиографа "ЭК-02" // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых Перспектива-2016. С. 185-193.
3. Агафонова М.Е. Метод контроля функциональной подготовленности сердечно-сосудистой системы спортивной лошади / Здоровье для всех: материалы II-й Международной научно-практической конференции, УО “Полесский государственный университет”, г. Пинск, 20-22 мая 2010 г.: в 2 ч. Ч. 2. – Пинск: ПолесГУ, 2010. - С. 61-68.
4. Синютин С.А., Коков З.А., Кармов М.А. Адаптивное подавление артефактов движения при записи ЭКГ лошади. Инженерный вестник Дона. 2013. № 3 (26). С. 81.
5. Шпаковская О.Ю., Синютин С.А., Синютин Е.С., Леонова А.В., Коков З.А. Мониторинг осанки всадника во время движения на лошади // Фундаментальная наука для практической медицины. Аддитивные технологии, современные материалы и физические методы в медицине: инновации: тезисы III Международной научно-практической конференции; Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова. – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2023. с. 78.
6. Ремизов А.Н. Медицинская и биологическая физика. М: ГЭОТАР-Медиа, 2013. – 648 с.
7. MAX86150. Datasheet. https://datasheets.maximintegrated.com/en/ds/MAX86150.pdf.

8. Гуденко Ю.А., Гутов А.З., Курданов Х.А., Лосанов Х.Х., Молоканов О.А. Android-совместимое устройство и программное обеспечение для контроля и мониторинга электрокардиограммы и фотоплетизмограммы и расчета на их основе артериального давления крови / Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы XIII Международной научно-технической конференции – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т., 2023. С. 297–301.
9. AD8232: Single-Lead, Heart Rate Monitor Front End. Datasheet https://arduino-ic.ru/search/img/aleksnet_document/pdf_13001.pdf.
10. Система биомедицинских измерений. Руководство по проведению экспе-риментов с KL-720. Компания «K&H MFG CO., LTD». https://ru.kandh.com.tw/kl-720-biomedical-measurement-training-system-kl-720.html

COMPARATIVE ANALYSIS OF ECG-ELECTRODES FROM DIFFERENT MATERIALS FOR HIGH-MOBILE ECG REGISTRARS

Kabardova D.M.[1], Kokov A.A.[1], Kokov Z.A.[1], Molokanov O.A.[1], Dyshekov A.Kh.[2]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]Regional public organization «Equestrian Federation of the KBR», Nalchik

A comparative analysis of ECG-electrodes from different mats for use in high-mobile registrars of the ECG in order to identify features in the registration of the ECG-signal. The results of the study of the perpetuity will allow you to choose the optimal material for high-mobile ECG registrars.

Keywords: *amplitude, ECG registrar, ECG-signal, ECG Electrode*

УДК 531.43 25-81

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЗОНДОВ АСМ В ИЗМЕРЕНИЯХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИЛ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА

Канаметов А.А., Кажарова К.З., Бузуркиева М.М., Барагунова Э.А., Ховхаев И.Л.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В приближении аддитивности получены выражения для динамического взаимодействия нанозондов атомно-силового микроскопа различной геометрии с плоской поверхностью в случае, когда движение нанозонда происходит перпендикулярно к образцу. Путем численных расчетов показано, что модель идеального конуса не может считаться надежной при интерпретации результатов измерений в сеансах силовой микроскопии и спектроскопии.

Анализ литературы показывает, что динамическое взаимодействие нанозондов с образцами в подавляющем большинстве случаев, рассматривается с учетом динамических поправок по скорости относительного движения взаимодействующих тел преимущественно в случае параллельного движения зонда относительно поверхности. В то же время, например, в наиболее универсальном режиме работы АСМ – полуконтактной методике сканирования поверхности - сочетаются, как латеральные движения нанозонда относительно поверхности, так и нормальные к ней. В этой связи, представляется актуальной задача моделирования динамического ВДВ взаимодействия нанозондов разной геометрии с плоской поверхностью образца в случае, когда зонд движется перпендикулярно к ней.

Первые теоретические модели для сил ВДВ были получены для простейших геометрий взаимодействующих тел: сфера-сфера, сфера-плоскость, плоскость-плоскость и т.д. [1]. Теоретические модели для зондов более сложной формы в пренебрежении запаздывания в аддитивном приближении были получены авторами [2,3].

