

Известия высших учебных заведений

ЭЛЕКТРОНИКА 3'2008



Научно-технический журнал

Издается с 1996 г.

Выходит 6 раз в год

СОДЕРЖАНИЕ

Фундаментальные исследования

Морозова Н.К., Мидерос Д.А. Связанный экситон на SA и SAL центрах ZnS(O) и ZnSe(O) 3

Материалы электронной техники

Грибов Б.Г., Зиновьев К.В. Новые технологии получения поликристаллического кремния для солнечной энергетики 10

Вигдорovich Е.Н. Термодинамические аспекты формирования квантоворазмерных гетероструктур на основе GaN 18

Неустроев С.А. Модель структуры вюрцитных и кубических нитридов металлов IIIa группы 26

Микроэлектронные приборы и системы

Бобрешов А.М., Хребтов И.В., Ряполов М.П. Влияние конструктивных параметров субмикронных НЕМТ-транзисторов на верхнюю границу динамического диапазона линейности усилителей 32

Хайновский В.И., Игнатьева Е.А., Уздовский В.В. Анализ процессов фоторелаксации и фотоэлектрических характеристик трехдиодной вертикально интегрированной спектрально-селективной фотоячейки 38

Нисков В.Я., Золотарев С.Н., Гашков А.Н. Исследование влияния конструктивно-технологических факторов на проводимость и пробивное напряжение латеральных ДМОП-транзисторов средствами численного моделирования 45

Учредители:

Министерство
образования и науки
Российской Федерации

Московский
государственный институт
электронной техники
(технический университет)

Главный редактор
В.Д.Вернер

Редакционная коллегия:

Бархоткин В.А.
Быков Д.В.
Грибов Б.Г.
Казённов Г.Г.
Коноплёв Б.Г.
Конаев Ю.В.
Коркишко Ю.Н.
Королёв М.А.
Кубарев Ю.В.
Неволин В.К.
Неволин В.Н.
Петросяниц К.О.
Руденко А.А.
Тацров Ю.М.
Телец В.А.
Тихонов А.Н.
Усанов Д.А.
Чаплыгин Ю.А. (зам. главного редактора)

Адрес редакции: 124498,
Москва, Зеленоград,
проезд 4806, д. 5, МИЭТ
Тел. (495) 534-6205
Факс (495) 530-5429
E-mail: magazine@rnd.miet.ru
<http://www.miet.ru>

Кацов Л.В., Кацов В.В., Ильичев Э.А. Оптимизация структуры детекторов на основе арсенида галлия с учетом рекомбинационных потерь..... 52

Алексеев Ю.И., Демьяненко А.В. Определение влияния оптического сигнала на импедансные свойства лавинно-пролетного диода..... 58

Нанотехнологии

Царик К.А., Лосев В.В., Баращ С.В. Формирование нанометровых слоев фокусированным ионным пучком..... 63

Информационные технологии

Лукин С.А., Шерина Е.В., Пономарева Н.Ю. Формализация процессов интеграции информационных систем на основе теории множеств 68

Автушенко К.И. Алгоритм обнаружения сердечного ритма плода в доплеровском сигнале..... 77

Слюсарь В.В., Баин А.М., Со Тант Методика автоматизированного анализа документированной информации в системах поддержки принятия решений 81

Методы и техника измерений

Максимов С.К. Особенности, методика и преимущества интегрального метода исследования текстур наноразмерных кристаллитов в электронной микроскопии. I. Физические основы метода..... 85

Конференции

Российско-Баварская конференция по биомедицинской технике (RBC-2008) 2 стр. обложки

IV Международная научно-техническая конференция «Информационные технологии в науке, технике и образовании»..... 3 стр. обложки

Contents 95

Abstracts 96

К сведению авторов 99

Заведующая редакцией
С.Г.Зверева

Редактор
А.В.Тихонова

Научный редактор
С.Г.Зверева

Художественный редактор
А.В.Тихонова

Корректор
Л.Ф.Летунова

Технический редактор
Л.Г.Лосякова

Компьютерный дизайн, верстка
Е.А.Каменская
А.А.Григорашвили
С.Ю.Рыжков

Подписано в печать 5.06.08.
Формат бумаги 60x84 1/8.
Печать офсетная.
Объем 11,63 усл.печ.л.,
11,4 уч.-изд.л.
Заказ № 60.

Отпечатано
в типографии ИПК МИЭТ
124498, Москва, Зеленоград,
проезд 4806, д. 5, МИЭТ

Свидетельство о регистрации
№ 014134
выдано Комитетом РФ по печати
12.10.95.

Включен в Перечень периодических научных изданий, рекомендуемых для публикации научных работ, отражающих основное научное содержание докторских диссертаций:
Бюллетень ВАК Министерства образования РФ, 2002, № 1.

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

УДК 535.3; 537.533.31; 539.219.1

Связанный экситон на SA и SAL центрах ZnS(O) и ZnSe(O)

Н.К.Морозова, Д.А.Мидерос

Московский энергетический институт
(технический университет)

Исследована превалирующая в спектрах люминесценции при 300 К и высокой плотности возбуждения экситонная полоса кристаллов ZnS(O) и ZnSe(O) с целью подтверждения ее природы. Установлено существование связанных экситонов на кислородных комплексах SA и SAL. Уточнены энергии связи полос связанного экситона и специфика поведения их в зависимости от интенсивности возбуждения, температуры, глубины информационного слоя в кристаллах разного структурного совершенства.

Введение изоэлектронных примесей в кристаллы III–V и II–VI привело к созданию новых материалов – highly mismatched alloys (HMAs) [1, 2], свойства которых в настоящее время интенсивно изучаются. Это относится и к кислороду в соединениях $A^{II}B^{VI}$, который инициирует изменение зонной структуры с позиций теории «непересекающихся зон» (BAC) [1–5]. Многие особенности спектров излучения этих соединений, в которых кислород присутствует как фоновая примесь в концентрации более 10^{18} см^{-3} , получают объяснение. В работах [3–5] отмечались факты возникновения в области спектра связанного экситона образцов ZnS(O), ZnSe(O) с самоактивированным свечением новых полос люминесценции, усиливающихся при введении кислорода. В кристаллах, имеющих огромное количество «самоактивированных» кислородных комплексов SA(I) или Cu(I), SAL(II), можно ожидать возникновение связанного экситона BE на акцепторных уровнях, обусловленных этими дефектами. До настоящего времени факты образования связанного экситона на этих центрах в литературе отсутствуют или затронуты весьма фрагментарно [4]. В данной работе предполагается дать их более полное описание.

Анализ собственных точечных дефектов в ZnS и ZnSe, проведенный в [6], показал, что в пределах всей области гомогенности соединений возможны только два типа комплексов – центров рекомбинации, которые и определяют два вида самоактивированного свечения: SA(I) и SAL(II). В присутствии фоновой примеси Cu комплексы могут включать медь. В таблице систематизировано положение акцепторных уровней E_A кислородных комплексов в ZnS(O) и ZnSe(O), уточненное в [4, 5] по сравнению с [7]. Таблица составлена на основании изучения конкретных групп кристаллов с конкретной концентрацией растворенного в узлах решетки кислорода $[O_S]$. Разные концентрации $[O_S]$ отражают связь SA и SAL свечения, как и растворимости кислорода, с отклонением от стехиометрии [7]. Ширина запрещенной зоны E_g взята по положению полосы свободного экситона FE при 80 К. Для ZnS $E_g = 3,833 \text{ эВ}$ при энергии связи свободного

Рекомбинационные уровни E_A центров самоактивированного излучения

Центры	SA(I) $\{Zn_i^{\bullet} \cdot V_{Zn}^{//}\}^{\cdot} \cdot O_{S(Se)}^{\times}$ Избыток цинка	Cu(I) $3d^{10}$ $\{Cu_i^{\bullet} \cdot V_{Zn}^{//}\}^{\cdot} \cdot O_{S(Se)}^{\times}$ Избыток цинка	SAL(II) $\{Zn_i^{\bullet\bullet} \cdot V_{Zn}^{//}\}^{\times} \cdot O_{S(Se)}^{\times}$ Стехиометрия	Cu(II) $3d^9$ $\{Cu_i^{\bullet\bullet} \cdot V_{Zn}^{//}\}^{\times} \cdot O_{S(Se)}^{\times}$ Стехиометрия
Соединение	ZnS(ZnSe)	ZnS(ZnSe)	ZnS(ZnSe)	ZnS(ZnSe)
$[O_S]$, мол. %	1 мол. %		0,1 (0,2) мол. %	0,1 (0,2) мол. %
E_A , эВ	0,55 (0,51)	0,61 (0,54)	0,22(0,15)	0,32 (0,20)

экситона 40 мэВ, для ZnSe – 2,814 эВ и 20 мэВ соответственно. В тексте спектральное положение полос связанного экситона ВЕ сопоставляется с табличными значениями E_A на основании соотношения Холстеда $E_A = 10 \varepsilon$ (где ε – энергия связи экситона).

Связанный экситон на SA и SAL центрах в ZnS(O). В работе [3] при исследовании катодоллюминесценции (КЛ) порошков ZnS, наряду с усиливающейся и испытывающей низкоэнергетический сдвиг при увеличении концентрации растворенного кислорода $[O_S]$ полосой свободного экситона $FE_{ZnS(O)}$ твердого раствора ZnS(O), наблюдалась вторая экситонная полоса, смещенная в длинноволновую сторону примерно на 60 мэВ. Спектральное положение этой полосы по отношению к FE, появление ее в КЛ кристаллов с избытком Zn, когда превалирует свечение на кислородных комплексах типа SA, усиление и смещение полосы с увеличением $[O_S]$, температурная зависимость полосы, аналогичная свободному экситону ZnS(O), – все это позволяет заключить, что наблюдался экситон, связанный на центрах самоактивированного свечения. Большая энергия связи позволяет наблюдать эти полосы связанного экситона

при комнатной температуре.

Для уточнения данных проведено исследование газостатированного CVD-ZnS с избытком цинка (чистого по посторонним примесям и с небольшим содержанием Cu). Газостатированию подвергались конденсаты CVD-ZnS и ZnSe при $T = 1050 \text{ }^\circ\text{C}$ и давлении 1500 атм в течение 20 ч для улучшения их прозрачности и структуры [5]. Поскольку полосы связанного экситона мало интенсивны при низком уровне возбуждения КЛ ($10^{22} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$), исследованы спектры импульсной катодоллюминесценции (ИКЛ) при высоких интенсивностях возбуждения до $10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$. Образцы возбуждались электронным пучком с максимальной энергией ~ 400 кэВ, когда глубина проникновения электронного пучка больше (~ 200 мкм) и доступна информация из объема зерна [3].

Спектр ИКЛ чистого по меди газостатированного образца CVD-ZnS(O) при 300 К показан на рис.1 (кривая 1). Во всей видимой области спектра присутствует

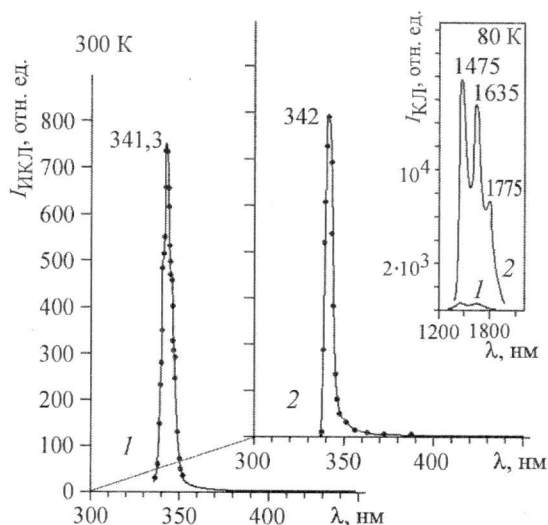


Рис.1. Спектры ИКЛ при уровне возбуждения $10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ газостатированных образцов: чистого по меди ZnS(O) (кривая 1) и ZnS-Cu(O) (кривая 2); концентрация кислорода $[O]_{\text{общ}} \sim (1-3) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. На вставке для тех же образцов приведен участок ИК-спектра, характеризующий КЛ иона меди $Cu 3d^9$

единственная полоса с максимумом 341,3 нм и энергией связи ~ 55 мэВ. В [3] представлены детали такого спектра и показано, что полоса имеет полуширину ~ 60 мэВ и ряд фоновых повторов как с коротковолновой, так и с длинноволновой стороны от максимума. По значению 14,4 мэВ они близки поперечному акустическому ТА-фонону сфалерита. Энергия связи полосы соотносится с глубиной акцепторного уровня SA(I) центров (см. таблицу), поэтому полоса может быть идентифицирована как экситон BE_{SA} , связанный на SA(I) центрах.

Спектр ИКЛ газостатированного образца CVD-ZnS(O) при 300 К, содержащего медь в большом количестве ($\sim 10^{17}$ см $^{-3}$), при той же концентрации кислорода $\sim 10^{19}$ см $^{-3}$ представлен на рис.1 (кривая 2). Присутствие Cu подтверждают спектры КЛ иона Cu $3d^9$ (см. вставку на рис.1). Спектральное положение экситонной полосы такого образца соответствует 342 нм при 300 К, что определяет энергию связи $BE \sim 61$ мэВ. Это согласуется с данными таблицы и определяет центр как Cu(I). Для комплексов Cu(I) полоса $BE_{Cu(I)}$ несколько сдвинута в длинноволновую сторону по сравнению с $BE_{SA(I)}$, так как акцепторные уровни комплексов различаются. Полуширина полосы $BE_{Cu(I)}$ также ~ 60 мэВ.

Аналогичные полосы BE наблюдали без идентификации их природы и ранее в спектрах катодоллюминесценции CdS при высоких уровнях возбуждения в РЭМ [8].

Очевидно, что полосы, представленные на рис.1, не являются FE. Действительно, содержание кислорода в этих кристаллах по данным анализа порядка 10^{19} см $^{-3}$, а для свободного экситона ZnS(O) длинноволновый сдвиг на 60 мэВ возможен только при концентрации кислорода ~ 1 мол. % ($2 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$).

При этом интенсивность полосы BE_{SA} матрицы исследованных кристаллов (см. рис.1) очень высока, тогда как области, сильно легированные кислородом, дают слабый по интенсивности свободный экситон [3, 8]. С экспериментом совпадает расчетное положение полосы BE_{SA} в диапазоне температур от 10 до 300 К, представленное в [5] и соответствующее температурной зависимости ширины запрещенной зоны ZnS.

Отметим, что при малой глубине информационного слоя $\sim 0,3$ мкм BE_{SA} чаще всего отсутствует и вместо него наблюдается полоса FE_{ZnS} более КВ. При глубине информационного слоя 1–2 мкм в РЭМ или ~ 200 мкм в ИКЛ [3] и больших интенсивностях возбуждения полоса BE_{SA} является единственной преобладающей в экситонной области, а для газостатированных образцов – для всей видимой области спектра (см. рис.1).

Экситон, связанный на SAL центрах в ZnS(O), типичен для кристаллов с преобладающим SAL свечением [7]. Так, при изучении в РЭМ спектров микрокатодоллюминесценции (МКЛ), эмитированной микроучастками гидротермальных кристаллов ZnS(O), выявляются новые детали в экситонной области. В частности, наблюдается разрешение экситонной полосы излучения на составляющие: 327 и 329 нм (рис.2).

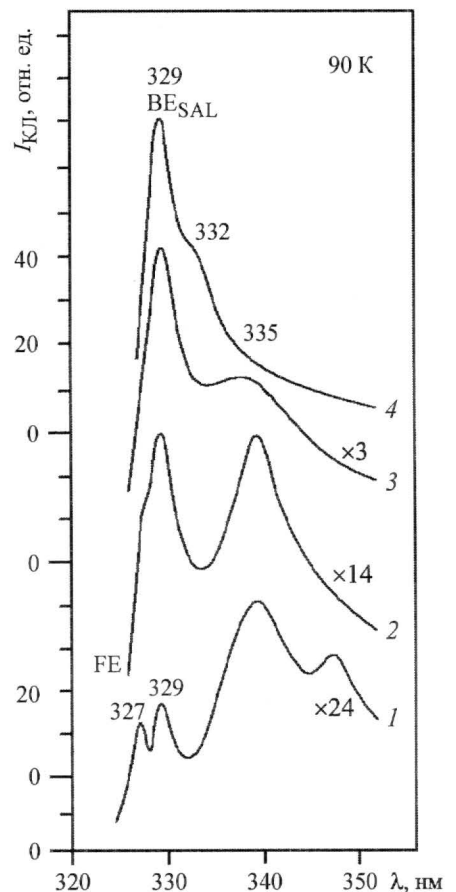


Рис.2. Спектры МКЛ ZnS(O) с SAL центрами при возбуждении от уровня $\sim 10^{24}$ до 10^{26} см $^{-3} \cdot c^{-1}$ (кривые 1–4)

Полоса 329 нм не соответствует какому-либо фоновому повтору $FE_{ZnS(O)}$, но усиливается и доминирует в спектрах ИКЛ участков с SAL свечением и повышенной концентрацией кислорода. Энергетический зазор между полосами для разных образцов находится в пределах 16–25 мэВ. Согласно таблице это близко энергии связи на SAL центрах ~ 22 мэВ, т.е. наблюдаемая полоса 329 нм (см. рис.2) может быть сопоставлена связанному экситону BE_{SAL} .

Увеличение интенсивности возбуждения приводит к усилению полосы катодоллюминесценции BE_{SAL} ZnS(O). При этом с интенсивностью возбуждения вначале выходит на насыщение SAL свечение, затем загасает FE, тогда как полоса BE_{SAL} растет по интенсивности (линейно со слабо выраженной сублинейностью), и при уровне возбуждения $10^{24} - 10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ BE_{SAL} превалирует в спектре. Для кристаллов ZnS(O) с SAL свечением это справедливо до температуры ≤ 200 К, выше которой оно переходит в SA [4–6].

Связанный экситон на SA и SAL центрах ZnSe(O). Возникновение экситона, связанного на SA центрах в ZnSe, изучено на конденсатах CVD- ZnSe(O). Снимались спектры ИКЛ при высоких интенсивностях импульсного возбуждения до $10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ и глубине проникновения электронного пучка, которая позволяла получать информацию из объема.

На рис.3 представлена в динамике зависимость спектров ИКЛ ZnSe(O) от интенсивности возбуждения. При уровне возбуждения $10^{22} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ в спектре ИКЛ негазостатированного образца (кривая 1) экситонные полосы отсутствуют. Неоднородность негазостатированных образцов подтверждается смещением максимума SA полосы в спектрах при изменении $I_{\text{возб}}$ (кривые 1–3). С ростом плотности возбуждения возникает,

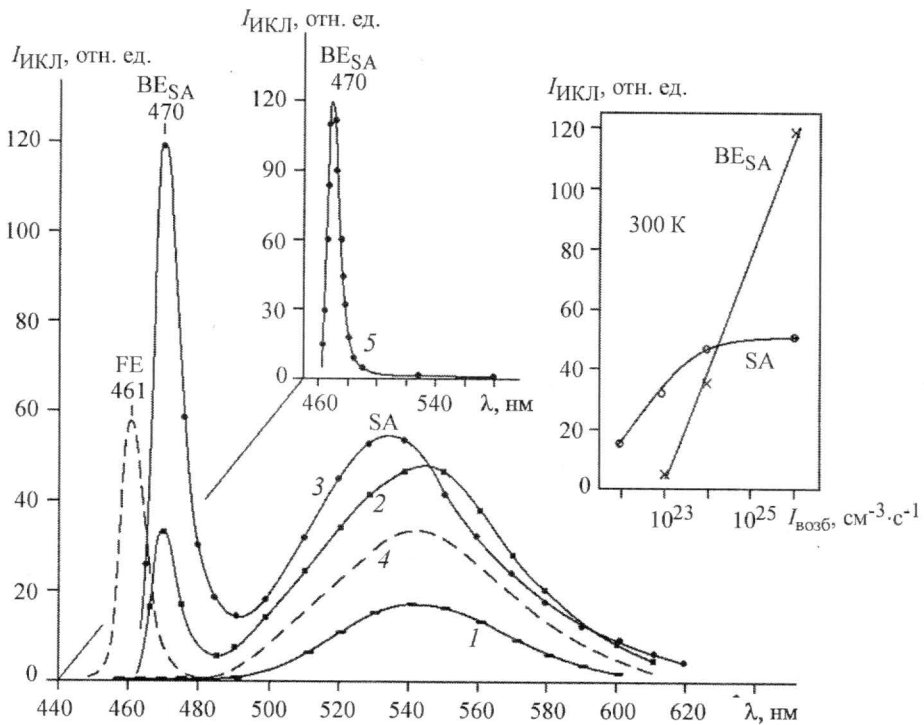


Рис.3. Спектры катодоллюминесценции CVD-ZnSe(O) при $T = 300$ К: ИКЛ негазостатированного образца при глубине информационного слоя ~ 200 мкм и интенсивности возбуждения $I_{\text{возб}} \sim 10^{22}, 10^{25}, 10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ (кривые 1–3); КЛ при глубине информационного слоя $\sim 0,3$ мкм и $I_{\text{возб}} \sim 10^{22} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ (кривая 4); газостатированного образца CVD-ZnSe(O) при $I_{\text{возб}} \sim 10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ (кривая 5). На вставке показано изменение интенсивности основной полосы BE_{SA} от $I_{\text{возб}}$ в сравнении с SA свечением

усиливается и при $I_{\text{возб}} = 10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ доминирует в ИКЛ полоса 470 нм. Спектральное положение ее определяет энергию связи 51 мэВ, что соответствует связанному экситону на SA центрах ZnSe(O) (см. таблицу).

Как и в случае ZnS(O), съемка КЛ в широком пучке при глубине информационного слоя $\sim 0,3$ мкм обнаруживает полосу $\text{FE}_{\text{ZnSe(O)}}$ свободного экситона 461 нм (см. рис.3, кривая 4). Эти факты свидетельствуют, что спектры ИКЛ, несущие информацию из глубины кристалла, выявляют центры самоактивированной SA люминесценции, которые устойчивы в объеме, где выполняется условие взаимной компенсации деформаций, вносимых дефектами, а вблизи поверхности нарушаются.

Обращает на себя внимание факт, что для газостатированных образцов ZnSe(O) в спектрах ИКЛ при $I_{\text{возб}} > 10^{25} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ связанный экситон является единственной полосой (наиболее быстрый канал рекомбинации), а более длинноволновое SA свечение отсутствует (см. рис.3, кривая 5). По данным РЭМ излучение BE_{SA} связано с очищенным при газостатировании в результате коалесценции основным объемом кристалла [4–5].

На вставке рис.3 показано изменение интенсивности полосы 470 нм по сравнению с SA свечением от $I_{\text{возб}}$. Согласно этим данным рост BE_{SA} линейен, как и в случае BE_{SA} ZnS(O). Самоактивированное SA свечение при больших $I_{\text{возб}}$ выходит на насыщение. Таким образом, и для ZnSe(O) при высоких плотностях возбуждения превалирующим в спектре ИКЛ становится свечение BE_{SA} .

Проведенные исследования показали, что полоса BE_{SA} ZnSe(O) или ZnS(O) при увеличении интенсивности возбуждения ($10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$) не только усиливается, но и сужается. Подобные изменения характерны для генерации. Учитывая выявленные особенности в формировании полосы BE_{SA} ZnS(O) (участие поперечных акустических ТА-фононов, а по литературным данным механизмы, ответственные за большинство лазерных переходов, включают связанные экситоны с участием акустических фононов), можно предполагать, что связанный на кислородных центрах экситон BE_{SA} будет определять свечение таких кристаллов при лазерном эффекте. Это соответствует данным [9], согласно которым стимулированное излучение ZnS(O) спектрально соответствует BE_{SA} , но не свободному экситону.

Экситон, связанный на SAL центрах ZnSe(O), исследован для большого разнообразия кристаллов ZnSe с преобладающим SAL свечением [4, 7, 10]. В спектрах их обычно резко усиливаются линии связанного экситона I_1^d . Известно, что полосы I_1^d присущи кристаллам ZnSe с отклонениями от стехиометрии, причем интенсивность их возрастает при избытке Se ($T \leq 150 \text{ K}$), т.е. в тех же условиях, что и SAL свечение ZnSe [7]. Обычно обсуждение природы полосы I_1^d ограничивается предположением о связи ее с вакансиями цинка, которые, возникают, как и SAL свечение, при избытке Se. Иногда полосы I_1^d связывают с присутствием акцепторной фоновой примеси меди [10].

На рис.4,а приведены результаты исследований при 90 К полос связанных экситонов I_1^d на кристаллах CVD-ZnSe(O), в фотолюминесценции которых преобладало SAL свечение 490 нм [4, 7]. Возбуждение фотолюминесценции (ФЛ) осуществлялось азотным лазером (337,1 нм) в импульсном режиме. Содержание меди в кристаллах на фоновом уровне $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$, поэтому свечение Cu(II) 480–510 нм слабое. Спектры исследованы при высоких уровнях фотовозбуждения. Как видно из рис.4,а, наблюдается полоса $\text{FE}_{\text{ZnSe(O)}}$ 449 нм, которая при увеличении уровня возбуждения отстает от BE 451,5 нм. Энергия связи полосы 451,5 нм составляет ~ 15 мэВ. Этот факт, как и перечисленные выше, позволяет отнести полосу 451,5 нм к $\text{BE}_{\text{SAL(II)}}$ (см. таблицу).

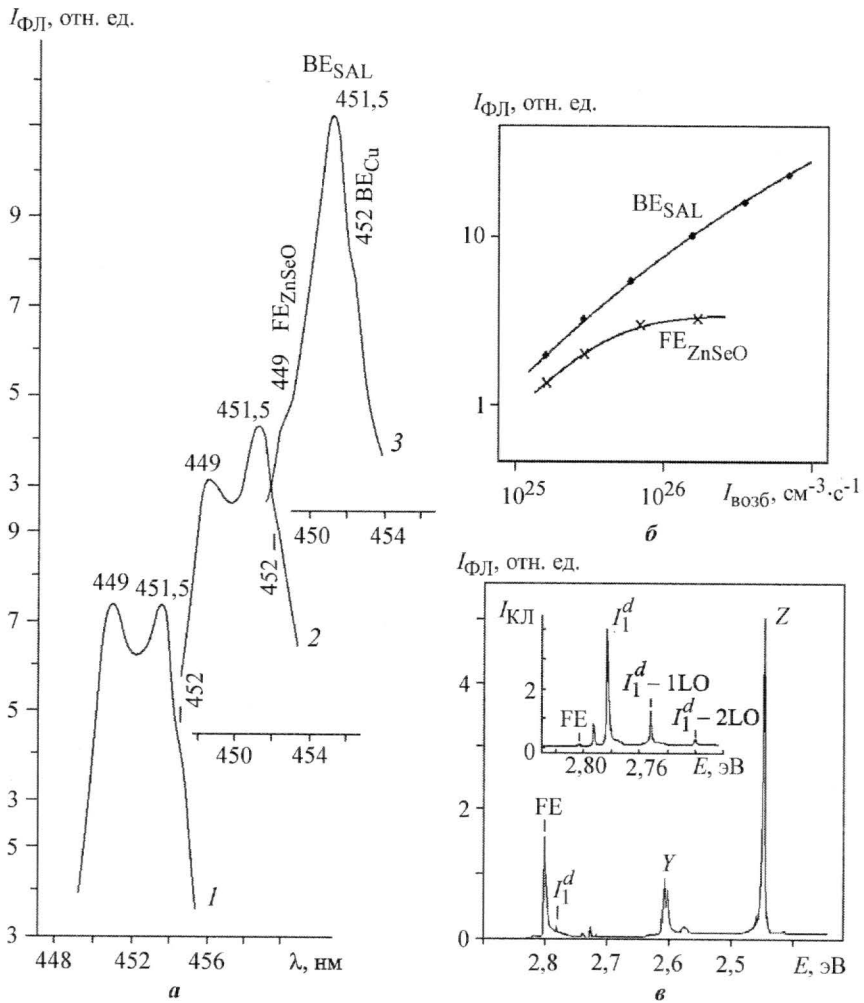


Рис.4. Зависимость интенсивности экситонных полос ФЛ ZnSe-Cu(O) с $[O_{\text{Se}}] \approx 0,3$ мол. % при 90 К от уровня возбуждения: 1 – 10^{25} ; 2 – $4 \cdot 10^{25}$; 3 – 10^{26} см⁻³·с⁻¹ (а), изменение с $I_{\text{возб}}$ см⁻³·с⁻¹ полосы BE_{SAL} по сравнению с FE (б), спектр ФЛ высокосовершенного ZnSe при 9 К [10]; положения полос: FE – 2,803; I_1^d или BE_{CuII} – 2,773; Y или Cu_{II}(H) – 2,606; Z или Cu_{II}(L) – 2,444 эВ (в)

С увеличением интенсивности возбуждения полоса BE 451,5 нм возрастает по интенсивности почти линейно, в то время как для FE зависимость сублинейная (рис.4,б).

Полосы BE_{Cu(II)} на длинноволновом спаде полосы 451,5 нм (~ 453 нм) слабо выделяются и не разрешаются. Исследование их проведено на сколах, где содержание меди больше. Энергия связи для BE_{Cu(II)} согласно результатам ~ 22 мэВ. Однако, учитывая данные [10], приведенные на рис.4,в, для ZnSe, выращенного методом кристаллизации из твердой фазы, следует принять эту энергию связи равной 20 мэВ. Авторы [10] допускали присутствие Cu в кристаллах и связь линии I_1^d с этой примесью, что подтверждается наличием в их спектрах ФЛ в области SAL свечения полос Z и Y (без идентификации природы). По нашим данным, эти узкие при $T = 9$ К полосы являются H- и L-компонентами свечения Cu(II), т.е. также обязаны присутствию меди [4].

Таким образом, по результатам эксперимента можно заключить, что на акцепторных уровнях кислородных центров самоактивированного свечения ZnSe(O) и ZnS(O) возможно возникновение полос связанных экситонов. Эти полосы типичны для спек-

тров из объема кристаллов при повышенной плотности возбуждения. Исследованная зависимость интенсивности полос ВЕ от плотности возбуждения показала, что при больших интенсивностях возбуждения и $T = 300$ К полоса ВЕ_{SA} совершенных газостатированных образцов является единственной для всей видимой области спектра.

Литература

1. Band Anticrossing in GaInNAs Alloys / *W. Shan, W. Walukiewicz, J.W. Ager III et al.* // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 82, № 6. – P. 1221–1224.
2. *Wu J., Walukiewicz W., Haller E.E.* Band structure of highly mismatched semiconductor alloys: Coherent potential approximation // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65. – P. 233210 1 – 233210 4.
3. Влияние кислорода на электронную зонную структуру ZnS / *Н.К. Морозова, И.А. Каретников, Н.Д. Данилевич и др.* // ФТП. – 2005. – Т. 39, № 5. – С. 513–520.
4. *Морозова Н.К., Мидерос Д.А., Гавришук Е.М., Галстян В.Г.* Роль фоновых примесей О и Си в оптике кристаллов ZnSe с позиций теории непересекающихся зон // ФТП. – 2008. – Т. 42, № 2. – С. 131–135.
5. Преобразование центров люминесценции CVD-ZnS при газостатировании / *Н.К. Морозова, И.А. Каретников, Е.М. Гавришук и др.* // ФТП. – 2004. – Т. 38, № 1. – С. 39–43.
6. *Мидерос Д.А., Нгуен Чан Ха, Морозова Н.К.* Комплексы точечных дефектов, ответственных за самоактивированное свечение и растворимость кислорода в ZnS и ZnSe // Матер. докл. 37 межд. науч.-техн. сем. «Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах». – М., МЭИ. – 2008. – С. 103–108.
7. *Морозова Н.К., Каретников И.А., Блинов В.В., Гавришук Е.М.* Исследование центров люминесценции, связанных с Си и О в ZnSe // ФТП. – 2001. – Т. 35, № 1. – С. 25–33.
8. Влияние контролируемого изменения собственных точечных дефектов и кислорода на оптические свойства CdS / *Н.К. Морозова, А.В. Морозов, И.А. Каретников и др.* // ФТП. – 1994. – Т. 28, № 10. – С. 1699–1713.
9. *Catalano I.M., Cingolani A., Minafra A.* Spontaneous and stimulated luminescence in CdS and ZnS excited by multiphoton optical pumping // Phys. Rev. B – 1973. – Vol. 8, № 4. – С. 1488–1492.
10. Growth by solid phase of large ZnSe crystals of high purity and structural perfection / *R. Triboulet, J.O. Ndar, A. Tromson-Carli et al.* // J. Cryst. Growth. – 1996. – Vol. 159. – P. 156–159.

Статья поступила
14 декабря 2007 г.

Морозова Наталья Константиновна – доктор физико-математических наук, профессор кафедры полупроводниковой электроники МЭИ. *Область научных интересов:* изучение роли кислорода в создании и стабилизации собственно-дефектных и примесных центров в соединениях A^{II}B^{VI}.

Мидерос Мора Даниэль Алехандро – аспирант кафедры полупроводниковой электроники МЭИ. *Область научных интересов:* исследование влияния кислорода на самоактивированную люминесценцию соединений ZnSe–ZnS с позиции теории непересекающихся зон.

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

УДК 621.315.592.669

Новые технологии получения поликристаллического кремния для солнечной энергетики

Б.Г.Грибов, К.В.Зиновьев

НИИ особо чистых материалов (г. Москва)

Рассмотрены проблемы производства поликристаллического кремния для солнечных элементов в настоящее время и в обозримом будущем. Представлены новые прогрессивные технологии, которые уже реализованы в опытном производстве, а также некоторые оригинальные разработки последнего времени. В частности, очень перспективным для получения высокочистого кремния является процесс восстановления оксидов кремния в газовой фазе.

В последние годы солнечная энергетика бурно развивается. Темпы ежегодного роста мирового производства солнечных модулей превышают 20%, и эта тенденция сохранится на ближайшие годы. Сырьем для солнечной энергетики служили, как правило, отходы производства электронного кремния, но в последнее время этих отходов уже не хватало, так как темпы роста производства солнечной энергетики значительно выше, чем электроники. Дефицит кремния покрывался за счет резервных мощностей, имевшихся у производителей поликристаллического кремния для электроники. Кремний для солнечных элементов производился по упрощенной трихлорсилановой технологии (с исключением одной или нескольких стадий очистки). Далее сложилась ситуация, когда и резервных мощностей по выпуску электронного кремния уже не хватало, а спрос на поликристаллический кремний для солнечной энергетики намного превысил предложение.

Современное состояние развития производства поликристаллического кремния, включая новые разработки, анализируется в работах [1, 2]. Основной проблемой в настоящее время является огромный дефицит поликремния, который привел к резкому скачку цен на него. Поэтому все основные производители поликремния на мировом рынке уже запланировали увеличение производства к 2010 году. Кроме того, появился ряд новых производителей поликремния, готовых внести заметный вклад в общий выпуск (до 25% и более). Прогнозируется 2–3-кратный рост объемов производства поликремния к 2010 г. и соответственно значительное сокращение дефицита солнечного кремния, однако спрос на солнечный поликремний еще долго будет превышать предложение. Предполагается, что цены на солнечный поликремний в ближайшие 5 лет сохранятся на уровне 100 евро за 1 кг и выше, что позволит производителям поликремния иметь высокую прибыль.

Основой производства солнечного поликремния останется трихлорсилановая технология, модифицированная для получения более дешевого продукта. Производство солнечного кремния по новым технологиям может составить более 15% от всего сол-

нечного кремния, планируемого к выпуску в 2010 г. Разработки новых технологий с целью создания производства дешевого поликристаллического кремния были начаты еще в 70-х гг., но до последнего времени в промышленном производстве не реализованы. Широкие исследования за рубежом и в России проводились в нескольких основных направлениях: восстановление или пиролиз летучих соединений кремния; рафинирование металлургического кремния; восстановление чистого кремнезема углеродом, металлами и другими реагентами. Эти основные направления достаточно подробно рассмотрены в работе [3], однако прогноз о наибольшей перспективности карботермического метода получения солнечного кремния подтвердился лишь частично. Реально происходит интенсивное развитие всех трех направлений, а растущий дефицит кремния является стимулом для новых разработок, направленных на сокращение расхода кремния в солнечной энергетике. В настоящей работе рассматриваются некоторые новые перспективные технологии, реализующиеся в опытном производстве, а также оригинальные разработки, которые потенциально могут существенно снизить затраты в производстве солнечного кремния.

Хлорсилановые технологии. В настоящее время поликристаллический кремний «электронного» и «солнечного» качества получают в основном по одной технологической схеме с использованием типового промышленного оборудования, а удешевление производства солнечного кремния достигается за счет упрощения стадий очистки трихлорсилана, увеличения скорости осаждения кремния и снижения энергопотребления [1]. Компания «Wacker Chemie» разработала технологию получения гранул кремния солнечного качества, используя реакцию восстановления трихлорсилана в реакторе с кипящим слоем [4, 5]. Выход завода на многотоннажное производство планируется на 2008 г. Компания «Токуяма» разрабатывает технологию получения поликристаллического кремния, используя восстановление трихлорсилана при повышенной температуре (~1500 °C). Кремний осаждается на стенку трубчатого графитового реактора, плавится и стекая образует гранулы кремния. Скорость осаждения превышает обычную более чем на порядок, однако кремний содержит много углерода [6]. Промышленные испытания планировалось начать в 2006 г., а в 2009 г. будет создано новое производство объемом 5000 т/год.

Из других разработок последнего времени следует выделить те, которые предлагают использовать тетрахлорид кремния SiCl_4 для непосредственного получения поликристаллического кремния. Компания «Japan Solar Silicon» разработала пилотную технологию восстановления SiCl_4 парами цинка, ранее известную как «Batelle»-процесс. По этой технологии получены слитки солнечного кремния диаметром 150 мм и длиной 0,5 м. Планируется начать промышленное производство с октября 2009 г. Объем реализации оценивается в 400–2000 т/год [7].

Компания «City Solar AG» разрабатывает процесс получения поликремния из SiCl_4 по двум схемам [8]. По одной из них предлагается полимеризовать SiCl_4 в соединение типа $[\text{SiCl}_2]_n$ с последующим его пиролизом и осаждением высокочистого кремния. Другая схема – прямое восстановление SiCl_4 до кремния в водородной плазме, что может обеспечить высокую чистоту кремния при низкой себестоимости (~10 евро за 1 кг). Обе схемы прошли стадию лабораторных исследований, и в настоящее время разрабатывается оборудование для пилотного варианта технологии получения поликремния.

Бесхлорные силановые технологии. Известно несколько различных промышленных методов получения моносилана, но во всех так или иначе используются соединения хлора [9]. Исключением является бесхлорная алкоксисилановая технология (БАС-процесс) – получение триэтоксисилана реакцией металлургического кремния с этило-

вым спиртом на катализаторе с последующим его диспропорционированием и получением моносилана [10]. Алкоксисилановая технология экологически более безопасна, чем хлорсилановая (хлоридно-гидридная), так как все продукты промежуточных стадий не токсичны и не агрессивны.

В последнее время большой интерес представляют методы получения моносилана взаимодействием силицидов металлов с кислотами. Обычно сначала превращают диоксид кремния в силицид металла (магния или алюминия) с последующей обработкой минеральной или органической кислотой либо аммонийной солью [9, 11]. Исследуется также возможность прямого получения моносилана из кварцита (SiO_2) при действии гидридов лития [12]. Одним из важных направлений в разработке технологии получения моносилана следует считать эффективную утилизацию промышленных отходов. В работе [13] предложено использовать различные силикатные шлаки для алюмотермического восстановления с получением кремнийсодержащих сплавов. При обработке последних кислотой получен моносилан с хорошим выходом.

Технология осаждения поликристаллического кремния из моносилана также непрерывно совершенствуется для повышения качества продукции и снижения себестоимости. Наиболее перспективным является процесс получения поликремния в реакторах типа «кипящий слой» из газовой фазы SiH_4 . Компания «МЕМС» (США) разработала и начала промышленное использование процесса получения гранул поликремния в реакторе с псевдоожиженным слоем, где моносилан разлагается при температуре около $800\text{ }^\circ\text{C}$ с образованием гранул диаметром 1–2 мм [1]. В 2003 г. Solar World AG и Degussa создали совместное предприятие «Joint Solar Silicon GmbH» для производства поликремния методом разложения моносилана и осаждения его на разогретые стенки кремниевых труб [6]. Была разработана также технология механического уплотнения порошка осажденного кремния в 10 раз для облегчения последующих операций с этим продуктом. Для более эффективного использования порошкового кремния исследуется возможность изготовления пластин из него методами порошковой технологии. Показано, что такой процесс позволяет получать пластины поликремния требуемой формы и текстуры поверхности [14].

Рафинирование металлургического кремния. Технология получения солнечного кремния рафинированием металлургического уже достигла уровня, требуемого для промышленного выпуска. В настоящее время лидерами этого направления являются четыре фирмы (таблица), которые готовы к полупромышленной стадии освоения. Еще не менее трех компаний находятся в стадии пилотного производства и, вероятно, более пяти – в стадии лабораторной разработки. Круг производителей солнечного кремния по данной технологии быстро расширяется.

Производители солнечного кремния рафинированием металлургического по состоянию на 2007 г.

Компания (страна)	Производительность, т/год; стадия освоения	Планы (т/год)	Время реализации
«Japan Ferrous Engineering» (Япония)	100; полупромышленная	800–1000	2007 г.
«Elkem Solar AS» (Норвегия)	100–250; полупромышленная	5000	2008 г.
«Dow Corning Solar» (США, Бразилия)	1000; полупромышленная	5000	2010 г.
«Bescancour Silicon Inc.» (Канада)	150; полупромышленная	4000	до 2010 г.

Основой технологии получения солнечного кремния из металлургического являются методы рафинирования кремния в конденсированной фазе. Методы пиро- и гидрометаллургии используются в определенной последовательности применительно к характеристикам исходного кремния.

Все эти методы хорошо известны и подробно описаны в работе [3]. Что касается технологических процессов рафинирования металлургического кремния, разработанных ведущими фирмами, то сообщается только о последовательности операций. Более детальные сведения о технологии рафинирования «Japan Ferrous Engineering» можно найти в ранее опубликованной работе [15]. О разработках других фирм, указанных в таблице, известно гораздо меньше.

Исходный кремний, предназначенный для рафинирования до солнечного качества, должен иметь повышенную чистоту 99,3–99,9 вес.% с минимальным содержанием бора и фосфора. Солнечный кремний, полученный по технологии рафинирования металлургического кремния, отличается по некоторым характеристикам от кремния, полученного по силановым технологиям, однако он пригоден для солнечной энергетики. Сообщается, что на этом солнечном кремнии удастся получать фотоэлектрические преобразователи с КПД 14–16%. В настоящее время идут полупромышленные испытания таких преобразователей [2].