В настоящей работе основной упор будет сделан на рассмотрении неконсервативных вкладов в выражения для сил ВДВ, в линейном приближении по скорости. Расчеты динамических сил ВДВ для зондов в форме параболоида вращения, идеального конуса и КС проведем, основываясь на результатах, полученных в работе [4]. В качестве исходного возьмем общее выражение для динамической силы ВДВ, действующей на малую сферическую частицу, движущуюся перпендикулярно к поверхности в пренебрежении квадратичного вклада по скорости:

$$F = \frac{3\hbar V}{2\pi z^5}\int_0^\infty\left(\alpha''(\omega)\frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{k_bT_1}\right)+\Delta''(\omega)\frac{d\alpha''(\omega)}{d\omega}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{k_bT_2}\right)\right)d\omega, \qquad (1)$$

где z - расстояние между малой сферической наночастицей и образцом, V - скорость частицы при приближении к поверхности, $\Delta(\omega) = \frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+1}$ - функция диэлектрического отклика поверхности, ε(ω) –диэлектрическая проницаемость материала пластины, α(ω) -дипольная электрическая поляризуемость частицы (в (1) двумя штрихами обозначены мнимые части соответствующих функций, одним - действительные), $T_{1,2}$ - температуры частицы и поверхности, $\hbar$ и k_B - постоянные Планка и Больцмана.

Принимая допущения о малости скорости зонда, проведем расчеты для проводящей толстой пластины. При равенстве температур зонда и образца, приходим к формуле (2) для сил ВДВ трения (ВДВТ), действующих на малую частицу:

$$F_f = -\frac{3}{4\pi}\frac{\hbar V}{z^5}\frac{\hbar}{k_B T}\int_0^\infty d\omega r^3 \frac{a\omega^2}{6(\omega^2+b)(\omega^2+c)}\sinh^{-2}\left(\hbar\omega/2k_B T\right), \qquad (2)$$

где введены обозначения: $a = 16\pi^2\sigma^2$, $b = 4\pi^2\sigma^2$, $c = \frac{16}{9}\pi^2\sigma^2$.

В качестве модели диэлектрической проницаемости материала пластины ε(ω) выбрано низкочастотное приближение:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i\frac{4\pi\sigma}{\omega}, \qquad (3)$$

где σ - статическая проводимость металла. Для поляризуемости малой сферической частицы выбрана модель:

$$\alpha(\omega) = r^3\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+2}, \qquad (4)$$

где r - радиус частицы.

Далее, принимая объем наночастицы в качестве бесконечно малого объема вещества зонда, делая замену $r^3 \to \frac{3}{4\pi}dV$ в выражениях (2), (3) и (4) и, проводя интегрирование по объему зонда, получим выражения для зондов разной геометрии. Геометрия аксиально-симметричного зонда и алгоритм интегрирования сил ВДВ по его объему приводились в работах [5, 6].

После интегрирования по объему зонда, выражение (2) преобразуются к следующему виду:

$$F_{fx} = -\frac{3}{8\pi}\frac{\hbar^2 V}{k_B T} I_f(a,b,c) G_{fx}(z), \qquad (5)$$

где функция $I_f(a,b,c)$ определяется следующим образом:

$$I_f(a,b,c) = \int_0^\infty d\omega \frac{a\omega^2}{6(\omega^2+b)(\omega^2+c)}\sinh^{-2}\left(\hbar\omega/2k_B T\right). \qquad (6)$$

Функция $G_{fx}(z)$ представляет собой множитель, зависящий только от геометрии зонда.

Расчеты проведем для золота, имеющего важное практическое значение для приложений в технике, и, в частности, в электронике. Принимая для золота $\sigma=1{,}85\cdot10^{17}$ с$^{-1}$ в выражении (3), при T=300 К и V=1 м/с, получим численное значение для частотного интеграла (6): $I_f(a,b,c)=1{,}001\cdot10^{6}$ с$^{-1}$. Радиусы закругления и высоты параболического зонда и зонда в форме КС примем одинаковыми и равными соответственно: R=50 нм и H=10 мкм. При этом, для зонда идеальной конической формы (без сферической оконечности), параметры R_c и H_c определяются из условия равенства его объема объему зонда в форме КС.