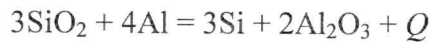
До 2010 г. солнечный поликремний, произведенный из металлургического, составит по осторожным аналитическим оценкам около 6% от всего объема солнечного поликремния [2]. В количественном выражении это соответствует 3000 т, что свидетельствует уже о создании новой технологии получения солнечного кремния в промышленных масштабах. Ориентировочная себестоимость солнечного кремния, полученного по новой технологии, планируется на уровне 20 евро за 1 кг при объеме производства около 1000 т/год.

Восстановление чистого диоксида кремния. В промышленном производстве металлургического кремния обычно используют классический вариант восстановления SiO_2 углеродом в рудно-термических печах. Этот вариант карботермического процесса обеспечивает получение достаточно дешевого кремния, когда не предъявляются повышенных требований к чистоте продукта восстановительной плавки. До настоящего времени проводятся исследования с целью применить такой карботермический процесс для получения высокочистого кремния с последующей финишной очисткой (рафинированием) до солнечного качества [3]. Реализовать эту технологию прямого карботермического восстановления чистого SiO_2 в производстве пока не удалось. Это может быть связано с тем, что процесс восстановления SiO_2 до кремния проходит в несколько стадий, причем в рудно-термической печи одновременно идет ряд реакций на разных горизонтах, т.е. в разных слоях садки [16]. Управлять процессом в такой системе затруднительно, в процессе плавки имеют место потери кремния в виде SiO и паров Si . При использовании очень чистых исходных компонентов процесс может оказаться невыгодным экономически.

Альтернативой классическому карботермическому процессу являются варианты двухстадийного карботермического процесса. В работе [17] предлагается использовать конструкцию шахтной дуговой печи, где имеется четкое разделение зон образования SiO , SiC и кремния по температуре. В работах [18, 19] сообщается о разработке так называемого карбидного метода получения высокочистого кремния: на первой стадии осуществляется синтез высокоактивного SiC в оптимальных условиях в кварцевых или

графитовых тиглях, на второй стадии производится выплавка металлургического кремния. Методом плазменного рафинирования металлургического кремния от примесей, особенно углерода, можно получить кремний солнечного качества. Такая технология уже реализована в пилотном варианте фирмой «Solsilc Development Co.» (Нидерланды) и первая опытно-промышленная партия объемом около 100 т планировалась на конец 2007 г. [20]. Это может означать, что наиболее перспективны для реализации в производстве технологические процессы, которые проводятся постадийно в оптимальных условиях для каждой стадии, в том числе и в отдельных реакторах для каждой стадии.

Существуют еще несколько вариантов восстановления SiO_2 металлами, в частности магнием, алюминием, цинком и др. Наиболее целесообразно использовать вариант восстановления диоксида кремния алюминием, поскольку при горении алюминия выделяется тепла гораздо больше, чем при сжигании других металлов. Получение кремния происходит по реакции



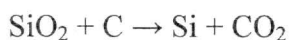
с выделением тепла. Когда реакция идет в ограниченном объеме, температура смеси быстро поднимается выше 2000°C . При этом полученный кремний расплавляется, а Al_2O_3 в виде шлака всплывает на поверхность. В работе [21] приведены результаты исследований получения кремния методом алюминотермического восстановления кремнезема в силикатных шлаках – отходах фосфорной промышленности с последующей гидрохимической очисткой металлургического кремния. Полученный кремний может служить исходным материалом для его превращения в солнечный кремний после финишной очистки.

Газофазное восстановление чистого диоксида кремния. В последнее время появились сообщения о возможности газофазного восстановления SiO_2 для получения солнечного кремния. Этот вариант представляет большой интерес, если использовать в качестве газообразного восстановителя чистый водород. В работе [22] рассматривается возможность восстановления кварцитов водородом и смесью водорода с углеводородами при температурах выше 2500°C . Восстановление в газовых смесях происходит при более низкой температуре, чем при использовании чистого водорода, но при этом возможно образование карбида кремния и углерода, загрязняющих конечный продукт. Варьируя температуру и состав газовой смеси (С/Н), можно найти оптимальные условия образования чистого кремния.

Реакция восстановления SiO_2 проходит, как правило, в две стадии – сначала до SiO с переводом его в газовую фазу, а затем газообразный монооксид восстанавливается до кремния. Монооксид кремния обладает высокой летучестью, парциальное давление паров SiO составляет (в мм рт. ст.): 2,1 при 1300°C ; 9,1 при 1440°C и 36,4 при 1580°C [23]. Летучесть SiO позволяет отделить его от ряда примесей, так как они имеют значительно меньшую летучесть [24]. Если затем при восстановлении SiO использовать очень чистый восстановитель (водород), то получаемый кремний будет иметь чистоту более высокую, чем исходный SiO_2 . Сопоставление парциальных давлений SiO и примесей при оптимальной температуре восстановления до SiO (1900°C) показывает, что степень очистки по большинству примесей может достигать $1 \cdot 10^{-3}$ и более. Таким образом, процесс восстановления SiO_2 через монооксид кремния позволяет совместить получение кремния с его дистилляционной очисткой от примесей.

Для получения монооксида кремния из кремнезема используют наряду с газообразными восстановителями также углеродную сажу или металлургический кремний [24, 25–28]. С целью повышения выхода SiO в реакции процесс проводят обычно при высоких температурах (до 2000 °С) или в электродуговой плазме. Полученный газообразный монооксид кремния может быть осажден при температурах ниже 800 °С в специальной камере с фильтром для сбора SiO. Конденсат представляет собой рыхлый порошок желто-коричневого цвета с очень малой кажущейся плотностью [29]. Он находит применение при изготовлении керамики [25] и в некоторых других областях [26]. При использовании в качестве промежуточного продукта для получения чистого кремния порошок SiO снова переводится в газовую фазу (при температуре выше 1300 °С) и восстанавливается до кремния.

В качестве восстановителей для монооксида кремния могут служить углерод и карбид кремния [27, 28], водород и водород-углеводородные смеси [22, 24]. Источником тепловой энергии, необходимой для протекания реакции, является индукционный нагрев или электродуговая плазма. Восстановление SiO происходит при температурах 1700–1900 °С и выше. Из имеющихся публикаций по этой проблеме не вполне ясно, в какой форме и с каким выходом получается кремний, а также какова его чистота по лимитирующим примесям. Нами [30] проведена работа по получению кремния из кварцитов по следующей схеме:



Эксперименты выполнялись с использованием углеродной сажи в качестве восстановителя на первой стадии. Кварциты высокой чистоты смешивались с сажой и нагревались до высокой температуры в вакууме и в токе аргона. При нагревании в вакууме до температуры 1300–1500 °С давление в системе изменялось от 10^{-3} до 1 мм рт. ст., но требовалось длительное время (несколько часов) для получения SiO. При нагревании до 1700 °С в аргоне (при атмосферном давлении) процесс образования SiO проходил очень интенсивно, но полученный монооксид загрязнялся сажой. Вообще использование сажи в таких процессах требует ее специальной обработки и, по-видимому, только усложняет процесс. Вторая стадия – восстановление SiO – выполнялась в атмосфере водорода при температуре до 1700 °С.

Проводились также эксперименты по восстановлению кремния из кварцевого сырья водородом в плазменном реакторе. В качестве источника тепла использовалась электрическая дуга постоянного тока. Исследовались два варианта образования монооксида кремния – взаимодействие кварцевой крупки с порошком технического кремния в атмосфере водорода и восстановление кварцевой крупки чистым водородом. В обоих вариантах исходные материалы быстро перерабатывались в SiO, который осаждался на фильтре-приемнике. Это доказывало, что первая стадия восстановления происходит успешно. Для проведения второй стадии был выбран вариант, когда газообразный монооксид сразу подавался на восстановление водородом в дуговом реакторе (без промежуточной конденсации).

Известно, что в среде водорода скорость газификации кремнезема самая высокая и в 6 раз выше, чем в среде аргона [31]. Водороду отводится роль агента, связывающего

кислород. Опыт показывает, что химическая активность водорода сильно повышается, когда реагируют не молекулы, а атомы (H) [32]. Атомарный водород в газообразном состоянии намного активнее молекулярного. Заметная термическая диссоциация водорода начинает идти с 2000 °С и быстро растет с повышением температуры. Благоприятно на развал молекулы H₂ действует электрический разряд, а также излучение с длинами волн менее 850 Å, что имеет место при горении дуги. Для увеличения выхода кремния в реакции восстановления SiO₂ нами применялась активация водорода в электрическом разряде.

Литература

1. **Заддэ В.В., Наумов А.В.** Трихлорсилан и Солнце // *The Chemical Journal*. – 2006. – № 3. – С. 44–48.
2. **Наумов А.В.** Еще раз о развитии солнечной энергетики и рынке кремниевого сырья с 2007–2010 гг. // Тез. докл. IV Российской конф. с междунар. участием по физике, материаловедению и физико-химическим основам технологии получения легированных кристаллов кремния и приборных структур на их основе «Кремний – 2007». – М., 2007. – С. 46–50.
3. **Грибов Б.Г., Зиновьев К.В.** Получение высокочистого кремния для солнечных элементов // *Неорганические материалы*. – 2003. – Т. 39, № 7. – С. 775–785.
4. Pilot production of granular polysilicon from trichlorosilane using a fluidized bed-type reactor / **D.Weidhaus, E.Schindlbeck, K.Hesse et al.** // 20-th Europ (PVSEC). – 2005. – P. 565–568.
5. Пат. США №7029632. Radiation – heated fluidized-bed reactor. Weidhaus D. et al. (Wacker Chemie), 2006.
6. New Process for cost effective Solar Grade Silicon from silane / **A.Muller, R.Sonnenschein, T. Sill et al.** // 20-th Europ (PVSEC). – 2005. – P. 623–626.
7. Masatsugu Yamaguchi. Polysilicon manufacturing implementing the reduction of silicon tetrachloride with zinc vapor: a very uncommon approach from shisso // 4-th Solar Silicon conference. – Munich, 2007. – С. 78–85.
8. **Kreutzmann A.** Yellow is the color of hope // *Photon International*. – 2006. – № 9. – С. 66–70.
9. Моносилан в технологии полупроводниковых материалов **Е.П.Белов, Е.Н.Лебедев, Ю.П. Григораш и др.** / М.: НИИТЭХИМ, 1989. – 72 с.
10. Бесхлорная алкоксисилановая технология получения полупроводникового кремния / **Е.П.Белов, В.Г.Герливанов, С.И.Клещевникова и др.** // Тр. междунар. конгресса «Бизнес и инвестиции в области возобновляемых источников энергии в России». – М., 1999. – С. 226–236.
11. Исследование взаимодействия силицидов лития с кислотами для получения моносилана / **В.В.Соколов, Л.Н.Трушникова, А.П. Зубарева и др.** // *Материалы электронной техники*. – 2003. – № 3. – С. 22–25.
12. Процессы взаимодействия гидрида лития с двуокисью кремния / **А.А.Камарзин, Ю.М.Зеленин, В.И. Лаврентьев и др.** // *Материалы электронной техники*. – 2001. – № 2. – С. 16–19.
13. **Тамендаров М.Ф.** Новый способ получения силана для производства солнечного кремния // Тез. докл. I Российской конф. «Кремний-2003». – М., 2003. – С. 366.
14. Production of polycrystalline silicon sheet with different shapes by sintering of silicon powders / **A.Derbouz Draona, A.Straboni, A.M.Archambault et al.** // 20-th Europ. PVSEC. – 2005. – P. 1474–1477.
15. Development of NEDO melt-purification process of solar-grade silicon / **N.Yuge, M.Abe, K.Hanazawa et al.** // *Techn. Dig. Int. PVSEC*, 1999. – 22A1. – P. 115–118.
16. **Катков О.М.** Выплавка технического кремния. – Иркутск: Изд-во ИПУ, 1997. – 243 с.
17. Production of Solar grade silicon by carbothermic reduction of high purity silica / **F.Aratani, Y.Sakaguchi, N.Yuge et al.** // *Bull. Jpn. Inst. Metals*, 1991. – Vol. 30, № 5. – P. 433–435.
18. **Абдюханов И.М.** Разработка научных основ технологии производства металлургического кремния повышенной чистоты для наземной фотоэнергетики // *Российский хим. журнал*. – 2001. – Т. 45, № 5–6. – С. 107–111.
19. Solar grade-silicon by a direct route based on carbothermic reduction of silica: requirements and production technology / **L.J.Geerlings, G.P.Wyers, R. Yensen et al.** // 12-th NREL Workshop on Crystalline Silicon Solar Cells, Materials and Processes. – 2002.

20. *Schmela M.* Mapping the silicon world // Photon International. – 2005. – № 5. – P. 24–35.
21. Получение кремния для фотоэнергетики из кремнийсодержащих отходов металлургической промышленности / *Х.А.Абдуллин, Б.А.Бекетов, Н.С. Бектурганов и др.* // Тез. докл. Совещания «Кремний-2004». – Иркутск, 2004. – С. 35.
22. *Демин В.Н., Титов А.А., Ващенко С.П., Кузнецов Ф.А.* О возможности газофазного восстановления кварцитов // Тез. докл. Совещания «Кремний-2004». – Иркутск, 2004. – С. 19.
23. *Ботвинкин О.К., Запорожский А.И.* Кварцевое стекло. – М.: Изд-во литературы по строительству, 1965. – 235 с.
24. Пат. США №3010797. High purity elemental silicon / *R.S.Aries.* – 1961.
25. Пат. Японии №561235. Метод производства мелкодисперсного монооксида кремния / *T.Funahashi, K.Ueda, R.Uchimura, Y.Oguchi.* – 1990.
26. Плазменный процесс получения монооксида кремния / *И.Д.Кулагин, В.К.Любимов, К.Г.Марин и др.* // Физика и химия обработки материалов, 1967. – № 2. – С. 36–41.
27. Пат. ЕР 0329803 31. Method and apparatus for preparing high-purity metallic silicon / *F.Aratani, T.Fukutake.* – 1993.
28. Пат. РФ №21737386. Способ получения мульти- и монокристаллического кремния / *А.М.Прохоров, Г.Н.Петров, Н.А. Калужский и др.* – 1999.
29. *Леко В.К., Мазурин О.В.* Свойства кварцевого стекла. – Л.: Наука, 1985. – 148 с.
30. Решение о выдаче пат. РФ по заявке №2006130023/15 (032646). Способ получения кремния высокой чистоты / *В.Д.Афанасьев, Б.Г.Грибов, К.В.Зиновьев и др.* – 2006.
31. Кинетика газификации кремнезема в различных условиях / *Г.Г.Папин, И.В.Рябчиков, Н.М. Деханов и др.* // Докл. АН СССР. Химическая технология. – 1971. – Т.196, № 5. – С. 1156–1158.
32. *Некрасов Б.В.* Основы общей химии. – 3-е. изд. – М.: Химия, 1974. – Т. 1. – 656 с.

Статья поступила
14 февраля 2008 г.

Грибов Борис Георгиевич – доктор химических наук, профессор, член-корреспондент РАН, генеральный директор ОАО «НИИ особо чистых материалов» (г. Москва). *Область научных интересов:* электронное материаловедение – исследование, получение и применение особо чистых материалов в электронике.

Зиновьев Константин Владимирович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник ОАО «НИИ особо чистых материалов» (г. Москва). *Область научных интересов:* химия и технология полупроводниковых материалов для изготовления фотоэлектрических преобразователей.

**Информация для читателей журнала
«Известия высших учебных заведений. Электроника»**

Вы можете оформить подписку на журнал по каталогу «Газеты, журналы» Агентства «Роспечать» в любом почтовом отделении связи.

**Подписной индекс
47570**

Термодинамические аспекты формирования квантоворазмерных гетероструктур на основе GaN

Е.Н.Вигдорович

Московский государственный университет приборостроения и информатики

С позиции классической термодинамики Гиббса проанализирован механизм кристаллизации GaN из газовой фазы. При исследовании образования нейтральных комплексов акцепторных примесей с водородом использованы основные положения теории Райса и Дебая – Хюккеля. На основании анализа межмолекулярного взаимодействия выявлены области нестабильности в системах GaN–InN и GaN–AlN. Для условий МОС-гидридной технологии определены зависимости изменения состава кристаллизующихся твердых растворов от состава парогазовой фазы.

На основе полупроводников с большой шириной запрещенной зоны – карбида кремния, соединений элементов II и IV группы или нитридов элементов III группы можно создавать голубые светодиоды. Однако у светодиодов на основе SiC слишком мал КПД и низкий квантовый выход излучения (число излученных квантов на одну рекомбинировавшую пару), у светодиодов на основе твердых растворов селенида цинка ZnSe квантовый выход выше, но они перегреваются из-за большого сопротивления и служат недолго.

В начале 70-х гг. появилось много публикаций о перспективности GaN и InGaN для создания полупроводниковых излучателей зелено-голубой области. Это связано с развитием газофазных технологий и разработкой оборудования для их реализации. Несмотря на определенные успехи в этой области, до сих пор не достигнуты теоретически обоснованные уровни функциональных характеристик. При оптимизации технологии получения GaN и многокомпонентных твердых растворов на его основе большое значение имеют знания фазовых равновесий в этих системах и термодинамический анализ процессов их получения.

Механизм кристаллизации GaN на сапфире. На основе представлений Гиббса [1] уравнения для энергии зарождения образования двумерных и трехмерных зародышей при эпитаксии можно записать в виде

$$E_2 = \frac{\pi c V (2\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_3)^2}{8F}; \quad E_3 = \frac{\pi V^2 (2\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_3)^3}{3F^2},$$

где V – мольный объем вещества; c – толщина монослоя; σ – свободная поверхностная энергия; F – пересыщение.

Основным методом получения GaN из газовой фазы является МОС-метод. Для МОС-гидридной технологии получения GaN определяющим фактором при кристаллизации будет концентрация МОС Ga в газовой фазе. Следовательно, пересыщение можно выразить как $F = RT \ln(P_{\text{МОС}}^*/P_{\text{МОС}}^0)$, где $P_{\text{МОС}}^*$, $P_{\text{МОС}}^0$ – парциальное давление МОС Ga на входе в реактор и равновесное давление МОС Ga на подложке соответственно.

Для скорости зарождения можно написать $I_i = I_i^0 \exp(-E_i/kT)$. Кинетический коэффициент I^0 связан с адсорбционной способностью поверхности кристаллизации и поэтому для гетероэпитаксии (физическая адсорбция) на сапфире он будет значительно меньше, чем для автоэпитаксии (химическая адсорбция). Анализ показывает, что среднее значение отношения $I_A^0/I_H^0 = 1 \cdot 10^4$ ($I_A^0 = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$).

В настоящей работе проведен качественный анализ процесса зарождения в диапазоне реальных пересыщений для МОС-технологии получения GaN (рис.1). В табл.1 приведены исходные данные для анализа.

Таблица 1

Значения параметров базовой плоскости решетки (0001) и свободной поверхностной энергии

Параметр	Al ₂ O ₃	AlN	GaN	InN
a , нм	0,475	0,311	0,319	0,353
σ , (10^{-4}) Дж/см ²	3,9	1,7	1,6	1,2

Из рис.1 видно, что гетероэпитаксиальное осаждение с достаточной скоростью энергетически выгодно (минимальная E_i) при больших значениях пересыщения h и трехмерном 3H-зародышеобразовании. После образования сплошного (с толщиной на уровне нескольких критических зародышей) трехмерного зародышевого слоя, а значит, при переходе от гетероэпитаксии H к автоэпитаксии A , в связи с уменьшением энергетического барьера (уменьшение поверхностной энергии) резко возрастает скорость зарождения, что приводит к формированию структурно-разупорядоченных слоев.

Процесс зарождения можно проводить и при малых пересыщениях, когда образование двумерных зародышей при гетеро- и автоэпитаксии энергетически более выгодно. Однако скорость гетероэпитаксиального зарождения в этом случае чрезвычайно мала.

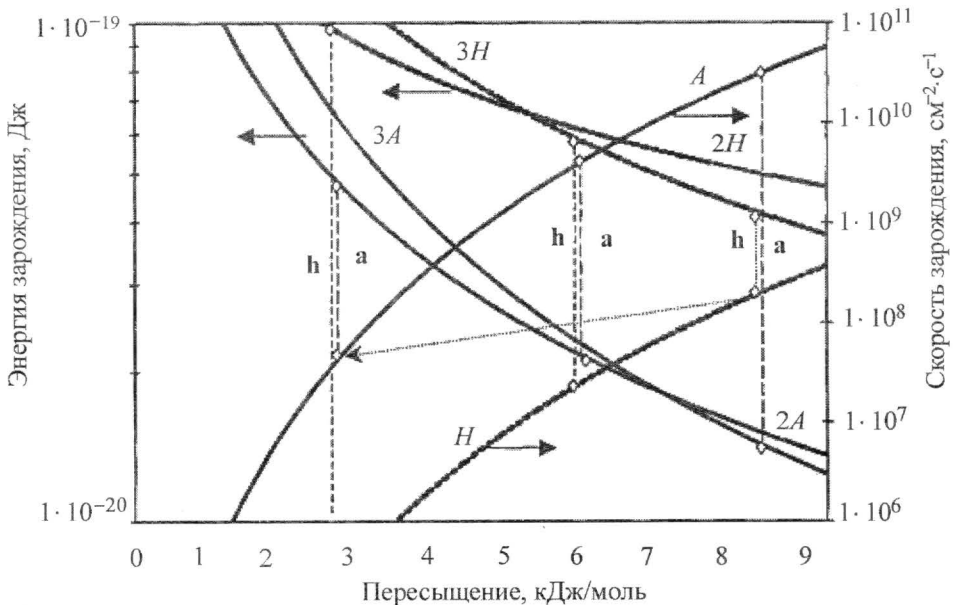


Рис.1. Изменение энергии и скорости зарождения от пересыщения для двухмерного (2A, 2H) и трехмерного (3A, 3H) зарождения в случае авто- и гетероэпитаксии

С целью получения качественных зародышевых слоев целесообразно гетероэпитаксию проводить при высоком пересыщении и в момент перехода к автоэпитаксии, резко уменьшая пересыщение в системе, переходить на условия более совершенного двумерного зародышеобразования ($h \rightarrow a$ на рис.1), что в реальном процессе выполнить не просто. Уменьшить энергетический скачок при переходе от гетероэпитаксии к автоэпитаксии можно, снизив поверхностную энергию подложки. Одним из способов снижения поверхностной энергии подложки является создание моноатомных слоев AlN на сапфире. Это достигается или нитридизацией поверхности сапфира, или нанесением тонкого слоя Al на сапфир перед эпитаксией GaN. При этом на поверхности сапфира образуется слой AlN, у которого значение поверхностной энергии близко к GaN. В этом случае процесс зарождения GaN можно практически сразу реализовать по двумерному механизму, что позволяет получать слои с высоким кристаллографическим совершенством.

Растворимость примесей в GaN. При термодинамическом равновесии процесс растворения примесей в GaN можно записать в виде



Считая, что реакция проходит в растворе, и предположив, что начиная с некоторой концентрации примеси галлий и нитриды этих примесей будут присутствовать в виде избыточных фаз ($a_{NH_3} = a_{Zn_3N_2} = a_{Mg_3N_2} = a_{Ga} = 1$), для идеальных растворов константа равновесия $K_p = 1/(N_{GaN}^n N_i^3)$. Так как $N_{GaN} \approx 1$, а K_p связана с изобарно-изотермическим потенциалом выражением $\Delta Z_T = -RT \ln K_p$, имеем $\Delta Z_T = -RT \ln(1/N_i^3)$, откуда концентрация примеси $N_i \approx \exp(\Delta Z_T/3RT)$. В табл.2 приведены значения равновесной предельной концентрации примеси.

Таблица 2

Растворимость примесей в GaN

T, К	Равновесная предельная концентрация, см ⁻³			
	Н		Mg	Zn
	NH ₃ + H ₂	NH ₃ + N ₂		
800	1,4·10 ¹⁶	2,5·10 ¹⁵	3,3·10 ²⁰	>10 ²¹
1000	9,2·10 ¹⁷	1,2·10 ¹⁷	1,0·10 ²¹	–
1200	1,5·10 ¹⁹	2,6·10 ¹⁸	2,1·10 ²¹	–
1400	1,1·10 ²⁰	2,3·10 ¹⁹	3,5·10 ²¹	–

Образование нейтральных комплексов в GaN. Серьезной проблемой является создание дырочного типа проводимости в GaN. Даже при концентрации акцепторов (Mg, Zn) до 10²⁰ см⁻³ получаются высокоомные, компенсированные (i) слои. Объяснить это явление удастся, предположив, что решающую роль в формировании свойств легированных акцепторами слоев GaN играет водород. Во-первых, водород является основным газом-носителем при МОС-эпитаксии. Во-вторых, при взаимодействии МОС Ga с NH₃ основным продуктом реакции, кроме GaN, является атомарный водород. Более того, при разложении МОС также возможно образование атомарного водорода. Водород в GaN может выступать в виде H⁺ или H⁻ и его поведение будет определяться реальными условиями эпитаксии GaN. Так, при наличии в слоях донорных примесей ему энергетически выгодно выступать в виде акцептора H⁻. При этом вероятнее всего будут образовываться неустойчивые при высокой температуре нейтральные или донорные

комплексы. При легировании слоев акцепторными примесями водороду энергетически выгодно выступать в виде донора H^+ и тогда возможно образование комплексов типа $(A-H)^0$. Согласно теории Райсса [2] при совместном легировании полупроводника донорами и акцепторами образуются ионные пары (e^-e^+) и нейтральные донорно-акцепторные комплексы типа $(D-A)^0$. Для этого процесса константа равновесия будет равна $K_p = P/[(N_D - P)(N_A - P)]$, где P – концентрация образовавшихся нейтральных комплексов.

Константа равновесия образования нейтрального комплекса рассчитывается в соответствии с теорией Дебая–Хюккеля, исходя из того, что при кулоновском взаимодействии возникает так называемый обобщенный потенциал иона, который характеризует напряженность электрического поля иона и определяет его поведение. В табл.3 приведены результаты расчета константы равновесия и доли акцепторов, связанных в нейтральный комплекс, для рассматриваемых систем при $N_A = N_D = 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Таблица 3

Константы равновесия реакции образования нейтральных комплексов

T, К	$(Mg-H)^0$		$(Zn-H)^0$	
	K_p	P/N_{Mg} , моль.доля	K_p	P/N_{Zn} , моль.доля
500	$7,7 \cdot 10^{-17}$	0,99	$1,1 \cdot 10^{-16}$	1,00
600	$6,7 \cdot 10^{-18}$	0,96	$1,0 \cdot 10^{-17}$	0,99
800	$5,1 \cdot 10^{-19}$	0,87	$7,6 \cdot 10^{-19}$	0,92
1000	$1,0 \cdot 10^{-19}$	0,73	$1,5 \cdot 10^{-19}$	0,80
1200	$3,3 \cdot 10^{-20}$	0,58	$4,9 \cdot 10^{-20}$	0,67
1400	$5,0 \cdot 10^{-21}$	0,25	$7,5 \cdot 10^{-21}$	0,36

В настоящее время при разработке технологии квантово-размерных гетероструктур повышение температуры роста и увеличение концентрации акцептора приводит к некоторому снижению концентрации нейтральных комплексов, однако это значение остается достаточно высоким (как и предсказывает теория). При уменьшении концентрации атомарного водорода с 10^{20} до 10^{19} см^{-3} доля комплексов $(Mg-H)^0$ снижается на порядок (до $\sim 5 \cdot 10^{-2}$ для $T = 1400 \text{ К}$ и при $N_{Mg} = 1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) и концентрация активных акцепторов достигает значения $\sim 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В этом случае при среднем уровне неконтролируемых доноров $1-5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ получается устойчивый низкоомный p -тип проводимости. Аналогичная картина наблюдается и для комплексов $(Zn-H)^0$.

В настоящее время концентрацию водорода в слоях снижают различными способами – обработкой при низких температурах потоком низкоэнергетичных электронов (LEEBI) или высокотемпературным отжигом в инертной атмосфере (RTA), уменьшая при этом долю связанных акцепторов. Так, при LEEBI удается снизить удельное сопротивление легированных магнием слоев GaN от 10^4 до 3 Ом·см, а при RTA от 10^6 до 2 Ом·см [3] и получать устойчивый p -тип проводимости.

Термодинамическая нестабильность в системах GaN–InN, GaN–AlN, AlN–InN. При разработке технологии получения структур имеет большое значение определение областей составов изучаемой системы, находящихся в метастабильном и неустойчивом состоянии. Удобным способом изучения межмолекулярного взаимодействия в сложных системах является анализ зависимости изменения свободной энергии Гиббса от состава [4]. Границу между стабильной и метастабильной областями (бинодаль) можно найти по уравнению

$$\partial(\Delta G)/\partial x = \alpha^s (1 - 2x) + RT [\ln x - \ln(1 - x)] = 0,$$

а границу между метастабильной и нестабильной областями (спинодаль) по уравнению

$$\partial^2(\Delta G)/\partial x^2 = [RT / x(1 - x)] - 2\alpha^s = 0.$$

Используя полученные в работе [5] значения α^s , рассчитаны бинодали и спинодали для GaN–AlN, InN–GaN и InN–AlN (рис.2).

Результаты исследования квазибинарных систем GaN–InN, InN–AlN и AlN–GaN показывают, что наиболее нестабильной в области реальных температур МОС-технологии является система AlN–InN, а наиболее стабильной – система AlN–GaN. В системе GaN–InN наблюдается достаточно широкая область метастабильного состояния, что, вероятно, необходимо учитывать при получении эпитаксиальных слоев твердых растворов $Ga_x In_{1-x}N$ с большим содержанием InN (см. рис.2).

Полученные результаты позволяют объяснить данные по деградации гетероструктур с квантовыми ямами InGaN [6].

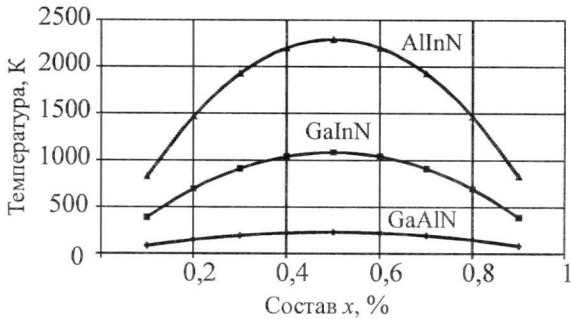


Рис.2. Спинодали для твердых растворов $Ga_{1-x}Al_xN$, $Ga_{1-x}In_xN$, $Al_{1-x}In_xN$

Формирование состава твердых растворов $Ga_{1-x}In_xN$ и $Ga_{1-x}Al_xN$ в процессе МОС-гидридной эпитаксии. Методика физико-химического анализа для газофазного синтеза разрабатывается и используется уже много лет для многокомпонентных твердых растворов на основе $A^{III}B^V$ [3, 7, 8]. Для данных систем наибольший интерес представляет определение влияния технологических параметров МОС-гидридного процесса на состав получаемых твердых растворов. При расчете коэффициента активности компонентов твердого раствора использовались значения параметра смешения, полученные в работе [5], которые для InN–GaN и AlN–GaN равны 17601 и 3741 Дж/моль соответственно.

На рис.3 приведены расчетные зависимости состава твердой фазы от состава газовой фазы при различных температурах.

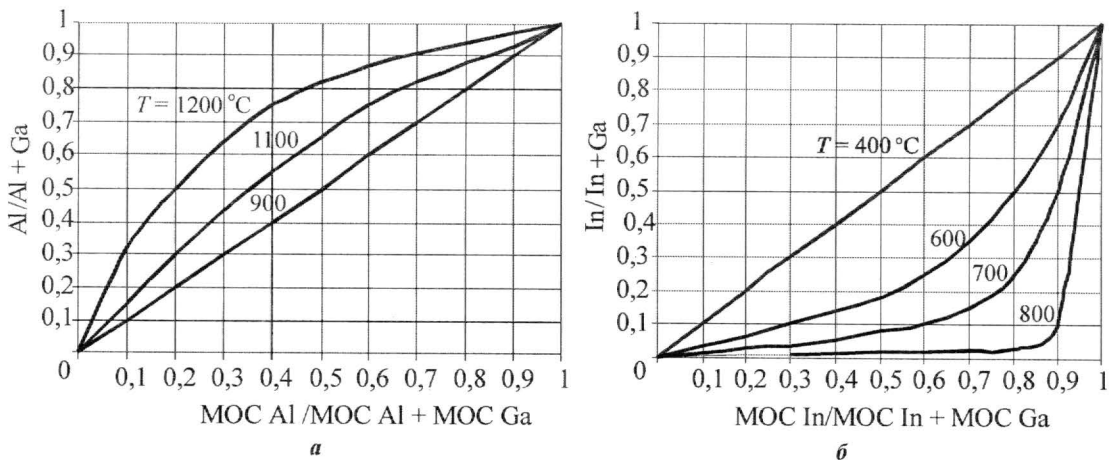


Рис.3. Зависимость состава твердого раствора $Ga_{1-x}Al_xN$ (а) и $Ga_{1-x}In_xN$ (б) от концентрации МОС III в газовой фазе при различных температурах

Приведенные результаты позволяют сделать заключение, что при выращивании твердых растворов $Ga_{1-x}In_xN$ при температуре роста более $1000\text{ }^\circ\text{C}$ получить воспроизводимо твердые растворы с малым содержанием индия практически невозможно. Управляемость составом твердых растворов $Ga_{1-x}In_xN$ улучшается с понижением температуры процесса эпитаксии и при $600\text{--}700\text{ }^\circ\text{C}$ удается получать твердые растворы заданного состава с высокой воспроизводимостью. При выращивании твердых растворов $Ga_{1-x}Al_xN$ в широком диапазоне температур возможно получать твердые растворы во всем диапазоне составов.

Эти результаты в настоящее время лежат в основе формирования сложных гетероструктур. Температура в процессе изменяется по сложной программе (повышение, снижение) при выращивании каждого слоя [9].

Критическая толщина псевдоморфного слоя InGaN активной области гетероперехода. При формировании функциональных гетероструктур на основе GaN используют чередование материалов (твердых растворов) с различной шириной запрещенной зоны. Для оптоэлектроники – GaN/GaInN/GaN..., для СВЧ-техники – GaN/GaAlN/GaN.

Как известно, различие параметров решеток сопрягающихся в гетероструктуре приводит к возникновению упругих напряжений, которые при росте или охлаждении релаксируют в процессе пластической деформации с образованием дислокаций несоответствия. При этом плотность дислокаций в слоях пропорциональна возникающим упругим напряжениям.

Расчет значения вектора Бюргерса b для нитридов показывает, что система скольжения $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ имеет минимальный вектор Бюргерса, а значит и минимальную энергию при смещении атома решетки. Для этого случая согласно модели Мэтьюза [10] уравнение для критической толщины слоя h будет иметь вид

$$h = \frac{b(1-\nu)}{2\pi f(1+\nu)} \ln\left(\frac{h}{b} + 1\right).$$

Оценочная критическая толщина псевдоморфного слоя для системы $(0001)GaN/(0001)Al_2O_3$ составляет не более 1 нм. Расчет для твердых растворов проводился с использованием справочных значений параметров решетки нитридов в предположении выполнения для объемных твердых растворов закона Vegarda. На рис.4 приведено изменение критической толщины псевдоморфного слоя от состава твердых растворов.

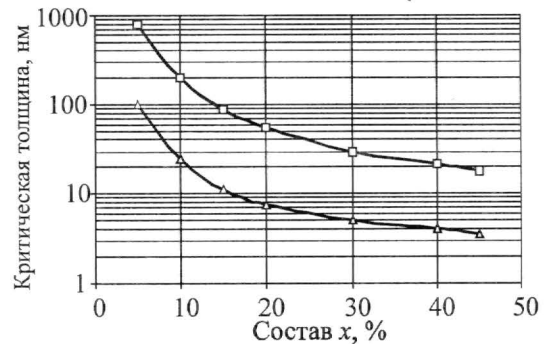


Рис.4. Изменение критической толщины псевдоморфного слоя GaInN и GaAlN от состава: Δ – $Ga_{1-x}In_xN$; □ – $Ga_{1-x}Al_xN$

Эффективная ширина запрещенной зоны. При исследовании термодинамических свойств твердых растворов соединений $A^{III}B^V$ была показана применимость теории регулярных растворов ($\Delta S_{см} = 0$) для определения отклонений от идеальности, которое в этом приближении определяется избыточной свободной энергией смешения $\Delta G_{см} = \Delta H_{см} = \alpha(1-x)x$.

Рассматривая твердые растворы с катионным замещением $A_{1-x}B_xC$ как регулярную квазибинарную систему AC–BC для изменения общей энтальпии образования, можно

написать $\Delta H^{ABC} = x \Delta H^{AC} + (1 - x)\Delta H^{BC} + \alpha(1 - x)x$, где ΔH^{AC} , ΔH^{BC} – энтальпия образования бинарных соединений из элементов.

Исследования ширины запрещенной зоны в твердых растворах на основе GaN показали, что изменение этого параметра в твердых растворах хорошо описывается уравнением $E_g(x) = (1 - x)E_g^{AC} + x E_g^{BC} + b(1 - x)x$. Параметры взаимодействия для различных систем приведены в табл.4.

Таблица 4

Параметры взаимодействия

Система	E_g , эВ	α , эВ [2]	b , эВ [3]
GaN–AlN	3,39–5,92	0,038–0,048	0–0,8
GaN–InN	3,39–1,35	0,18–0,55	0–(-3)

Очевидно, что изменение ширины запрещенной зоны и свободной энергии образования в твердых растворах подчиняется одному и тому же закону. Коэффициенты α и b в обоих случаях являются параметрами параболического изгиба зависимостей $\Delta H^{ABC}(x)$ и $E_g(x)$. Однако (см. табл.2), если для $Ga_{1-x}Al_xN$ значения параметров практически совпадают, то для $Ga_{1-x}In_xN$ знак параметра b противоположен знаку параметра α .

Параметры параболического изгиба зависимостей $\Delta H^{ABC}(x)$ и $E_g(x)$ по своей сути есть параметр взаимодействия, отнесенный к одному молно раствора:

$$\Delta U = N_0 zx(1 - x)[U_{AB-AC} - 0,5(U_{AB-AB} + U_{AC-AC})],$$

где U_{AB-AC} , U_{AB-AB} и U_{AC-AC} – энергия взаимодействия между разноименными и одноименными элементами раствора соответственно.

Гетероструктуру можно рассматривать как упорядоченную гетерофазную систему. При некогерентном сопряжении (толстые слои) в слоях происходит пластическая деформация и генерация дислокаций несоответствия и вакансий. В этом случае слои имеют свойства, близкие к свойствам объемного материала. При когерентном сопряжении (тонкие слои) возникает псевдоморфный слой, искажения решетки в котором компенсируются возникновением упругих внутренних напряжений. В $Ga_{1-x}Al_xN/GaN$ возникают растягивающие напряжения, что с точки зрения теории химической связи характеризуется положительными отклонениями от идеальности. В системе $Ga_{1-x}In_xN/GaN$ возникают сжимающие напряжения, что приводит к усилению химической связи и, следовательно, к отрицательным отклонениям. В соответствии с теорией упругости избыточную энергию внутренней деформации псевдоморфного слоя $Ga_{1-x}In_xN$ на GaN можно выразить как $\Delta G = qV$, где q – удельная свободная энергия единицы объема; V – объем недеформированной элементарной ячейки кристаллической решетки. Таким образом, имеем

$$\Delta G = \sqrt{3}N_0h(a_{GaInN} - a_{GaN})^2 \frac{\lambda_{0001}(1 + \nu)}{(1 - \nu)},$$

где N_0 – число Авогадро; a_i – параметр решетки; λ_{0001} – модуль сдвига в плоскости (0001); h – толщина слоя; ν – коэффициент Пуассона.

Из уравнения видно, что энергия деформации при $x = \text{const}$ зависит от толщины слоя. Так как в $In_xGa_{1-x}N/GaN$ возникают сжимающие напряжения, в приближении регулярных растворов можно написать $-\Delta G = b(1 - x)x$.

Если изучаемая система регулярна, то значение b при $h_{кр}(x)$ не изменится для всех составов $In_xGa_{1-x}N/GaN$. При уменьшении $h < h_{кр}$ значения ΔG и b будут убывать. При увеличении $h > h_{кр}$ произойдет пластическая деформация, которая будет сопровождать-

ся сбросом напряжений и генерацией дислокаций несоответствия. При этом упругие напряжения уменьшатся и по мере увеличения h параметр b будет стремиться к α .

Изменение ширины зоны в квантовой яме GaN/InGaN/GaN активной области в светодиодной структуре приведет к изменению длины волны излучения. На рис.5 приведены расчетные и экспериментальные значения изменения длины волны излучения в гетероструктуре с одиночной квантовой ямой для различного состава $Ga_{1-x}In_xN$ в зависимости от толщины псевдоморфной квантовой ямы.

Кроме изменения эффективной ширины запрещенной зоны, как показывают последние исследования, изменение толщины квантовой ямы значительно влияет на функциональные характеристики. При изменении толщины квантовой ямы от 3 до 5 нм квантовая эффективность излучателя снижается в 1,5–2 раза [11].

Полученные в работе результаты позволяют найти основные модельные закономерности процессов формирования квантоворазмерных гетероструктур и будут полезны при планировании экспериментов по изучению механизма кристаллизации GaN на инородных подложках, формировании состава эпитаксиальных слоев гетероструктуры, а также для достижения необходимых функциональных характеристик активных областей гетероструктуры с множественными квантовыми ямами.

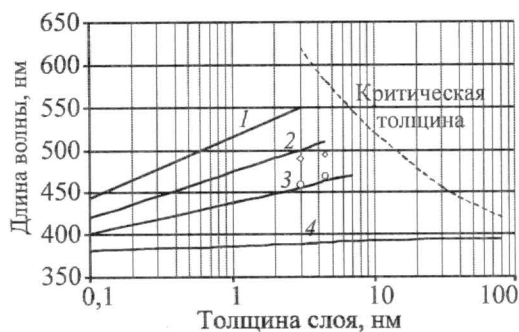


Рис.5. Изменение длины волны электролюминесценции при изменении толщины псевдоморфного слоя $Ga_{1-x}In_xN$ при различных содержаниях InN, моль.доля: $x = 0,4; 0,3; 0,2; 0,1$ кривые 1–4 соответственно (расчет); \diamond – 0,3, \circ – 0,25 (эксперимент)

Литература

1. Пригожин И., Дефэй Р. Химическая термодинамика. – Новосибирск: Наука, 1966. – 509 с.
2. Глазов В.М., Земсков В.С. Физико-химические основы легирования полупроводников. – М.: Наука, 1967. – 56 с.
3. Asai T., Dandy D. Thermodynamic analysis of III–V semiconductor alloys grown by metalorganic vapor phase epitaxy // J. of Appl. Phys., 2000. – Vol. 88, N 7. – P. 4407–4416.
4. Мейер К. Физико-химическая кристаллография. – М.: Металлургия, 1972. – 250 с.
5. Vigdorovich E.H., Sveshnikov Y.N. Thermodynamic Stability of the GaN-InN-AlN // System Inorganic Materials. – 2000. – Vol. 36, N 5. – P. 568–570.
6. Никуфоров С.Г. Почему светодиоды не всегда работают так, как хотят их производители? // Компоненты и Технологии. – 2007. – № 7. – С. 170–175.
7. Seki H., Koukitu A. Thermodynamic Calculation for the Quaternary Alloy Composition of Vapor-Grown $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ // Jpn. J. Appl. Phys. – 1979. – Vol. 18, N 8. – P. 1649, 1650.
8. Van Schilfhaarde M., Sher A., Chen A. Theory of AlN, GaN, InN and their alloys. – J. of Crystal Growth. – 1997. – 178. – P. 8–31.
9. Belousov M., Volf B., Ramer J.C., Armour E.A., Gurary A. In situ metrology advances in MOCVD growth of GaN-based materials // J. of Crystal Growth. – 2004. – 272. – P. 94–99.
10. Кузнецов В.В., Москвин П.П., Сорокин В.С. Неравновесные явления при жидкофазной гетероэпитаксии полупроводниковых твердых растворов. – М.: Металлургия, 1991. – 174 с.
11. Stevenson R. Researchers seek material solution to GaN deficiencies at ISBLED 2006 // Compound Semiconductor. – 2006. – July. – P. 20–22.