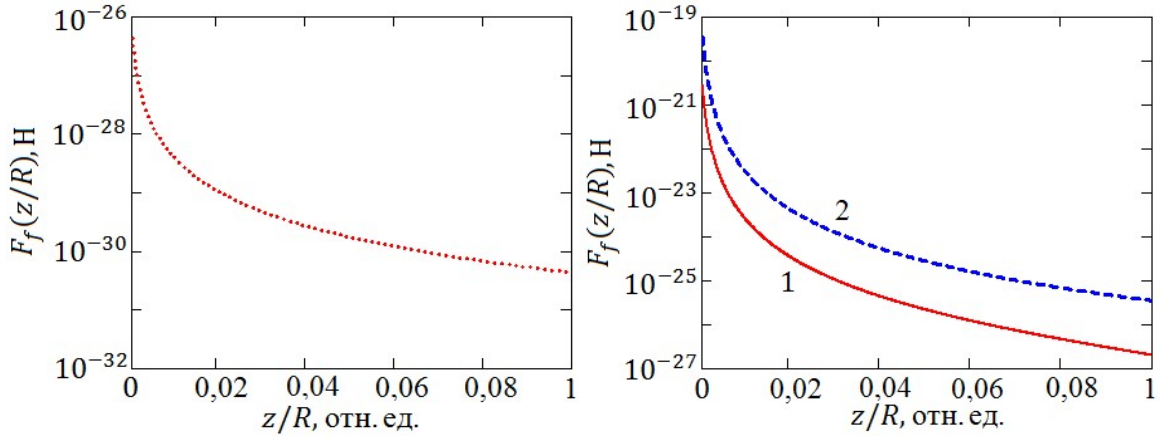


Рис. 1. Абсолютные значения силы ВДВТ в зависимости от относительного расстояния z/R между зондом, покрытым пленкой из золота, и поверхностью золота: а) – результаты, полученные для зонда в форме КС (1) и параболического зонда (2), б) – результаты, полученные для зонда в форме идеального конуса. Скорость приближения зонда к образцу $V=1$м/с. R – радиус закругления зонда

Результаты расчета для зондов разной геометрии приведены в виде универсальных зависимостей абсолютных значений сил трения от относительного расстояния, нормированного на радиус закругления зонда. Как видно из рисунков 1а и 1б абсолютные значения сил ВДВТ как минимум на 9 порядков величины меньше сил статического притяжения, полученных из измерений в [7]. Отметим, что такие значения сил находятся на пределе измерительных возможностей АСМ. Зонды, имеющие близкую геометрию (параболоид и КС) дают абсолютные значения сил трения, различающиеся примерно на порядок, причем параболический зонд дает боле высокие значения.

Конический зонд (рис. 1б) дает значения меньшие на 6 порядков величины, и учитывая тот факт, что силы ВДВТ и так малы по сравнению с типичными значениями сил, измеряемыми в сеансах спектроскопии и микроскопии на базе АСМ, следует сделать вывод о значительных ошибках, к которым могут привести попытки интерпретации слабых сил ВДВТ с ис-

пользованием модели зонда в форме заостренного конуса. Это вполне было ожидаемо, поскольку реальная форма апекса зонда в подавляющем большинстве случаев далека от формы идеального конуса.

Заключение

При условии совпадения геометрической модели зонда с его реальной формой, наиболее приемлемой при измерении слабых сил ВДВТ является модель зонда в форме параболоида в силу ее относительной простоты. Модель заостренного конуса дает сильно заниженные значения сил во всех случаях, в результате ее значительного отличия от реальной формы зонда.

Литература

1. Butt H., Cappella B., Kappl M. // Surf. Science Rep. 2005. Vol. 59. P. 1-152.
2. Guggisberg M., Bammerlin M., Loppacher Ch., et. al. // Phys. Rev. 2000. Vol. B61. № 16. P. 11151-11158.
3. Argento C. and French R.H. // Appl. Phys. 1996. Vol. 80. № 11. P. 6081-6090.
4. Дедков Г.В., Кясов А.А. // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. № 13. С. 65-70.
5. Dedkov G.V., Kanametov A.A. // Tech. Phys. 2018. Vol. 63. № 11. P. 1553-1559.
6. Канаметов А.А., Дедков Г.В. // Прикладная физика. 2018. № 1. С. 5-10.
7. Dedkov G.V., Kanametov A.A., Dedkov E.G. // Tech. Phys. 2009. Vol. 54. № 12. P. 1801-1907.