Статья поступила
29 ноября 2007 г.

Вигдорovich Евгений Наумович – доктор технических наук, профессор кафедры инновационных технологий приборостроения МГУПИ. Область научных интересов: материаловедение и технология полупроводников.

Модель структуры вюрцитных и кубических нитридов металлов IIIa группы

С.А.Неустроев

Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)

Структура кристаллов нитридов металлов (B, Al, Ga, In, Tl) представлена сомкнутыми тетраэдрами так, что «азотный» тетраэдр содержит в себе вершину «металлического», а «металлический» – вершину «азотного». Определены параметры вюрцитной и кубической сингонии, а именно положение и расстояние между атомами, радиус азота, смещение разноименных атомов от центра масс тетраэдра и др.

Нитриды металлов IIIa группы вюрцитной и кубической сингонии нашли применение в электронике, так как сочетают электрофизические, тепловые и механические свойства, обладают химической инертностью и т.д. [1, 2]. Используются как индивидуальные нитриды, так и их сплавы, гомо- и гетероструктуры различной сингонии, композиции с металлами. Компоненты нитридов различаются химической природой и размерами атомов, однако отсутствие информации о взаимном расположении атомов, размерах, расстоянии между ними затрудняет разработку и изготовление приборов. Потребность в этих данных возрастает по мере уменьшения элементов микросхем, особенно с переходом в субмикронную и нанометровую области.

В литературе приводятся спектроскопические данные о наиболее важных для электроники сингониях нитридов – гексагональной типа вюрцита ($w\text{-MeN}$) и кубической ($c\text{-MeN}$). Первая относится к двухслойной упаковке $\dots ABAB\dots$, вторая – к трехслойной $\dots ABCA\dots$. Каждый слой двухслойной упаковки, так же как и трехслойной, представляет собой набор соприкасающихся сфер атомов на плоскости A, B, \dots , центры сфер лежат в углах равносторонних треугольников. Атомы каждого последующего слоя занимают лунки предыдущего. Набор таких слоев в указанной последовательности отражает структуру кристалла. Рассматриваемые нитриды – молекулярные образования, из которых подобным образом осуществляется «сборка» кристалла.

В отличие от свободной молекулы, в которой атомы азота и металла соединены тройной связью ($\text{Me}\equiv\text{N}$), в кристалле нитрида присутствуют ординарные связи. Их направление и протяженность являются предметом исследования в настоящей работе. При этом рассматривается расположение центров атомов азота на плоскости A, B, \dots , с которыми связаны атомы металла, располагающиеся на перпендикулярных осях ниже.

Ячейка вюрцитного нитрида – гексагональная призма $P6_3mc$ с постоянными a и c . Гексагон $DEFGHJ$ базовой плоскости кристалла A (рис.1,а) охватывает шесть треугольников, в его углах и центре O находятся атомы азота. В одном из треугольников ODJ они изображены соприкасающимися окружностями. Атомы металла расположены под атомами азота. Центры атомов азота слоя B смещены относительно базового A вдоль высоты треугольника ODJ (это один из трех треугольников гексагона с вершинами вниз) на $2/3$ ее длины и находятся на осях O', F' и G' . Проекция сечения кристалла плоскостями, проходящими через O, O' и D , приведена в верхней части рис.1,б.

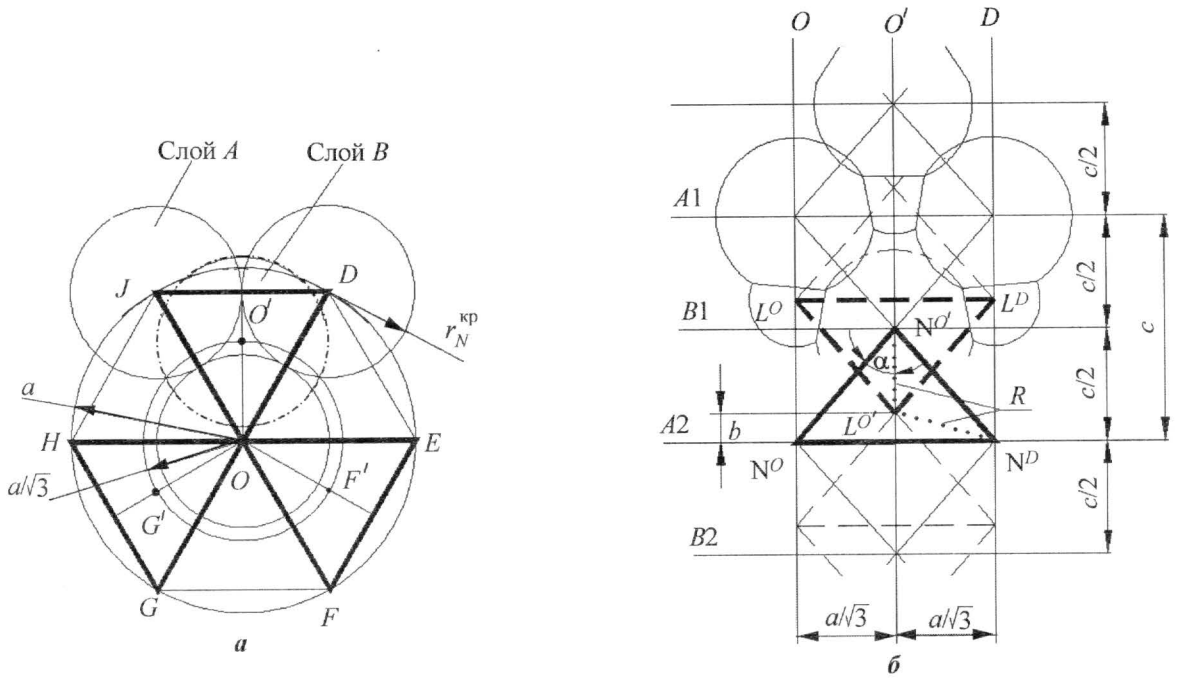


Рис.1. Схема расположения атомов в ячейке вюрцитного нитрида: a – проекция базовой плоскости (сплошные соприкасающиеся окружности – контуры атомов с центрами в точках D , O и J , штрихпунктирная окружность – атом азота на плоскости B , ее центр смещен относительно центра гексагона на $2/3$ высоты треугольника DOJ); b – вид сечения ячейки плоскостями, проходящими через точки O , O' и D параллельно оси c ($N^O N^D N^J$ – основание «азотной» пирамиды; $L^O L^D L^J$ – основание «металлической»; b – положение вершины «металлической» пирамиды)

Выделенные на рис.1, a треугольники гексагона ODJ , OHG и OFE плоскости A можно представить основаниями пирамид с вершинами на осях O' , G' и F' плоскости $B1$. На рис.1, b выделена развертка такой пирамиды, обозначены центры атомов азота N с индексами осей их нахождения: основание на плоскости $A2$ – треугольник $N^O N^D N^J$ (N^J не виден, так как находится за плоскостью развертки), и вершиной $N^{O'}$ на плоскости $B1$. Подобное построение сделано и для пирамиды атомов металла (обозначены L): основание $L^O L^D L^J$ (L^J не виден), вершина $L^{O'}$. Геометрия «металлической» и «азотной» пирамид одинакова, атомы ее основания и вершина находятся на тех же осях, но «металлическая» повернута на 180° и смещена вдоль вертикальной оси так, что ее вершина оказалась внутри «азотной» пирамиды. Вершина «азотной» пирамиды также размещена внутри «металлической».

На рис.1, b положение вершины «металлической» пирамиды относительно основания «азотной» определяется значением длин связи R между центром атома азота, который является вершиной «азотной» пирамиды $N^{O'}$ и центром атома металла $L^{O'}$ (вершина металлической пирамиды). Атом $L^{O'}$ находится также в химической связи с атомами азота основания азотной пирамиды. Расстояние между центром атома $L^{O'}$ и центрами атомов основания азотной пирамиды N^O , N^D и N^J также равно R . Эти равенства соответствуют равенству энергии всех связей в кристалле:

$$L^{O'} N^O = L^{O'} N^D = L^{O'} N^J = L^{O'} N^{O'} = N^{O'} L^O = N^{O'} L^D = N^{O'} L^J = R. \quad (1)$$

На рис.1, b длина связи между центрами разноименных атомов R обозначена пунктиром, показан также угол между высотой и ребром пирамиды α .

С учетом этих построений и данных постоянных ячейки можно записать для R :

$$R = (1/2)(N^{O'} N)(1/\cos \alpha). \quad (2)$$

Здесь $N'O'N$ – длина ребра «азотной» пирамиды (индексы атомов азота основания опущены):

$$N'O'N = [(a/\sqrt{3})^2 + (c/2)^2]^{1/2}, \quad (3)$$

косинус угла α равен отношению высоты пирамиды $c/2$ к ее ребру:

$$\cos \alpha = (c/2)/(N'O'N). \quad (4)$$

Подставив (4) в (2), получим расчетное уравнение для R :

$$R = (N'O'N)^2/c. \quad (5)$$

Положение вершины «металлической» пирамиды относительно основания «азотной» определяется разностью между высотой пирамиды $c/2$ и R :

$$b = c/2 - R. \quad (6)$$

Исходя из наличия на атомах азота отрицательного заряда, минимальное расстояние их сближения в кристалле соответствует половине постоянной ячейки a , т.е. «кристаллическому» радиусу азота:

$$r_N^{kp} = a/2. \quad (7)$$

В табл.1 приведены значения пространственных постоянных ячейки нитридов металлов III группы вюрцитной сингонии и вычисленные по формулам (3), (5), (6) и (7) значения параметров структуры.

В последнем столбце табл.1 даны значения смещения положения вершины «металлической» пирамиды $L'O'$ от центра масс «азотной» пирамиды: положительные – в направлении основания «азотной» пирамиды, отрицательные – в противоположном. Нитрид индия имеет наибольшее значение смещения, затем следует нитрид алюминия, наименьшее – одна из форм нитрида галлия и нитрида таллия. Положение вершины «азотной» пирамиды относительно основания «металлической» имеет то же значение.

Таблица 1

Параметры кристаллической решетки нитридов металлов IIIa группы вюрцитной сингонии

Вещество	Литературный источник	Постоянные ячейки, 10^{-10} м		Вычисленные значения, 10^{-10} м				
		a	c	$N'O'N$	R	b	r_N^{kp}	$c/(8-b)$
BN	[1]	2,55	4,23	2,576960	1,569911	0,545089	1,275	-0,016339
AlN	[3]	3,1114	4,9792	3,070023	1,892883	0,596717	1,5557	0,025683
GaN	[1]	3,189	5,185	3,179774	1,950040	0,642459	1,5945	0,005666
GaN	[4], с. 445	3,186423	5,176435	3,175421	1,947923	0,640294	1,593211	0,006760
GaN	[5]	3,095	5,000	3,072947	1,888601	0,611398	1,5475	0,013602
GaN	[5]	3,192	5,196	3,185261	1,962634	0,645365	1,596	0,004135
GaN	[5]	3,126	5,119	3,131825	1,916063	0,64497	1,563	-0,004495
GaN	[5]	3,043	4,969	3,042910	1,863424	0,621076	1,5215	$4,9 \cdot 10^{-5}$
InN	[4], с. 450	3,540136	5,703497	3,508560	2,158323	0,693425	1,770068	0,095121
InN	[5]	3,536	5,709	3,509406	2,157283	0,697217	1,768	0,016408
InN	[5]	3,5446	5,7034	3,510022	2,160159	0,691541	1,7723	0,021384
TlN	[6]	3,68	6,01	3,680238	2,253603	0,751397	1,84	$-1,47 \cdot 10^{-5}$

Электрические поля, возникающие между атомами металла и азота, обусловлены различной электроотрицательностью компонентов соединения. Связи между атомами металла и азота в пирамиде имеют ионно-химический характер. Связь характеризуется присутствием на каждом атоме положительного (на металле) и отрицательного (на азоте) заряда. Рассматривая поля, создаваемые зарядами атомов азотной пирамиды $N^O N^D N^J N^{O'}$, можно видеть, что составляющая поля атома $N^{O'}$ вдоль оси O' превышает сумму полей вертикальных составляющих от атомов основания. Аналогично атом азота, находящийся в металлической пирамиде $N^{O'}$, притягивается к вершине металлической пирамиды $L^{O'}$. Направление векторов этих полей противоположно, а значения равны. Это обеспечивает электронейтральность кристалла.

Кубическая структура нитридов металлов III группы подобна сфалериту ($F\bar{4}3m$) с постоянной пространственной ячейки a , которая рассмотрена в гексагональной анаморфозе, т.е. как трехслойная упаковка. В трехслойной упаковке нитрида ... $ABCA$... можно выделить гексагональную призму с пространственными постоянными a_h и c_h . Между двумя базовыми плоскостями A призмы находятся плоскости B и C . Все плоскости проведены через центры атомов азота. На каждой плоскости центры атомов азота занимают углы равносторонних треугольников. На рис.2,а контур базовой плоскости ($DEFGHJ$) – гексагон охватывает шесть треугольников, в его углах и центре находятся центры атомов азота. Центры атомов азота плоскостей B размещаются на осях, проходящих через ортоцентры треугольников гексагона с вершинами вниз O', F' и G' . Аналогично расположение центров атомов азота плоскости C – на осях ортоцентров треугольников с вершинами вверх – D'', O'' и J'' .

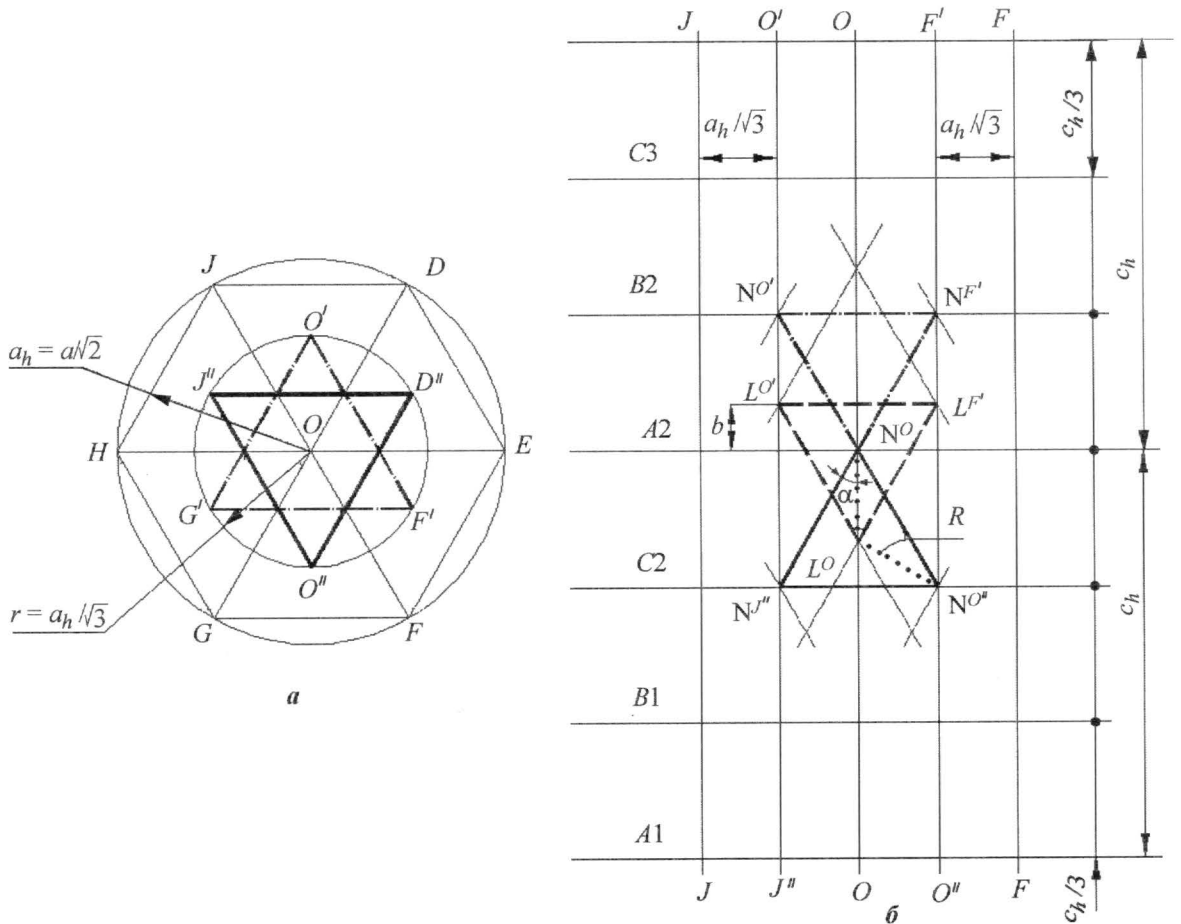


Рис.2. Схема расположения центров атомов фрагмента кубического нитрида:
 а – вид сверху; б – сечение фрагмента призмы плоскостями, параллельными поворотной оси

Можно представить, что треугольники $O'F'G'$ и $D''O''J''$ являются основаниями пирамид с общей вершиной, находящейся на плоскости $A - O$. На рис.2,б представлен фрагмент структуры, на котором ниже базовой плоскости $A2$ изображена развертка сечения плоскостями $JJ''OO''F$ пирамиды с основанием на плоскости $C2$ (выделена); центры атомов азота основания пирамиды расположены на осях J'' , O'' и D'' (ось D'' находится за плоскостью сечения), а вершина – на оси O . Пирамида слоя $B2$ имеет общую вершину с пирамидой слоя $C2$, а ее сечение плоскостями $JO'OF'F$ совмещено с сечением пирамиды слоя $C2$ плоскостями $JJ''OO''F$, но расположено выше плоскости $A2$. На рис.2,б это сечение выделено штрихпунктиром. Система обозначений расположения атомов подобна рис.1,б. Штрихом обозначена «металлическая» пирамида, построенная на центрах металлических атомов слоя $B2$: основание L^O , $L^{F'}$ и $L^{G'}$ ($L^{G'}$ не виден), а вершина – на центре атома металла слоя $A2 - L^O$.

Согласно уравнению (1) на рис.2,б обозначены расстояния между разноименными атомами R и угол α между высотой и ребром пирамиды. Приведенные на рисунке размеры пирамиды гексагональной анаморфозы $c\text{-MeN}$ получены для кристалла нитрида из геометрических построений: $a_h = a / \sqrt{2}$, $c_h = a\sqrt{3}$; $N^ON = a_h$ (N – угол треугольника основания); расстояние между атомами азота и металла в кристалле

$$R = a(1/4)\sqrt{3}; \tag{8}$$

расположение вершины «металлической» пирамиды относительно основания «азотной»

$$b = a(1/3 - 1/4)\sqrt{3}. \tag{9}$$

Значения параметров гексагональной анаморфозы кубических нитридов металлов IIIa группы, полученные по соотношениям (8), (9) приведены в табл.2.

Таблица 2

Параметры кристаллической решетки нитридов металлов IIIa группы кубической сингонии

Вещество	Литературный источник	Постоянные ячейки, 10^{-10} м			Вычисленные значения, 10^{-10} м			
		a	a_h	c_h	$R(8)$	$b(9)$	$r_N^{kp} = a_h(1/2)$	$c_h/12$
BN	[7]	3,615	2,55659	6,261136	1,565340	0,521780	1,278295	0,521761
AlN	[8]	4,12	2,913176	7,136049	1,784012	0,594671	1,456588	0,594671
AlN	[9]	3,9565	2,797668	6,852858	1,713214	0,571071	1,398834	0,571071
AlN	[10]	4,045	2,860247	7,006145	1,751536	0,583845	1,430123	0,583845
AlN	[11]	4,0316	2,850771	6,982936	1,745734	0,581911	1,425385	0,581911
AlN	[5]	4,365	3,086521	7,56040	1,890100	0,630033	1,543260	0,630033
GaN	[5]	4,364	3,085814	7,558669	1,889667	0,629889	1,542907	0,629889
GaN	[5]	4,531	3,203900	7,847922	1,961980	0,653993	1,60195	0,653993
GaN	[5]	4,419	3,124705	7,653932	1,913483	0,637828	1,562352	0,637828
InN	[5]	4,980	3,521	8,625612	2,156403	0,718801	1,7605	0,718801
InN	[5]	4,983	3,523513	8,63089	2,157702	0,719234	1,761756	0,719234

Кубический нитрид бора представлен одним видом, другие нитриды имеют несколько кубических видов, которые различаются значением постоянной ячейки. Некоторые из них имеют близкие значения постоянных, например $a_{AlN} = 4,365 \cdot 10^{-10}$ м,

$a_{\text{GaN}} = 4,364 \cdot 10^{-10}$ м. Вычисленное положение вершинных атомов пирамид нитридов алюминия, галлия и индия относительно основания «азотных» пирамид совпадает с приведенным геометрическим положением центра масс. Отклонение в пятом знаке после запятой замечено только для нитрида бора: $b = 0,521780 \cdot 10^{-10}$ и $c_H/12 = 0,521761 \cdot 10^{-10}$ м. Приведенные данные по взаимному положению атомов азота и металла в нитридах кубической сингонии определенно указывают на полную компенсацию полей зарядов, удерживаемых атомами одного сорта, полями зарядов атомов другого сорта.

Таким образом, кристаллы нитридов вюрцитной и кубической сингонии можно представить состоящими из тетраэдров азота и металла. Эти тетраэдры сомкнуты вершинами так, что вершинные атомы одного сорта оказались в объеме пирамиды другого сорта. В кубическом нитриде положение атома металла совпадает с центром масс «азотного» тетраэдра. Точно так же атом азота в «металлическом» тетраэдре находится в его центре масс. Это и создает полную компенсацию электрических полей всех атомов, несмотря на наличие на них заряда.

В кристалле вюрцитной сингонии положение атома другой природы не совпадает с центром масс тетраэдра. Оба сомкнутые вершинами тетраэдры («азотный» и «металлический») имеют равные значения вертикальных составляющих векторов электрических полей, но с противоположным направлением. В статических условиях они взаимно компенсированы. Однако механическое воздействие на кристалл вызывает разновременное смещение атомов азота и металла. Оно внешне проявляется электрической волной. Величина пьезоэлектрического эффекта в вюрцитном кристалле нитрида много больше, чем в кубическом.

Литература

1. *Mohammad S.N.* Electrical characteristics of thin film cubic boron nitride // *Solid-State Electronics*. – 2002. – Vol. 46, N 1. – P. 203–222.
2. *Marcos H., Di Carlo A., Cingolani R.* GaN-based modulation doped FETs and UV detectors // *Solid-State Electronics*. – 2002. – Vol. 46, N 1. – P. 157–202.
3. Natl. Bur. Stand. (USA). Monogr. – 1975. – N 25 (12). – P.5.
4. Справочник химика: В 5 т. Т. 1. / *Под ред. Б.П.Никольского*. – М.–Л.: Химия, 1966. – 1071 с.
5. *Yeh C.Y., Lu Z.W., Froyen S., Zunger A.* Zinc-biende-wurtzite politipism in semiconductors // *Phys. Rev. B*. – 1992. – Vol. 46, N 16. – P. 10086–10097.
6. *Самсонов Г.В., Пилянкевич А.П., Андреева А.Ф., Шагинян Л.Р.* Структура пленок нитрида галлия // *ДАН СССР*. – 1973. – Т. 213, № 1. – С. 101–103.
7. *Химическая энциклопедия: В 5 т. Т. 1. / Под ред. И.Л.Кнуныца*. – М.: Сов. энциклопедия, 1988. – С. 301–303.
8. Fiala. Central Resarch institute SKODA, Czechoslovakia. 1973. (Private Communication).
9. *Kieffer R., Wruss W., Willer B.* Proprieties phisigues et ceramiques AlN–Al₂O₃ obtenues par compression a chaud // *Rev. Int. Huetes Temp et Refract.* – 1976. – Vol. 13, N 2. – P. 97–107.
10. *Vollstadt H., Ito E., Akaishi M. et al.* High pressure synthesis of rocksalt Type of AlN // *Proc. Japan Acad. Ser B*. – 1990. – Vol. 66, N 11. – P. 7–9.
11. *Van Camp P.E., Van Doren V.E., Devreese J.T.* High-pressure properties of wurtzite and rocksalt-type aluminium nitride // *Phys. Rev. B*. – 1991. – Vol. 44, N 16. – P. 9056–9059.

Статья поступила
30 ноября 2007 г.

Неустроев Степан Архипович – доктор технических наук, профессор кафедры материалов и твердотельной электроники МИЭТ. *Область научных интересов:* электротехнология в микроэлектронном производстве.

Влияние конструктивных параметров субмикронных НЕМТ-транзисторов на верхнюю границу динамического диапазона линейности усилителей

А.М.Бобрешов, И.В.Хребтов, М.П.Ряполов

Воронежский государственный университет

Проведено исследование зависимости верхней границы динамического диапазона линейности и шумовых характеристик НЕМТ-транзисторов с прямой структурой от геометрических параметров. Предложена оптимизация параметров транзистора с целью улучшения характеристик усилителей на его основе.

Широкое распространение беспроводных средств связи приводит к значительному усложнению электромагнитной обстановки, при этом используются все более сложные схемы модуляции для увеличения скорости передачи данных. Поэтому к приемно-передающим устройствам предъявляются жесткие требования для обеспечения электромагнитной совместимости. Для входных малощумящих усилителей это означает возможность устойчивой работы при наличии на входе различного рода помех. Основными характеристиками электромагнитной совместимости являются интермодуляция, блокирование и перекрестные искажения. Интермодуляционные характеристики зависят от нелинейных свойств каскадов СВЧ-приемника, что позволяет говорить об уменьшении мощности интермодуляционных продуктов, образующихся в усилителе, при расширении динамического диапазона линейности. Кроме нелинейных характеристик необходимо учитывать шумовые характеристики, которые определяют чувствительность приемников. Поскольку возможности улучшения шумовых характеристик полевых транзисторов на базе МДП-технологий практически исчерпаны, основное внимание уделяется транзисторам с высокой подвижностью электронов (НЕМТ). НЕМТ-транзисторы, имеющие улучшенные шумовые и нелинейные характеристики, могут заменить полевые транзисторы во входных усилителях приемно-передающего оборудования [1–3].

Характеристики усилителей на НЕМТ-транзисторах зависят от геометрических параметров (длины и ширины затвора, толщины донорного слоя d и толщины спейсера d_i) и параметров, использованных при изготовлении полупроводниковых материалов, таких как концентрация носителей и их подвижность, критическое электрическое поле, при котором наступает насыщение, скорость носителей в насыщении, диэлектрическая проницаемость слоя полупроводника, отделяющего канал от затвора, разрыв зон проводимости между узкозонным и широкозонными полупроводниками. В настоящей работе рассмотрено влияние толщины слоев d и d_i на нелинейные и шумовые характеристики усилителей на НЕМТ-транзисторах для проведения оптимизации его структурных параметров с целью расширения динамического диапазона линейности.

Эквивалентная схема транзистора, применяемая в используемой модели, изображена на рис.1. [4] Наиболее важными элементами в эквивалентной схеме являются источник тока g_m , характеризующий крутизну транзистора, сопротивление g_d , определяющее

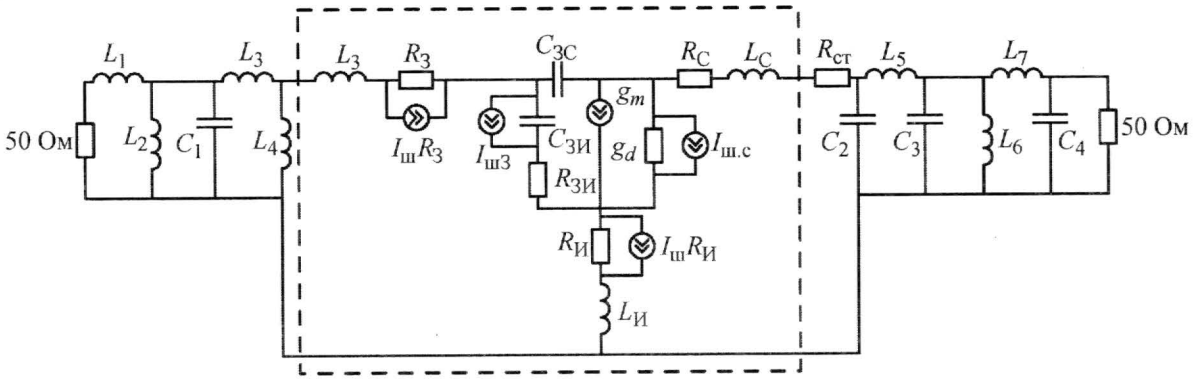


Рис.1. Эквивалентная схема усилителя (пунктиром выделена эквивалентная схема транзистора с учетом шумовых источников)

выходную проводимость, емкости затвор–исток $C_{3И}$ и затвор–сток $C_{3С}$. Для нахождения связи этих элементов с рабочим режимом транзистора используется зависимость концентрации электронов двумерного электронного газа НЕМТ-транзистора в его потенциальной яме от распределения потенциала в канале, а также концентрация свободных электронов и нейтрализованных доноров в слое AlGaAs [4].

Концентрация электронов двумерного газа рассчитывается по формуле

$$n_{s1} = \frac{\epsilon}{(d + \Delta d)} (U_{3И} - U_{t1}) \frac{1}{q}, \quad (1)$$

где $U_{3И}$ – напряжение затвор–исток; U_{t1} – пороговое напряжение для электронного газа при 300 К; d – толщина донорного слоя AlGaAs; $\Delta d = \epsilon a / q$ – поправка к толщине донорного слоя; q – заряд электрона; ϵ – диэлектрическая проницаемость слоя AlGaAs; $a = 0,125 \cdot 10^{-16} \text{ В} \cdot \text{м}^2$ – параметр модели.

Для концентрации свободных электронов в слое AlGaAs имеем

$$n_{s2} = \left(\frac{\epsilon}{d - n_{s01} / N_D} - \frac{\epsilon}{d + \Delta d} \right) (U_{3И} - U_{t2} - U_0) \frac{1}{q}, \quad (2)$$

здесь N_D – концентрация доноров в слое AlGaAs; $U_0 = v_{s1} L / \mu_1$, v_{s1} и μ_1 – параметры модели; L – длина затвора; $U_{t2} = U_{t1} + q n_{s01} (d + \Delta d) / \epsilon$; n_{s01} – максимально достигаемая концентрация электронов 2D-газа в потенциальной яме.

Концентрация нейтрализованных доноров n_{s3} рассчитывается по формуле

$$n_{s3} = \frac{\epsilon}{n_{s01} / N_D} (U_{3И} - U_{t2} - \frac{U_0}{2}) \frac{1}{q}. \quad (3)$$

Из соотношений (1) – (3) можно найти зависимости $C_{3И}(U_3)$, $C_{3С}(U_C)$, $g_m(U_3)$ и $g_d(U_C)$, на основе которых строятся PSpice модели элементов $C_{3И}$, $C_{3С}$, g_m и g_d эквивалентной схемы.

Учет влияния длины затвора, ударной ионизации, насыщения дрейфовой скорости электронов в канале и напряжения стока на работу транзистора позволяет описать влияние короткоканальных эффектов, возникающих в транзисторах с длиной затвора менее 1 мкм. Для этого используется следующая поправка к пороговому напряжению транзистора [4]:

$$\Delta U_{off} = \frac{l_m}{L} (v_m U_{СИ} + v_r U_{3И} U_{СИ} \cdot \exp(v_w U_{СИ}) + 1), \quad (4)$$

где $U_{СИ}$ – напряжение сток–исток; L – длина затвора; l_m , v_m , v_r , v_w – параметры модели транзистора, определяемые по вольт-амперным характеристикам и зависимости порогового напряжения от напряжения на затворе. Данная поправка позволяет описывать транзисторы с длиной затвора от 0,1 до 1 мкм.

Для исследования зависимости нелинейных характеристик усилителей на НЕМТ-транзисторах от толщины донорного слоя AlGaAs и спейсера в пакете OrCad 9.2 синтезирован однокаскадный усилитель. На входе и выходе использованы фильтры для согласования усилителя с нагрузкой 50 Ом и получения требуемой амплитудно-частотной характеристики с центральной частотой 2 ГГц. Схема полученного усилителя, включающая эквивалентную схему НЕМТ-транзистора и генераторы шумового тока, приведена на рис.1 ($R_{ст}$ – согласующее сопротивление внешней цепи стока).

Генератор шумового тока $I_{ш.з}$, включенный во входную цепь активной области транзистора, описывает индуцированный шум затвора, определяемый флуктуациями напряжения затвор–канал из-за тепловых флуктуаций напряжения в канале от двух источников. Первый определяется флуктуациями напряжения затвор–канал из-за тепловых флуктуаций напряжения в канале. Второй источник определяется вкладом диффузионного шума части канала в области, где электроны достигают скорости насыщения. Генератор шумового тока $I_{ш.с}$, включенный в выходную цепь эквивалентной схемы, описывает тепловой шум проводящей части канала области до насыщения скорости с учетом температуры электронов и шум за счет дрейфа спонтанно возникающих дипольных слоев в области насыщения скорости.

Шум затвора индуцируется шумом в канале полевого транзистора. Оба шума обусловлены одними физическими процессами, поэтому токи $I_{ш.с}$ и $I_{ш.з}$ не являются независимыми. Коэффициент корреляции имеет мнимый характер, что соответствует емкостной связи шумовых флуктуаций канала с наведенными шумами в цепи затвора.

Среднеквадратические значения шумовых токов стока и затвора могут быть определены следующим образом [5]:

$$\overline{|I_{ш.с}|^2} = 4kT_0 \Delta f g_m P, \quad \overline{|I_{ш.з}|^2} = 4kT_0 \Delta f \frac{\omega^2 C_{зи}^2}{g_m} R. \quad (5)$$

Здесь k – постоянная Больцмана; T_0 – абсолютная температура; Δf – полоса частот; ω – рабочая частота; g_m – крутизна; P, R – шумовые параметры. Зависимость P и R от напряжений $U_{зи}$ и $U_{си}$ описывается следующими соотношениями:

$$P = P_1 + P_2; \quad P_1 = \frac{P'_1}{(U_{зи} - U_{off})^{0,75} U_{си}};$$

$$P_2 = P'_2 (U_{зи} - U_{off}) \sqrt{U_{си}} + P''_2 (U_{зи} - U_{off})^5 U_{си}^4; \quad R = R' (U_{зи} - U_{off})^2 / U_{си}^2,$$

где P'_1, P'_2, P''_2, R' – параметры модели, U_{off} – пороговое напряжение транзистора. Для учета эффектов короткого канала субмикронных транзисторов вместо порогового напряжения U_{off} следует использовать выражение $U_{off} - \Delta U_{off}$, где ΔU_{off} определяется из (4).

Шумовые источники $I_{ш.з3}$ и $I_{ш.зИ}$ описывают тепловой шум сопротивлений затвора R_3 и истока $R_{И}$. Среднеквадратические значения шумовых токов этих элементов определяется следующим образом:

$$\overline{|I_{ш.з3}|^2} = 4kT_0 \Delta f / R_3, \quad \overline{|I_{ш.зИ}|^2} = 4kT_0 \Delta f / R_{И}.$$

Для выбранного вида эквивалентной схемы существует аналитическое выражение для расчета минимального коэффициента шума. Итоговое выражение имеет вид

$$F_{\min} = 1 + 2g_n \left(R_C + \sqrt{R_C^2 + \frac{r_n}{g_n}} \right), \quad (7)$$

где $g_n = \frac{\omega^2 C_{3И}^2 R_{3И}^2}{g_m} (P + R - 2C\sqrt{PR})$; $r_n = R_3 + R_{И} + \frac{1 + \omega^2 C_{3И}^2 R_{3И}^2}{g_m} \frac{PR(1 - C^2)}{P + R - 2C\sqrt{PR}}$;

$R_C = R_3 + R_{И} + \frac{R_{3И}(P - C\sqrt{PR})}{P + R - 2C\sqrt{PR}}$, где C – модуль коэффициента корреляции. Для субмикронных НЕМТ-транзисторов модуль C близок к единице и не зависит от рабочего режима транзистора [6]. В настоящей работе использовалось значение коэффициента корреляции $C = 0,95$.

В качестве отправной точки для исследования влияния толщины донорного слоя и спейсера на характеристики транзистора выбран транзистор ATF36143 фирмы Hewlett-Packard с длиной затвора 0,5 мкм, шириной затвора 400 мкм и рабочим режимом $U_3 = -0,2$ В и $U_C = 2$ В. Толщина донорного слоя составляет 41 нм, спейсера – 5 нм. Были проведены расчеты для транзисторов с фиксированной толщиной донорного слоя $d = 41$ нм при изменении толщины спейсера от 2 до 10 нм и для транзисторов с фиксированной толщиной спейсера 2, 5 и 10 нм при изменении толщины донорного слоя от 37 до 45 нм. Значения толщины спейсера выбраны как наиболее часто встречающиеся в литературе при описаниях транзисторов [7–9]. Для каждого из них рассчитаны зависимости верхней границы динамического диапазона линейности по уровню –1 дБ, коэффициента усиления и коэффициента шума от напряжения на затворе. При этом напряжение на стоке не менялось и равнялось 2 В.

При фиксированной толщине донорного слоя d и изменении толщины спейсера коэффициент усиления растет с уменьшением d_i . Наибольший коэффициент усиления наблюдается при $d_i = 2$ нм, наименьший – при $d_i = 10$ нм (рис.2, здесь и далее дБм – мощность в дБ относительно милливатта). Это объясняется увеличением расстояния между донорным слоем и каналом, что приводит к меньшей плотности двумерного электронного газа и, следовательно, меньшей крутизне. При этом верхняя граница динамического диапазона линейности расширяется при увеличении толщины спейсера, достигая максимума при $d_i = 10$ нм.

При постоянной толщине спейсера d_i и увеличении толщины донорного слоя d уменьшается максимальное значение коэффициента усиления и изменяется положение его максимума. Положение максимума определяется из условия соприкосновения областей обеднения в донорном слое [10]. Одна из этих областей вызвана диффузией электронов в канал, а другая связана с барьером Шотки на границе полупроводника с затвором. Размер области обеднения, вызванного диффузией электронов в канал, не зависит от приложенного напряжения и определяется электрофизическими параметрами транзистора. Толщина обедненного слоя со стороны затвора изменяется в зависимости от приложенного к нему напряжения, и для разной толщины донорного слоя соприкос-

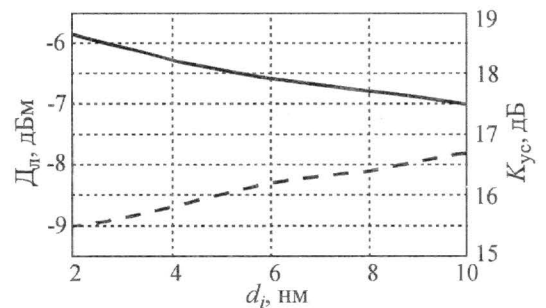


Рис.2. Зависимость верхней границы динамического диапазона линейности D_n и коэффициента усиления K_{yc} от толщины спейсера d_i ($d = 41$ нм)

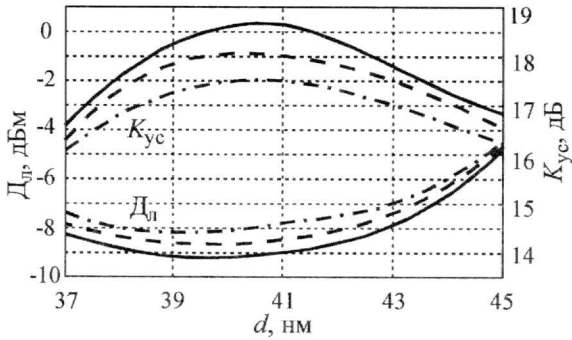


Рис.3. Зависимость верхней границы динамического диапазона линейности D_n и коэффициента усиления K_{yc} от толщины донорного слоя d : — $d_i = 2$ нм; --- $d_i = 5$ нм; -·-·- $d_i = 10$ нм

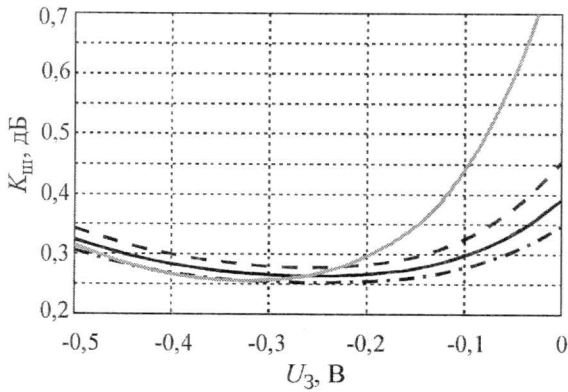


Рис.4. Зависимость минимального коэффициента шума $K_{ш}$ на частоте 2 ГГц в от напряжения на затворе U_3 для различных соотношений толщин легированного слоя/спейсера, нм: -·-·- 41/2; — 41/5; --- 41/10; — 41/50

Проведенные расчеты позволяют сделать вывод, что при увеличении толщины спейсера до 10 нм и донорного слоя до 45 нм и сохранении рабочего режима транзистора с $U_3 = -0,2$ В и $U_C = 2$ В возможно расширение верхней границы динамического диапазона линейности по уровню -1 дБ на 4 дБ (см. рис.3). Изменение коэффициента

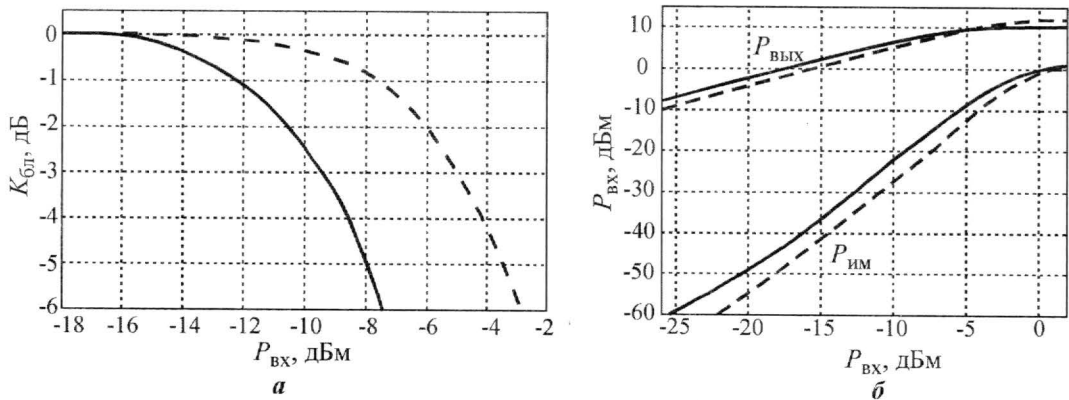


Рис.5. Коэффициент блокирования, передаточные характеристики $P_{вых}$ и интермодуляционные продукты 3-го порядка $P_{им}$ для исходного (а) и оптимизированного (б) транзисторов для разных соотношений толщин легированного слоя/спейсера, нм: — 41/5; -·-·- 45/10

новение областей обеднения будет происходить при разных напряжениях на затворе, что и вызывает изменение положения максимума усиления. Кроме того, максимальное значение коэффициента усиления монотонно возрастает при уменьшении толщины донорного слоя. Зависимость верхней границы динамического диапазона линейности от толщины донорного слоя имеет минимум при $d = 40$ нм. Наибольшее расширение динамического диапазона достигается при $d = 45$ нм и составляет 4 дБ (рис.3).

Коэффициент шума при увеличении толщины спейсера монотонно уменьшается, что объясняется снижением влияния рассеяния на ионизированных примесях в донорном слое (рис.4). При изменении толщины донорного слоя коэффициент шума существенно возрастает для $d > 43$ нм и при напряжении на затворе близком к нулю, а также для $d = 37$ нм и при напряжениях на затворе близких к $U_3 = -0,4$ В. Первое вызвано образованием в донорном слое дополнительного канала проводимости, существующего в обычном полевом транзисторе и приводящем к ухудшению характеристик НЕМТ-транзисторов. Второе можно объяснить увеличением вклада дробового шума при уменьшении плотности двумерного электронного газа, наблюдаемого в этом рабочем режиме.

шума при этом составляет 0,025 дБ (см. рис.4). Поскольку верхняя граница динамического диапазона линейности является основной нелинейной характеристикой усилителя, определяющей параметры его электромагнитной совместимости, ее расширение приводит к улучшению остальных характеристик усилителя, таких как блокирование и интермодуляция. Для блокирования расширение верхней границы динамического диапазона по уровню -1 дБ составляет 4,5 дБ (рис.5). При этом уменьшение продукта интермодуляции 3-го порядка при той же входной мощности достигает 5 дБ.

Литература

1. Hill J., Ladbrooke P.H. High Electron Mobility Transistors (HEMTs) – A Review // The GEC Journal of Research. – 1986. – Vol. 4, № 1. – P. 1–14.
2. GaAs PHEMT chipsets and IC processes for high-end fiber optic applications / R.LebLANC, A.Gasmi, M.Zahzouh et al. // Intern. J. of High Speed Electronics and Systems. – 2003. – Vol. 13, N 1. – P. 91–109.
3. Microwave performances of silicon heterostructure-FETs / F.Aniel, M.Enciso, S.Richard et al. // Applied Surface Science. – 2004. – Vol. 224. – P. 370–376.
4. Бобрешов А.М. Хребтов И.В. Аналитическая модель для субмикронных HEMT-транзисторов с учетом короткоканальных эффектов // Изв. вузов. Электроника. – 2005. – № 3. – С. 14–21.
5. Analytical bias dependent noise model for InP HEMTs / B.-U. H.Klepser, C.Bergamaschi, M.Schefer et al. // IEEE Trans. on Electron Devices. – 1995. – Vol. 42. – N 11. – P. 1882–1889.
6. Bergamaschi C., Patrick W., Bachatold W. Determination of the noise source parameters in InAlAs/GaInAs HEMT heterostructure based on measured noise temperature dependence on the electric field // In Proc. Sixth Conf. InP and Rel. Mat. – 1994. – P. 21–24.
7. Anwar A.F.M., Liu K.-W., Khondler A.N. A Charge Control And Current-Voltage model for inverted MODFET'S // IEEE Trans. on Electron Devices. – 1995. – Vol. 42, N 4. – P. 586–590.
8. Bouzaiene L., Sfaxi L., Moaref H. Investigation of Two-Dimensional Electron gas concentration in selectively doped n -Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs heterostructure // Microelectronics J. – 1999. – Vol. 30. – P. 705–709.
9. Sohel Intiaz S. M., Samir M. El-Ghazaly. Performance of MODFET and MESFET: A Comparative Study Including Equivalent Circuits Using Combined Electromagnetic and Solid-State Simulator // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1998. – Vol. 46, N 7. – P. 923–931
10. Пожелла Ю. Физика быстродействующих транзисторов. – Вильнюс: Моклас, 1989. – 264 с.

Статья поступила
после доработки
6 февраля 2008 г.

Бобрешов Анатолий Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой электроники ВГУ. *Область научных интересов:* нелинейные многосигнальные явления в малощумящих твердотельных и вакуумных приборах СВЧ, проблема надежности их функционирования в условиях перегрузок, методы измерений параметров электромагнитной совместимости малощумящих усилителей СВЧ.

Хребтов Игорь Владимирович – кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры электроники ВГУ. *Область научных интересов:* нелинейные многосигнальные явления в малощумящих твердотельных приборах СВЧ, параметры электромагнитной совместимости малощумящих усилителей СВЧ.

Яполов Михаил Павлович – аспирант кафедры электроники ВГУ. *Область научных интересов:* моделирование твердотельных приборов СВЧ, параметры электромагнитной совместимости малощумящих усилителей СВЧ, приемопередающие устройства СВЧ.

Анализ процессов фоторелаксации и фотоэлектрических характеристик трехдиодной вертикально интегрированной спектрально-селективной фотоячейки

В.И.Хайновский, Е.А.Игнатъева, В.В.Уздовский

Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)

Проведен анализ и численный расчет процессов фоторелаксации и спектральных характеристик фоточувствительности n - и p -областей трехдиодной вертикально интегрированной фотоячейки. Получены зависимости времен фоторелаксации n - и p -областей фотоячейки от длины волны поглощаемого оптического излучения.

В связи с устойчивым спросом на многоспектральные фотоприемные устройства видимого диапазона для систем приема изображения с улучшенными параметрами по распознаванию развиваются технологии интегральных приемников изображения. Одной из удачных практических реализаций такого класса фотоприемных матриц является спектрально-селективный матричный фотоприемник фирмы Foveon на основе трех вертикально интегрированных p - n -переходов. Данное устройство обладает сравнительно малыми по площади фоточувствительными элементами разложения оптического изображения и достаточно высокой степенью их интеграции на одном кристалле с учетом разложения изображения на три оптических диапазона длин волн (синий, зеленый, красный) [1]. По своим конструктивным параметрам и фотоэлектрическим характеристикам он не уступает и даже превосходит известные спектрально-селективные фотоэлектрические преобразователи изображений (ФЭПИ) на основе приборов с зарядовой связью [2–7].

Разработка спектрально-селективных матричных фотоприемников высокой степени интеграции на основе вертикально совмещенных диодных структур является в настоящее время актуальной задачей. В данной работе представлены результаты анализа процессов фоторелаксации и фотоэлектрических характеристик фоточувствительной трехдиодной ячейки спектрально-селективного матричного фотоприемника. Исследования распределений электрического потенциала, а также расчеты величин поверхностных концентраций и управляющих напряжений вертикально интегрированной трехдиодной фоточувствительной структуры проведены в [8].

Анализ выполнен на основе численных расчетов на ЭВМ двумерной по толщине модели структуры фоточувствительной ячейки с помощью приборно-технологической САПР ISE TCAD швейцарской фирмы ISE.

На рис.1 схематически изображен поперечный вертикальный разрез кремниевой полупроводниковой структуры фоточувствительной ячейки, содержащей три p - n -перехода, которые с полупроводниковой кремниевой подложкой p -типа проводимости образуют n - p - n - p -структуру. Самый глубокий слой n -типа проводимости, выполненный непосредственно в подложке, имеет толщину $a = 1,4$ мкм и концентрацию донорной легирующей примеси $N_d^{(1)} = 1 \cdot 10^{16}$ см⁻³. Лежащий сверху него слой p -типа имеет толщину $b = 0,4$ мкм и концентрацию акцепторной легирующей примеси $N_a^{(2)} = 1 \cdot 10^{17}$ см⁻³. Приповерхностный

слой n -типа легирован донорной примесью концентрацией $N_d^{(2)} = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и имеет толщину $s = 0,2 \text{ мкм}$. Кремниевая подложка p -типа имеет концентрацию легирующей акцепторной примеси $N_a^{(1)} = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

При освещении структуры ячейки сверху оптическим излучением указанные глубины залегания p - n -переходов от поверхности подложки обеспечивают разделение образующихся фотоносителей, соответствующих разным диапазонам длин волн оптического излучения. Это является следствием зависимости коэффициента поглощения оптического излучения в кремнии от длины волны [9]. В верхнем n -слое структуры должно преимущественно поглощаться излучение длин волн $0,4\text{--}0,49 \text{ мкм}$ (синий цвет). В среднем p -слое – оптическое излучение диапазона длин волн $0,49\text{--}0,575 \text{ мкм}$ (зеленый цвет). В нижнем n -слое, а также частично в p -подложке – излучение длин волн $0,575\text{--}0,70 \text{ мкм}$ (красный цвет).

Через соответствующие контакты к указанным областям приложены положительные напряжения относительно подложки: к глубокому n -слою – U_1 , к среднему p -слою – U_2 и к верхнему n -слою – U_3 .

На рис.2 изображено качественное распределение электрического потенциала в рассматриваемой p - n - p - n -структуре, обозначены толщины n - и p -слоев, границы p - n -переходов и толщины ОПЗ в них.

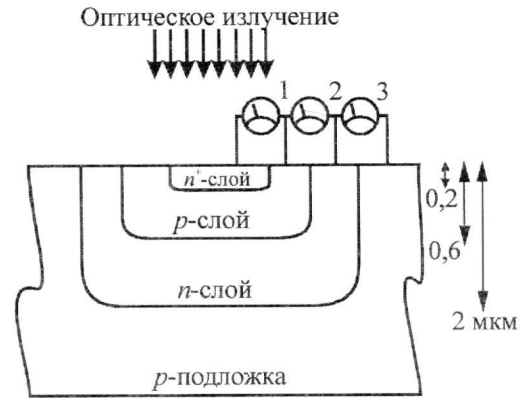


Рис.1. Схематический разрез фоточувствительной ячейки, содержащей три вертикально интегрированных p - n -перехода (1, 2, 3 – источники управляющих напряжений)

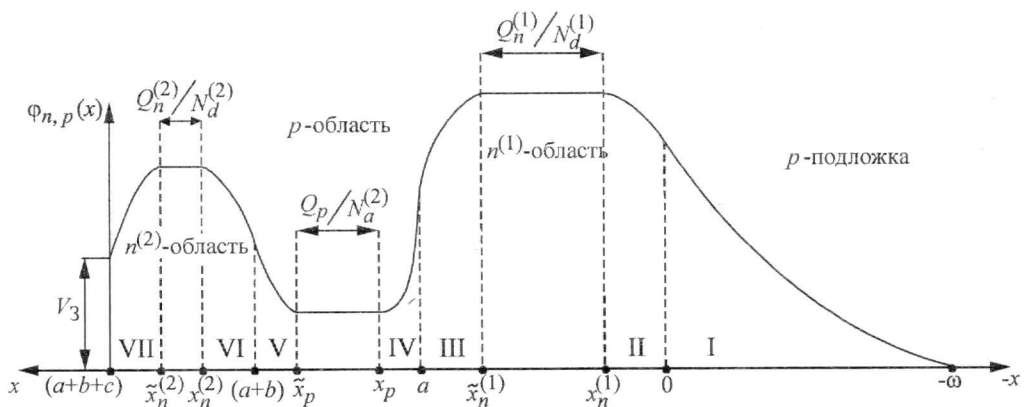


Рис.2. Качественное распределение электрического потенциала в p - n - p - n -структуре

Для расчета спектральных характеристик фоточувствительностей p - и n -областей рассматриваемой структуры необходимо получить соответствующие уравнения, описывающие процессы фотогенерации электронов и дырок в них. При этом следует учитывать, что поглощение оптического излучения в каждой n - и p -области определяется соответствующей толщиной ее ОПЗ и коэффициентом поглощения излучения для рассматриваемой длины волны. Для скоростей генерации фотоносителей имеем следующие уравнения:

– в глубокой n -области:

$$\frac{dQ_n^{(1)}}{dt} = B \cdot \exp\left(-\int_{x_p}^{(a+b+c)} \alpha(x) dx\right) \left[1 - \exp\left(-\int_{-w}^{x_p} \alpha(x) dx\right)\right]; \quad (1)$$

– в средней p -области:

$$\frac{dQ_p}{dt} = B \cdot \exp\left(-\int_{x_n^{(2)}}^{(a+b+c)} \alpha(x) dx\right) \left[1 - \exp\left(-\int_{\bar{x}_n^{(1)}}^{x_n^{(2)}} \alpha(x) dx\right)\right]; \quad (2)$$

– в приповерхностной n -области:

$$\frac{dQ_n^{(2)}}{dt} = B \left[1 - \exp\left(-\int_{\bar{x}_p}^{(a+b+c)} \alpha(x) dx\right)\right]. \quad (3)$$

В уравнениях (1)–(3) обозначили $B = \frac{P}{E}$, где E – энергия кванта света для рассматриваемой длины волны λ ; P – заданная энергетическая освещенность поверхности фотоячейки, Вт/см²; $\alpha(x)$ – коэффициент поглощения оптического излучения в кремнии для длины волны λ на глубине x (из справочных экспериментальных данных). Остальные величины соответствуют рис.2 и выражениям, полученным в работе [8]. Скорости генерации фотоносителей связаны с величинами фототоков, считываемых из n - и p -областей в фотодиодном режиме их работы, соотношениями:

– для глубокой n -области:

$$I_{n \text{ фот}}^{(1)} = (eS_{\text{яч}}) \frac{dQ_n^{(1)}}{dt}; \quad (4)$$

– для p -области:

$$I_{p \text{ фот}} = (eS_{\text{яч}}) \frac{dQ_p}{dt}; \quad (5)$$

– для приповерхностной n -области:

$$I_{n \text{ фот}}^{(2)} = (eS_{\text{яч}}) \cdot \frac{dQ_n^{(2)}}{dt}. \quad (6)$$

Уравнения (1)–(3) и соотношения (4)–(6), используемые в программе ISE TCAD, позволили провести численный расчетный эксперимент на ЭВМ по определению величин фототоков, считываемых из фотоячейки, в зависимости от длины волны λ поглощаемого оптического излучения при заданной постоянной внешней освещенности поверхности фотоячейки ($P = 3$ Вт/см²) и ее фоточувствительной площади $S_{\text{яч}} = 3 \times 3$ мкм. С этой целью на глубокую n -область, p -область и приповерхностную n -область структуры были поданы соответственно напряжения $U_1 = +3,0$ В, $U_2 = +1,0$ В и $U_3 = +3,0$ В. Освещение фотоячейки осуществлялось при установившихся максимальных уровнях напряжений в интервале времени $\tau_{\text{фот}} = 30$ нс.

На рис.3 в качестве примера показано изменение фототока во времени, считываемого из глубокой n -области для управляющего напряжения U_1 . В моменты переднего фронта и заднего среза (длительностью по 5 нс) импульса $U_1(t)$ наблюдаются соответственно темновые токи обеднения фотоячейки (участок 3) и токи инжекции восстановления ее необедненного состояния (участок 4). Эти токи имеют значительные амплитудные значения ~ 4 мкА. В промежутке между ними наблюдается значительно меньший по величине фототок электронов амплитудой ~ 95 нА для $\lambda = 0,62$ мкм.

Используя указанный расчетный эксперимент на ЭВМ, получены данные по величинам фототоков из n - и p -областей фотоячейки при $P = 3$ Вт/см² в зависимости от длины волны λ поглощаемого в структуре оптического излучения. На основе этих данных построены спектральные характеристики фоточувствительности n - и p -областей фотоячейки, которые представлены в относительных единицах (рис.4). За единицу масштаба принято значение максимального фототока в каждой n - и p -области. Из рис.4 следует, что максимальная фоточувствительность приповерхностной n -области наблюдается при $\lambda = 0,42$ мкм, соответственно в p -области – при $\lambda = 0,5$ мкм, а в глубокой n -области – при $\lambda = 0,65$ мкм, что соответствует выбранным толщинам n - и p -областей рассматриваемой кремниевой структуры.

Исходя из амплитудно-временных параметров трапецидальной формы фототоков (см. рис.3), рассчитаны возникающие при этом поверхностные концентрации соответствующих фотоэлектронов и фотодырок, которые могут накапливаться в n - и p -областях структуры при работе в режиме «плавающего» электрического потенциала. При этом «потенциальные ямы» обедняются управляющими напряжениями, поданными через внешние «ключи» на основе кремниевых МОП-транзисторов схем управления. Рассчитанные зависимости поверхностных концентраций накапливаемых фотоносителей от длительности времени освещения оптическим излучением $\tau_{\text{фот}}$ для $P = 3$ Вт/см² показаны на рис.5. В интервале времен фотонакопления $0 < \tau_{\text{фот}} \leq 75$ нс проявляется линейный характер этих зависимостей, поскольку время 75 нс является предельным временем фоторелаксации рассматриваемой фотоячейки при $P = 3$ Вт/см². При больших временах фоторелаксации эти зависимости должны приобрести сублинейный характер, переходящий к насыщению, вследствие полного заполнения n - и p -областей соответствующими фотоносителями. Кроме того, как следует из формул (4)–(6), наклон указанных прямых определяет фототок и в конечном счете – спектральную чувствительность каналов.

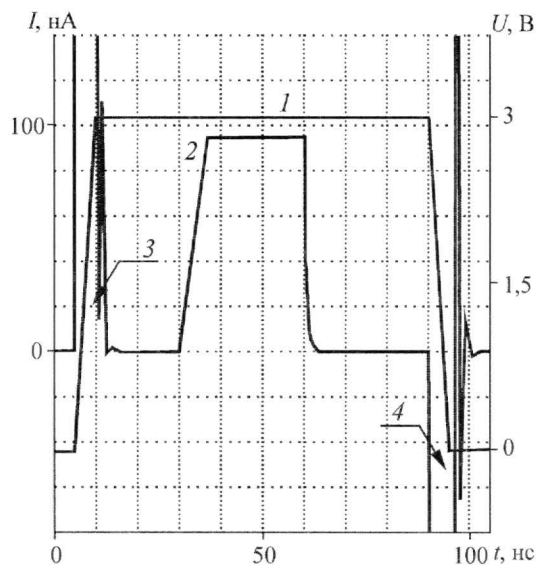


Рис.3. Изменения во времени токов, считанных из глубокой n -области: 1 – эюра напряжения $U_1(t)$; 2 – фототок электронов; участки 3, 4 – токи обеднения и обогащения n -области ($P = 3$ Вт/см², $\lambda = 0,62$ мкм)

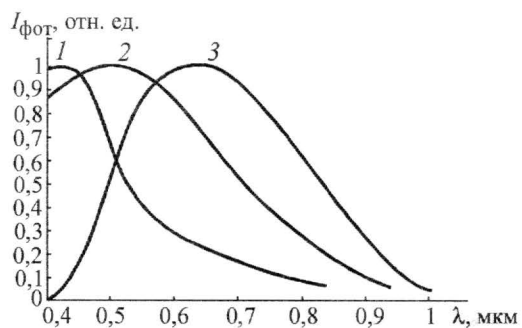


Рис.4. Спектральные характеристики фоточувствительности областей фотоячейки: приповерхностная n^+ -область (1), средняя p -область (2), глубокая n -область (3)

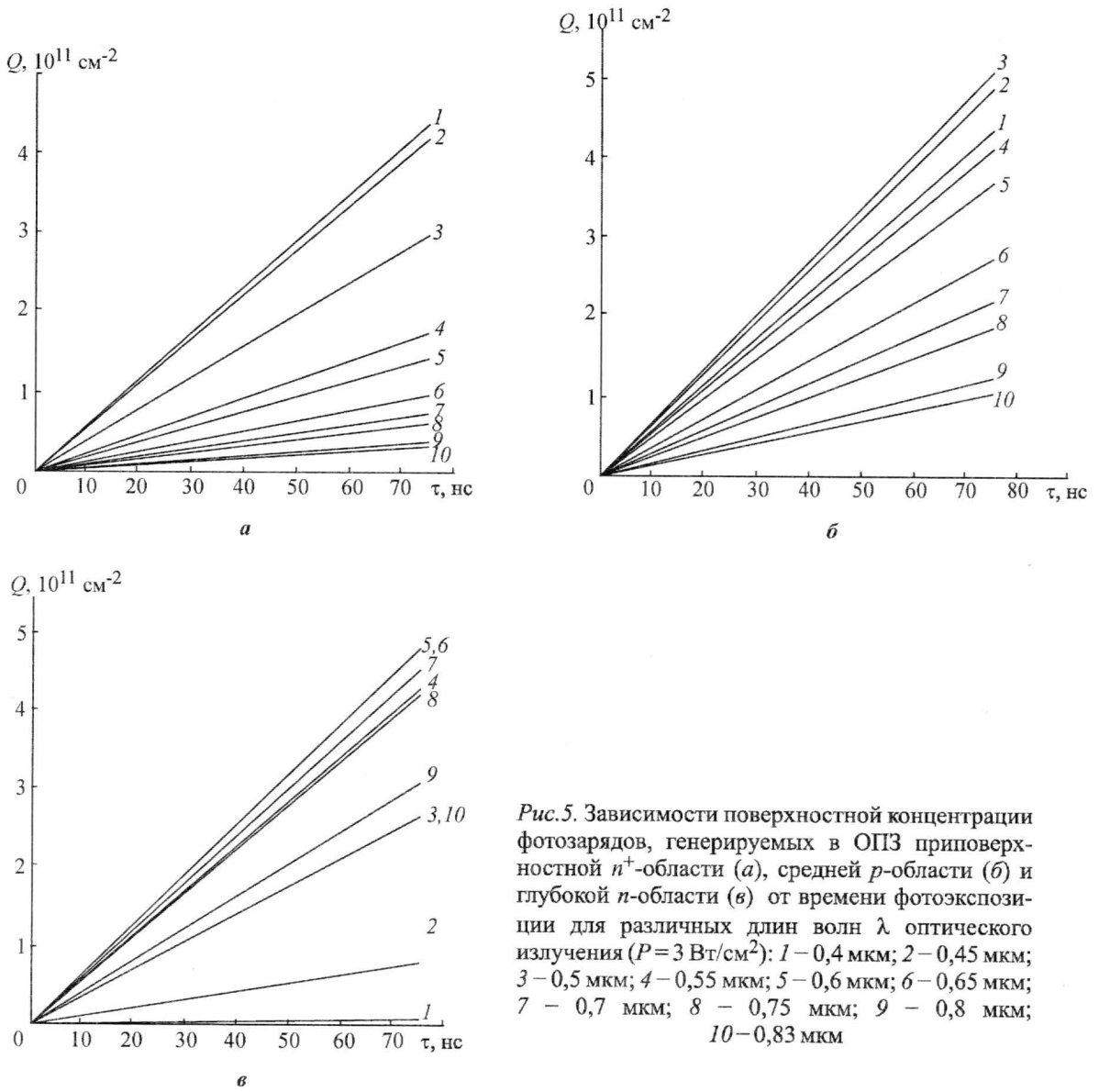


Рис.5. Зависимости поверхностной концентрации фотозарядов, генерируемых в ОПЗ приповерхностной n^+ -области (а), средней p -области (б) и глубокой n -области (в) от времени фотоэкспозиции для различных длин волн λ оптического излучения ($P = 3 \text{ Вт/см}^2$): 1 – 0,4 мкм; 2 – 0,45 мкм; 3 – 0,5 мкм; 4 – 0,55 мкм; 5 – 0,6 мкм; 6 – 0,65 мкм; 7 – 0,7 мкм; 8 – 0,75 мкм; 9 – 0,8 мкм; 10 – 0,83 мкм

На рис.6 показаны зависимости времен фоторелаксации n - и p -областей фотоячейки от длины волны поглощаемого оптического излучения ($P = 3 \text{ Вт/см}^2$), полученные на основе численного расчета максимальных поверхностных концентраций фотоносителей, заполняющих соответствующие «потенциальные ямы» за время фоторелаксации:

$$\tau_{\text{фот}} = \frac{e \cdot \Delta Q_{n,p\text{фот}}}{j_{n,p\text{фот}}}$$

Как и следовало ожидать, в интервалах длин волн, соответствующих наибольшим значениям фоточувствительности n - и p -областей фотоячейки, времена фоторелаксации наименьшие и соответственно равны величинам: для глубокой n -области – 75 нс (кривая 1), p -области – 120 нс (кривая 2) и приповерхностной n -области – 130 нс (кривая 3). Вне указанных диапазонов длин волн времена фоторелаксации n - и p -областей существенно увеличиваются, достигая 1000 нс.

На рис.7 представлены зависимости величин фототоков, считанных из n - и p -областей фотоячейки, от величины ее освещенности внешним поглощаемым оптическим излучением. Они имеют линейный характер. Следует заметить, что освещенность $P = 6 \text{ Вт/см}^2$ является значительной по сравнению с освещенностью, создаваемой небом в солнечный день и равной $P = 0,135 \text{ Вт/см}^2$ [10]. Поэтому для $P = 6 \text{ Вт/см}^2$ времена фоторелаксации n - и p -областей в 2 раза меньше, чем рассчитанные величины для случая, когда $P = 3 \text{ Вт/см}^2$ (см.рис.6), и соответственно равны $\sim 37 \text{ нс}$, 60 нс , 65 нс для глубокой n -области, p -области и приповерхностной n -области.

В результате физического анализа получены уравнения, описывающие процессы фоторелаксации обедненных n - и p -областей диодов, и путем численного их решения на ЭВМ рассчитаны:

- спектральные характеристики фоточувствительности n - и p -областей структуры фотоячейки, которые разделены по длинам волн оптического диапазона так, что максимумы спектральных фоточувствительностей приходятся соответственно на длины волн для приповерхностной n -области – $0,42 \text{ мкм}$, средней p -области – $0,5 \text{ мкм}$, глубокой n -области – $0,65 \text{ мкм}$;

- времена фоторелаксации (заполнения «потенциальных ям» фотоносителями), которые соответственно равны для глубокой n -области – 75 нс , средней p -области – 130 нс , приповерхностной n -области – 120 нс при освещенности фотоячейки $P = 3 \text{ Вт/см}^2$ и длине волны света $\lambda = 0,554 \text{ мкм}$;

- временные зависимости по накоплению фотозарядов в «потенциальных ямах» n - и p -областей, имеющие линейный характер вплоть до их допустимого предельного значения.

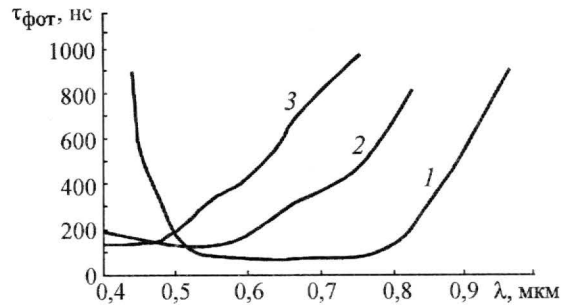


Рис.6. Зависимости максимального времени фоторелаксации обедненных областей p - n -переходов трехдиодной фотоячейки от длины волны поглощаемого оптического излучения: 1 – n -область; 2 – p -область; 3 – n^+ -область ($P = 3 \text{ Вт/см}^2$)

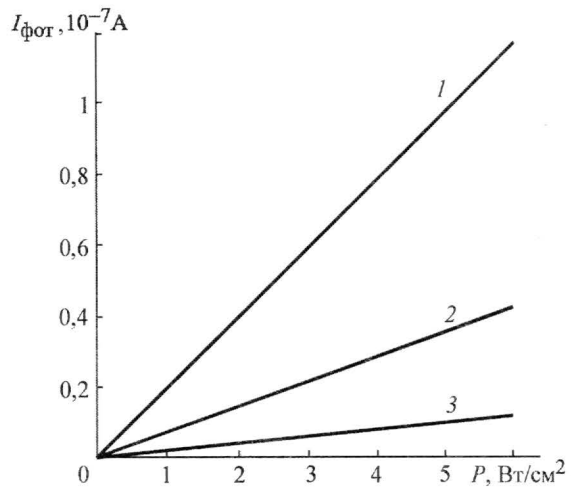


Рис.7. Зависимость фототока в n^+ -области (3), p -области (2), n -области (1) фоточувствительной трехдиодной ячейки от освещенности поглощаемого оптического излучения ($\lambda = 0,55 \text{ мкм}$, $S_{\text{яч}} = 3 \times 3 \text{ мкм}$)

Литература

1. Pat. US № 5,969,875, Int.Cl. G01J 3/50, U.S.Cl. 250/226. Colour Separation in an Active Pixel Cell Imaging Array Using a Triple-Well-Structure / **R.B. Merrill**. – 1999.
2. **Barsan R.** Characteristics of the Overlaid Charge-Coupled Device // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1979. – Vol. ED-26, № 2. – P. 123–131.
3. **Khainovskii V.I., Uzdovskii V.V.** Theoretical and experimental study of photoelectric characteristics of the two-channel bulk charge-coupled device // Optical Engineering. – 1994. – Vol. 33, № 7, July. – P. 2352–2356.

4. *Khainovskii V.I., Uzdoovskii V.V.* Photoelectrical characteristics of the spectrozonal two-channel bulk charge coupled device // Proc. 40th Int. Symp. Opt. Eng. Inst. (San Diego, California, USA, 13–14 July 1995). – 1995. – Vol. 2551. – P. 189–196.

5. *Khainovskii V.I., Uzdoovskii V.V.* Numerical simulation of photoelectrical characteristics of the spectrozonal three-channel bulk charge coupled device // Optical Engineering. – 1997. – Vol. 36, June. – P. 1678–1684.

6. *Хайновский В.И., Уздовский В.В., Гордо Н.М.* Многофункциональные спектрозональные фоточувствительные объемные приборы с зарядовой связью // Изв. вузов. Электроника. – 1999. – № 3. – С. 45–51.

7. *Хайновский В.И., Уздовский В.В., Гордо Н.М., Федоров Р.А.* Моделирование процессов фоторелаксации в многоканальных объемных фоточувствительных приборах с зарядовой связью // Изв. вузов. Электроника. – 2000. – № 1. – С. 28–35.

8. *Игнатъева Е.А., Уздовский В.В., Хайновский В.И.* Расчет конструктивных параметров и электрического потенциала трехдиодной вертикально интегрированной спектрально-селективной фотоячейки // Изв. вузов. Электроника. – 2008. – № 1. – С. 35–42.

9. *Dash W.C., Newman R.* Intrinsic Optical Absorption in Single-Crystal Germanium and Silicon at 77K and 300K // Phys. Rev. – 1955. – Vol. 99, № 4, August. – P. 1151–1155.

10. *Зи С.М.* Физика полупроводниковых приборов. – М.: Мир, 1984. – 655 с.

Статья поступила
13 сентября 2007 г.

Хайновский Владимир Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Ставропольского государственного университета. *Область научных интересов:* физика полупроводников, МДП-структуры, приборы с зарядовой связью.

Игнатъева Елена Александровна – аспирант кафедры общей физики МИЭТ. *Область научных интересов:* физика полупроводников, моделирование фотоэлектрических процессов в фотоприемных структурах.

Уздовский Валерий Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики МИЭТ. *Область научных интересов:* физика полупроводников, фотоэлектрические процессы в объемных каналах фотоприемников.

Информация для читателей журнала

«Известия высших учебных заведений. Электроника»

Вы можете оформить подписку на 2008 г. в редакции с любого номера.

Стоимость одного номера – 600 руб. (с учетом всех налогов и почтовых расходов).

Адрес редакции: 124498, Москва, Зеленоград, проезд 4806, д. 5, МИЭТ, комн. 7232

Тел.: (495) 534-62-05. Факс: (495) 530-54-29. E-mail: magazine@rnd.miee.ru

<http://www.miet.ru/static/je/os.html>

Исследование влияния конструктивно-технологических факторов на проводимость и пробивное напряжение латеральных ДМОП-транзисторов средствами численного моделирования

В.Я.Нисков, С.Н.Золотарев, А.Н.Гашков

Воронежский государственный технический университет
ОАО «СКТБ ЭС» (г. Воронеж)

Исследовано влияние конструктивно-технологических факторов на параметры латеральных ДМОП-транзисторов. Представлены результаты численного моделирования латеральных ДМОП-транзисторов.

Латеральные ДМОП-транзисторы (ЛДМОПТ), при изготовлении которых используют технологию двойной диффузии примесей для формирования областей транзисторов, применяются в разных электронных устройствах в качестве усилителей ВЧ- и СВЧ-диапазона, дискретных высоковольтных ключей и ключевых элементов в составе ИС вторичных источников питания, драйверов высоковольтных МОПТ и БТИЗ, а также в ИС управления газоразрядными панелями и т.п. [1–3]. Два варианта конструкции таких транзисторов схематично представлены на рис.1.

ЛДМОПТ занимают значительно большую площадь, чем МОПТ с вертикальной конструкцией при одинаковых величинах обратного напряжения пробоя $U_{СИ}$ и сопротивления открытого транзистора $R_{СИ}$. Поэтому основной проблемой при разработке латеральных транзисторов, как дискретных, так и в составе ИС, является оптимизация их конструкции, при которой удельное сопротивление $R_{СИу}$ открытого транзистора (на единицу его площади) будет минимально при требуемой величине $U_{СИ}$ [1, 2].

В работах [4, 5] эта проблема решалась применительно к ЛДМОПТ (см. рис.1,б). Для повышения $U_{СИ}$ формировали пинч-резистор в дрейфовой области стока транзистора и исследовали влияние этого резистора и ряда других конструктивно-технологических факторов на величины $U_{СИ}$ и $R_{СИ}$. С использованием компьютерного моделирования в среде ISE TCAD была установлена зависимость этих параметров от уровня легирования и протяженности пинч-резистора и конструкции затворного электрода и полевого окисла. Компьютерная оптимизация этих параметров позволила получить максимальные значения $U_{СИ} = 192$ В и $R_{СИу} = 23–29$ мОм·см² при глубине $p-n$ -перехода стока 7–9 мкм в p -подложке (в [5] удельное сопротивление не указано).

Показанный на рис.1,б ЛДМОПТ имеет ограниченное применение, так как может быть использован только в КМОП ИС, изготавливаемых на p -подложках.

Конструкция транзистора, представленная на рис.1,а, более универсальная и гибкая. Она может быть использована как в КМОП ИС, так и в биполярных ИС и БИКМОП ИС, так как позволяет формировать изолированные от подложки истоки и стоки транзистора. Подобные конструкции используются в ИС высоковольтных драйверов [2], в которых эти транзисторы имеют обратные напряжения до 600–1200 В и полностью электрически изолированы от расположенных на этом же кристалле низковольтных блоков управления.

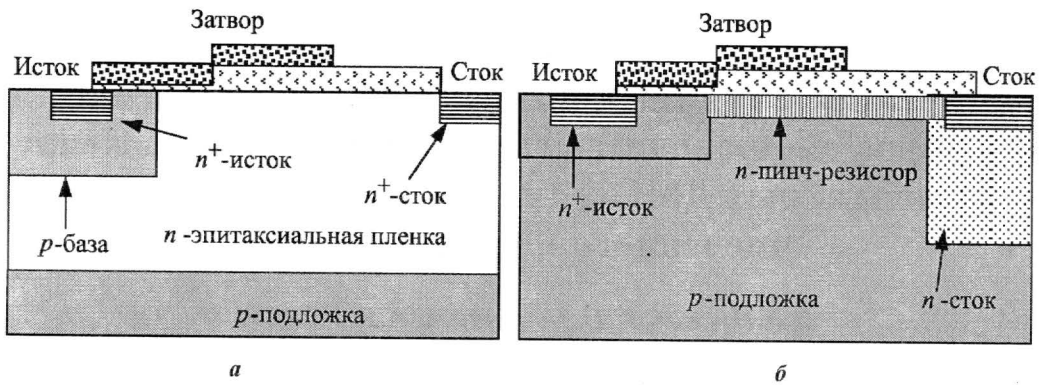


Рис. 1. Варианты конструкции интегральных ЛДМОПТ:
 а – на эпитаксиальных структурах n - p -типа; б – на p -подложках

В настоящей работе исследовано влияние конструктивно-технологических факторов на параметры именно таких ЛДМОПТ с обратными напряжениями 40–200 В.

Методика исследования. Исследование проводили на основе компьютерного технологического и приборного моделирования с применением пакетов программ PROWIZ и DEWIZ.

Программа одномерного технологического моделирования PROWIZ позволяет моделировать и исследовать все основные технологические процессы, применяемые при изготовлении ЛДМОПТ: диффузию и ионное легирование разных примесей в разных режимах, термическое окисление кремния в разных температурно-временных режимах и газовых средах, термические отжиги в разных режимах и т.д. С использованием этой программы определяли характеристики конструктивных слоев, которые образуют ЛДМОПТ. Эти характеристики затем использовали в программе DEWIZ для двумерного приборно-физического моделирования ЛДМОПТ. Моделировали обратные, прямые и проходные ВАХ транзисторов с полосковой конструкцией и площадью матрицы ячеек 1 мм^2 , из которых определяли величины их обратного напряжения $U_{\text{СИ}}$, порогового напряжения $U_{\text{пор}}$ и удельного прямого сопротивления $R_{\text{СИ}y}$.

Величину $U_{\text{СИ}}$ определяли по излому прямой ВАХ (по точке резкого роста тока $I_{\text{СИ}}$), представленной в координатах $\log(I_{\text{СИ}}) = f(U_{\text{СИ}})$. Напряжение $U_{\text{пор}}$ определяли при $I_{\text{СИ}} = 100 \text{ мкА}$, а $R_{\text{СИ}y}$ – при напряжении на затворе $U_{\text{ЗИ}} = 10 \text{ В}$ и $U_{\text{СИ}} = 1,0 \text{ В}$.

Одновременно определяли и анализировали распределения потенциалов, токов и «горячих точек» в сечении структуры ЛДМОПТ с максимальными электрическими полями и скоростью генерации пар носителей заряда (областей пробоя).

Программа DEWIZ имеет удобный интерфейс и более проста в работе, чем известная программа ISE TCAD [6]. Она не требует наличия навыков программирования и знания сложного синтаксиса ее пользователями для подготовки и решения задач приборного моделирования, обеспечивая достаточную точность и скорость решений.

Моделирование ЛДМОПТ проводили на виртуальной модели, представленной на рис.2, которая соответствует реальной физической конструкции ЛДМОПТ.

Результаты моделирования и их обсуждение. На величину $U_{\text{СИ}}$ ЛДМОПТ влияют такие конструктивно-технологические факторы, как (см. рис.2) толщина $H_{\text{эп}}$ и удельное сопротивление $\rho_{\text{эп}}$ эпитаксиальной пленки, глубина легированных областей p -базы X_{jp} и n^+ -истока X_{jn}^+ , толщина подзатворного $H_{3,0}$ и полевого окислов $H_{\text{п.о}}$, протяженность этих окислов, покрытых затвором ($L_{3,0}$ и $L_{3,п.о}$ соответственно), зазор $L_{\text{п.с}}$ от края затвора до n^+ -области стока, покрытый полевым окислом.

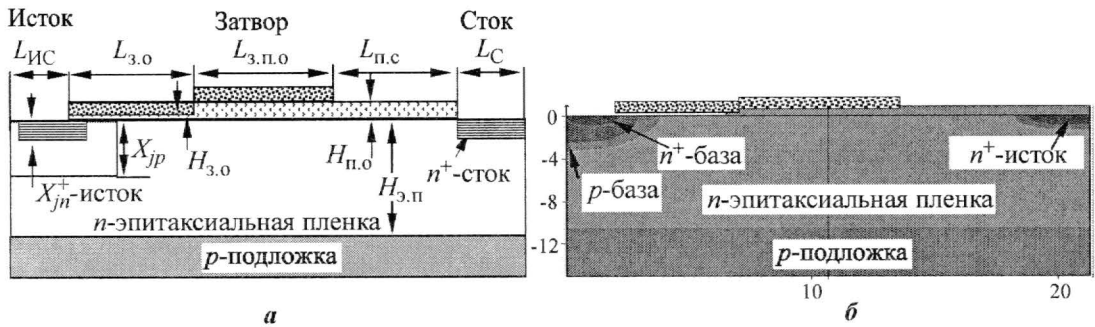


Рис. 2. Виртуальная модель ЛДМОПТ: а – эскиз поперечного сечения с обозначениями элементов; б – двумерная моделируемая структура с обозначениями слоев

Влияние $\rho_{эп}$ на $U_{СИ}$ и удельное сопротивление $R_{СИу}$ открытого ЛДМОПТ показано на рис.3. Конструктивные параметры ЛДМОПТ приведены в табл.1, в которой приняты следующие обозначения: W_k – суммарная ширина канала полоскового ЛДМОПТ; S_m – его площадь; $N_{sa}, N_{sd}, N_{a.п}$ – поверхностные концентрации примесей в p -базе, n^+ -истоке и постоянная концентрация акцепторов в p -подложке соответственно. Примеси в p -базе и n^+ -истоке распределены по закону Гаусса.

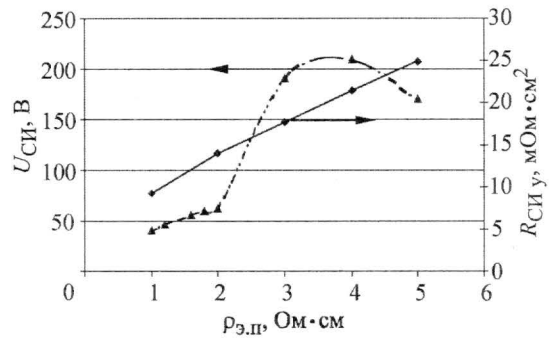


Рис. 3. Зависимость $U_{СИ}$ и $R_{СИу}$ от $\rho_{эп}$

Таблица 1

Конструктивно-технологические параметры моделируемых ЛДМОПТ

Толщина слоев, мкм					Размер элементов в плане*, мкм						Концентрация примесей, см ⁻³			
$H_{э.п}$	X_{jp}	X_{jn}^+	$H_{з.о}$	$H_{п.о}$	$L_{ис}$	$L_{з.о}$	$L_{з.п.о}$	$L_{п.с}$	L_c	W_k	$S_m, \text{мм}^2$	N_{sa}	N_{sd}	$N_{a.п}$
10	3,6	1,1	0,08	0,8	2	5	7	6	2	45454,5	1,0	$5 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{20}$	$1 \cdot 10^{15}$

* Шаг полоскового ЛДМОПТ равен 22 мкм.