AFM PROBE GEOMETRY MODELS IN THE MEASUREMENTS OF VAN DER WAALS FORCES

Kanametov A.A.

Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
kanametov_a@mail.ru

Expressions for the dynamical Van der Waals forces for the different geometries of a neutral nanoprobes moving perpendicular to a flat surface are obtained in according to additivity approximation. The results of numerical calculations shows that in the case of using an a sharp cone as a model of the tip the comparison of theoretical calculation with the experimental atomic force micro- and spectroscopy data can not give a reliable results.

УДК 621.317 25-85

ВЫСОКОМОБИЛЬНЫЙ ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС РЕГИСТРАЦИИ НА СМАРТФОНЕ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЧЕЛОВЕКА

Молоканов О.А.[1,2], Гуденко Ю.А.[2], Гутов А.З.[2], Курданов Х.А.[2], Лосанов Х.Х.[1,2], Курданова М.Х.[1,2]

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
[2]Центр медико-экологических исследований ГНЦ РФ ИМБП РАН, Нальчик

Реализована возможность создания высокомобильного программно-аппаратного комплекса для контроля и мониторинга набора физиологических параметров состояния человека с сохранением всей измерительной информации на смартфоне и с расчетом, в частности, оценки параметров артериального давления крови.

К настоящему времени известны разнообразные миниатюрные нательные устройства для регистрации физиологических сигналов человека. Наибольший интерес представляют, вероятно, сигналы электрокардиографии (ЭКГ) и фотоплетизмографии (ФПГ). Интерес именно к этим сигналам обусловлен, среди прочего, возможностью безоклюзионной оценки артериального давления крови (АД). Последнее возможно благодаря хорошо установленной корреляционной связи времени распространения пульсовой волны (ВРПВ) с параметрами АД [1–4]. Оценка АД по ЭКГ/ФПГ потенциально позволяет получать значения АД в каждом цикле сердечной деятельности, что абсолютно невозможно при классическом измерении АД с помощью оклюзионной манжеты.

Однако, до настоящего отсутствуют доступные высокомобильные комплексы, которые позволяя ли бы: регистрировать как короткие (около 1 минуты), так длительные (мониторирование до трех суток) записи наьора физиологических сигналов; сохранять первичную измерительную информацию на смартфоне; в режиме реального времени отображать в удобочитаемом для пользователя формате рассчитанные значения физиологических параметров; передавать первичные данные на облачный сервер для детального анализа и формирования отчета с отправкой его пользователю.

Решению обозначенных вопросов и посвящена настоящая работа, которяя явилась продолжением и развитием предыдущих работ [5–8] по созданию беспроводных мобильных программно-аппаратных-комплексов для оценки параметров физиологического состояния организма человека.

В аппаратной составляющей комплекс содержит: 1) сенсорную часть из комбинированного сенсора сигналов ФПГ и ЭКГ и термосенсора (может, также, дополняться акселерометром); 2) контроллерную часть из собственно микроконтроллера, Bluetooth-радиомодуля и контроллера питания; 3) Li-Po-аккумулятор. Для записи ЭКГ предусмотрены как встроенные в

корпус модуля электроды, так и микроразъем для подключения кабеля пациента и стандартных Ag-AgCl-электродов.

В программной части комплекс содержит: 1) программу для микроконтроллера (прошивка); 2) приложение для Android-смартфона; 3) облачный сервер.

Программа для микроконтроллера обеспечивает аналого-цифровое преобразование основных анализируемых сигналов: одного канала ЭКГ (в развитии – трех), двух каналов ФПГ и дополнительного сигнала температуры, а также формирование пкетов данных и передачу их по Bluetooth-интерфейсу.

Приложение для Android-смартфона обеспечивает: развитый интерфейс пользователя; ведение профилей нескольких пользователей; прием от измерительного модуля измерительной инфрмации по Bluetooth-интерфейсу; расчет всех необходимых параметров, в частности, сатурацию кислорода SpO_2 и оценку значений АД; отображение актуальных значений всех параметров; сохранение в памяти смартфона как первичных измерительных сигналов, так и расчитаных параметров; работу с архивом данных; а также необходимую связь с облачным сервером.

Облачный сервер не является необходимым для функционирования данного программно-аппаратного комплекса, но расширяет его функциональные возможности, в частности, позволяет средствами внешнего софта проводить автоматический анализ холтеровских ЭКГ.