Численные значения $R_{СИу}$ ЛДМОПТ при разных $\rho_{эп}$ приведены ниже:

$\rho_{эп}, \text{Ом} \cdot \text{см}$	$R_{СИу}, \text{МОм} \cdot \text{см}^2$
1,0	9,25
2,0	13,96
3,0	17,76
4,0	21,41
5,0	24,81

При $\rho_{эп} = 4 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ и разной толщине подзатворного окисла (100–1400 Å) измерены проходные характеристики и обратные ВАХ ЛДМОПТ и определены $U_{пор}$, $R_{СИу}$, $U_{СИ}$ и напряжения «прокола» $U_{пр}$ между истоком и стоком (табл. 2 и рис.4, 5).

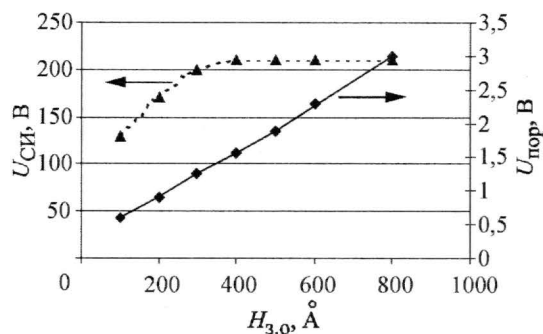


Рис.4. Влияние $H_{3,0}$ на $U_{СИ}$ и $U_{пор}$ ($\rho_{э,п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$)

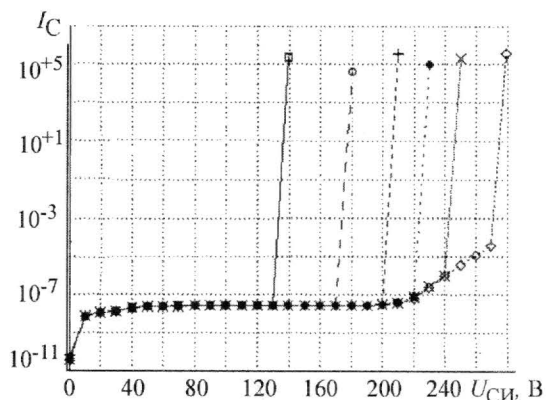


Рис.5. Обратные ВАХ при разных $H_{3,0}$:
 \square – 100 Å; \circ – 200 Å; $+$ – 300 Å; \bullet – 400 Å;
 \times – 600 Å; \diamond – 800 Å

Таблица 2

Зависимость величин $U_{пор}$, $R_{СИУ}$, $U_{СИ}$, $U_{пр}$ от толщины и подзатворного окисла $H_{3,0}$ ($\rho_{э,п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $H_{3,п} = 10 \text{ мкм}$)

$H_{3,0}$, Å	$U_{пор}$, В	$R_{СИУ}$, мОм·см ²	$U_{СИ}$, В	$U_{пр}$, В
100	0,60	17,79	130	130
200	0,90	18,38	170	170
300	1,25	18,94	200	200
400	1,55	19,42	210	220
500	1,90	19,92	210	—
600	2,30	20,37	210	240
800	3,0	21,47	210	270
1000	—	22,57	—	—
1200	—	23,92	—	—
1400	—	25,51	—	—

Изменение расчетного $U_{СИ}$ с ростом $\rho_{э,п}$ неоднозначно (см. табл.1 и рис.3). Это можно объяснить изменениями в распределении электрических потенциалов и их градиентов внутри структуры транзистора и положения точек с большой скоростью генерации пар носителей заряда, т. е. мест лавинного пробоя при изменении величин $\rho_{э,п}$ (рис.6).

Из рис.6,а видно, что при малых $\rho_{э,п}$ (1–2 Ом·см) лавинный пробой происходит вблизи p -базы под краем тонкого (800 Å) затворного окисла, а распределение потенциала при обратном смещении качественно соответствует рис.6,б (при $U_{СИ} = 40 \text{ В}$).

При росте $\rho_{э,п}$ от 2 до 3 Ом·см область пробоя перемещается под край затвора, расположенного над толстым полевым окислом (см. рис.6,в). Распределение потенциала в структуре существенно изменяется: область пространственного заряда (ОПЗ) с ростом $U_{СИ}$ заполняет весь объем эпитаксиальной пленки (см. рис.6,б,г) и $U_{СИ}$ резко увеличивается. Дальнейшее увеличение $\rho_{э,п}$ от 4 до 5 Ом·см вызывает спад $U_{СИ}$ от 210 до 170 В (см. рис.3). Это объясняется более быстрым заполнением объема эпитаксиальной пленки областью ОПЗ, увеличением электрического поля вблизи n^+ -стока и перемещением в эту область «горячей точки» с высокой скоростью лавинной генерации пар, т.е. пробоя (см. рис.6,д).

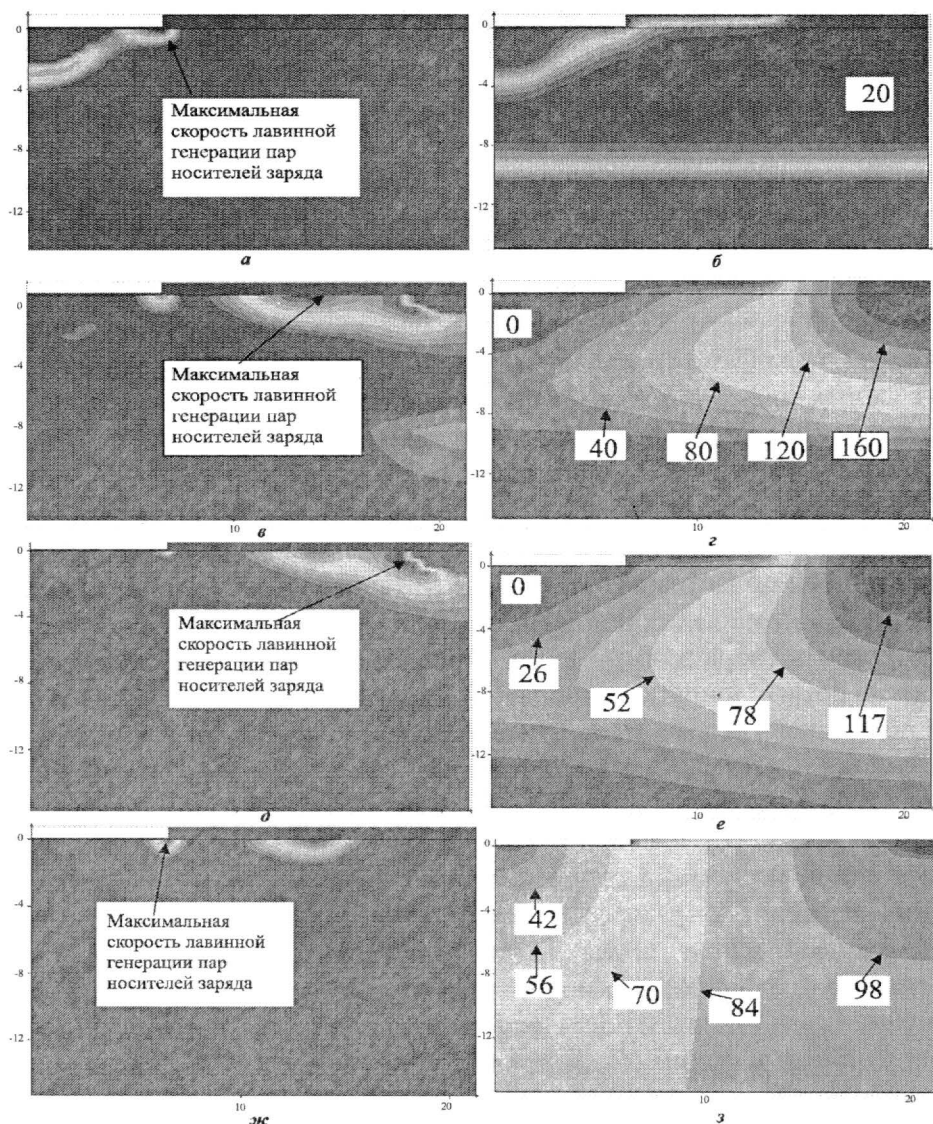


Рис.6. Распределение областей генерации пар носителей и электрических потенциалов. Генерация пар: $\rho_{эл.п} = 1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $U_{СИ} = 40 \text{ В}$ (а); $\rho_{эл.п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $U_{СИ} = 200 \text{ В}$ (б); $\rho_{эл.п} = 5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $U_{СИ} = 170 \text{ В}$ (д); $\rho_{эл.п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $H_{3,0} = 100 \text{ \AA}$, $U_{СИ} = 130 \text{ В}$ (ж). Распределение потенциалов: $\rho_{эл.п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ и $U_{СИ} = 20$ и 200 В (б, з); $\rho_{эл.п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $H_{3,0} = 100 \text{ \AA}$, $U_{СИ} = 130 \text{ В}$ (е); $\rho_{эл.п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $H_{3,0} = 100 \text{ \AA}$, $U_{СИ} = 140 \text{ В}$ (з) (цифры на рис. б, з, е, з – значения потенциалов на эквипотенциальных линиях)

Компьютерные эксперименты с изменением $H_{3,0}$ выявили иной механизм пробоя. Расчетная величина $U_{СИ}$ уменьшается при снижении $H_{3,0}$ (см. табл.2, рис.5).

Уменьшение $H_{3,0}$ увеличивает электрическое поле и лавинную генерацию пар под краем подзатворного окисла (см. рис.6,з). Однако при $H_{3,0} = 100 \text{ \AA}$ пробой происходит не в результате лавинной генерации пар и не в этой точке (скорость генерации при этом не очень велика), а вследствие «электрического прокола» всего промежутка эпитаксиальной пленки между p -базой и областью n^+ -стока. Это подтверждается резким изменением распределения потенциалов в этом промежутке при росте $U_{СИ}$ от 130 до 140 В (см. рис.6,е,з) и ростом (на много порядков) обратного тока стока (см. рис.5). Также резко изменяется распределение потенциала между истоком и стоком и возрастает обратный ток во время «прокола» и при других толщинах окисла затвора.

При толщине окисла более 400 Å электрический пробой перехода исток–сток начинает определяться не механизмом «прокола», а лавинной генерацией пар носителей заряда, которая превалирует при меньших напряжениях, чем требуются для «прокола».

Величина $R_{СИ\ у}$ монотонно увеличивается с ростом толщины подзатворного окисла (см. табл.2). Это объясняется ростом сопротивления открытого канала ЛДМОПТ $R_{кан}$ и сопротивления растекания на поверхности эпитаксиальной пленки под площадью затвора.

Экстраполяцией расчетной величины $R_{СИ\ у}$ (см. табл.2) к «нулевой» толщине подзатворного окисла ($H_{3,0} = 0$) можно оценить величину удельного сопротивления открытого ЛДМОПТ, определяемого только сопротивлением эпитаксиальной пленки $R_{эп,у}$, между краем открытого канала и областью n^+ -стока.

Для ЛДМОПТ с параметрами, приведенными в табл.1, при $\rho_{э,п} = 4 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ расчетная величина $R_{эп,у}$ составила около $17 \text{ мОм}\cdot\text{см}^2$, а сопротивление канала $R_{кан}$ при толщине подзатворного окисла 800 Å – около $4,5 \text{ мОм}\cdot\text{см}^2$ (20% от величины $R_{СИ\ у}$).

Влияние ширины областей затвора, расположенных над подзатворным и полевым окислами ($L_{3,0}$ и $L_{3,п,0}$), на величины $U_{СИ}$, $U_{пор}$ и $R_{СИ\ у}$ определяли при фиксированном зазоре между краем затвора и областью n^+ -стока ($L_{п,с} = 6 \text{ мкм}$) для следующих случаев: при постоянной общей ширине затвора (12 мкм) и изменении величин $L_{3,0}$ и $L_{3,п,0}$; при переменной общей ширине затвора и изменении величины $L_{3,п,0}$ при $L_{3,0} = 5 \text{ мкм}$.

При изменении $L_{3,0}$ и $L_{3,п,0}$ соответственно от 1 до 11 мкм и от 11 до 1 мкм величина $U_{СИ}$ не изменялась и составляла 210 В. При уменьшении ширины затвора над тонким подзатворным окислом ($L_{3,0}$) величина $R_{СИ}$ плавно увеличивается (см. табл.4) из-за уменьшения степени модуляции сопротивления стоковой области полем затвора. При $L_{3,0}$ менее 2 мкм значение $R_{СИ}$ возросло катастрофически (до более 10^7 Ом) из-за неполного перекрытия всей длины канала ЛДМОПТ затвором, расположенным над тонким окислом, и резкого увеличения его порогового напряжения. С учетом этого для эксперимента выбрана $L_{3,0} = 5 \text{ мкм}$ и изменялась ширина затвора над толстым полевым окислом $L_{3,п,0}$. Результаты экспериментов представлены в табл. 3, зависимость обратной ВАХ от $L_{3,п,0}$ – на рис.7.

Полученные в настоящей работе расчетные параметры ЛДМОПТ ($U_{СИ} = 210 \text{ В}$, $R_{СИ\ у} = 19,4 \text{ мОм}\cdot\text{см}^2$) существенно лучше, чем в работе [5].

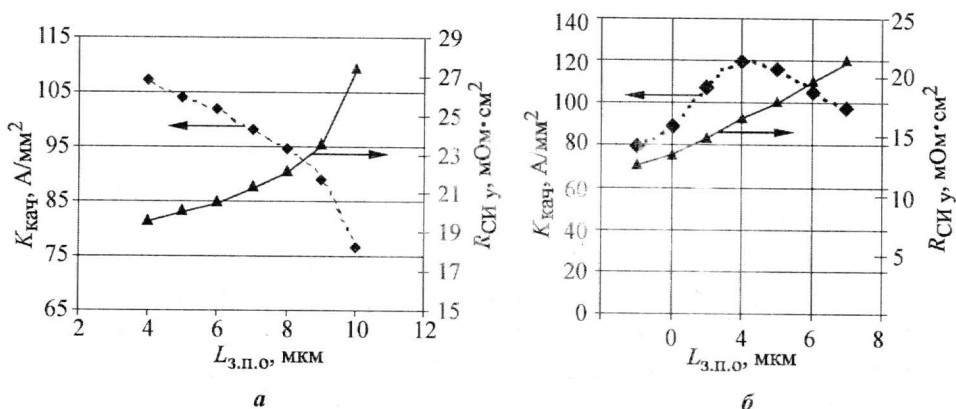


Рис.7. Влияние $L_{3,п,0}$ на $K_{кач}$ и $R_{СИ\ у}$ ЛДМОПТ при постоянном (а) и переменном (б) шаге ячеек матрицы ($K_{кач} = U_{СИ}/R_{СИ\ у}$ – обобщенный коэффициент качества транзистора)

Влияние конструкции затвора на расчетные параметры ЛДМОПТ

Ширина областей структуры ЛДМОПТ, мкм						$U_{ис}$, В	$U_{пор}$, В	$R_{си.у.}$ МОМ·см ²	$K_{кач.}$ А/мм ²
$L_{ис}$	$L_{з.о}$	$L_{з.п.о}$	$L_{п.о}$	L_c	$L_{шаг}$				
При постоянном шаге ячеек матрицы ЛДМОПТ									
2	1	11	6	2	22	210	>10	>10 ⁷	–
2	2	10	6	2	22	210	3,1	27,4	76,64
2	3	9	6	2	22	210	3,0	23,6	88,98
2	4	8	6	2	22	210	3,0	22,2	94,59
2	5	7	6	2	22	210	3,0	21,4	98,13
2	6	6	6	2	22	210	3,0	20,6	101,94
2	7	5	6	2	22	210	3,0	20,2	103,96
2	8	4	6	2	22	210	3,0	19,6	107,14
2	9	3	6	2	22	210	3,0	–	–
2	10	2	6	2	22	210	3,0	–	–
2	11	1	6	2	22	210	3,0	–	–
При переменном шаге ячеек матрицы ЛДМОПТ									
2	5	7	6	2	22	210	3,0	21,4	98,13
2	5	6	6	2	21	210	3,0	19,8	106,06
2	5	5	6	2	20	210	3,0	18,1	116,02
2	5	4	6	2	19	200	3,0	16,6	120,48
2	5	3	6	2	18	160	3,0	14,9	107,38
2	5	2	6	2	17	120	3,0	13,5	88,89
2	5	1	6	2	16	100	3,0	12,6	79,36

С использованием компьютерного моделирования определено влияние конструктивно-технологических факторов на основные статические параметры интегральных ЛДМОПТ. Полученные результаты демонстрируют возможности оптимизации ЛДМОПТ при минимальном использовании дорогостоящих экспериментальных отработок выбираемых конструктивно-технологических решений.

Литература

1. Блехер А. Физика силовых биполярных и полевых транзисторов: Пер. с англ./ Под ред. И.И.Грехова. – Л.: Энергоатомиздат, 1986. – 248 с.
2. Силовые полупроводниковые приборы: Пер с англ. / Под ред. В.В.Токарева. – Воронеж, 1995. – 661 с.
3. Королев М.А., Красюков А.Ю., Тихонов Р.Д. Классификация и конструктивно-технологические особенности мощных приборов для интеллектуальных силовых интегральных схем // Изв. вузов. Электроника. – 2004. – № 6. – С. 10–17.
4. Королев М.А., Красюков А.Ю., Тихонов Р.Д. Исследование влияния конфигурации области стока на пробивное напряжение планарного МОП-транзистора // Изв. вузов. Электроника. – 2003. – № 1. – С. 37–41.
5. Красюков А.Ю. Исследование и разработка конструктивно-технологических решений создания планарных мощных МОП-транзисторов с повышенным значением пробивного напряжения для интеллектуальных силовых интегральных схем: Дис. канд. техн. наук. – М., 2005.
6. ISE TCAD Release 10. User's manual. – 2004. – 5420 с.

Статья поступила 9 января 2008 г.

Нисков Валерий Яковлевич – доктор технических наук, профессор ВГТУ. Область научных интересов: исследование и разработка ИС, силовых полупроводниковых приборов.

Золотарев Сергей Николаевич – заместитель генерального директора ОАО «СКТБ ЭС» (г. Воронеж). Область научных интересов: исследования и разработка изделий полупроводниковой микроэлектроники специального назначения.

Гашков Андрей Николаевич – инженер-технолог ОАО «СКТБ ЭС» (г. Воронеж). Область научных интересов: исследование и разработка силовых полупроводниковых приборов.

Оптимизация структуры детекторов на основе арсенида галлия с учетом рекомбинационных потерь

Л.В.Кацоев, В.В.Кацоев

Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)

Э.А.Ильичев

НИИ Физических проблем им. Ф.В.Лукина

Предложена модель, описывающая физические процессы, сопровождающие взаимодействие тяжелых заряженных частиц с полупроводниковым детектором ионизирующего излучения. Решена задача оптимизации электрофизических характеристик и конструкции детекторной ячейки. Модель позволяет в условиях наличия процессов рекомбинации рассчитывать выходной ток детектора в зависимости от толщины его активной области и прикладываемого к датчику напряжения.

В последние годы в связи с интенсивным развитием ядерных технологий возросла потребность в твердотельных радиационно- и термостойких датчиках ионизирующих излучений [1–4]. В целях увеличения эффективности регистрации детектором пучков частиц высоких энергий необходимо оптимизировать геометрию и электрофизические характеристики материала активной области детектора. Настоящая работа посвящена разработке физической модели детектора α -частиц, описывающей процессы их взаимодействия с твердым телом, и выявлению условий, при которых достигается его максимальная регистрирующая способность.

Известно, что потери энергии, сопровождающие прохождение тяжелых заряженных частиц большой энергии в веществе, почти полностью обусловлены возбуждением связанных электронов. Эти потери энергии, определяющие пробег частицы в данном веществе, называют ионизационными потерями, хотя в действительности не все электронные переходы сопровождаются ионизацией и возможно возникновение просто возбужденных состояний в основном с возбуждениями одного (внешнего) электрона. Для возбуждения уже двух электронов требуются энергии, достаточные для ионизации атома, поэтому в суммарной интенсивности отношение долей переходов в состояния дискретного спектра и ионизации составляет $\sim 1/Z$ (Z – порядковый номер элемента). Таким образом, основную роль в торможении тяжелыми атомами играют столкновения, сопровождающиеся ионизацией.

Неупругие столкновения тяжелых заряженных частиц с атомом приводят к изменению его внутреннего состояния. Атом может перейти из нормального состояния в возбужденное состояние дискретного или непрерывного спектра. В последнем случае это означает ионизацию атома. Пусть \mathbf{k} и \mathbf{k}' – волновые векторы частицы до и после рассеяния соответственно. Введем разностный волновой вектор с абсолютной величиной

$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, где θ – угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' (угол рассеяния):

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}.$$

Поскольку основную роль при торможении падающей частицы играют неупругие столкновения, сопровождающиеся ионизацией атома, то особого рассмотрения требует неупругое рассеяние с ионизацией атома, сопровождающееся большой передачей импульса. Имеются в виду большие по сравнению с «обратным атомным радиусом» значения q , т.е. по сравнению с $1/a_0$, где a_0 по порядку величины равно размеру атома ($qa_0 \gg 1$). При этом $\theta \gg v_0/v$, где $v_0 \sim \hbar/ma_0$ по порядку величины равно скорости атомных электронов. Для тяжелых частиц большая потеря импульса не означает отклонение на большой угол – θ всегда остается малым. Большие значения q означают, что атому передается импульс, большой по сравнению с собственным первоначальным импульсом атомных электронов. Физически это позволяет рассматривать атомные электроны как свободные, а столкновение с атомом – как упругое столкновение падающей частицы с первоначально покоившимися атомными электронами. Электрон, вылетевший из атома, обладает импульсом $\hbar \mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$, который определяется законом сохранения импульса, как при столкновении двух свободных частиц.

Таким образом, в предложенной модели процесс образования вторичных электронов (δ -электронов) можно рассматривать как рассеяние тяжелой заряженной частицы на свободном электроне. Такой процесс соответствует представленной на рис.1 диаграмме импульсов рассеяния для случая, когда масса налетающей частицы много больше массы частицы мишени.

Из импульсной диаграммы следует, что угол ψ вылета δ -электрона находится в пределах $0 \leq \psi \leq \pi/2$, а его кинетическая энергия в лабораторной системе координат (ЛСК) после столкновения изменяется в зависимости от угла в соответствии с формулой $\varepsilon = \frac{4mM}{(m+M)^2} E \cos^2 \psi$ (E – начальная кинетическая энергия падающей частицы массой M в ЛСК).

Минимальное значение энергии $\varepsilon_{\min} \rightarrow 0$ (при этом $\varepsilon \ll E$) имеем при $\psi \rightarrow \pi/2$, максимальное значение энергии δ -электрон получает при выбивании его вперед ($\psi = 0$):

$$\varepsilon_{\max} = \frac{4mM}{(m+M)^2} E \approx \frac{4m}{M} E.$$

Эффективное сечение образования δ -электронов может быть получено преобразованием формулы Резерфорда, записанной в системе центра инерции (СЦИ) частица-электрон:

$$d\sigma = \left(\frac{ze^2}{\mu v^2} \right)^2 \frac{2\pi \sin \theta' d\theta'}{4 \sin^4 \frac{\theta'}{2}},$$

где μ – приведенная масса.

Тогда эффективное сечение для ионизации атома с испусканием электрона с энергией между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$ имеет вид

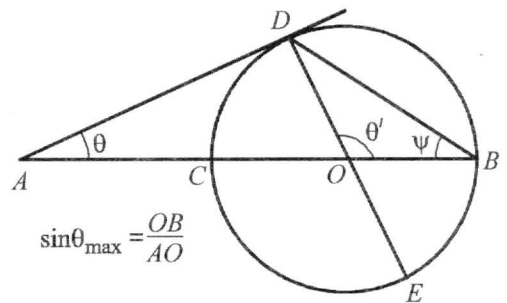


Рис.1. Диаграмма импульсов рассеяния тяжелой частицы (OB, OD – импульс α -частицы в СЦИ до и после рассеяния соответственно; OC, OE – импульс электрона в СЦИ до и после рассеяния соответственно; AD – импульс α -частицы в ЛСК после рассеяния; DB – импульс электрона в ЛСК после рассеяния)

$$d\sigma = \frac{2\pi Zz^2 e^4}{m\nu^2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^2}.$$

Таким образом, большая часть электронов выбивается с малыми энергиями под углом, близким к $\pi/2$.

Число δ -электронов с энергией в интервале от ε_{\min} до ε_{\max} , испущенных на единице пути, очевидно, должно быть равно $dn_{\delta}/dx = \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} n_{at} d\sigma$, где n – концентрация электронов в среде. Пределы интегрирования определяются следующим образом:

$$\varepsilon_{\min} = \frac{1}{2mE^2} \left(\frac{ze^2 M \bar{I}}{\hbar} \right)^2; \quad \varepsilon_{\max} = 2m\nu^2, \quad (1)$$

где $\bar{I} = 13,6Z$ – средний ионизационный потенциал.

Поскольку $\frac{dE}{dx} = \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon \cdot d\sigma \cdot n$, с учетом (1) для удельных энергетических потерь получим

$$-\frac{dE}{dx} = n2\pi z^2 e^4 \frac{M}{m} \ln \left(2 \frac{m}{M} \frac{E}{\bar{I}} \right) \frac{1}{E}. \quad (2)$$

Выражение (2) совпадает с известной формулой Бора [5] для удельных ионизационных потерь энергии, что подтверждает корректность предложенной модели.

Важным обстоятельством является малая вероятность рассеяния тяжелых частиц под большими углами к первоначальному направлению. Можно считать, что направление движения частицы сохраняется практически неизменным до тех пор, пока преобладают ионизационные потери. Поэтому область ионизации в кристалле вблизи траектории тяжелой заряженной частицы в первом приближении можно считать ограниченной объемом цилиндра, ось которого совпадает с траекторией частицы.

Модель учитывает долю энергии, передаваемой вторичным электронам, следующим образом. Поскольку большая часть электронов выбивается с малыми энергиями под углом, близким к $\pi/2$, к направлению движения тяжелой заряженной частицы, определим количество электронно-дырочных пар, рожденных в элементарном слое dx следующим соотношением:

$$dN_{e-h} = \frac{\frac{dE}{dx} \cdot dx}{\Delta},$$

где Δ – энергия образования одной электронно-дырочной пары.

В этом случае область выноса электронов во внешнюю цепь (рис.2) связана с дрейфовой длиной носителя (длина дрейфа $l_{dr} = V_{dr} \tau$, V_{dr} – дрейфовая скорость носителя, τ – время жизни носителя) во внешнем электрическом поле. При этом число вынесенных электронов, очевидно, равно: $N_{e-h} = \int_{x-l_{dr}}^x dN_{e-h}$. Пренебрегая слабой логарифмиче-

ской зависимостью от энергии падающей частицы, получим, что число вынесенных во внешнюю электрическую цепь электронно-дырочных пар определяется выражением:

$$\Delta N_{e-h} = \frac{1}{\Delta} \left[\sqrt{E_0^2 - 2c(x - V_{dr}\tau)} - \sqrt{E_0^2 - 2cx} \right].$$

Здесь $c = n2\pi z^2 e^4 \frac{M}{m} \ln \left(2 \frac{m}{M} \frac{E_0}{I} \right)$; E_0 – начальная энергия тяжелой частицы.

Решая задачу оптимизации, найдем оптимальную толщину детектора из условия $\frac{d\Delta N_{e-h}}{dx} = 0$. Результат, как и следовало ожидать, совпадает с длиной пробега частицы, а именно

$$R = \frac{E_0^2}{2n2\pi z^2 e^4 \frac{M}{m} \ln \left(2 \frac{m}{M} \frac{E_0}{I} \right)}.$$

На рис.3 приведены численные значения оптимальных толщин активной области GaAs-детектора при регистрации α -частиц с начальной энергией, изменяющейся в диапазоне 2–50 МэВ.

Предложенная модель позволяет также оценить оптимальные величины рабочих напряжений (при которых происходит 100%-ный сбор носителей заряда), прикладываемых к полупроводниковому детектору для заданной начальной энергии тяжелой заряженной частицы. Действительно, оптимальные величины рабочих напряжений, обедняющих по свободным носителям активную область, должны соответствовать рассчитанным выше оптимальным толщинам. В высокоомных GaAs-подложках имеем компенсированный материал, поэтому при расчете глубин проникновения области пространственного заряда в матрицу нужно учитывать и ионизацию примесных энергетических центров в поле напряжения обратного смещения. Расчеты, выполненные в соответствии с представлениями, развитыми в работах [6, 7], показывают, что даже для случая оптимальной компенсации фоновой примеси (в GaAs стандартный уровень фоновой примеси составляет $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$) при реализации барьерных детекторов получить для обедняющих напряжений приемлемые значения не удастся. С использованием таких материалов возможна реализация лишь детекторов резистивного типа. При этом следует учитывать, что токи утечки (фоновые токи) таких резистивных структур будут существенно ограничивать пороговую чувствительность детекторов. Действительно, как показано в работе [6], в области сильных полей (больших $3 \cdot 10^4 \text{ В/см}$)

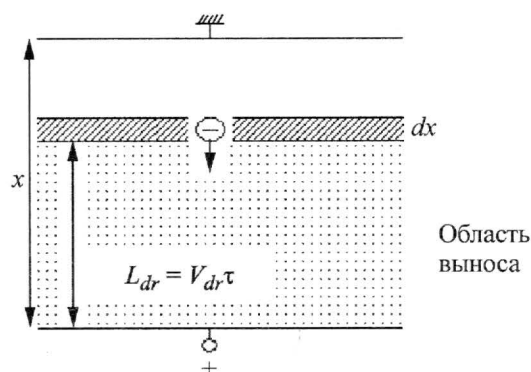


Рис.2. Область выноса носителей во внешнюю цепь

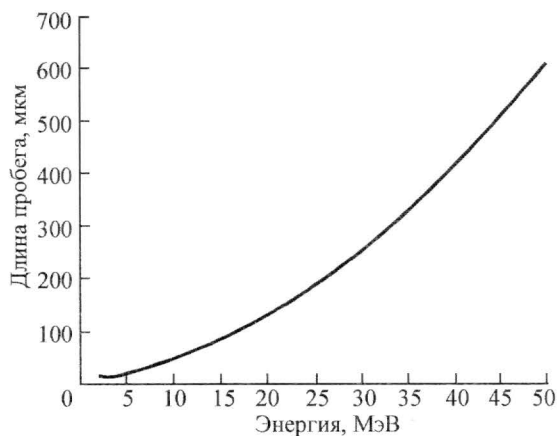


Рис.3. Расчетные значения оптимальных толщин активной области GaAs детектора α -частиц

существенна генерация дырок с акцепторов. При этом с ростом поля растет темп генерации дырок: $e_p = e_{p0} \cdot \exp(E/E_{FP})$ и концентрация дырок: $p = \frac{e_p(E)y_0}{C_p}$, а объемная

концентрация электронов остается практически постоянной и равна $n = \frac{e_n}{C_n y_0}$. Здесь

$E_{FP} \sim 4 \cdot 10^4$ В/см – параметр полевой ионизации Френкеля–Пула; $y_0 = (N - N_d)/N_d$ – степень компенсации; C_n и C_p – коэффициенты захвата электрона на нейтральный акцептор и дырки соответственно. При попытках увеличения полевого сбора фотоносителей это приведет к экспоненциальному росту полного тока в соответствии с функциональной зависимостью

$$j = j_{n0}(1 + \beta F y_0^2),$$

где $\beta = \frac{\mu_p C_n}{\mu_n C_p}$, $F = e_p(E)/e_{n0} = F_0 \cdot \exp(\frac{E}{E_{FP}})$, $F_0 = e_{p0}/e_{n0}$.

Несложные оценки, полученные с использованием представленных выражений, при типичных концентрациях фоновых примесей $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и табличных значений для коэффициентов захвата типичных ГЭЦ компенсированных GaAs-подложек, показывают, что уже при напряжениях порядка двух–трех десятков вольт величины темновых токов детекторов с диаметром приемного окна ~ 5 мм достигают значений ~ 100 нА. Достигнутая при этом толщина ОПЗ не превышает 2–3 мкм. Повысить пороговые напряжения развития процессов существенной генерации дырок с акцепторов возможно посредством ввода в процессе роста в кристалл дополнительного «глубокого» донора. Это позволит увеличить (до 3 раз) пороговые напряжения и незначительно повысить глубину ОПЗ. Однако незначительность положительного эффекта и существенное усложнение технологии роста делают такой подход практически неэффективным.

Лишь при фоновой концентрации меньше $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ можно рассчитывать на реализацию детекторов барьерного типа с приемлемыми величинами обедняющих напряжений. Для фоновых концентраций примесей в активных областях барьерных GaAs-детекторов на уровне $5 \cdot 10^{12} - 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ в соответствии с развитыми выше представлениями получаем для зависимости оптимальных напряжений обеднения от энергии детектируемых α -частиц значения, представленные на рис.4.

В частности, при начальной энергии α -частицы, равной 5 МэВ, оптимальная толщина детектирующего слоя составит ~ 19 мкм и, как следует из рис.4, при фоновой концентрации $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ значение напряжения обеднения составит ~ 14 В, а уже при концентрации $\sim 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ напряжение не превысит 2 В.

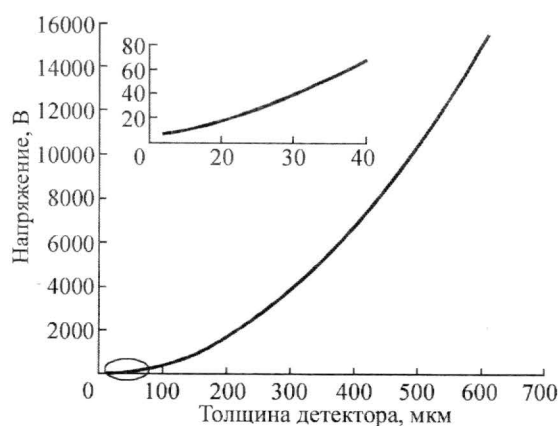


Рис.4. Расчетные значения оптимальных напряжений обеднения для регистрации GaAs-детектором α -частиц ($N_i = 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$)

Рассмотренная модель дает возможность учесть рекомбинационные потери при получении количественных данных об ионизации α -частицами. Это можно сделать посредством расчета числа вынесенных во внешнюю цепь электронов путем интегрирования в рамках геометрии оптимальных треков, где пределы интегрирования связаны с временами жизни носителей в зонах непрерывных состояний, зависящих, в свою очередь, от стационарных концентраций носителей в зонах в условиях сильного обеднения. При таком подходе модель позволяет решить задачу $\sim 100\%$ -ного сбора носителей заряда во внешнюю электрическую цепь, а также установить количественную связь выходного тока от напряжения обеднения и от толщины активной области детектора.

Литература

1. **Иванов А.М., Лебедев А.А., Строкан Н.Б.** Влияние экстремальных доз радиации на характеристики SiC-детекторов ядерных частиц // ЖТФ. – 2006. – Т. 40, вып. 10. – С. 1259–1263.
2. Электрофизические свойства GaAs слоев и особенности характеристик детекторов частиц высоких энергий на их основе / **В.А.Беспалов, А.А.Горбачевич, В.И.Егоркин и др.** // ЖТФ. – 2004. – Т. 74. Вып. 3. – С. 28–73.
3. **Айзенштат Г.И., Биматов М., Воробьев А.П., Толбанов О.П.** Сбор заряда в координатных детекторах рентгеновского излучения на основе полуизолирующего GaAs компенсированного хромом // Тез. докл. Восьмой Российской конф. «Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V». – 2002. – С. 269–272.
4. *P-i-n*-структуры на основе высокоомного геттерированного арсенид галлия для детекторов α -частиц / **А.Т.Гореленок, А.А.Томасов, Н.М.Шмидт и др.** // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32, вып. 22.
5. **Бор Н.** Прохождение атомных частиц через вещество. – М.: Иностранная литература, 1950.
6. **Гергель В.А., Ильичев Э.А., Лукьянченко А.И., Полторацкий Э.А.** Паразитное управление по подложке в полевых транзисторах на арсениде галлия // ФТП. – 1992. – Т. 26. Вып. 5. – С. 794–800.
7. **Рывкин С.М.** Фотоэлектрические явления в полупроводниках. – М.: Физ.-мат. лит., 1963.

Статья поступила
21 января 2008 г.

Кацоев Леонид Витальевич – аспирант кафедры квантовой физики и наноэлектроники МИЭТ. *Область научных интересов:* физика полупроводников, полупроводниковые детекторы ионизирующих излучений.

Кацоев Валерий Витальевич – аспирант кафедры квантовой физики и наноэлектроники МИЭТ. *Область научных интересов:* физика полупроводников, полупроводниковые детекторы ионизирующих излучений.

Ильичев Эдуард Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник НИИ Физических проблем им. Ф.В. Лукина. *Область научных интересов:* твердотельная микро- и наноэлектроника, эмиссионная наноэлектроника, физика полупроводников и диэлектриков, полупроводниковые детекторы ионизирующих излучений.

Определение влияния оптического сигнала на импедансные свойства лавинно-пролетного диода

Ю.И.Алексеев, А.В.Демьяненко

Технологический институт Южного федерального университета в г. Таганроге

На основе теоретической модели лавинно-пролетного диода (ЛПД), отражающей не только лавинное умножение носителей заряда, но и процессы, протекающие в диодном промежутке при его облучении оптическим лучом, определены импедансные свойства ЛПД, позволяющие рассчитывать СВЧ-модулирующие и демодулирующие устройства оптического диапазона.

Освоение оптического диапазона в системах радиосвязи требует интенсивного развития элементной базы радиопередающих устройств в этом диапазоне и в первую очередь – разработки оптических СВЧ-модуляторов и демодуляторов. Известно [1, 2], что лавинно-пролетный диод (ЛПД) достаточно эффективно взаимодействует с оптическим лучом и позволяет, таким образом, осуществлять модуляцию оптических колебаний за счет изменения ширины запиорного слоя отрицательно смещенного $p-n$ -перехода под действием СВЧ-сигнала, а также демодуляцию амплитудно-модулированного (АМ) светового луча путем синхронного возбуждения СВЧ-генерации ЛПД на частотах сигналов, модулирующих оптические колебания. Энергетической основой такого процесса синхронизации СВЧ-колебаний ЛПД служит энергия несущего (светового) колебания.

При разработке модулирующих (демодулирующих) устройств необходимы сведения об импедансных свойствах ЛПД, позволяющие проводить расчет основных параметров СВЧ-генератора и оценить возможное изменение этих параметров, в том числе и при облучении $p-n$ -перехода ЛПД световым лучом.

Цель настоящей работы – исследование импедансных свойств ЛПД под влиянием оптического колебания, модулированного по амплитуде СВЧ-сигналом, находящемся в рабочем частотном диапазоне ЛПД.

Изменение импедансных свойств под воздействием оптического излучения на генерирующей ЛПД целесообразно рассматривать в двух направлениях: 1) при облучении ЛПД светом постоянной интенсивности, когда выявляются изменения импеданса под действием на ЛПД дополнительного энергетического воздействия; 2) при облучении ЛПД СВЧ-амплитудно-модулированным светом, когда выявляются импедансные свойства ЛПД-генератора, возбуждаемого синхронно с присутствующим в АМ-колебании модулирующим СВЧ-сигналом, что открывает возможность детектирования световых АМ-колебаний.

Исходя из того, что при световом облучении ЛПД в известном выражении для импеданса Z_d [3, 4]

$$R_d = \frac{1}{\omega C_d} \frac{\beta_n^2 f(J_1)}{\beta_n^2 f(J_1) - 1} \frac{1 - \cos \theta_d}{\theta_d}, \quad X_d = \frac{1}{\omega C_d} \left[\frac{\beta_n^2 f(J_1)}{\beta_n^2 f(J_1) - 1} \frac{\sin \theta_d}{\theta_d} - 1 + \frac{l_a}{(\beta_n^2 f(J_1) - 1)(W - l_a)} \right]$$

добавляется член $Z_{\text{опт}}$, т.е. в случае облучения $Z_d = R_d + jX_d + Z_{\text{опт}}$, для расчета «оптической добавки» имеем

$$\begin{aligned} R_{\text{опт}} &= \frac{2}{\omega C_d \theta_d \gamma^2} \left[\left(\frac{J_{s0}}{J_0} - \frac{m J_{s0}}{J_1} \cos \varphi_1 \right) \left(\frac{\omega^2}{\Omega_{\text{л}}^2 f(J_1)} + \frac{\sin \theta_d}{\omega \tau_a} \right) + \frac{m J_{s0}}{J_1} \sin \varphi_1 \left(\frac{\cos \theta_d - 1}{\omega \tau_a} \right) \right], \\ X_{\text{опт}} &= \frac{2}{\omega C_d \theta_d \gamma^2} \left[\left(\frac{J_{s0}}{J_0} - \frac{m J_{s0}}{J_1} \cos \varphi_1 \right) \left(\frac{\cos \theta_d - 1}{\omega \tau_a} \right) - \frac{m J_{s0}}{J_1} \sin \varphi_1 \left(\frac{\omega^2}{\Omega_{\text{л}}^2 f(J_1)} + \frac{\sin \theta_d}{\omega \tau_a} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $R_{\text{опт}}$ и $X_{\text{опт}}$ – «оптическая добавка» к активной и реактивной составляющим импеданса ЛПД; ω – круговая частота; θ_d – угол пролета носителем заряда области дрейфа; C_d – емкость области дрейфа; W – ширина запирающего слоя; l_a – ширина эквивалентного слоя умножения; $\gamma = \frac{\beta_{\text{л}}^2 - 1}{\beta_{\text{л}}^2}$, $\beta_{\text{л}}^2 = \frac{\Omega_{\text{л}}^2}{\omega^2}$; $\Omega_{\text{л}}$ – лавинная частота; J_{s0} – плотность постоянной составляющей фототока; J_0 – плотность тока питания ЛПД; J_1 – амплитуда первой гармоники СВЧ-тока; φ_1 – разность фаз между колебаниями генератора на ЛПД и модулирующего СВЧ-колебания; τ_a – время пролета носителем заряда эквивалентного

слоя умножения; $f(J_1) = 2I_1 \left(\beta_{\text{л}}^2 \frac{J_1}{J_0} \right) \left[\left(\beta_{\text{л}}^2 \frac{J_1}{J_0} \right) I_0 \left(\beta_{\text{л}}^2 \frac{J_1}{J_0} \right) \right]^{-1}$ – функция, описывающая амплитудную зависимость импеданса [3], где I_1 и I_0 – функции Бесселя первого и нулевого порядка. Считаем, что частота модуляции оптического сигнала равна частоте СВЧ-сигнала и сдвиг фаз между ними равен нулю ($\varphi_1 = 0$).