Таким образом показана возможность создания высокомобильного программно-аппаратного комплекс для длительной регистрации на смартфоне физиологических параметров человека с расчетом на основе первичной измерительной информации, в частности, сатурации кислорода SpO_2 и оценочных значений АД.

Литература

1. Шульгин В. И., Джадуей Али, Шульга Д. И., Наседкин К. В., Федотенко В. В. Измерение артериального давления на основе совместной обработки набора физиологических показателей // Клин. информат. и телемед. 2012. Т. 8. Вып. 9. с. 38–44.
2. Анисимов А.А., Сергеев Т.В. Алгоритм оценки артериального давления по времени распространения пульсовой волны // Биотехносфера, 2015. № 4 (60). С. 57-61.
3. Анисимов А.А. Дисс….. на соиск. учен. ст. канд. техн. наук. Санкт-Петербург, 2017, – 1532 с.
4. Elgendi M., Fletcher R., Liang Y. et al. The use of photoplethysmography for assessing hypertension. npj Digit. Med. 2, 60 (2019). https://doi.org/10.1038/s41746-019-0136-7.
5. Гуденко Ю.А., Гутов А.З., Курданов Х.А., Молоканов О.А. Устройство регистрации ЭКГ по Bluetooth-каналу / Микро- и нанотехнологии в

электронике. Материалы VI Международной научно-технической конференции – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т., 2014. С. 505–506.
6. Акользин Д.Н., Гуденко Ю.А. Курданов Х.А., Молоканов Г.О., Молоканов О.А. Система мониторирования ЭКГ. Разработка Android-приложения и сопряжение с датчиком / Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы VII Международной научно-технической конференции – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т., 2015. С. 381–386.
7. Гуденко Ю.А., Гутов А.З., Курданов Х.А., Лосанов Х.Х., Молоканов О.А. Устройство мониторирования электрокардиограммы и параметров артериального давления на основе мобильных технологий / Микро- и нанотехнологии в электронике. Материалы X Международной научно-технической конференции — Нальчик: Каб.-Балк. ун-т., 2018. С. 439–442.
8. Гуденко Ю.А., Гутов А.З., Коков А.Л., Курданов Х.А., Лосанов Х.Х., Молоканов О.А. Устройство и программное обеспечение для пульсоксиметрии на основе мобильных технологий / Микро- и нанотехнологии в электронике: Материалы XII Международной научно-технической конференции. – Нальчик: Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова. – 2021. – С. 474-478.

HIGHLY MOBILE SOFTWARE AND HARDWARE COMPLEX FOR REGISTRATION OF HUMAN PHYSIOLOGICAL PARAMETERS ON A SMARTPHONE

Molokanov O.A.[1,2], Gudenko Yu.A.[2], Gutov A.Z.[2], Kurdanov Kh.A.[2], Losanov Kh.Kh.[1,2], Kurdanova M.Kh.[1,2]

[1]Kabardino-Balkarian State University, Nalchik
[2]Center for Medical and Environmental Research SSC RF IMBP RAS, Nalchik

The possibility of creating a highly mobile software and hardware complex for controlling and monitoring a set of physiological parameters of a person's condition while storing all measurement information on a smartphone and calculating, in particular, the assessment of blood pressure parameters has been realized.

УКАЗАТЕЛИ

Авторский указатель

A

Abdullayev N.A. 32, 36
Abdullayev Yu.A. 36

B

Badalova Z.I. 36

H

Hidiyev Kh.A. 32, 36

M

Mamedova I.A. 32

Q

Qasimoglu I.Q. 32

R

Ragimov S.S. 32, 36

А

Агоев А.З. 160
Азизов И.К. 125, 130
Алекперов А.И. 54
Алиева А.И. 110
Ализаде Р.А. 113
Анофриев В.А. 48
Антонов А.С. 48
Апрелева А.С. 296
Арсентьев А.В. 291
Арсланов Т.Р. 100
Арчегова О.Р. 79
Аскеров Р.О. 209
Асланов М.А. 215
Ахкубекова С.Н. 265
Ахундова Э.А. 95