Выражения (1) получены из основной системы уравнений [4, 5], описывающих динамические процессы в запирающем слое ЛПД, в которых учтено влияние облучения p - n -перехода диода оптическим лучом: падающие на p - n -переход фотоны поглощаются с образованием пар носителей заряда, создавая тем самым дополнительные («оптические») носители заряда, которые учитываются в коэффициентах генерации носителей заряда в уравнении полного тока. Дополнительные носители заряда, дрейфуя под действием электрического поля, создают фототок, который однозначно связан с интенсивностью падающего оптического сигнала известным соотношением:

$$I_s(t) = \frac{2q\lambda}{\hbar c} z I(t),$$

где q – заряд электрона; λ – длина волны оптического воздействия; \hbar – постоянная Планка; c – скорость света в вакууме; z – квантовый выход; $I(t)$ – интенсивность воздействующего оптического сигнала.

Таким образом, если p - n -переход ЛПД облучается АМ-светом с интенсивностью $I(t) = I_0 [1 + m \cos(\omega_{\text{СВЧ}} t + \varphi)]$, то в диоде возникает фототок $I_s(t) = I_{s0} [1 + m \cos(\omega_{\text{СВЧ}} t + \varphi)]$, где m – коэффициент амплитудной модуляции.

При расчетах использовались следующие параметры: $C_d = 0,4$ пФ – емкость области дрейфа; $W = 3,84$ мкм – ширина запирающего слоя; $l_a = 0,2W$ – ширина эквивалентного слоя умножения; $\Omega_{\text{л}} = 4,7$ ГГц – лавинная частота; $\varphi_1 = 0$ – разность фаз между колебаниями генератора на ЛПД и модулирующего СВЧ-колебания; $s = 11,7 \cdot 10^{-9}$ м² – пло-

щадь поперечного сечения кристалла диода; $\tau_a = 8,5 \cdot 10^{-12}$ с – время пролета носителем заряда эквивалентного слоя умножения. Методика расчета подробно описана в [6].

Результаты расчета частотной зависимости импеданса ЛПД при облучении его оптическим сигналом постоянной интенсивности представлены на рис.1. Для расчетов выбраны длина волны светового облучения 850 нм и мощности оптического сигнала, соответствующие фототокам $I_{s0} = 1; 5$ мА. Расчет импеданса проводился в рабочем диапазоне частот ЛПД типа 3А707В при токе питания 80 мА в режиме малого сигнала. Видно, что активная часть импеданса сильно зависит от уровня оптического сигнала: при фототоке $I_{s0} = 5$ мА абсолютная величина активной части импеданса уменьшается на 10–20%. Такое существенное изменение R_d приводит к уменьшению СВЧ-мощности автогенератора на ЛПД, а дальнейшее увеличение интенсивности облучающего света может привести к срыву колебаний. Таким образом, при помощи оптического излучения можно эффективно управлять режимом работы автогенератора на ЛПД.

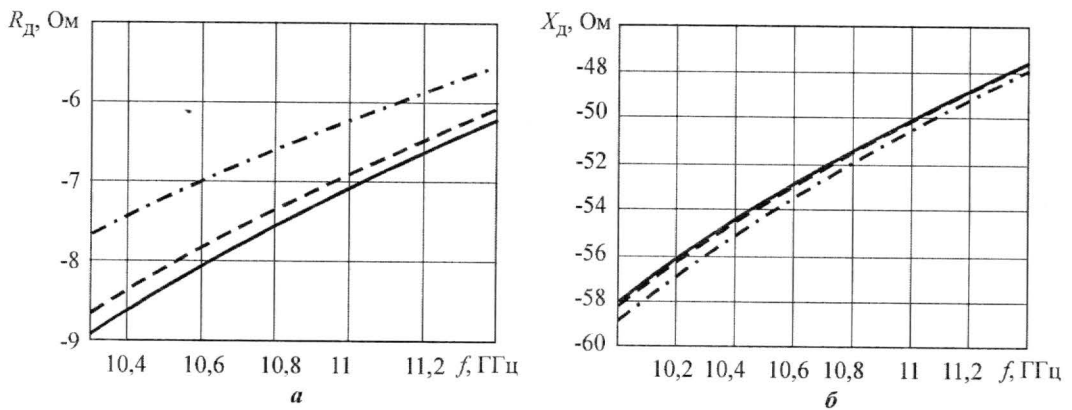


Рис. 1. Частотная зависимость активной (а) и реактивной (б) частей импеданса:
 — $I_{s0} = 0$; - - - $I_{s0} = 1$ мА; - · - · - $I_{s0} = 5$ мА ($I_0 = 80$ мА; $I_1 = 3$ мА)

Несмотря на то что появление фототока – это дополнительная энергетическая накачка генератора, противоречия в уменьшении мощности генератора при увеличении фототока нет. Физически это объясняется процессами, происходящими в запирающем слое диода в момент, предшествующий началу процесса лавинообразования. В начале каждого цикла образования лавины носители заряда в слое умножения образуются лавинным умножением из малого начального уровня, обусловленного тепловой генерацией электронно-дырочных пар. И прежде чем начнется следующий цикл, большая часть носителей заряда покидает слой умножения. Следовательно, присутствие дополнительных носителей заряда в слое умножения в моменты времени, соответствующие началу лавинной ионизации, будет оказывать существенное влияние на начальный процесс лавинного образования носителей. Если в слое умножения дополнительные носители заряда появятся перед началом лавинного цикла, когда напряженность электрического поля приближается к величине, при которой возможно лавинное умножение носителей заряда, то они ускорят начало образования лавины, сгусток носителей заряда сформируется и начнет дрейф раньше. При этом сдвиг фаз между СВЧ-напряжением и СВЧ-током в цепи генератора будет отличен от π , что приведет к уменьшению мощности генератора.

Реактивная часть импеданса (см. рис.1,б) имеет слабую зависимость от мощности облучающего оптического сигнала – при том же фототоке $I_{s0} = 5$ мА она увеличивается по абсолютной величине не более чем на 1,5%, т.е. управление частотой колебаний генератора на ЛПД с помощью оптического луча менее эффективно, чем управление мощностью колебаний.

На рис.2 приведены зависимости активной и реактивной составляющих импеданса ЛПД от изменения фототока I_{s0} в широких пределах (до 12% от постоянного тока питания ЛПД), что соответствует возможным на практике случаям. Обе зависимости составляющих импеданса в данном диапазоне фототоков носят линейный характер.

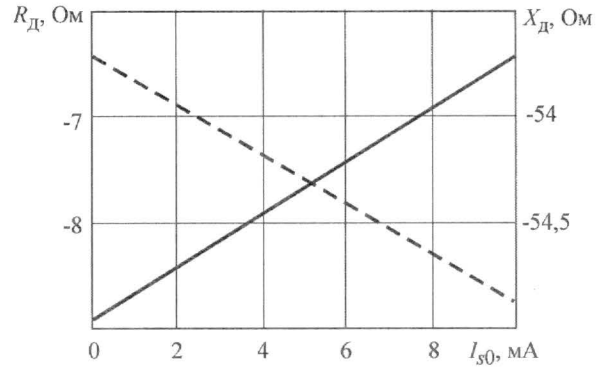


Рис.2. Зависимости активной и реактивной составляющих импеданса ЛПД от фототока I_{s0} ($f = 10,5$ ГГц; $I_1 = 3$ мА; $I_0 = 80$ мА)

Практический интерес представляют импедансные свойства при воздействии на ЛПД СВЧ-амплитудно-модулированным световым лучом для анализа процессов демодуляции такого светового колебания путем возбуждения автогенератора на ЛПД синхронно с модулирующим СВЧ-сигналом. На рис.3 приведены зависимости активной и реактивной составляющих импеданса ЛПД от изменения коэффициента модуляции m . Для расчета выбраны три значения постоянной составляющей фототока. Расчет проводился на частоте 10,5 ГГц при токе питания 80 мА и амплитуде СВЧ-тока 0,03 А. Как видно из рис.3,а, активная часть импеданса имеет сильную зависимость от коэффициента модуляции оптического сигнала, а величина постоянной составляющей фототока определяет наклон $R_d(I_{s1}) = f(m)$. Зависимости на рис.3 имеют важное практическое значение, поскольку с их помощью можно определить соотношение между постоянной составляющей фототока и коэффициентом модуляции оптического луча для обеспечения заданного режима работы генератора-демодулятора.

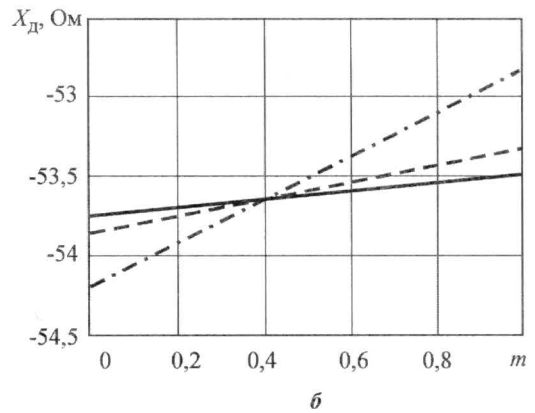
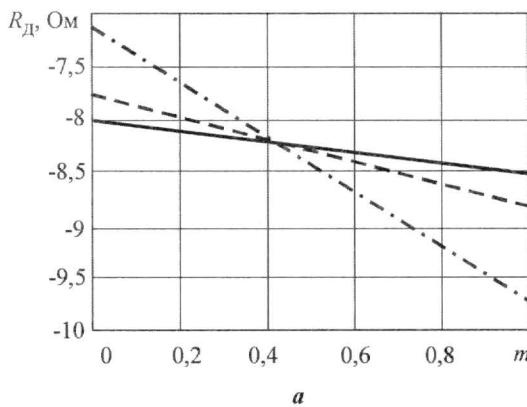


Рис.3. Зависимости активной (а) и реактивной (б) составляющих импеданса ЛПД от коэффициента модуляции m при трех значениях постоянной составляющей фототока: — $I_{s0} = 1$ мА; --- $I_{s0} = 2$ мА; - · - · - $I_{s0} = 5$ мА ($I_0 = 80$ мА; $I_1 = 0,03$ А; $f = 10,5$ ГГц)

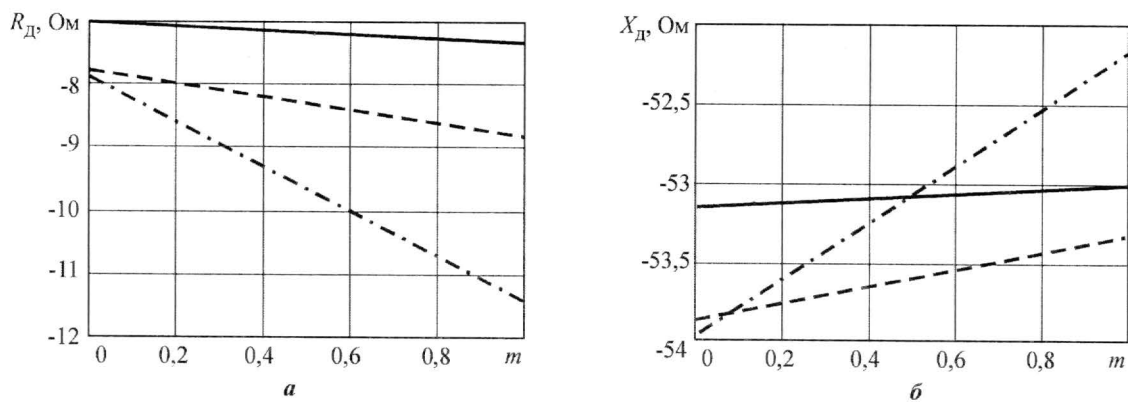


Рис.4. Зависимости активной (а) и реактивной (б) составляющих импеданса ЛПД от коэффициента модуляции m при трех значениях амплитуды СВЧ-тока: — $I_1 = 0,1$ А; --- $I_1 = 0,03$ А; - · - · - $I_1 = 0,01$ А ($f = 10,5$ ГГц; $I_{c0} = 2$ мА; $I_0 = 80$ мА)

Следует обратить внимание на сильную зависимость оптических компонент импеданса ЛПД от СВЧ-напряжения на диоде (рис.4), поскольку в рассматриваемом здесь процессе возможной демодуляции АМ оптического излучения модулирующий СВЧ-сигнал играет роль синхронизирующего сигнала, стимулирующего синхронное возбуждение ЛПД-генератора на частоте синхросигнала. Такая сильная зависимость импеданса свидетельствует о критичности процесса возникновения синхронной СВЧ-генерации к параметрам модулирующего световое излучение СВЧ-сигнала, и, таким образом, дальнейший анализ может привести к определению двух основных параметров синхронного возбуждения – величины синхросигнала и полосы частот синхронного возбуждения. Последнее, в свою очередь, позволит выработать требования к модуляционным характеристикам, при которых возможно эффективное детектирование АМ оптических колебаний путем возбуждения генерации ЛПД на частотах модулирующего СВЧ-колебания.

Литература

1. Катус Г.П., Кравцов Н.В., Чирков Л.Е., Коновалов С.М. Модуляция и отклонение оптического излучения. – М.: Наука, 1967. – 176 с.
2. Шалимова К.В. Физика полупроводников. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.
3. Тагер А.С., Вальд-Перлов В.М. Лавинно-пролетные диоды и их применение в технике СВЧ. – М.: Сов. радио, 1968. – 479 с.
4. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. – М.: Мир, 1984. – 455 с.
5. Кэррол Дж. СВЧ-генераторы на горячих электронах. – М.: Мир, 1972. – 390 с.
6. Алексеев Ю.И., Демьяненко А.В. Расчет импеданса лавинно-пролетного диода в малосигнальном режиме // Изв. вузов. Электроника. – 2005. – № 1. – С. 25–28.

Статья поступила
после доработки 16 января 2008 г.

Алексеев Юрий Иванович – доктор технических наук, профессор кафедры антенн и радиопередающих устройств ТТИ ЮФУ. *Область научных интересов:* генерация, усиление и преобразование СВЧ-колебаний.

Демьяненко Александр Викторович – аспирант кафедры антенн и радиопередающих устройств ТТИ ЮФУ. *Область научных интересов:* генерация и усиление СВЧ-колебаний, СВЧ-модуляция и детектирование оптических колебаний.

НАНОТЕХНОЛОГИЯ

УДК 621.372.852.5

Формирование нанометровых слоев фокусированным ионным пучком

К.А.Царик, В.В.Лосев, С.В.Бараш

**Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)**

Разработана методика формирования периодических протяженных (до 30 мкм) нанометровых слоев с характерными поперечными размерами 70 нм и глубиной 2–3 нм. Измерена скорость травления пучком ионов галлия, ускоренных напряжением 30 кВ, таких материалов, как GaAs, AlGaIn, Al и Si, используемых для создания акустоэлектронных преобразователей. Показана возможность полировки ионным пучком поверхности AlGaIn до уровня шероховатости 0,5–0,7 нм.

Использование фокусированных ионных пучков с нанометровыми поперечными размерами открывает новые возможности в создании электронных приборов гигагерцевого диапазона [1]. В первую очередь это автоматизированное получение рабочих областей элементов электроники с топологическими нормами менее 100 нм с высокой точностью работы ионного пучка.

Отработка методики формирования протяженных наноразмерных слоев проводилась с использованием модуля фокусированного ионного пучка (ФИП) и модуля сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) нанотехнологического комплекса «НТК-5 Нанофаб-100» фирмы NT MDT. Модуль ФИП представляет собой источник ионов галлия Ga^+ , ускоренных напряжением до 30 кВ, с возможностью фокусировки ионного пучка до диаметра 13 нм. Таким образом, ФИП является инструментом, способным создать литографический рисунок с минимальным топологическим размером на уровне 13 нм. Такой диапазон размеров характерен для современных нанотехнологических процессов, включая глубокое травление. Травление ионным пучком позволяет получать наноразмерные канавки, не прибегая к использованию фотолитографии и жидкостного травления.

Для проведения экспериментов выбраны четыре пластины диаметром 50,8 мм. Первая пластина из монокристаллического кремния с отполированной поверхностью исходной шероховатостью 0,5 нм, вторая – из монокристаллического арсенида галлия с отполированной поверхностью и исходной шероховатостью 1 нм, третья пластина – из сапфира с выращенной на его поверхности структурой AlGaIn/GaIn, четвертая – из сапфира с нанесенным на него алюминием с помощью термического распыления источника. На основе этих материалов формируют акустоэлектрические элементы электроники. В отличие от кремния, на поверхности и в объеме которого акустоэлектрический эффект слабо выражен [2], арсенид галлия и структура AlGaIn/GaIn более перспективны [3], так как имеют высокую скорость звуковой волны в среде. Что же касается алюминия, то этот материал используется для создания контактных областей к вышеперечисленным материалам при создании акустоэлектрических приборов.

© К.А.Царик, В.В.Лосев, С.В.Бараш, 2008

Образцы поочередно загружались в вакуумную камеру нанотехнологического комплекса «Нанофаб» с фокусированным ионным пучком. Модификация поверхности образца проводилась при давлении 10^{-8} торр. Для контроля модификации использовалось сканирование во вторичных электронах.

Основной проблемой при изготовлении нанозаготовок является шероховатость поверхности материала, на которой создаются наноструктуры. С помощью травления ионным лучом можно понизить шероховатость поверхности материала. Однако для разных материалов глубина травления для шлифовки до требуемой шероховатости различна. Это в первую очередь зависит от кристаллической структуры материала. Пленки алюминия и AlGaIn превысили предел (1 нм) по шероховатости поверхности. На рис.1,а показана морфология поверхности AlGaIn до травления ионным пучком, полученная в атомно-силовом микроскопе (АСМ). Шероховатость поверхности, измеренная АСМ, составила 3–4 нм. На рис.1,б показана морфология поверхности AlGaIn после травления ионным пучком, полученная в АСМ. Шероховатость поверхности, измеренная зондовым микроскопом, составила 0,5–0,7 нм. После чего был проведен эксперимент по травлению канавок.

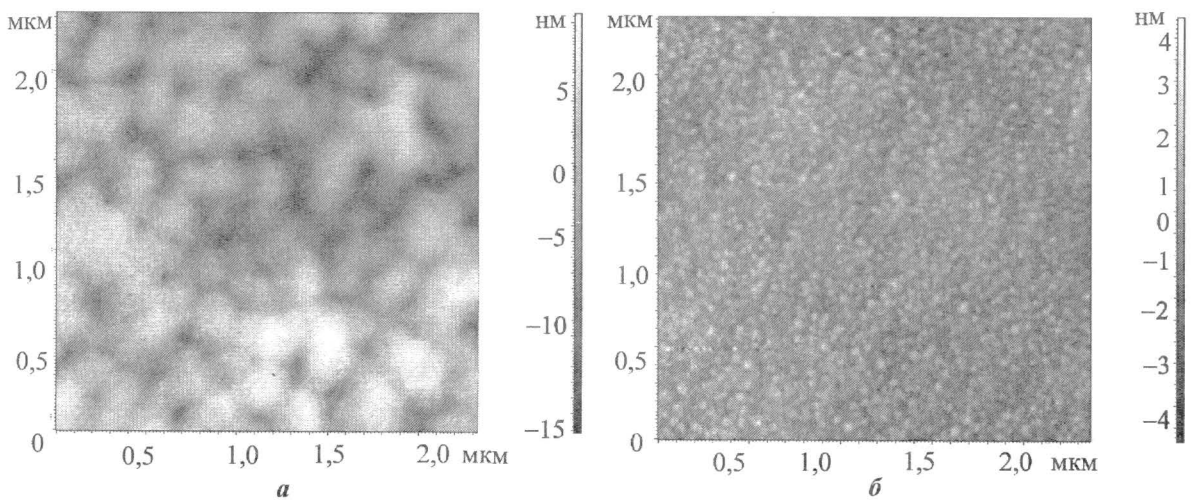


Рис.1. АСМ-изображение поверхности AlGaIn до (а) и после (б) травления ионным пучком

Опыт по полировке поверхности алюминиевой пленки показал, что полировка невозможна в связи с высокой скоростью травления аморфного алюминия (≈ 14 нм/мс). Так как качество поверхности не удовлетворяет условию получения равномерной канавки шириной ~ 10 нм и условию создания равномерной тонкой (порядка 10 нм и менее) пленки в качестве наноразмерных контактов, то исследования данного материала ограничены изучением скорости травления.

Для воздействия на поверхность образца создан файл-шаблон, используемый программой управления ионным пучком. Шаблон представляет собой потоковый файл, содержащий набор координат точек, время воздействия в них и количество проходов. Для создания шаблонов написана программа на языке C++. Для более точного контроля геометрии полученных структур и изучения скорости травления использовался сканирующий зондовый микроскоп, находящийся в другой камере нанотехнологического комплекса «Нанофаб».

Для изучения процессов травления опыты проводились при различных диаметрах пучка, токах пучка, а также временах воздействия пучка ионов. На рис.2 показана скорость травления Si при токах пучка 10 и 100 пА и GaAs при токах пучка 10 и 50 пА.

При травлении остросфокусированным ионным пучком происходит выброс вещества, и чем глубже травление, тем сильнее происходит травление боковых стенок получаемого кратера. Показанные на рисунке области замедления скорости травления связаны с затруднением выхода распыляемого материала [1]. Распыляемые ионным пучком атомы начинают смещаться в сторону и выбивать боковые атомы из материала.

На рис.3 показана скорость травления алюминиевой пленки. Из рисунка видно, что травление алюминия, полученного термическим распылением, на глубину до 110 нм происходит с постоянной скоростью. Это наблюдение позволяет не прибегать к дополнительным исследованиям при большей апертуре.

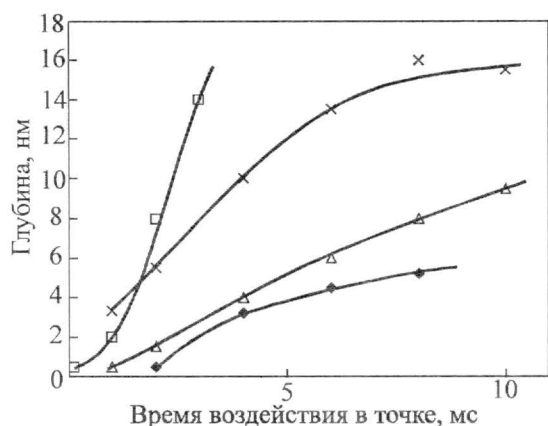


Рис.2. Зависимость глубины полученных канавок на кремнии при токах пучка 10 пА (◇) и 100 пА (□) и арсениде галлия при токах пучка 10 пА (Δ) и 50 пА (×) от времени воздействия в каждой точке

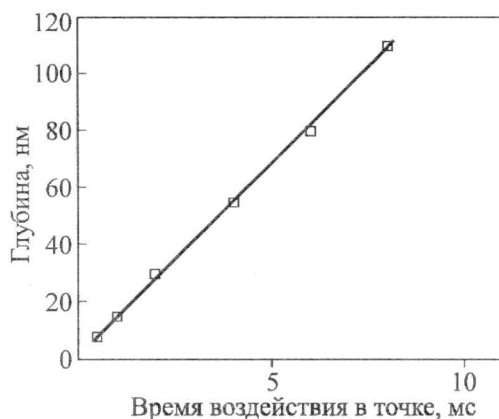


Рис.3. Зависимость глубины полученных канавок алюминия при токе пучка 10 пА от времени воздействия в каждой точке для алюминиевой пленки

При получении канавок ионным травлением имеются трудности на диэлектрических пленках типа AlGaIn. Предельно низкое качество изображения поверхности пленки широкозонного полупроводника во вторичных электронах приводит к необходимости работать на предельной для фокусированной ионной пушки апертуре, которая обеспечивает ток пучка 20 нА. Из рис.4 видно, что при травлении до глубины 160 нм скорость травления имеет линейный характер.

Графики, показанные на рис.5, получены в процессе оптимизирования времени воздействия и тока ионного пучка с целью получения канавок с минимальной шириной. Из графиков видно, что на арсениде галлия GaAs удалось добиться ширины реза в 70 нм при глубине 0,5 нм. Эти значения зависят не только от диаметра пучка, но и от свойств образца: плоскость среза, кристаллическая структура, аморфность и т.д. Например, при тех же параметрах травления на кремнии можно вытравить канавки шириной 45–50 нм и глубиной 2–3 нм.

Замедление травления боковых стен, расстояние между которыми превышает в несколько раз диаметр ионного пучка, связано со свободным вылетом нижележащих атомов из материала без вытеснения вышележащих боковых атомов.

После оптимизации ширины канавок создан потоковый файл, в котором учитывалась величина модифицированной области в точке и величина необходимого шага для получения ширины области между канавками, равной ширине канавок. Однако величина шага в потоковом файле также влияет на перекрытие точек воздействия ионного пучка. Соответственно при увеличении перекрытия точек увеличивается доза излучения [нКл/мкм²] и, следовательно, глубина канавки.

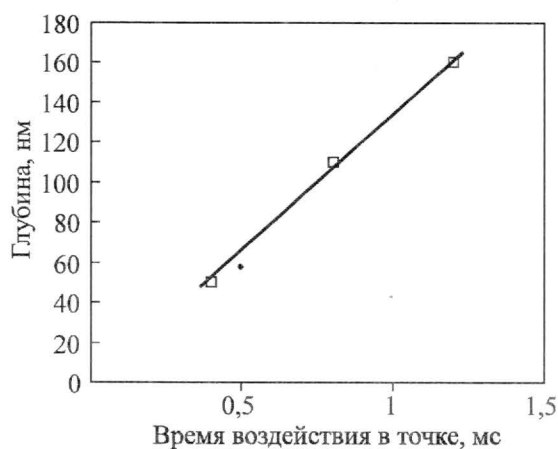


Рис.4. Зависимость глубины травления AlGaIn при токе пучка 20 нА от времени воздействия в каждой точке

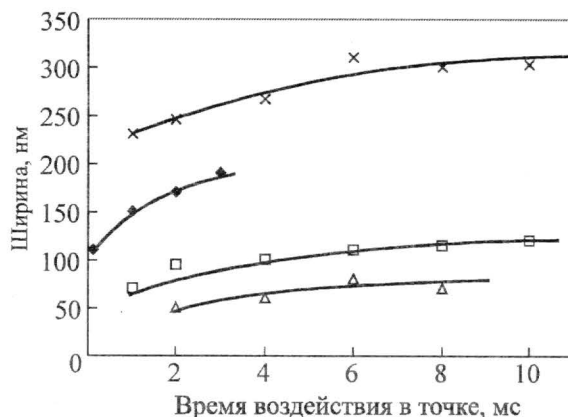


Рис.5. Зависимость ширины полученных канавок на кремнии при токах пучка 10 пА (Δ) и 100 пА (\blacklozenge) и арсениде галлия при токах пучка 10 пА (\square) и 50 пА (\times) от времени воздействия в каждой точке

На рис.6 показан результат травления ионным пучком поверхности GaAs образца в форме «змейки» с высокой точностью и периодичностью структуры. Видно, что отсутствует дрейф механической подвижки в плоскости XY, который обычно является серьезной преградой на пути формирования протяженных нанозаполнений. Дрейф удалось избежать благодаря калибровке параметров движения перемещающей подвижки.

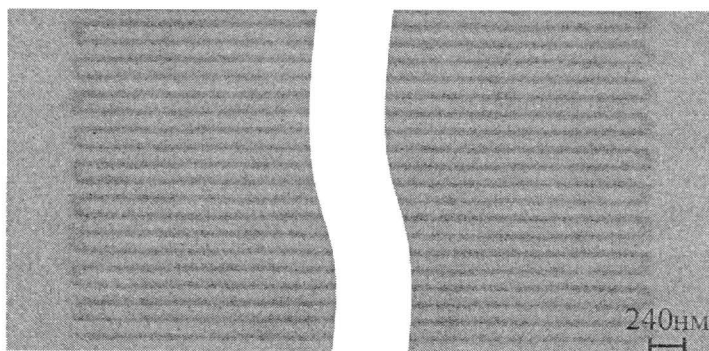


Рис.6. Изображение модифицированной поверхности GaAs во вторичных электронах (ширина канавки и расстояние между канавками примерно 70 нм)

Найдены закономерности формирования наноструктур фокусированным пучком ионов галлия, ускоренных напряжением 30 кВ, на поверхности материалов, которые можно использовать и для создания акустоэлектрических приборов СВЧ-диапазона. Исследования показывают, что скорость травления монокристаллических образцов гораздо меньше, чем аморфных или поликристаллических. Например, при времени воздействия в точке, равном 4 мс, глубина травления кремния и арсенида галлия составляла 3,2 и 4 нм соответственно, а алюминия – 55 нм. Следовательно, при травлении пленки алюминия на подложке арсенида галлия можно избежать излишнего травления арсенида галлия. Использование полирующего эффекта фокусированного ионного пучка позволяет получать поверхности материалов высокого качества, что дает хорошие перспективы для создания эффективных наноструктур на этих поверхностях.

Сведения по скоростям травления материалов и по топологическим размерам полученных элементов дают возможность разрабатывать методики построения прибора на основе акустоэлектрического эффекта.

Авторы благодарят Б.К.Медведева и В.К.Неволина за проявленный интерес к работе и обсуждение полученных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (госконтракты №02.523.12.3013 и №02.513.11.3152).

Литература

1. Грибков В.А., Григорьев Ф.И., Калинин Б.А., Якушин В.Л. Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов. – М.: Издательский дом «Круглый стол», 2001. – 527 с.
2. Campbell C. Surface Acoustic Wave Devices for Mobile and Wireless Communications. – San Diego: Academic Press, 1998, CA.
3. Velocity dispersion in GaN-based surface acoustic wave filters on (0001) sapphire substrates / N.Shigekawa, K.Nisimura, H.Yokoyama et al. / IEICE Electronics Express. – 2005. – Vol. 2, N 19. – P. 495–500.

Статья поступила
18 января 2008 г.

Царик Константин Анатольевич – аспирант Учебно-научного центра «Зондовая микроскопия и нанотехнология» МИЭТ. *Область научных интересов:* зондовая микроскопия, нанотехнология и наноэлектроника.

Лосев Виктор Васильевич – кандидат физико-математических наук, профессор кафедры общей физики МИЭТ. *Область научных интересов:* атомно-силовая микроскопия, зондовая нанотехнология.

Бараи Сергей Владимирович – магистрант кафедры квантовой физики и наноэлектроники МИЭТ. *Область научных интересов:* зондовая микроскопия, наноэлектроника, ионно-лучевая литография.

Информация для читателей журнала «Известия высших учебных заведений. Электроника»

С тематическими указателями статей за 1996 - 2007 гг., аннотациями и с содержанием последних номеров можно ознакомиться на нашем сайте:

<http://www.miet.ru/static/jel/os.html>

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 004.9

Формализация процессов интеграции информационных систем на основе теории множеств

С.А.Лупин, Е.В.Шерина

Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)

Н.Ю.Пономарева

Консультационно-диагностический центр Зеленоградского АО

Предложен метод формализации процессов интеграции информационных систем, основанный на описании процессов их взаимодействия с помощью теории множеств. Под интеграцией понимается процесс объединения информации, принадлежащей различным системам. Метод позволяет проводить качественную оценку возможных способов интеграции и прогнозировать свойства интегрированных систем.

Вопросы интеграции информационных систем (ИС), внедренных во все области человеческой жизнедеятельности, обобщающие как взаимодействие составляющих одной сложной системы между собой, так и взаимодействие нескольких различающихся систем, становятся все более насущными. Отсутствие общепринятого подхода приводит к тому, что в разных отраслях эти вопросы решаются независимо, опыт интеграции, приобретенный при решении проблемы в одной сфере, часто оказывается бесполезным в другой.

Суть предлагаемого подхода заключается в следующем.

Представим информационную систему $\{\Psi\}$ в виде множества из n элементов (объектов) $\{\Psi\} = \{\psi_1, \dots, \psi_n\}$. Тогда мощность $\{\Psi\}$ будет равна количеству содержащихся в ней объектов $|\Psi| = n$, каждому из которых ставится в соответствие некоторый набор атрибутов:

$$\{\psi\} = \{\iota_1, \dots, \iota_k, \phi_1, \dots, \phi_l, \alpha_1, \dots, \alpha_m\}, \quad |\psi| = k + l + m.$$

Таким образом, свойства объекта ψ в ИС описываются с помощью его атрибутов, принадлежащих некоторому классу I_i , Φ_i или A_i . Данные классы объединяют соответственно идентификационные, основные (или функциональные) и дополнительные атрибуты объекта и составляют множества классов $\{I\}$, $\{\Phi\}$ и $\{A\}$. Множество идентификационных классов ИС $\{I\}$ в системе $\{\Psi\}$ определяет все возможные классы, которым может принадлежать идентификационный атрибут, определяющий объект в данной ИС. Множество основных классов $\{\Phi\}$ в $\{\Psi\}$ определяет классы основных, функциональных атрибутов объекта, а множество дополнительных классов $\{A\}$ – классы некоторых дополнительных, не определяющих наши знания об объекте, атрибутов. Множество классов атрибутов одной системы может совпадать полностью, частично или не совпадать с соответствующим множеством классов атрибутов другой системы. Возможен случай пересечения неоднотипных множеств классов, например множества идентификационных классов одной системы с множеством дополнительных классов другой системы.

Таким образом, любой объект ψ представляется в ИС тремя множествами атрибутов: $\{i_i\}$ – множество идентификационных атрибутов; $\{\phi_i\}$ – множество основных информационных атрибутов, определяющих функциональность $\{\Psi\}$, и $\{\alpha_i\}$ – множество дополнительных информационных атрибутов, не влияющих на функциональность $\{\Psi\}$. Для каждого из атрибутов ψ существует единственный класс, принадлежащий множеству классов атрибутов рассматриваемой ИС:

$$\forall i_i \exists! I_i \in \{I\}, \forall \phi_i \exists! \Phi_i \in \{\Phi\}, \forall \alpha_i \exists! A_i \in \{A\}.$$

Рассмотрим некоторое множество ИС: $\{\Psi_1\}, \{\Psi_2\}, \dots, \{\Psi_N\}$. Каждую из них можно представить в следующем виде:

$$\{\Psi_i\} = \{i_{i1}, \dots, i_{ik(i)}, \phi_{i1}, \dots, \phi_{il(i)}, \alpha_{i1}, \dots, \alpha_{im(i)}\}, \quad |\Psi_i| = n_i.$$

Под интеграцией будем понимать создание некоторой системы $\{\Theta\}$:

$$\{\Theta\} = I\{\Psi_i\}, i = (1, \dots, N); \quad \{\Theta\} = \{i_1, \dots, i_{k(\Theta)}, \phi_1, \dots, \phi_{l(\Theta)}, \alpha_1, \dots, \alpha_{m(\Theta)}\}, \quad |\Theta| = M,$$

где I – некоторая функция интеграции.

Типы интегрируемых ИС. Введем следующую классификацию ИС исходя из их отношения друг к другу при интеграции:

- однородные информационные системы (ОИС);
- аддитивные информационные системы (АИС);
- разнородные информационные системы (РИС).

Системы $\{\Psi_1\}, \{\Psi_2\}, \dots, \{\Psi_N\}$ являются однородными по отношению друг к другу ($O\{\Psi_i\}$), если они описывают однотипные объекты. При этом множества как идентификационных, так и функциональных классов атрибутов объектов совпадают для всех систем. Различие заключается лишь во множествах классов дополнительных атрибутов:

$$\Psi_1 \in \{\Psi_i\}, \Psi_2 \in \{\Psi_j\}, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad i \neq j, \Psi_1 \neq \Psi_2; \quad (1)$$

$$k_1 = k_2 = \dots = k_N = k, \quad l_1 = l_2 = \dots = l_N = l,$$

$$\exists I_1, I_2, \dots, I_k : \forall i = 1, \dots, N$$

$$\exists ! j = 1, \dots, k : i_{ij} \in I_x \in \{I\}, \quad x = 1, \dots, k,$$

$$\exists \Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_l : \forall i = 1, \dots, N \quad (2)$$

$$\exists ! j = 1, \dots, l : \phi_{ij} \in \Phi_x \in \{\Phi\}, \quad x = 1, \dots, l,$$

$$\{A\}^i \neq \{A\}^j.$$

Системы $\{\Psi_1\}, \{\Psi_2\}, \dots, \{\Psi_N\}$ аддитивны по отношению друг к другу ($A\{\Psi_i\}$), если они содержат разную информацию об одних и тех же объектах. В этом случае множество классов идентификационных атрибутов может быть либо одинаковым для всех систем, либо иметь общее пересечение, позволяющее идентифицировать объект в любой из систем, т.е. выполняется следующее условие:

$$\psi \in \{\Psi_i\}, \psi \in \{\Psi_j\}, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad i \neq j; \quad (3)$$

$$k_i \neq k_j, \text{ из (3)} \Rightarrow \exists x \in 1, \dots, k_i : \exists y \in 1, \dots, k_j \text{ и } i_{ix} = i_{jy}. \quad (4)$$

При этом множества классов функциональных и дополнительных атрибутов различаются для разных систем: $\{\Phi\}^i \neq \{\Phi\}^j$, $\{A\}^i \neq \{A\}^j$.

Разнородные информационные системы $(P\{\Psi_i\})$ содержат в себе информацию о различных группах объектов. Единственным фактором, позволяющим провести интеграцию подобных систем, является совпадение некоторых классов идентификационных атрибутов одной системы с классами основных или дополнительных атрибутов другой системы:

$$\psi_1 \in \{\Psi_i\}, \psi_2 \in \{\Psi_j\}, i, j = 1, \dots, N, i \neq j, \psi_1 \neq \psi_2, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \forall i, j = 1, \dots, N \rightarrow \{I\}^i \neq \{I\}^j, \\ \exists! i = 1, \dots, N : \forall j = 1, \dots, N \text{ и} \\ \exists x = 1, \dots, l_i, \exists y = 1, \dots, m_i, \exists z = 1, \dots, k_j \text{ выполняется} \\ (\Phi_x \in \{\Phi\}^i) = (I_z \in \{I\}^j) \text{ или } (A_y \in \{A\}^i) = (I_z \in \{I\}^j). \end{aligned} \quad (6)$$

Функциональность ИС. Введем понятия функциональности, необходимые для оценки свойств интегрированных ИС: функциональность ИС по отношению к принадлежащему ей объекту $f(\psi_i)$ и функциональность ИС по отношению к некоторой совокупности объектов $F(\Psi)$.

Функциональность ИС $\{\Psi\}$ по отношению к принадлежащему ей объекту $f(\psi_i)$ зависит только от количества основных атрибутов объекта. Это определение не учитывает, какие именно атрибуты характеризуют объект. Оно не позволяет сравнивать между собой две информационные системы и предназначено только для того, чтобы оценивать изменения информационного наполнения системы в процессе интеграции. Таким образом, функциональность системы относительно принадлежащих ей объектов определяется тем набором основных информационных атрибутов, которые содержатся в системе:

$$\psi_i \in \{\Psi_j\} \Rightarrow f_j(\psi_i) \approx |\{\Phi\}^j| = l_j, \quad \forall i, j \in \mathbb{N}. \quad (7)$$

Функциональность ИС $\{\Psi\}$ по отношению к совокупности объектов $F(\Psi)$ является некоторой мерой возможностей по выявлению взаимосвязей между отдельными атрибутами объектов, принадлежащих системе, т.е. косвенной оценкой достоверности математических моделей объектов:

$$F(\Psi) \approx |\{\Psi\}| = n. \quad (8)$$

Исходя из основ теорий корреляционного и регрессионного анализа [1] можно сказать, что чем больше число коррелируемых пар показателей при вычислении степеней свободы, тем выше достоверность связи при одном и том же значении коэффициента корреляции. Таким образом, можно считать, что функциональность ИС как понятие, введенное для оценки информативности системы, будет возрастать с ростом количества объектов, принадлежащих ей.

Отметим, что вводимые понятия функциональности позволяют производить только качественную оценку изменений ИС при интеграции.

Методы интеграции ИС. Проведенный анализ методов интеграции ИС в различных сферах деятельности (государственной, финансовой, страховой, транспортной, во-

енной, медицинской, учебной) позволил выделить наиболее распространенные методы интеграции: интерфейсный, трансмиссионный и революционный.

Интерфейсный метод интеграции $I^И$, или жестко стандартизованный, основывается на утвержденных стандартах, протоколах обмена данными, определенной аппаратной платформе и т.д. Наиболее яркое применение этого метода можно проследить в сфере банковской деятельности на примере организации структуры SWIFT [2]. Данному методу интеграции присущи следующие недостатки:

- высокая стоимость подключения новых партнеров;
- сложность общения с внешними ИС;
- сильное влияние технической системы на структуру организации.

Трансмиссионный метод интеграции $I^Т$ предполагает создание в каждой интегрируемой системе локальных модулей-трансляторов для связи с остальными членами объединения. Как разновидность метода можно рассматривать ИС с «центральным транслятором», который связывает локальные системы. Этот подход часто используется в случае интеграции «под давлением», например в страховом бизнесе [3].

Примерами могут служить «введенные сверху» в жизнедеятельность общества процедуры, связанные с ОМС или ОСАГО. Так, страховые компании внедрили в свою структуру информационные модули, связанные с учетом необходимых данных. Однако эти модули не одинаковы для различных страховых компаний и при организации обмена данными, например для расчета страховой премии, они вынуждены прибегать к трансляторам.

Очевидным недостатком трансмиссионного метода является высокая сложность построения универсального транслятора, а достоинством – относительно малое время разработки транслятора для внедрения в готовую интегрированную систему новой ИС. Однако при большом количестве интегрируемых систем возникает сложность создания множества трансляторов, позволяющих общаться каждой системе с каждой.

Революционный метод интеграции $I^Р$ является самым радикальным. Он предполагает, что старая ИС, обросшая в процессе эксплуатации различными надстроечными модулями, просто заменяется новой, которая и реализует весь необходимый набор функций. В России этот метод уже дважды был использован в Министерстве путей сообщения [4]. Однако при широко распределенной ИС процесс смены всей системы становится весьма болезненным и очень затратным мероприятием. К тому же прогресс в области информационных технологий приводит к быстрому устареванию системы и заставляет внедрять новую, революционную, что влечет за собой дальнейшие сложности и затраты.

Во многих случаях при построении интегрированных ИС используются комбинированные подходы, включающие в себя элементы из перечисленных выше методов. В процессе эволюции ИС двигаются по спирали, проходя последовательно через все методы интеграции в зависимости от стадии развития, на которой они находятся.

Совместив в некоторой матрице предложенные методы интеграции и типы информационных систем, получим формализованный аппарат, позволяющий проводить качественную оценку возможных методов и прогнозировать свойства интегрированных систем, а также особенности их развития.

Особенности интерфейсного метода интеграции ОИС. Из определения ОИС (2) и интерфейсного метода интеграции следует:

$$\begin{aligned} \forall i, j \in \aleph : k_i = k_j = k, \quad l_i = l_j = l, \\ \exists I_1, I_2, \dots, I_k : \forall i = 1, \dots, N \exists ! j = 1, \dots, k : \iota_{ij} \in I_x, \quad x = 1, \dots, k, \\ \exists \Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_l : \forall i = 1, \dots, N \exists ! j = 1, \dots, l : \varphi_{ij} \in \Phi_x, \quad x = 1, \dots, l. \end{aligned}$$

При $I^И(\mathcal{O}\{\Psi_i\})$ каждая $\{\Psi_i\}$ сохранит свою индивидуальность, при этом

$$\begin{aligned} k_{\Theta} = k, \quad l_{\Theta} = l, \\ \forall i = 1, \dots, k \exists ! x : \iota_{\Theta i} \in I_x, \quad x = 1, \dots, k, \\ \forall i = 1, \dots, l \exists ! y : \varphi_{\Theta i} \in \Phi_y, \quad y = 1, \dots, l. \end{aligned}$$

Таким образом, функция интеграции $I^И(\mathcal{O}\{\Psi_i\})$ при возникновении запроса должна обеспечивать передачу идентификационных и основных атрибутов объектов (ι_i, φ_j) из одной системы в другую через общий интерфейс, т.е. в каждую систему $\{\Psi_i\}$ необходимо встроить механизм преобразования (ТМ) атрибутов ι_{ij} и φ_{ij} системы $\{\Psi_i\}$ в атрибуты $\iota_{\Theta k}$ и $\varphi_{\Theta k}$ системы $\{\Theta\}$:

$$\begin{aligned} \forall i = 1, \dots, N \text{ в } \Psi_i, \\ \exists TM_j \quad (j = 1, \dots, k) : \forall x = 1, \dots, k \exists ! TM_j : \{ \iota_{ij} \rightarrow \iota_{\Theta x} \}, \\ \exists TM_j \quad (j = 1, \dots, l) : \forall y = 1, \dots, l \exists ! TM_j : \{ \varphi_{ij} \rightarrow \varphi_{\Theta y} \}. \end{aligned}$$

Существование механизма преобразования также обусловлено тем, что классы, которым принадлежат идентификационные и основные атрибуты, являются гомогенными для всех интегрируемых систем. Для дополнительных информационных параметров объекта, атрибутов α_{ij} , представляется возможным два пути реализации интеграции – система с широким интерфейсом, когда в интегрируемой системе сохраняются все дополнительные атрибуты, присутствующие в каждой из интегрируемых систем, и система с узким интерфейсом, когда выбираются и сохраняются в системе $\{\Theta\}$ наиболее существенные атрибуты из всех α_{ij} , присутствующих во всех $\{\Psi_i\}$. В первом случае интерфейс системы будет более сложным, так как в нем будут присутствовать все атрибуты α_{ij} из всех N систем, подвергшихся интеграции.

Оценим изменение функциональности систем $\{\Psi_i\}$ и $\{\Theta\}$ при $I^И(\mathcal{O}\{\Psi_i\})$.

Теорема 1. При интеграции ОИС интерфейсным методом функциональность интегрированной системы по отношению к объекту не изменяется.

Доказательство. Пусть $\{\Theta\} = I^И(\mathcal{O}\{\Psi_i\})$.

$$\begin{aligned} \forall \psi_i \in \{\Psi_j\} \rightarrow \psi_i = \theta_i \in \{\Theta\} = I^И(\mathcal{O}\{\Psi_j\}), \quad j = 1, \dots, N, \\ \theta_i \in \{\Theta\} \stackrel{\text{Из (7)}}{\Rightarrow} f_{\Theta}(\theta_i) \approx |\{\Phi\}^{\Theta}| = l_{\Theta}. \end{aligned}$$

Опираясь на свойство однородных ИС, когда $l_1 = l_2 = \dots = l_N = l$, получаем:

$$\theta_i \in \{\Theta\} \Rightarrow f_{\Theta}(\theta_i) \approx |\{\Phi\}^{\Theta}| = l_{\Theta}; f_i(\psi_i) \approx |\{\Phi\}^i| = l_i;$$

$$l_{\Theta} = l \Rightarrow f_{\Theta}(\theta_i) = f_i(\psi_i), \forall i \in \mathbb{N}.$$

Таким образом, функциональность интегрированной системы по отношению к объекту не изменяется при $I^H(O\{\Psi_i\})$.

Теорема 2. При интеграции ОИС интерфейсным методом функциональность интегрированной системы по отношению к совокупности объектов возрастает.

Доказательство. Пусть $\{\Theta\} = I^H(O\{\Psi_i\})$.

$$\forall i = 1 \dots N : |\{\Theta\}| = M, |\{\Psi_i\}| = n_i, M \geq n_i. \text{ Из (8): } F(\Psi_i) \approx |\{\Psi_i\}| = n_i,$$

$$F(\Theta) \approx |\{\Theta\}| = M, M \geq n_i \Rightarrow F(\Theta) \geq F(\Psi_i).$$

Таким образом, повышается функциональность интегрированной системы по отношению к совокупности объектов.

Особенности интерфейсного метода интеграции РИС. Отметим, что в случае $I^H(P\{\Psi_i\})$ невозможно создать общий интерфейс, равноправно объединяющий все системы. Исходя из определения РИС (6), имеем несколько систем, в которых как мощность множеств классов различных атрибутов, так и их содержание различаются. Единственным моментом, позволяющим провести интеграцию, является свойство:

$$\exists i = 1, \dots, N : \forall j = 1, \dots, N \text{ и } \exists x = 1, \dots, l_i, \exists y = 1, \dots, m_j, \exists z = 1, \dots, k_j \text{ выполняется}$$

$$\left((\Phi_x \in \{\Phi\}^i) = (I_z \in \{I\}^j) \right) \text{ или } \left((A_y \in \{A\}^j) = (I_z \in \{I\}^j) \right).$$

Рассмотрим процесс $I^H(P\{\Psi_i\})$ в интересах некоторой системы $\{\Psi_i\}$, т.е. объекты идентифицируются в системе $\{\Psi_i\}$, а их функциональные и дополнительные свойства являются объектами в других системах $\{\Psi_j\}$:

$$\{\Theta\} = I^H(P\{\Psi_j\}), j = (1, \dots, N),$$

$$\{\Theta\} = \{ \iota_1, \dots, \iota_{k(i)}, \Phi_1, \dots, \Phi_{l(\Theta)}, \alpha_1, \dots, \alpha_{m(\Theta)} \};$$

$$k_{\Theta} = k_i,$$

$$\forall x \in 1 \dots k_{\Theta} \exists ! y \in 1, \dots, k_i : I_{\Theta x} = I_{iy};$$

$$\{I\}^{\Theta} = \{I\}^i,$$

$$\text{в } \{\Theta\} \exists TM_x (x = 1, \dots, k_{\Theta}) : \forall j = 1, \dots, k_i \exists ! TM_x : \{ \iota_{\Theta x} \rightarrow \iota_{ij} \}.$$

В силу свойств РИС функциональные $\{\Phi\}^{\Theta}$ и дополнительные $\{A\}^{\Theta}$ атрибуты в интегрируемой системе $\{\Theta\} = I^H(P\{\Psi_i\})$ расширяются следующим образом:

$$\{\Phi\}^{\Theta} = \{\Phi\}^i + \bigcup_{j \neq i, j=1}^N \left[KR \left[\left(\bigcup_{y=1}^{l_j} (\Phi_{jy}) \right) \bigcup \left(\bigcup_{z=1}^{m_j} (A_{jz}) \right) \right] \right], \quad (9)$$

где KR – условие $(\Phi_{ix} = I_{ju}) = 1, x = 1, \dots, l_i, u = 1, \dots, k_j;$

$$\{A\}^{\Theta} = \{A\}^i + \bigcup_{j \neq i, j=1}^N \left(KR \left[\left(\bigcup_{y=1}^{l_j} (\Phi_{jy}) \right) \bigcup \left(\bigcup_{z=1}^{m_j} (A_{jz}) \right) \right] \right),$$

где KR – условие $(A_{ix} = I_{ju}) = 1, x = 1, \dots, m_i, u = 1, \dots, k_j$.

Таким образом, значение функционального атрибута интегрированной системы имеет вид

$$\{\Theta\} : \langle \Phi_{\Theta x} \rangle = \begin{cases} \langle \Phi_{iy} \rangle, y = 1, \dots, l_i, \\ \langle I_{jz} \rangle, z = 1, \dots, k_j, \\ \langle \Phi_{ju} \rangle, u = 1, \dots, l_j, \\ \langle \alpha_{jv} \rangle, v = 1, \dots, m_j, \end{cases} \quad j = 1, \dots, N, j \neq i.$$

Аналогично можно описать и значения дополнительных атрибутов интегрированной ИС.

Механизм преобразования в случае $I^И(\mathcal{P}\{\Psi_i\})$ при запросе от главной системы к второстепенной позволяет получить целый список новых свойств объекта. При возникновении запроса от второстепенной системы $\{\Psi_j\}$ в $\{\Theta\} = I^И(\mathcal{P}\{\Psi_i\})$ протекают следующие процессы (рассмотрим случай запроса между двумя второстепенными системами, напрямую не связанными между собой, как наиболее сложный и интересный). Пусть

$$\psi \in \{\Psi_j\}, j = 1, \dots, N, j \neq i \text{ и } \exists I_{jx} (x = 1, \dots, k_j):$$

$$\langle I_{jx} \rangle = \begin{cases} \langle \Phi_{\Theta y} \rangle = \langle \Phi_{iy} \rangle, y = 1, \dots, l_i, \\ \langle A_{\Theta y} \rangle = \langle A_{iy} \rangle, y = 1, \dots, m_i, \end{cases}$$

тогда

$$\exists TM_{ji} : \begin{cases} \{ I_{jx} \rightarrow \Phi_{iy} \}, \\ \{ I_{jx} \rightarrow \alpha_{iy} \}. \end{cases}$$

В системе $\{\Psi_i\}$ присутствует несколько объектов с необходимым значением некоторого функционального или дополнительного атрибута:

$$\begin{aligned} \exists \psi_{\xi} \in \{\Psi_i\} (\xi = 1, \dots, \mu, \mu \in \aleph) : \begin{cases} \langle \Phi(\psi_{\xi}) \rangle^{iy} \\ \langle A(\psi_{\xi}) \rangle^{iy} \end{cases} = \begin{cases} \Phi_{iy} = I_{jx} \\ \alpha_{iy} = I_{jx} \end{cases} \\ \Rightarrow u \forall \psi_{\xi} \exists \begin{cases} \langle \Phi_{id} \rangle, d = 1, \dots, l_i : \langle \Phi_{id} \rangle = \langle I_{j^*x^*} \rangle, \\ \langle \alpha_{id} \rangle, d = 1, \dots, m_i : \langle \alpha_{id} \rangle = \langle I_{j^*x^*} \rangle. \end{cases} \end{aligned}$$

Таким образом, система $\{\Psi_j\}$ может запросить и получить количественные значения некоторого атрибута, интересующего ее в другой системе $\{\Psi_{j^*}\}$.

Теорема 3. При интеграции РИС интерфейсным методом функциональность интегрированной системы по отношению к объектам увеличивается.

Доказательство. Пусть $\{\Theta\} = I^H(\mathcal{P}\{\Psi_i\})$ и объект ψ принадлежит системе $\{\Psi_i\}$, первичной в интегрированной ИС $\{\Theta\}$. Из (9) и (7) имеем:

$$l_{\Theta} = \left| \{\Phi\}^{\Theta} \right| > \left| \{\Phi\}^{\psi} \right| = l_i,$$

$$\theta \in \{\Theta\}, \psi \in \{\Psi_i\}, \theta = \psi \Rightarrow f_{\Theta}(\theta) \approx \left| \{\Phi\}^{\theta} \right| = l'_{\Theta}, f_i(\psi) \approx \left| \{\Phi\}^{\psi} \right| = l_i,$$

$$l'_{\Theta} > l_i \Rightarrow f_{\Theta}(\theta) > f_i(\psi).$$

Очевидно, что $f_{\Theta}(\theta)$ по отношению к объектам, представленным в системе $\{\Psi_i\}$ (главной в нашем случае), увеличится за счет возрастания числа функциональных и дополнительных атрибутов объекта.

Для второстепенных при интеграции систем

$$\theta \in \{\Theta\}, \psi \in \{\Psi_j\}, \theta = \psi \Rightarrow f_{\Theta}(\theta) \approx \left| \{\Phi\}^{\theta} \right| = l'_{\Theta}, f_j(\psi) \approx \left| \{\Phi\}^{\psi} \right| = l_j,$$

$$l'_{\Theta} > l_j \Rightarrow f_{\Theta}(\theta) > f_j(\psi).$$

$f_{\Theta}(\theta)$ по отношению к объектам, представленным во второстепенных системах $\{\Psi_j\}$, увеличивается за счет получения некоторых обобщающих количественных характеристик из $\{\Psi_i\}$. Этот факт и обеспечивает заинтересованность в процессе интеграции различных «второстепенных» систем.

Теорема 4. При интеграции РИС интерфейсным методом функциональность интегрированной системы по отношению к совокупности объектов не изменяется.

Доказательство. Пусть $\{\Theta\} = I^H(\mathcal{P}\{\Psi_i\})$. Исходя из свойства РИС (5), что в каждой из интегрируемых систем содержатся свои уникальные объекты и при интеграции их количество не меняется, получаем

$$\forall i = 1, \dots, N : F(\Psi_i) \approx \left| \{\Psi_i\} \right| = n_i; \quad F_{\Theta}(\Psi_i) = F(\Psi_i) \approx n_i.$$

Таким образом, функциональность интегрированной системы $\{\Theta\}$ по отношению к совокупности объектов $F_{\Theta}(\Psi_i)$ не меняется ни в случае главной системы, ни в случае второстепенных ИС.

Подобным образом можно проанализировать все возможные варианты сочетаний методов интеграций с типами интегрируемых систем и в зависимости от рассматриваемого случая, общих целей интеграции и будущей стратегии развивающейся ИС произвести выбор того или иного метода интеграции.

Описанный выше механизм анализа путей интеграции ИС применен авторами при построении интегрированной медицинской ИС, предназначенной для работы генетического центра Зеленоградского округа, и ИС, поддерживающей работу множества различных подразделений университета. В первом случае была проведена разработка структуры открытой масштабируемой системы, интегрирующей потоки данных из нескольких лечебных учреждений. При внедрении этой системы она являлась первичной и никакая из существующих в других лечебных учреждениях систем не являлась прототипом. Реализованная связь внедренной медицинской ИС с вышестоящими организациями и лечебными учреждениями округа (женские консультации, родильные дома, детские поликлиники) позволяет врачу-генетику работать в некотором едином информационном поле окружной базы данных лечебно-профилактического учреждения охраны материнства и детства, получая расширенную информацию о пациентах, что способствует повышению эффективности медицинской помощи в первичном звене практического здравоохранения.

Во втором случае интеграция проводилась на базе нескольких уже существующих ИС, внедренных в подразделениях университета, выполняющих разные функции и раз-

работанных различными производителями. Вследствие создания единого информационного пространства, объединяющего подразделения вуза, повысилась эффективность процесса управления, снизились трудозатраты на информационную работу, усовершенствовалось предоставление данных для принятия управленческих решений.

Таким образом, предложенный метод формализации процессов интеграции ИС позволяет:

- провести деление интегрируемых ИС по степени общности данных на однородные, аддитивные, разнородные;
- ввести качественный показатель функциональности ИС и механизм оценки его изменения в процессе интеграции;
- оценить еще на начальной стадии процесса интеграции изменение функциональности отдельных ИС и системы в целом, а также затраты, необходимые на разработку программного обеспечения;
- провести оценку взаимодействия ИС реализованных на различных платформах, абстрагируясь от конкретных СУБД.

Литература

1. **Васильев В.И., Красильников В.В., Плакий С.И., Тягунова Т.Н.** Статистический анализ многомерных объектов произвольной природы. Введение в статистику качества: М.: ИКАР, 2004. – 382 с.
2. SWIFT-RUR. Форматы и правила использования. [Электронный ресурс] / Рекомендации по использованию стандартов SWIFT для передачи финансовых сообщений с учетом требований российской платежной системы. Версия 6. РОССВИФТ: Российская национальная ассоциация SWIFT. – Электрон. дан. – М., 2006. – Режим доступа: http://www.swift.ru/word_docs/RUR61811.pdf – Загл. с экрана.
3. **Дубова Н.** Информатизация страхового бизнеса // Открытые системы. – Электрон. дан. – М., 2003. – № 11. – Режим доступа: <http://www.osp.ru/os/2003/11/183636/>
4. **Марчук Б.Е., Красильникова Н. Н., Макарова Е. А.** Стратегия и приоритетные направления развития системы управления пассажирскими железнодорожными перевозками // Вестник ВНИИЖТ. – 2002. – № 5.

Статья поступила
6 сентября 2007 г.

Лупин Сергей Андреевич – кандидат технических наук, профессор кафедры вычислительной техники МИЭТ. *Область научных интересов:* информационно-управляющие и информационные системы, параллельные вычисления, кластерные вычислительные системы.

Шерина Евгения Владимировна – кандидат технических наук. *Область научных интересов:* информационно-управляющие и информационные системы.

Пономарева Наталья Юрьевна – заведующая окружным медико-генетическим кабинетом Зеленоградского АО. *Область научных интересов:* педиатрия, генетика, организация и информатизация в здравоохранении.

Алгоритм обнаружения сердечного ритма плода в доплеровском сигнале

К.И. Автушенко

Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)

Предложен метод определения частоты сердечных сокращений (ЧСС) плода по принципу «beat-to-beat» («от удара к удару»), основанный на вычислении ЧСС путем определения длины временного интервала между двумя последовательными сердечными сокращениями.

Основными показателями состояния плода являются параметры его сердечной активности. Для регистрации сердечной деятельности плода наиболее часто применяется метод ультразвукового зондирования с использованием эффекта Доплера. При реализации данного метода основная вычислительная задача – определение длины интервала сердечных сокращений.

При разработке алгоритма использовался метод компьютерного моделирования в среде математической обработки данных Matlab. В качестве входных данных использовались математически созданные сигналы, а также записи реальных ультразвуковых обследований. Рассмотрим пошагово работу алгоритма.

Первоочередной задачей при определении ЧСС является выделение ультразвукового доплеровского сигнала, отраженного миокардом. Помимо полезного сигнала, содержащего информацию о сердечной активности, в отраженном сигнале имеются побочные данные, определяемые плацентарным кровотоком и реакцией несердечных тканей. Пример входного сигнала представлен на рис. 1, а.

Шаг 1. Выделение полезного сигнала. Согласно медицинским данным, частота колебаний миокарда лежит в диапазоне 240–250 Гц. Для выделения из доплеровского сигнала обозначенной полосы частот предлагается использовать последовательно-включенные цифровой ФНЧ и полосовой фильтр (ПФ). В качестве ФНЧ выбран эллиптический фильтр

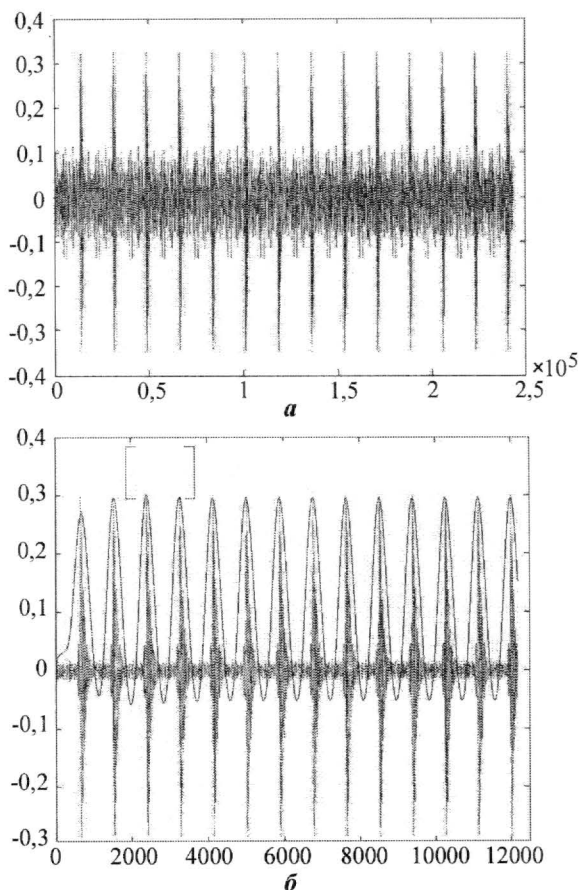


Рис. 1. Пример входного сигнала (а) и отфильтрованного сигнала с наложенной огибающей и окном для выделения фрагмента с двумя СС (б)

8 порядка с частотой среза 300 Гц и коэффициентом подавления 120 дБ. В качестве ПФ выбран эллиптический фильтр 8 порядка, выделяющий полосу частот от 200 до 300 Гц и обеспечивающий подавление в полосе заграждения 120 дБ.

Шаг 2. Построение огибающей. Следующим шагом и первым ключевым моментом алгоритма является получение огибающей выделенного полезного сигнала. Полученная огибающая используется в последующих шагах алгоритма для определения «первичного пульса» путем поиска местоположения пиков огибающей и определения временного расстояния между соседними пиками и для выделения фрагмента исходного отфильтрованного сигнала, содержащего ровно 2 сердечных сокращения.

Для получения огибающей сигнала строится модуль отфильтрованного исходного сигнала, а затем осуществляется фильтрация полученного сигнала эллиптическим ФНЧ 4-го порядка с граничной частотой 3 Гц.

Шаг 3. Определение «предварительного пульса». На огибающей рассматриваются два первых последовательных пика и вычисляется длина временного интервала между ними. Полученное значение используется как грубая оценка периода СС – «первичный пульс».

Шаг 4. Выделение двух последовательных сердечных сокращений. Рассматриваются три последовательных пика огибающей и строится временное окно, границы которого лежат на местоположении первого и третьего пика в группе. Полученное окно смещается вправо по сигналу на 125 мс. Такое смещение выбрано на основании анализа исследовательских материалов [2]. Далее проводится непосредственно вырезание участка полезного сигнала, содержащегося внутри выбранного временного окна (рис.1,б).

Выделенный фрагмент содержит ровно два последовательных сердечных сокращения (рис.2,а). Сигналы, отображающие сердечное сокращение, могут значительно отличаться друг от друга. Поэтому для увеличения степени схожести (коррелированности) в алгоритме проводится свертка выделенного участка с «эталонным ударом».

Шаг 5. Получение «эталонного удара». Для получения «эталонного удара», соответствующего особенностям конкретного участка, применяется автокорреляционная

функция (АКФ) [3]. Вычисляется симметричная АКФ $y(k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} x(n) \cdot x(n-k)$ для вы-

деленного участка сигнала и в качестве «эталонного удара» берется центральный пик АКФ, попадающий во временное окно протяженностью 80 мс, расположенное симметрично относительно центра АКФ (рис.2,б).

Шаг 6. Улучшение вырезанного участка с помощью «эталонного удара». Вычисляется свертка «эталонного удара» и исходного участка:

$$s(k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} x(n) \cdot y(k-n).$$

Результат свертки (улучшенный участок) представлен на рис.2,в.

Шаг 7. Определение ЧСС. На данном шаге проводится непосредственное определение ЧСС. Для этой цели используется значение «предварительного периода СС», вычисляемое как временное расстояние между соседними пиками огибающей. На улучшенном участке сигнала выбирается временная метка t , значение которой вычисляется как «предварительный период СС» минус 15 мс. Начиная от метки t и до конца улучшенного участка сигнала, вырезается однократное сердечное сокращение и вычисляется первый коэффициент взаимной корреляционной функции (ВКФ)

$$y(k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} x_1(n) \cdot x_2(n-k)$$

между полученным фрагментом и исходным улучшенным участком. Полученное значение сохраняется в массиве.

Далее проводится смещение метки t на один отсчет вправо. Повторяется операция по вырезанию фрагмента сигнала с одним СС и вычислению коэффициента ВКФ для нового фрагмента и исходного улучшенного участка. Коэффициент сохраняется в качестве второго элемента массива. Смещение метки и получение новых коэффициентов повторяется до тех пор, пока значение временной метки t не станет равно значению «предварительного периода СС» плюс 15 мс.

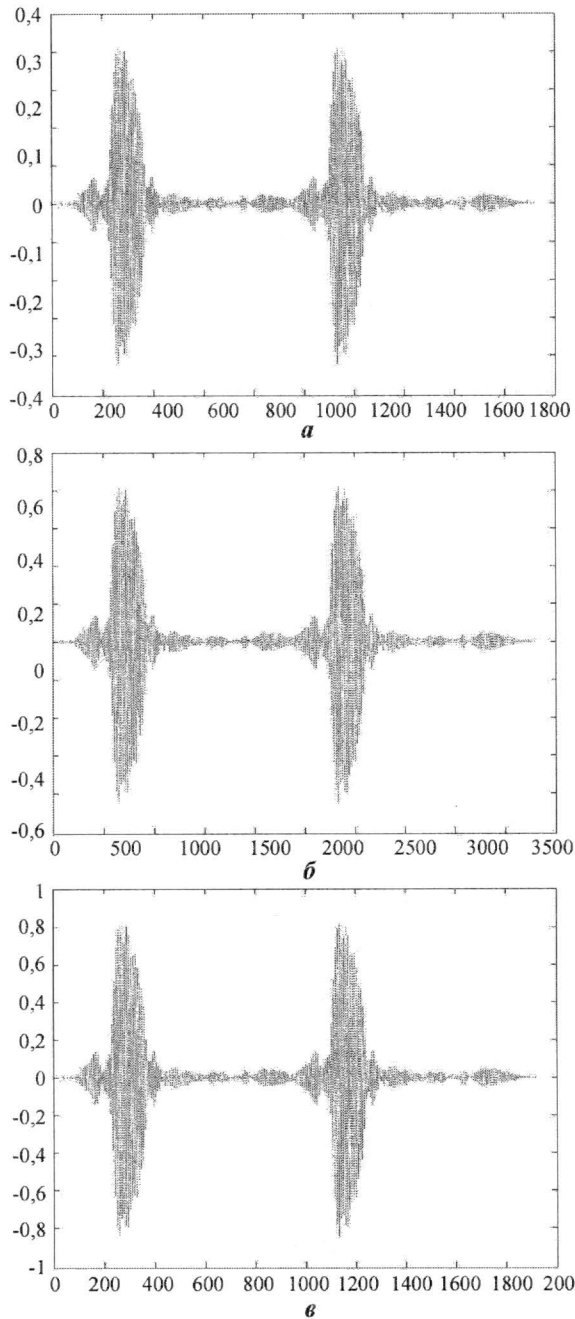


Рис.2. Фрагмент сигнала, содержащий два сердечных сокращения (а); АКФ фрагмента с окном для выделения «эталонного удара» (б); улучшенный фрагмент сигнала (в)

В окончательно заполненном массиве проводится поиск максимального элемента и значение метки t , соответствующее этому элементу, принимается за истинную ЧСС на данном участке.

Шаг 8. Выбор нового участка сигнала. На огибающей берется следующая группа пиков (пики 2, 3 и 4). Для данной группы повторяются шаги 3–7 алгоритма. В результате мы получаем оценку ЧСС для очередной пары СС. Повторяется шаг 8.

В результате работы алгоритма получена оценка сердечной деятельности плода на всем этапе обследования, которая отображается в виде тахограммы. Для оценки точности определения ЧСС алгоритмом использовалась оценка по методу наименьших квадратов (МНК).

Результаты тестирования алгоритма на равномерных последовательностях длиной 10 ударов сердца приведены на рис.3. Максимальное отклонение значения периода сердцебиений, определенных алгоритмически, от истинного периода составило 1 мс. При вычислении ЧСС такая погрешность определения периода приводит к ошибке менее 1 удар/мин, что является допустимой погрешностью определения ЧСС.

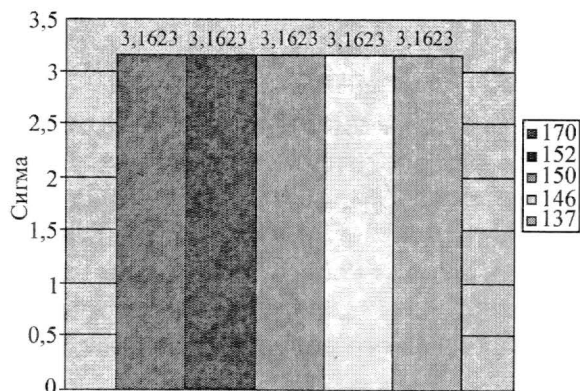


Рис.3. Гистограмма значений сигма для равномерных тестовых последовательностей

Литература

1. *Лелюк В.Г., Лелюк С.Э.* Ультразвуковая ангиология. – 3-е изд. – М.: Реал Тайм, 2007. – 416 с.
2. Beat-to-beat detection of fetal heart rate: Doppler ultrasound cardiotocography compared to direct ECG cardiotocography in time and frequency domain / *Chris H.L. Peters, Edith D.M. ten Broeke et al.* – Institute of physics publishing, 2004. – 9 с.
3. *Сергиенко А.Б.* Цифровая обработка сигналов. – СПб.: Питер, 2003. – 608 с.

Статья поступила
26 ноября 2007 г.

Автушенко Кирилл Игоревич – аспирант кафедры информатики и программного обеспечения вычислительных систем МИЭТ. *Область научных интересов:* применение алгоритмов цифровой обработки сигналов в медицинских системах.

Методика автоматизированного анализа документированной информации в системах поддержки принятия решений

В.В.Слюсарь, А.М.Баин, Со Тант

**Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)**

Предложена методика автоматизированного анализа содержания документированной информации, входящей в состав баз знаний автоматизированных систем поддержки принятия решений. Разработаны способы оценки соответствия документированных текстов заданной предметной области.

Ключевым фактором рыночного успеха в условиях высокой конкуренции становится оперативное принятие эффективных производственных и управленческих деловых решений. Однако на практике промышленные предприятия и организации часто испытывают значительные проблемы – объемы накопленной информации, доступной для анализа, входят в противоречие с интеллектуальными возможностями человека, усложняя процесс принятия эффективных решений. Одним из современных инструментов, обеспечивающих эффективное функционирование производственных, экономических и управленческих процессов, являются системы поддержки принятия решений (СППР), сочетающие в себе средства аналитической обработки данных и их представления (визуализации). Одним из важнейших компонентов СППР является база знаний – совокупность знаний по данной предметной области. Работа пользователя и системы с базой знаний нередко является самым продолжительным и трудоемким этапом процесса выработки решения с помощью СППР и фактически сводится к классификации и поиску информации, представленной в документированной форме.

Традиционно в задачах классификации и полнотекстового поиска документированной информации при выработке и принятии управленческих решений используются упрощенные векторные модели, представляющие описание предметной области в виде набора составляющих слов [1]. В современных условиях модели этого типа не всегда обеспечивают необходимое качество поиска информации в базе знаний. Одним из перспективных способов повышения качества моделей является учет коррелированности появления слов в тексте, обусловленной наличием между ними семантических связей.

Полагая понятие основной смысловой единицей предметной области, примем, что его появление обусловлено активацией одного элемента семантической модели, представляющего тему предметной области. Появление прочих слов в понятии обусловлено их связями с темами, задействованными в модели на момент анализа. Учитывая коррелированность появления слов в рамках определений предметной области, можно представить процесс построения понятий как марковский процесс первого порядка, состояния которого соответствуют предложениям, а вероятности переходов между состояниями обуславливаются связями элементов семантической модели, соответствующих словам.

В качестве описания модели предметной области используем ассоциативную семантическую сеть [2, 3].

Семантическая сеть как набор элементов, представляющих понятия предметной области, связанные между собой ассоциативными связями, в общем случае описывается матрицей весов связей A :

$$A = [a_{ij}], \quad (1)$$

в дальнейшем используемой для описания взаимосвязей, где a_{ij} может интерпретироваться как сила ассоциированности и отражать вероятность появления понятия j в смысловой связи с понятием i в рамках предметной области, описываемой сетью ($i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, N$, где N – количество понятий предметной области).

Пусть имеется модель ассоциативной семантической сети (1), представленная в виде матрицы P^N размера $N \times N$

$$P^N = [p(j|i)], i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, N, \quad (2)$$

где $p(j|i) \sim a_{ij}$ – условная вероятность появления j -го понятия в смысловой связи с i -м, N – количество элементов сети.

Приведем оценку вероятности того, что произвольный текст относится к заданной предметной области.

Обозначим набор понятий как одномерную матрицу $Q = (q_i)$ размера N , где $q_i = 1$, если i -е понятие семантической сети присутствует в наборе и 0 – в противном случае.

Тогда $Q = \sum_{i=1}^N q_i$ – количество понятий в наборе.

Представим предложение как набор входящих в него понятий $Q(m) = (q_i(m))$, где $m = 1, \dots, M$ – порядковый номер предложения в тексте.

Предположим, что каждое предложение относится к одной предметной области (теме) и обуславливает появление всех остальных понятий, связанных с ним, но попарно независимых. Тогда вероятность вхождения предложения $Q(m)$ в предметную область I , содержащую совокупность N предложений, можно определить как

$$p(Q(t)|m) = \sum_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (p(I/m)), I = I(i, j), \quad (3)$$

где $t = 1, \dots, M$ – порядковый номер понятия в предложении; $i = 1, \dots, N$ – порядковый номер предложения в предметной области. Представим вероятность вхождения предложения в предметную область как условную

$$p(Q(t)|q(t-1)) = \sum_{m=1}^N q_m(t) p(Q(t)|m) p(m|q(t-1)), \quad (4)$$

где q_m – вероятность появления m -го предложения в тексте, содержащем N предложений. Полагая равновероятным, что любое из понятий предложения m могло обусловить предметную область, вероятность вхождения предложения в предметную область определим следующим образом:

$$p(m|q(t-1)) = \frac{\sum_{j=1}^N q_j(t-1) p(m|j)}{\sum_{j=1}^N q_j(t-1)}, \quad (5)$$

где q_j – вероятность того, что j -е понятие присутствует в семантической сети, определяющей предметную область. Формула (5) верна и в общем случае для равновероятных событий. Тогда с учетом (3) и (5) из (4) окончательно получаем оценку вероятности вхождения предложения в предметную область в виде

$$p(Q(t)|Q(t-1)) = \sum_{m=1}^M q_m(t) p(I|m)^{q_i(t)}(t-1). \quad (6)$$

Полная вероятность вхождения текста в заданную предметную область вычисляется по формуле

$$p^* = \prod_{t=1}^N p(q(t)|q(t-1)). \quad (7)$$

Описанная модель может быть использована для решения задачи автоматизированной поддержки принятия управленческих решений.

Оценка параметров модели семантической сети в форме (2) требует определения понятий, а также условных вероятностей $p(j|i)$ появления пары понятий в смысловой связи. Провести оценку возможно на основе анализа текстов, входящих в предметную область, – эталонных текстов из одного класса в задаче классификации [3, 5].

Условная вероятность появления понятия j при условии, что понятие i использовалось перед этим, определяется следующим образом:

$$p(j|i) = \frac{p(ij)}{p(i)}, \quad (8)$$

где $p(ij)$ – вероятность появления пары понятий в смысловой связи, $p(i)$ – собственная вероятность появления i -го понятия в тексте.

В качестве критерия возможной связности понятий используем факт их появления в одном предложении текста. Искомая оценка выражается формулой

$$p(j|i) = \frac{\sum_{t=1}^N q_i(t)q_j(t)}{\sum_{t=1}^N q_i(t)} \left[\sum_{t=1}^N q_i(t) \right]^{-1}. \quad (9)$$

Здесь второй множитель – частота встречаемости понятия в тексте (исключая повторы в одном предложении), а первый – частота совместной встречаемости понятий в предложениях текста, нормированная с учетом количества понятий по каждому из предложений.

На практике при использовании модели из предложений текста следует исключить стоп-слова (предлоги, союзы и т.п.), появление которых обуславливается рядом таких факторов, как грамматика языка [4, 5].

Применение подобных моделей при проектировании и разработке автоматизированных СППР позволяет существенно повысить компетентность вырабатываемых ими положений. Введение учета коррелированности появления тех или иных понятий в тексте значительно сужает рамки предметной области, что позволяет исключить «мнимые» понятия, ошибочно отнесенные к искомой области. Определение частот встречаемости слов в текстах позволяет выделять ключевые понятия предметной области и осуществлять ранжирование текстов на предмет соответствия поставленной задаче.

При дальнейшем расширении ассоциативной сети понятий до очень больших размеров ($N \rightarrow \infty$) возможно использование методов математической статистики и осуществление предварительного анализа ожидаемых результатов и разброса параметров.

Использование рассмотренного математического аппарата позволяет решить и обратную задачу – создание семантической ассоциативной сети (с использованием формул (5), (8–9), а также выполнение оптимизации сети (под оптимизацией в данном случае подразумевается построение сети, не являющейся избыточной и имеющей взаимно однозначное соответствие между элементами). В ходе проведенных экспериментальных исследований установлено, что благодаря предложенному подходу среднее время поиска документированной информации для среднестатистической базы знаний предметной области снизилось на 10–15%. Таким образом, можно говорить, что предложенная методика обеспечивает повышение оперативности, а значит и эффективности принятия управленческих решений, что позволяет обеспечить значительные преимущества предприятия перед конкурентами.

Литература

1. Харламов А.А., Ермаков А.Е., Кузнецов Д.М. Технология обработки текстовой информации с опорой на семантическое представление на основе иерархических структур из динамических нейронных сетей, управляемых механизмом внимания // Информационные технологии. – N 2. – 1998. – С. 26–32.
2. Honkela T., Kaski S., Lagus K., Kohonen T. Exploration of full-text databases with self-organizing maps // Proc. ICNN96, International Conference on Neural Networks // IEEE Service Center, 1996. – Vol. I. – P. 56–61.
3. Van Rijsbergen C.J. Information retrieval. – London: Butterworths, 1979. – 208 p.
4. Айвазян С.А., Бухштабер В.М., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 606 с.
5. Ермаков А.Е., Пleshko В.В. Ассоциативная модель порождения текста в задаче классификации // Информационные технологии. – 2000. – № 12. – С. 34–37.

Статья поступила
18 декабря 2007 г.

Слюсарь Валентин Викторович – кандидат технических наук, доцент кафедры информатики и программного обеспечения вычислительных систем (ИПОВС) МИЭТ. *Область научных интересов:* программно-аппаратные средства автоматизированного поиска документированной информации, интеллектуальные информационные системы.

Баин Александр Михайлович – кандидат технических наук, научный сотрудник кафедры ИПОВС МИЭТ. *Область научных интересов:* системы информационной поддержки управления виртуальным предприятием, реинжиниринг бизнес-процессов, модели и алгоритмы оптимизации структуры систем логистической поддержки.

Со Тант – аспирант кафедры ИПОВС МИЭТ. *Область научных интересов:* интернет-программирование, автоматизированные информационно-поисковые системы, системы управления знаниями.

МЕТОДЫ И ТЕХНИКА ИЗМЕРЕНИЙ

УДК 620.187:548.135

Особенности, методика и преимущества интегрального метода исследования текстур наноразмерных кристаллитов в электронной микроскопии

I. Физические основы метода

С.К.Максимов

Московский государственный институт электронной техники
(технический университет)

При электронно-микроскопических исследованиях (ЭМИ) текстурированных агрегатов из наноразмерных кристаллитов не существует ограничений на электронографические исследования текстур (ЭИТ) в колонне микроскопа, которые возникают для крупнокристаллических объектов. Описаны физические закономерности ЭИТ. Подчеркнуты преимущества от реализации ЭИТ в рамках ЭМИ.

В последние годы активно проявляется интерес к задачам, связанным с изучением структуры и свойств агрегатов, состоящих из наноразмерных кристаллитов [1–6]. Текстуры этих агрегатов могут быть обусловлены влиянием ориентирующих и неориентирующих подложек [2, 4, 5], механизмами роста [6], закономерностями транспорта компонентов к поверхности растущего агломерата [3] и т.д. Текстурированность во многом определяет все свойства основных продуктов нанотехнологий, и изучение текстур важно для их освоения. При решении этой задачи рентгеноструктурным методом возникают трудности, связанные с малыми размерами кристаллитов и недостаточной локальностью [7, 8]. Цель настоящей работы – показать, что текстурированность нанокристаллов может изучаться в электронной микроскопии, и указать пути этого изучения.

Текстурированные материалы – материалы с преимущественной ориентацией кристаллитов. Текстуры могут быть осевыми (аксиальными) с преобладающей ориентацией элементов текстуры относительно особого направления или планальными – с преимущественной ориентировкой вокруг особой плоскости. Эти оси и плоскости представляют собой субъекты текстур. В идеальных текстурах для субъектов текстур жестко выполняются ориентации, предписываемые текстурой, но реально ориентации выполняются не жестко и текстуры характеризуются дисперсией этих ориентаций. В аксиальных текстурах кристаллиты ориентированы так, что совокупность особых направлений $\langle hkl \rangle$ всех кристаллитов лежит внутри конуса, осью которого является ось текстуры. Угол при вершине конуса характеризует дисперсию. В планальных текстурах

плоскости $\{uvw\}$ ориентированы относительно оси текстуры таким образом, что совокупность направлений $\langle uvw \rangle$ формирует сферический пояс, центром которого является узел 000 . Ось планальной текстуры представляет собой нормаль к экваториальной плоскости сферического пояса. Оси текстуры и экваториальной плоскости приписываются индексы hkl , и в этом приближении с ними можно работать как с реальным направлением и плоскостью. Для совокупностей невыделенных направлений и плоскостей в статье использованы индексы huz , для особых направлений аксиальных текстур, осей аксиальной и плоскостной текстуры, а также плоскости нормальной оси текстуры – $\langle hkl \rangle$, $[hkl]$ и (hkl) , для элементов плоскостной текстуры – uvw . Для планальной текстуры дисперсия характеризуется углом, который образуется при сечении сферического пояса плоскостью, проходящей через ось текстуры.

Закономерности электронограмм для текстур обобщены в [9–11]. При использовании электронограмм от текстур для уменьшения азимутальной протяженности рефлексов рекомендованы проекции, наклоненные примерно на $55\text{--}60^\circ$ относительно оси текстуры (косые текстуры). До настоящего времени косые текстуры применяются при электронографических исследованиях атомной структуры [9–13]. В электронно-микроскопических исследованиях прошлых лет исследователи обычно имели дело с кристаллитами размерами, превышающими $0,5$ мкм. Для таких объектов электронно-микроскопические исследования были ориентированы на выявление внутрикристаллитной структуры, а взаимная ориентация кристаллитов изучалась с помощью рентгеноструктурного метода. Краткая информация об электронограммах текстур содержится в [14, 15], но она не доведена до методических рекомендаций и недостаточна для работы с этими электронограммами. Даже упоминания о текстурах отсутствуют в [16, 17], где описаны задачи, решаемые в электронной микроскопии электронографическим методом.