Б

Бакиров Р.М. 286
Барагунова Э.А. 352
Баринов А.Д. 220
Басов М.В. 173
Белых М.А. 27
Березов А.В. 209
Бобылев А.Н. 74
Бодин А.Ю. 301, 306
Бодин О.Н. 306
Бойко А.Н. 265
Бондаренко В.Б. 85
Будник В.С. 118
Бузовкин С.С. 122
Бузуркиева М.М. 352
Буй К.Д. 244
Бусыгин А.Н. 316

В

Ванеева Д.Д. 44
Васильев С.А. 48
Вахрушев С.Б. 11
Вересов С.А. 51
Винокуров А.А. 291
Волхонский В.В. 281, 286
Воропаев С.Е. 334, 338, 342
Воропай Е.С. 225, 230, 234

Г

Габдулин Б.Н. 316
Гавриков М.В. 203
Гаджием Г.М. 249
Гаев Д.С. 265
Гатиев Р.У. 144
Глуховской Е.Г. 203
Гончаров И.Н. 79, 209
Горбакова Х.К. 149
Горячев А.В. 239
Гуденко Ю.А. 356
Гукетлов А.М. 122, 244
Гутов А.З. 356

Д

Дедков Г.В. 155
Джалалов Б.К. 54
Дзестелова А.А. 215
Донец М.А. 322, 326, 330
Дышеков А.Х. 346

Е

Едельбекова П.А. 239
Еремина А.Ф. 79
Ермалицкая К.Ф. 225, 230, 234

Ермоленко Д.Н. 125, 130
Ж
Жовнерик Н.В. 22
Жуков Н.Д. 68, 203, 311
З
Зажогин А.П. 225, 230, 234
Захрабекова З.М. 54
Здравомыслов Д.М. 65, 199
Зезин Д.А. 220
Зейналов Р.З. 249
И
Ибрагимов И.Н. 95
Искендерова П.М. 110
Исламзаде Е.М. 54
К
Кабардова Д.М. 346
Кабисов Г.С. 209
Кажарова К.З. 352
Калаев А.Н. 209
Калиберда И.В. 281, 286
Канаметов А.А. 352
Карданов А.Н. 215
Карданова Р.А. 260
Кармоков А.М. 160, 270, 275
Кармокова Р.Ю. 160
Касеинов Р. 74
Касумов Ю.Н. 79
Кашежев А.З. 125, 130
Кирнев В. 74
Кодзасова Т.Л. 215
Козырев Е.Н. 160, 209
Коков А.А. 346
Коков З.А. 346
Кокоева А.А. 125, 130
Колесников С.Е. 322, 326, 330
Колосов А.Ю. 51
Кондратьев В.М. 122
Конев М.Д. 27
Коробова В.М. 334, 338, 342
Корсак К.В. 169
Котов В.А. 220
Кошелева Н.Н. 27
Крамм М.Н. 306
Крамынин С.П. 134
Красноперов Н.Н. 225, 230, 234
Крюков Р.С. 122
Кузьмин Н.Б. 48
Кульбачинский В.А. 296
Кунашев З.А. 155
Курбанов А.З. 100
Курданов Х.А. 356
Курданова М.Х. 356
Кушхов Х.Б. 260
Кытин В.Г. 296
Кязимова В.К. 54
Л
Лабунов В.А. 118
Лиу Женгбиао 22
Лойко В.А. 16
Лойко Н.А. 16
Лосанов Х.Х. 270, 275, 356
М
Магомедов М.Н. 90
Макарук К.С. 239
Маскаева Л.Н. 239
Матиев А.Х. 139, 144, 149
Мирошников Б.Н. 239
Мирошникова И.Н. 60, 239
Мискевич А.А. 16
Можаров А.М. 169
Молоканов О.А. 160, 270, 275, 346, 356
Мошников В.А. 122, 244
Мустафаев А.Г. 195
Мустафаев Г.А. 40, 179, 184, 190, 195
Мустафаев М.Г. 40, 44, 179, 184, 190
Мустафаева Д.Г. 40, 179, 184, 190
Муха Е.В. 169
Мухин И.С. 169
Н
Налимова С.С. 122, 244
Непша Н.И. 51
П
Плотникова Е.Ю. 291