Методы электронографических исследований текстур в колонне электронного микроскопа практически недоступны современным авторам в силу библиографической редкости монографий [9, 10] и ограниченности информации, содержащейся в [11]. В настоящее время для электронно-микроскопического изучения текстур используются изображения с «прямым разрешением кристаллической решетки (HREM)» и/или «микроскопия ориентационно зависимых изображений» (orientation imaging microscopy) [2, 5, 7, 18–22]. Результаты подобных экспериментов имеют недостаточное статистическое обоснование и должны подкрепляться рентгеновскими [2, 5] (имеются также попытки преодолеть ограничения рентгеноструктурного метода применительно к исследованиям текстуры агрегатов, состоящих из нанокристаллов [7, 8]) или электронографическими исследованиями [17, 19]. Однако при рентгеноструктурном изучении текстур возникают указанные выше трудности, а электронографические исследования не доводятся до выявления закономерностей текстур и ограничены демонстрацией электронограмм, отвечающих одной проекции. При этом отсутствуют даже попытки определить дисперсию текстуры, и она характеризуется терминами «high-textured» и «low-textured» [17].

Сложности, возникающие при электронно-микроскопических исследованиях текстур из кристаллитов с размерами $\gg 0,5$ мкм, отсутствуют для агрегатов из наноразмерных кристаллов. Даже при размерах селективных областей $\approx 0,5$ мкм в образце толщиной $0,1$ мкм насчитывается $\approx 2,5 \cdot 10^4$ кристаллитов размерами ≈ 10 нм. При на-

клонах образца относительно оси прибора до 60° противолежащие точки на краю селективной области $\approx 0,5$ мкм удалены друг от друга вдоль оси прибора на $\approx 0,4$ мкм и от оси микроскопа на $\approx 0,2$ мкм. Поэтому даже наклоны в 60° (например, для Philips CM 30 [23]) не искажают геометрию электронограмм, и текстуры нанокристаллов могут изучаться в электронных микроскопах электронографическим методом.

Электронограммы текстурированных объектов. Общие сведения о электронограммах текстур. Электронограммы текстур существенно отличаются от точечных электронограмм монокристаллов и кольцевых электронограмм поликристаллов. Их можно охарактеризовать через построение обратной решетки текстуры, которая формируется путем вращения решетки монокристалла вокруг оси, совпадающей с осью текстуры. Эта решетка описывается в цилиндрических координатах с координатной осью, совпадающей с осью текстуры. В цилиндрических координатах расстояние между узлами 000 и huz характеризуется координатами R и \check{z} (R – радиус кольца, \check{z} – расстояние вдоль оси) и модуль дифракционного вектора \mathbf{H}_{huz} равен

$$H_{hkl}^2 = h^2 + k^2 + l^2 = R^2 + \check{z}^2. \quad (1)$$

Выражение (1) соответствует ситуации, когда оси x и y лежат в плоскости текстуры, а ось \check{z} совпадает с одной из осей обратной решетки. Закономерности обратной решетки текстуры в цилиндрических координатах видны на рис.1.

В результате дисперсии кольцевые узлы трансформируются в сферические пояса с центрами в узле 000 и сечение поясов плоскостями, наклоненными относительно оси координат, ведет к возникновению рефлексов в форме дуг. Поэтому обратная решетка текстуры представляет собой системы дуг (рис.2) для всех отражений за исключением узлов, лежащих на оси вращения, которые остаются точечными, и для всех проекций, кроме проекций, параллельных или перпендикулярных оси текстуры. Электронограмма для проекции, параллельной оси текстуры, представляет собой совокупность концентрических колец, отдельные сегменты которых могут иметь более высокую интенсивность (рис.3). Азимутальная протяженность рефлексов на косых проекциях зависит от амплитуды дисперсии и угла наклона между направлением проекции и осью текстуры и уменьшается с ростом этого угла. Одновременно уменьшается ретикулярная плотность отражений на электронограмме, поскольку с уменьшением азимутальной протяженности отражений секущая плоскость касается все меньшего числа рефлексов. Хотя на электронограмме текстуры отражения имеют форму дуг, это не мешает выделению отдельных рефлексов, и в этом отношении она близка к точечным электронограммам монокристаллов. Однако отражения на электронограмме текстуры принадлежат разным проекциям в решетке монокристалла, и в этом отношении она подобна кольцевым электронограммам поликристаллов.

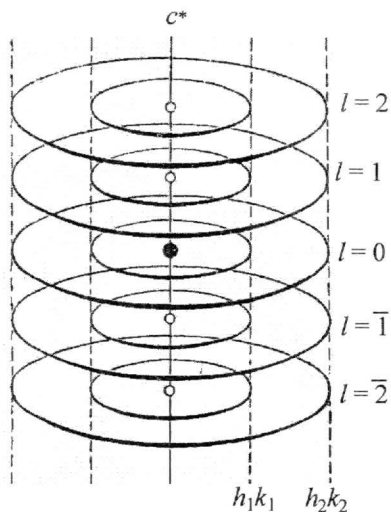


Рис.1. Узлы обратного пространства текстуры в цилиндрических координатах (расположение кольцевых узлов обратной решетки идеальной текстуры на коаксиальных цилиндрах при ее описании в цилиндрических координатах)

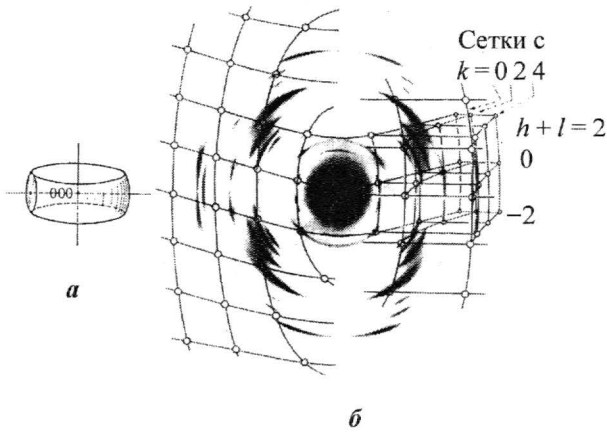


Рис.2. Закономерности формирования электронограмм от текстур: *a* – форма узла текстуры; *б* – электронограмма кривой текстуры $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; ось текстуры $[101]$, угол наклона относительно оси 60° . Справа показано перспективное изображение обратной решетки монокристалла $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, вращение которой объясняет электронограмму; слева – сетка отражений $h0l$ для монокристалла

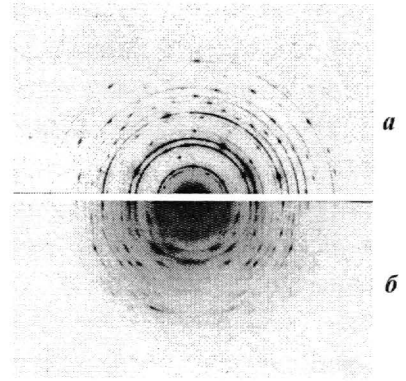


Рис.3. Изменения на электронограмме текстуры $\text{BaCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ при наклонах: *a* – съемка вдоль нормали к плоскости текстуры (накладываются дифрактограммы монокристаллической и текстурированной областей); каждому узлу $hk0$ на электронограмме текстуры соответствует кольцо; *б* – наклон в 60° относительно оси текстуры; кольца распадаются на рефлексы в форме дуг

Особенности косых текстур. Пусть плоскость сечения пересекает обратную решетку текстуры под углом φ , так что угол наклона этой плоскости относительно оси z равен $(90^\circ - \varphi)$. В этой плоскости лежит дифракционный вектор \mathbf{H}_{xyz} . Связь вектора \mathbf{H}_{xyz} с координатами обратной решетки иллюстрирует рис.4, где углы и координаты оси относятся к триклинной решетке (наиболее общий случай). Переход к кристаллам других сингоний не представляет труда, например для кубических кристаллов оси обратной решетки совпадут с осями в пространстве текстуры, а углы $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$.

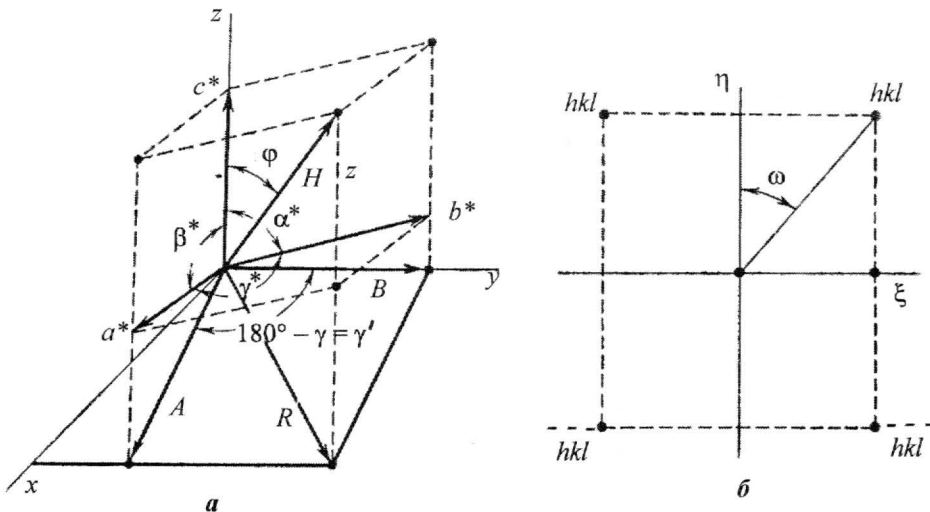


Рис.4. Оси цилиндрических координат, используемые в статье: *a* – цилиндрические оси координат обратной решетки (вектор \mathbf{H} проведен к узлу 111); *б* – оси координат в плоскости электронограммы

Для секущей плоскости, проходящей через узлы 000 и xyz , введем координаты η и ξ . Связь между цилиндрическими координатами и координатами η и ξ показана на рис.5. Расстояние узла xyz от узла 000 сохраняется в этом сечении неизменным:

$$H_{xyz} = (d_{xyz})^{-1} = r_{xyz}(L\lambda)^{-1}. \quad (2)$$

В соответствии с формулой (2) и рис.5 соотношения, связывающие координаты в плоскости электронограммы η и ξ с координатами узла обратной решетки, имеют вид

$$\eta = \frac{z}{\sin \varphi}, \quad (3a)$$

$$\xi^2 = R^2 - (z \operatorname{ctg} \varphi)^2, \quad (3б)$$

$$R^2 = H_{hkl}^2 - \eta^2 \sin^2 \varphi, \quad (3в)$$

$$\xi^2 = R^2 - \eta^2 \cos^2 \varphi, \quad (3г)$$

$$\xi^2 = H_{hkl}^2 - \eta^2. \quad (3д)$$

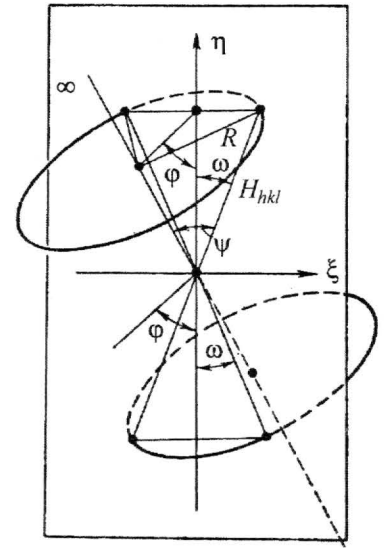


Рис.5. Переход от цилиндрических координат в обратной решетке к координатам электронограммы

Сетки с эллиптическим распределением рефлексов. Узлы обратной решетки отображаются на электронограмме дужками. В то же время прямые в обратной решетке превращаются при вращении в поверхности вращения. Сечение этих поверхностей плоскостью электронограммы дает кривые второго порядка, вдоль которых лежат рефлексы. Характерным для текстуры является расположение рефлексов вдоль прямых, параллельных оси текстуры (см. рис.4). Если расстояние R такой прямой от оси текстуры R_1 , то уравнение $R = R_1$ является в цилиндрических координатах уравнением цилиндрической поверхности. Чтобы найти уравнение сечения, объединим формулы (1) и (3г), тогда имеем:

$$\frac{\xi^2}{R_1^2} + \frac{\eta^2 \cos^2 \varphi}{R_1^2} = 1. \quad (4)$$

Уравнение (4) – уравнение эллипса с малой полуосью R_1 и большой полуосью $\frac{R_1}{\cos^2 \varphi}$.

Таким образом, характерным для электронограмм косых текстур является расположение отражений по эллипсам. В случае наноразмерных кристаллов и малых углов наклона φ рефлексы могут объединяться в непрерывные кривые и на электронограмме будут наблюдаться непрерывные эллипсы (рис.6). Величины R и φ могут быть определены на электронограммах косых структур по двум рефлексам, принадлежащим одному эллипсу:

$$R^2 = \frac{\xi_1^2 \eta_2^2 - \xi_2^2 \eta_1^2}{\eta_2^2 - \eta_1^2}; \quad (5a)$$

$$\cos^2 \varphi = \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\eta_2^2 - \eta_1^2}. \quad (5б)$$

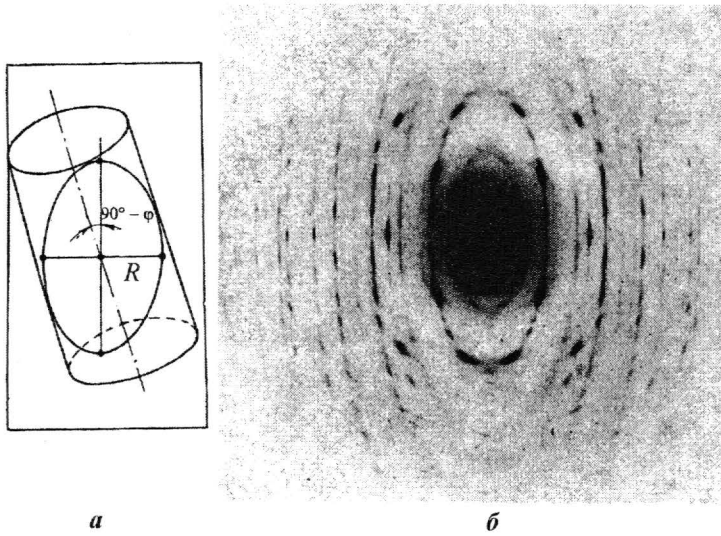


Рис.6. Эллипсы на электронограммах косых текстур: *а* – схема образования; *б* – электронограмма $\text{PbO} \cdot \text{H}_2\text{O}$. Ось текстуры c^* , наклон – 65°

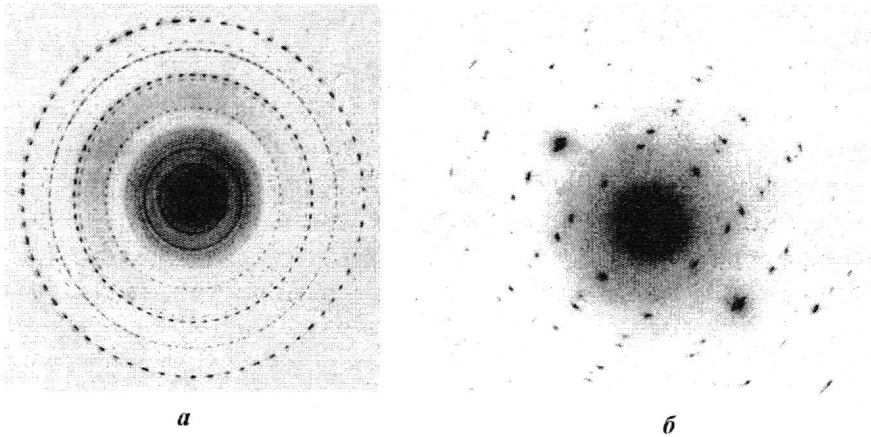


Рис.7. Электронограммы текстур, отвечающие особым ориентациям проекций: *а* – электронограмма $\text{Ba}(\text{OH})_3$, кристаллы имеют практически непрерывный набор ориентаций, съемка вдоль оси текстуры; *б* – кристаллы мочевины, ось текстуры лежит в плоскости проекции

На электронограммах вдоль оси текстуры эллипсы трансформируются в окружности, а для текстур кристаллитов с ортогональной решеткой они превращаются в прямые при $\cos \varphi = 0$ (рис.7).

Слоевые линии. Слоевые линии возникают, если какие-то плоскости обратной решетки перпендикулярны оси текстуры. Тогда рефлексы от этих плоскостей, формируют параллельные ряды, именуемые слоевыми линиями (рис.8). Причем слоевая линия, проходящая через узел 000 , именуется нулевой. Если ось z является осью текстуры, то любой узел данной плоскости имеет $z = z_1$, где z_1 равно целому числу периодов c^* , и тогда

$$\eta = \frac{lc^*}{\sin \varphi}; \tag{6a}$$

$$c^* = \frac{\eta \sin \varphi}{l} \quad (66)$$

(здесь l – номер слоевой линии). Формула (66) позволяет определять c^* , но точность определения не велика в силу малой точности оценок φ . Точные измерения осуществляются, если измерить малую полуось R какого-либо эллипса (она измеряется непосредственно, поскольку на электронограмме присутствует нулевая слоевая линия), а также H любого рефлекса данного эллипса:

$$c^* = \frac{\sqrt{H^2 - R^2}}{l}. \quad (7)$$

Слоевые линии наблюдаются только на электронограммах текстур кристаллов высших и средних сингоний, ориентированных главными или побочными осями параллельно оси текстуры, а также для кристаллов орторомбической сингонии, расположенных координатными гранями параллельно этой оси.

Осевые прямые электронограмм от текстур. Осевыми прямыми на электронограммах текстур являются прямые, которые проходят через узел 000 , и вдоль которых располагаются узлы, соответствующие разным порядкам отражения от некоторой плоскости. Образование осевых прямых иллюстрирует рис.9. Если на электронограмме присутствуют слоевые линии, то две оси совпадают с нулевой слоевой линией. В зависимости от симметрии кристаллов и ориентации оси текстуры относительно направления съемки в составе пучка осевых прямых могут наблюдаться от одной до трех осевых прямых, соответствующих осям обратной решетки a^* , b^* , c^* , или прямые, отвечающие осям решетки, не наблюдаются вообще. Особо интересны осевые прямые, не образующие прямого угла с осью z . Обозначим этот угол через ψ . Уравнение прямой, проходящей через узел 000 :

$$z \operatorname{tg} \psi = R. \quad (8)$$

Это уравнение в цилиндрических координатах является уравнением конической поверхности, и, выражая z и R через координаты η и ξ в соответствии с уравнениями (3а)–(3д), получим:

$$\xi^2 = k^2 \eta^2, \quad (9a)$$

$$\xi = \pm k \eta, \quad (9б)$$

где

$$k^2 = \sin^2 \varphi \operatorname{tg}^2 \psi - \cos^2 \varphi. \quad (9в)$$

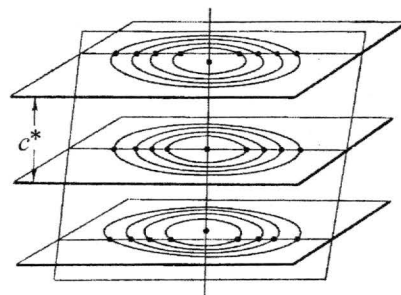


Рис.8. Схема образования слоевых линий

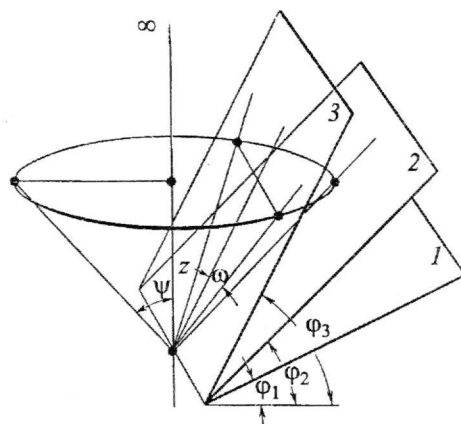


Рис.9. Образование осевых прямых на электронограммах косых текстур. Три варианта сечения конуса в обратной решетке наклонной плоскостью: 1 – $\varphi_i < 90^\circ - \psi$, $k^2 < 0$; 2 – $\varphi_i = 90^\circ - \psi$, $k^2 = 0$; 3 – $\varphi_i > 90^\circ - \psi$, $k^2 > 0$

Таким образом, прямая обратной решетки, проходящая через начало координат, отображается на электронограмме парой прямых, также проходящих через начало координат. Угол ω легко определяется по электронограмме по соотношениям $\cos \psi = \frac{\eta}{H}$ или $\operatorname{tg} \psi = \frac{\xi}{\eta}$. Из рис.9 следует $z = H \cos \psi = H \cos \omega \cdot \sin \varphi$, т.е.,

$$\cos \omega = \cos \psi / \sin \varphi. \quad (10)$$

Это соотношение позволяет переходить прямо от углов на электронограмме к углам в обратном пространстве.

Пока угол сечения не станет равным ($90^\circ - \psi$), плоскость сечения не коснется прямой на электронограмме (рис.9), поэтому величина k в (9а) не всегда является действительной. При $\varphi = 90^\circ - \psi$ плоскость касается прямой и на электронограмме возникают нерасщепленные рефлексы, но только при $\varphi > 90^\circ - \psi$ на электронограмме направлению huz в обратном пространстве будет соответствовать пара осевых прямых.

Гиперболы на электронограммах от текстур. Пусть направление обратной решетки проходит через узел $00l$, но не проходит через 000 (рис.10). Уравнением такой прямой (и соответствующей ей конической поверхности) будет:

$$(z - lc^*) \operatorname{tg} \psi = H. \quad (11)$$

Выражение (11) в результате преобразований, аналогичных преобразованиям, осуществившихся при переходе к формуле (9в), трансформируется в следующее:

$$\xi^2 - k^2 \eta^2 + 2\eta \cdot \sin(\varphi lc^*) \cdot \operatorname{tg} \psi = l^2 c^{*2} \cdot \operatorname{tg} \psi, \quad (12)$$

где k определяется аналогично k в формуле (9).

Анализ выражения (12) совместно с рис.10 показывает, что в зависимости от значения k^2 и разных φ на электронограмме фиксируются окружность (при $\varphi = 0^\circ$), эллипс, парабола, пара гипербол и пара прямых (при $\varphi = 90^\circ$). При съемке под углами $> 45^\circ$ прямые этого типа изображаются как пара гипербол с осью η . Эти гиперболы именуется гиперболами 1-го рода.

Общим случаем наклонной узловой прямой в обратной решетке является прямая, не проходящая через ось z . Пусть данная прямая пересекает плоскость $z = 0$ в точке R_1 и параллельная ей прямая, проходящая через узел 000 , образует с осью z угол ψ . Уравнение такой прямой и поверхности вращения, для которой эта прямая является образующей, имеет вид

$$R^2 - (z \cdot \operatorname{tg} \psi)^2 = R_1^2. \quad (13)$$

Эта поверхность представляет собой однополостный гиперboloид вращения с асимптотическим конусом $z \cdot \operatorname{tg} \psi = R$ (рис.11, 12).

Переходя к координатам электронограммы посредством уравнений (3) получим

$$\xi^2 - k^2 \eta^2 = R_1^2, \quad (14)$$

где k определяется аналогично k в формуле (9а).

Рассматривая совместно рис.11 и выражение (14) найдем, что при возрастании φ на электронограмме появятся: окружность ($k = -1$), эллипс ($k^2 < 0$), пара прямых ($k^2 = 0$), пара гипербол ($k^2 > 0$), которые именуется гиперболами 2-го рода.

Подводя итог описанию закономерностей косых текстур, отметим, что все направления, существующие в обратной решетке текстур, отображаются на этих электронограммах в соответствии с их ориентациями и позиционированием относительно оси текстуры, т.е.

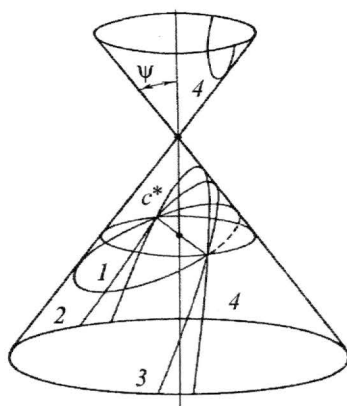


Рис.10. Отображение на узловой прямой обратной решетки, проходящей через ось текстуры, на электронограмме косой текстуры. Вращение узловой прямой дает конус. ψ – угол прямой с осью текстуры; сечение конуса плоскостью при возрастании угла φ дает окружность (1), эллипс (2), параболу (3), гиперболу первого рода (4)

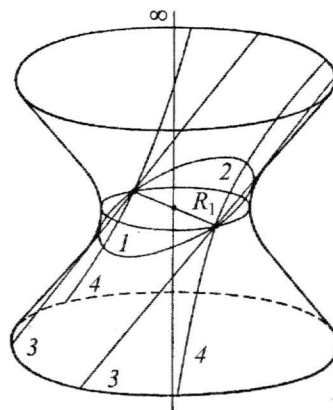


Рис.11. Отображение узловой прямой обратной решетки, не проходящей через ось z , на электронограмме косой текстуры в виде гиперболоида вращения. Так же как в предшествующем случае, сечение конуса плоскостью при возрастании угла φ дает окружность (1), эллипс (2), параболу (3), гиперболу 2-го рода (4)

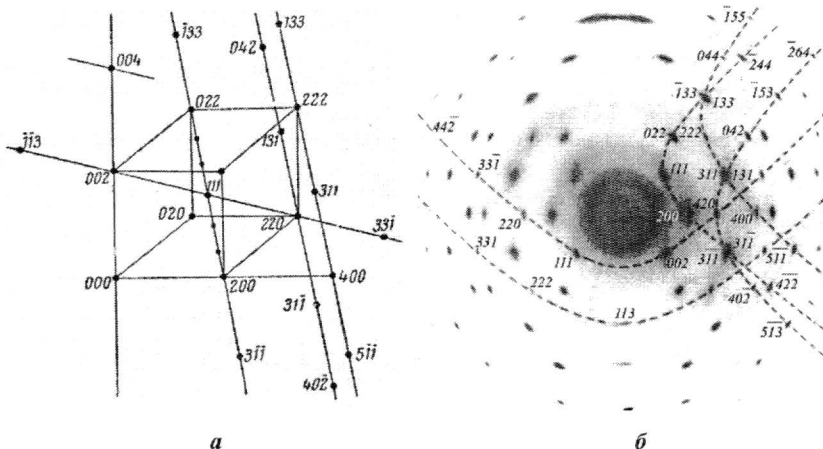


Рис.12. Электронограмма «косой текстуры» серебра, где линии, проходящие через рефлексы, формируют гиперболы: *a* – схема, на которой указаны диагональные прямые обратной решетки серебра, порождающие гиперболы; *b* – электронограмма косой текстуры серебра (штриховые линии – гиперболы 1-го и 2-го рода; рефлексы, расположенные на этих гиперболах, соответствуют в обратной решетке пространственным диагоналям куба)

косые текстуры могут рассматриваться как своеобразное двумерное перспективное изображение трехмерной обратной решетки текстуры. Поэтому изучение закономерностей текстур может осуществляться непосредственно на основе особенностей этих электронограмм без обработки результатов дифракционных исследований с помощью стереографических проекций – традиционного метода для рентгеновских исследований текстур [24–29].

Литература

1. *Detavernier C., Lavoie C.* Edge-to-edge matching in thin films // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2006. – Vol. 37. – P. 851–855.
2. Growth of II-IV-V₂ Chalcopyrite Nitrides by Molecular Beam Epitaxy / *J.E. Van Nostrand, J.D. Albrecht, R. Cortez, et al.* // J. of Electronic Materials. – 2005. – Vol. 34, N 10. – P. 1349–1356.
3. *Leoni M., Tosi C., Scardi P.* Co,Ni-base alloy thin films deposited by r.f. magnetron sputtering in Ar/N₂ atmosphere // J. of Materials Science. – 2005. – Vol. 40, N 7. – P. 1685–1691.

4. Orientation-enhanced growth and optical properties of ZnO nanowires grown on porous silicon substrates / *Hsu-Cheng Hsu, Ching-Sheng Cheng, Chia-Chieh et al.* // *Nanotechnology*. – 2005. – Vol. 16, N 2. – P. 297–301.
5. *Carvalho N.J.M., Zoestbergen E., Kooi B.J., De Hosson J.T.M.* Stress analysis and microstructure of PVD monolayer TiN and multilayer TiN/(Ti,Al)N coatings // *Thin Solid Films*. – 2003. – Vol. 429, N 1. – P. 179–189.
6. *Cavalcanti W., Santos M., Figueiredo W.* Random deposition model of particles with discrete orientations // *Physica A*. – 2003. – Vol. 322. – P. 467–476.
7. *Leoni M., Di Maggio R., Polizzi S., Scardi P.* X-ray diffraction methodology for the microstructural analysis of nanocrystalline powders: application to cerium oxide // *J. of the American Ceramic Society*. – 2004. – Vol. 87, N 6. – P. 1133–1140.
8. *Suh J.O., Tu K.N., Tamura N.A.* Synchrotron radiation X-ray microdiffraction study on orientation relationships between a Cu₆Sn₅ and Cu substrate in solder joints // *JOM*. – 2006. – Vol. 58, N 6. – P. 63–66.
9. *Пунскер З.Г.* Дифракция электронов. – М.: Изд-во АН СССР, 1949. – 429 с.
10. *Вайнштейн Б.К.* Структурная электронография. – Изд-во АН СССР, 1956. – 314 с.
11. *Vainshtein B.K., Zvyagin B.B., Avilov A.S.* Electron diffraction structure analysis. In electron diffraction techniques / Ed. Cowley M.J. – Oxford University Press, 1992. – P. 216–312.
12. *Nickolsky M.S., Zhuklistov A.P., Oleynikov P.N.* OTED patterns and Image Plate application // *Moscow Summer School on Electron Crystallography*. – Moscow: IC RAS, 2003. – P. 131–138.
13. *Klechkovskaya V.V.* Electron diffraction by thin organic films // *Moscow Summer School on Electron Crystallography*. – Moscow: IC RAN, 2003. – P. 151–154.
14. *Хирш П., Хову А., Николсон Р. Пэшли Д. Уэлан М.* Электронная микроскопия тонких кристаллов. – М.: Мир, 1968. – 574 с. (Hirsch P.B., Howie A., Nicholson R.B., Pashley D.B., Whelan M.J. *Electron Microscopy of Thin Crystals*. – London: Butterworths, 1965).
15. *Reimer L.* Transmission Electron Microscopy. Physics of Image Formation and Microanalysis. – 4th-ed. – Berlin: Springer, 1997. – 584 p.
16. *Edington J.W.* Monographs in practical electron microscopy in materials science. – P.2. Electron diffraction in electron microscope // *Philips Technical Library*, 1989. – 122 p.
17. *Fultz B., Howe J.* Transmission electron microscopy and diffractometry of materials. – 2nd-ed. – Berlin: Springer, 2002. – 748 p.
18. *Misra R.D.K., Kale A., Kooi B.J., de Hosson J.T.M.* Some aspects of nanocrystalline nickel and zinc ferrites processed using microemulsion technique // *Materials Science and Technology*. – 2003. – Vol. 19, N 11. – P. 1617–1621.
19. *De Pauw V., Reznik B., Kalhofer S., Lu Z.J., Huttinger K.J.* Texture and nanostructure of pyrocarbon layers deposited on planar surface in hall-wall reactor // *Carbon*. – 2003. – Vol. 41. – P. 71–77.
20. *Reznik B., Gerthsen D., Zang W., Huttinger K.J.* Texture changes in the matrix of an aniferated carbon fiber be polarized light microscopy and selected area electron diffraction // *Carbon*. – 2003. – Vol. 41. – P. 368–384.
21. *Tse Y., Duggan B.* Orientation imaging microscopy studies of recrystallization in interstitial-free steel // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2006. – Vol. 37, N 3. – P. 1055–1064.
22. *Paul H., Morawiec A., Bouzy Em., Fundenberger J.-J., Piatkowski A.* Orientation Imaging in Scanning Electron and Transmission Electron Microscopy for Characterization of the Shear Banding Phenomenon // *Microchimica Acta*. – 2006. – Vol. 155, N 1–2. – P. 243–250.
23. *Edington J.W.* Monographs in practical electron microscopy in materials science. P. 1. The operation and calibration of electron microscope // *Philips Technical Library*. – 1989. – 33 p.
24. *Бублик В.Т., Дубровина А.Н.* Методы исследования структуры полупроводников и металлов. – М.: Металлургия. – 1978. – 272 с.
25. Новые методы исследования текстур поликристаллических материалов / *Под ред. И.И. Панурова* – М.: Металлургия, 1985. – 311 с.
26. *Эндрюс К., Дэйсон Д., Киоун С.* Электронограммы и их интерпретация. – М.: Мир, 1971. – 250 с. (Andrews K.W., Dyson D.J., Keown S.R. *Interpretation of Electron Diffraction Patterns*. – London: Butterworths, 1968).
27. *Миркин Л.И.* Рентгеноструктурный анализ. – Т. 2. Индексирование рентгенограмм. – М.: Наука, 1981. – 494 с.
28. Powder diffraction files. Inorganic // Published by the JCPDS-International Center for Diffraction Data. – Pennsylvania, 1998.
29. *Китайгородский А.И.* Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. – М.-Л.: Гос. изд-во технико-теоретической лит-ры, 1952. – 588 с.

Статья поступила 20 июля 2007 г.

Максимов Сергей Кириллович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории электронно-микроскопических исследований МИЭТ. *Область научных интересов:* закономерности дифракции и электронно-микроскопического контраста, применение электронной микроскопии к исследованиям материалов и твердотельных приборов, фазовые превращения, дефекты кристаллической структуры.

CONTENTS

Fundamental researches

<i>N.K.Morozova, D.A.Mideros</i> Bound Exciton on ZnS (O) and ZnSe (O) SA and SAL Centers	3
---	---

Electronic engineering materials

<i>B.G.Gribov, K.V.Zinoviev</i> New Technologies of Polycrystalline Silicon Production for Solar Industry.....	10
<i>E.N.Vigdorovich</i> Thermal-Dynamic Aspects in Formation of Quantum-Dimensional GaN-Based Heterostructures	18
<i>S.A.Neoustroev</i> Model of Structure of II Group Metals Wurtzite and Cubic Nitrides.....	26

Microelectronic devices and systems

<i>A.M.Bobreshov, I.V.Hrebtov, M.P.Raypolov</i> Influence of Design Parameters of Submicron HEMT Transistors on Upper Boundary of Amplifier Linearity Dynamic Range	32
<i>V.I.Khainovskii, E.A.Ignatjeva, V.V.Uzdovskii</i> Study on Photorelaxation and Photoelectric Characteristics of Three-Diode Vertical Integrated Spectral-Selective Photocell.....	38
<i>V.Y.Niskov, S.N.Zolotarev, A.N.Gashkov</i> Study on Influence of Constructive-Technological Factors on Conductivity and Breakdown Voltage of Lateral LDMOSFET Transistors by Simulation Methods	45
<i>L.V.Katsoev, V.V.Katsoev, E.A.Ilichev</i> Gallium Arsenide Detector Structure Optimization Taking into Account Recombination Loss	53
<i>Yu.I.Alekseev, A.V.Dem'yanenko</i> Determination of Optical Signal Influence on Impedance Properties of Avalanche Diode.....	58

Nanotechnology

<i>K.A.Tsarik, V.V.Losev, S.V.Barash</i> Nanometer Layers Formation by Focused Ion Beam ...	63
---	----

Information technologies

<i>S.A.Loopin, E.V.Sherina, N.Yu.Ponomareva</i> Formalization of Information Systems Integration Processes.....	68
<i>K.I.Avtushenko</i> Algorithm of Fetal-Heart Rate Measurement with Doppler Signal	77
<i>V.V.Slyusar, A.M.Bain, So Tant</i> Documentary Information Automated Analytical Processing Methods in Decision Support Systems	81

Measurement methods and technology

<i>S.K.Maksimov</i> Peculiarities, Methods and Advantages of Integral Method of Investigation of Nanosized Crystallite Textures in Electron Microscopy	85
--	----

ABSTRACTS

FUNDAMENTAL RESEARCHES

Bound Exciton on ZnS (O) and ZnSe (O) SA and SAL Centers

N.K.Morozova, D.A.Mideros

The nature of the excitons bands, prevailing in the ZnS(O) and ZnSe(O) luminescence spectra at 300 K and high excitation density, has been investigated. The existence of bound excitons on oxygen Sa and SAL complexes has been determined. The bound energy of the excitons bands and the excitons behavior depending on the excitation intensity, temperature and the information layer depth in different crystal have been defined more precise.

ELECTRONIC ENGINEERING MATERIALS

New Technologies of Polycrystalline Silicon Production for Solar Industry

B.G.Gribov, K.V.Zinoviev

The problems in production of polycrystalline silicon for solar cells at present and in the nearest future have been considered. New progressive technologies, already realized in the pilot-scale production, as well as the recent original developments have been presented. In particular, the reduction of silicon oxides in the gas phase is a very promising process for production of high-purity silicon.

Thermal-Dynamic Aspects in Formation of Quantum-Dimensional GaN-Based Heterostructures

E.N.Vigdorovich

The mechanism of GaN crystallization from the gas phase has been analyzed from the standpoint of the Gibbs's classical thermodynamics. In the investigation of forming the neutral complexes of the acceptor impurities with oxygen the main statements of the Reiss and Debye-Huchel's theory have been used. Based on the analysis of the inter-molecular interaction the instability regions in the GaN – InN and GaN – AlN systems have been revealed. For the MOS-hydride technology the dependencies of variation of the crystallizing solid solution compositions on the vapor-gas phase composition have been determined.

Model of Structure of II Group Metals Wurtzite and Cubic Nitrides

S.A.Neoustroev

The structure of the crystals of the (B, Al, Ga, In, Tl) metals nitrides has been presented by the closed-up tetrahedrons so that the «nitrogen» tetrahedron includes the apex of the «metal» one, and the «metal» one that one of the «nitrogen» tetrahedron. The parameters of the wurtzite and cubic syngony – the position and the distance between atoms, the nitrogen radius, the displacement of different atoms from the center of the tetrahedron masses, etc. – have been determined.

MICROELECTRONIC DEVICES AND SYSTEMS

Influence of Design Parameters of Submicron HEMT Transistors on Upper Boundary of Amplifier Linearity Dynamic Range

A.M.Bobreshov, I.V.Hrebtov, M.P.Raypolov

The dependence of the dynamic range upper boundary has been investigated with respect to linearity and noise characteristics of the HEMT transistors with the direct structure on the geometrical parameters has been investigated. An optimization of the transistor parameters for the purpose to improve the characteristics of the amplifiers based on this transistor has been proposed.

Study on Photorelaxation and Photoelectric Characteristics of Three-Diode Vertical Integrated Spectral-Selective Photocell

V.I.Khainovskii, E.A.Ignatjeva, V.V.Uzdovskii

The analysis and the numerical calculation of the photorelaxation processes and spectral characteristics of photosensitivity of n- and p-type regions of the three-diode vertical integrated photocell have been performed. The dependencies of the photorelaxation times of the photocell n- and p-type regions on the length of absorbed optical radiation have been obtained.

Study on Influence of Constructive-Technological Factors on Conductivity and Breakdown Voltage of Lateral LDMOSFET Transistors by Simulation Methods

V.Y.Niskov, S.N.Zolotarev, A.N.Gashkov

The influence of the constructive-technological factors on the parameters of lateral LDMOSFET transistors has been investigated. The results of simulation of the lateral LDMOSFET transistors have been presented.

Gallium Arsenide Detector Structure Optimization Taking into Account Recombination Loss

L.V.Katsoev, V.V.Katsoev, E.A.Ilichev

The model, that describes the physical processes, accompanying the interaction of heavy charged particles with the ionizing radiation semiconductor detector, has been proposed. The problem of optimization of electric-physical characteristics and of the detector cell construction has been solved. The model allows calculating the output detector current depending on the detector thickness and applied voltage under conditions of the recombination processes presence.

Determination of Optical Signal Influence on Impedance Properties of Avalanche Diode

Yu.I.Alekseev, A.V.Dem'yanenko

Based on the avalanche diode theoretical model, reflecting not only the avalanche multiplication of charge carriers but also, the processes proceeding in the diode interval under the condition of its irradiation by optical beam, the avalanche diode impedance properties, which allow calculating the MW –modulating and demodulating properties of the optical region, have been determined.

NANOTECHNOLOGY

Nanometer Layers Formation by Focused Ion Beam

K.A.Tsarik, V.V.Losev, S.V.Barash

The technique of forming the periodical lengthly (up to 30 μm) nanometer layers with 70 nm cross-section and 2-3 nm depths has been developed. The etching velocity of gallium ions, accelerated by 30 kV voltages of such materials as GaAs, AlGa_{0.3}N, Al and Si, used for creation of acoustic-electron transducers, has been measured. The possibility of polishing the AlGa_{0.3}N surface by ion beam up to 0,5-0,7 nm roughness levels has been demonstrated.

INFORMATION TECHNOLOGIES

Formalization of Information Systems Integration Processes

S.A.Loopin, E.V.Sherina, N.Yu.Ponomareva

The method of formalization of the information systems integration processes has been proposed. This method is based on the description of their interaction processes using the set theory. As the integration the process of combining the information belonging to different systems is understood. The method permits to realize the qualitative assessment of possible integration methods and to forecast the properties of the integrated systems.

Algorithm of Fetal-Heart Rate Measurement with Doppler Signal

K.I.Avtushenko

The method of the fetal-heart rate determination by the «beat-to-beat» principle, based on the fetal-heart rate calculation by determining the length of the time interval between two subsequent beats, has been proposed.

Documentary Information Automated Analytical Processing Methods in Decision Support Systems

V.V.Slyusar, A.M.Bain, So Tant

The methods of automated analytical processing of documentary information in the knowledge bases of decision support systems have been offered. The ways of estimating the document correspondence to the adjusted data domain have been developed.

MEASUREMENT METHODS AND TECHNOLOGY

Peculiarities, Methods and Advantages of Integral Method of Investigation of Nanosized Crystallite Textures in Electron Microscopy

S.K.Maksimov

The electron microscopy investigations of the texturing arrays of nanosized crystals are not concerned with the constraints arising during the electron diffraction studies of textures (EDST) of the arrays of micron crystals in the column of an electron microscope. The regularities of EDST and the methods of comprehensive texture studies have been described. The advantages of EDST, which essentially, transform it to a new method with unique locality, self-descriptiveness and resolution, have been underlined. EDST is notable for precision control of projections axes, permits to combine in the same experiment and for the same volume the electron diffraction and electron-microscopy studies, to select the volumes to be investigated based not only on EMS patterns, but also, based on EDST, etc.