Попов А.И. 60, 239
Пухаева Н.Е. 79
Пшуков А.М. 125, 130
Р
Рагимов С.С. 110
Рамазанов Ш.М. 249
Рембеза Е.С. 27
Рехвиашвили С.Ш. 265
Рыбина А.А. 122
С
Савина К.Г. 51
Самсонов В.М. 51
Сарач О.Б. 220
Свистова Т.В. 27
Сдобняков Н.Ю. 48, 51
Сергеев И.Н. 270, 275
Серов С.В. 51
Смирнов А.Г. 22, 169
Соколов Д.Н. 51
Степанов А.А. 22, 169
Сун Хиао Вей 22
Сучков Д.С. 311
Сучков С.Г. 311
Сысоев С.С. 173
Т
Тагиев В.С. 95
Танрывердиев В.А. 95
Тибилов В.В. 79
Тимошенков С.П. 265
Тлехугов А.М. 209
Тотиев С.Т. 215
Тотикова Д.З. 209
Троян Е.Ф. 22
Тучковский А.К. 118
У
Удовиченко С.Ю. 74, 316
Успажиев Р.Т. 139, 144, 149
Ф
Федоров В.В. 169
Филимонов А.В. 11, 85
Х
Ханукаева Е.И. 125, 130
Хасанов А.И. 160, 270, 275
Ховхаев И.Л. 352
Ч
Черкесова Н.В. 254
Чулухадзе Г.Р. 79
Чурилов Д.В. 27
Ш
Шогенова М.М. 125, 130
Шомахов З.В. 122, 244, 270, 275
Шрамов И.И. 169
Шулаев Н.А. 74
Э
Эсмурзиева А.А. 139
Я
Яхьяев М.Г. 105

Указатель организаций

SUSTech 22
АУ 122
БГУ 32, 36, 110, 225, 230, 234
БГУИР 22, 118, 169
ВГТУ 27, 291
ВГУ 27
ВНИИА 173
ГГНТУ 139, 144, 149
ГУМРФ 322, 326, 330, 334, 338, 342
ДГАУ 322, 326, 330, 334, 338, 342
ДГУНХ 195
ИИПРУ ФНЦ КБНЦ РАН 122, 244
ИнгГУ 139, 144, 149
ИНМ РАН 239
ИПГ ОИВТ РАН 90
ИТМО 281, 286
ИФ ДФИЦ РАН 100, 105, 134, 249
ИФ МНОА 54, 95, 110, 113
ИФ НАН Беларуси 16
ИФ НАНА 32, 36

КБГУ 65, 122, 125, 130, 155, 160, 195, 199, 244, 254, 260, 265, 270, 275, 346, 352, 356
ЛЭТИ 122, 244
МГУ 296
МИЭТ 265
МФТИ 122
МЭИ 60, 220, 239, 301, 306
НПП Волга 68
ОИЯИ 79
ПГТУ 306
СГУ 203, 311
СКГМИ 40, 44, 79, 160, 179, 184, 190, 209, 215, 270, 275
СКФУ 281, 286
СОГУ 79, 209
СПбАУ 169
СПбПУ 11, 85, 169
ТвГУ 48, 51
ТюмГУ 74, 316
УИ ГПС МЧС 239
УрФУ 239
ФКС КБР 346
ФНЦ КБНЦ РАН 265
ФТИ Иоффе 11, 85
ЦМЭИ ИМБП РАН 356
ЧГУ 160, 270, 275

Указатель городов

Баку 32, 36, 54, 95, 110, 113
Владикавказ 40, 44, 79, 159, 179, 184, 190, 209, 215, 270, 275
Воронеж 27, 291
Грозный 139, 144, 149, 159, 270, 275
Дубна 79
Екатеринбург 239
Магас 139, 144, 149
Махачкала 90, 100, 105, 134, 195, 249
Минск 16, 22, 118, 169, 225, 230, 234
Москва 60, 122, 173, 220, 239, 265, 296, 301, 306
Нальчик65, 122, 125, 130, 155, 159, 195, 199, 244, 254, 260, 265, 270, 275, 346, 352, 356
Пенза 306
Персиановский 322, 326, 330, 334, 338, 342
Пятигорск 281, 286
Санкт-Петербург 11, 85, 122, 169, 244, 281, 286, 322, 326, 330, 334, 338, 342
Саратов 68, 203, 311
Тверь 48, 51
Тюмень 74, 316
Шеньчжень 22

Научное издание

Микро- и нанотехнологии в электронике

Материалы XV Международной научно-технической конференции

Нальчик: Каб.-Балк. ун т., 2025. − 361 с.

ISBN

В печать 01.08.2025. Формат 60x84 1/16.

[Электронное издание].