

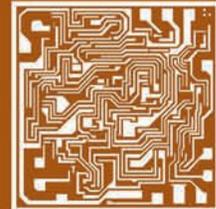
ISSN 0544-1269

Том 52, Номер 1

Январь - Февраль 2023



МИКРОЭЛЕКТРОНИКА



www.sciencejournals.ru



СОДЕРЖАНИЕ

Том 52, номер 1, 2023

ДИАГНОСТИКА

Контроль параметров травления кремния в ВЧ плазме CHF_3 методом оптической эмиссионной спектроскопии

Д. Б. Мурин, И. А. Чесноков, С. А. Пивоваренок, А. М. Ефремов 3

Электрофизические характеристики и эмиссионные спектры плазмы тетрафторметана

Д. Б. Мурин, С. А. Пивоваренок, И. А. Чесноков, И. А. Гозулев 11

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

Искусственный интеллект никогда не заменит полностью человека

И. И. Абрамов 20

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИБОРОВ

Расчет напряженности электрического поля и плотности тока внутри тонкого металлического слоя с учетом скин-эффекта

Э. В. Завитаев, О. В. Русаков, Е. П. Чухлеб 32

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Моделирование дефектной структуры суперрешечки и явления переноса в TlInTe_2

М. М. Асадов, С. Н. Мустафаева, С. С. Гусейнова, В. Ф. Лукичев 46

Разработка методики построения нелинейной модели метаморфного 0.15 мкм МНЕМТ InAlAs/InGaAs транзистора

В. В. Локотко, И. С. Васильевский, Н. И. Каргин 58

ПРИБОРЫ

Исследование фотоприемников с барьерами Шоттки на основе контакта IRSI-SI

Э. А. Керимов 68

Контактно-транспортные и автоэмиссионные свойства низкоразмерных 2D углеродных гетероструктур

Р. К. Яфаров, Н. О. Шабунин 71

ТЕХНОЛОГИЯ

Параметры газовой фазы и кинетика реактивно-ионного травления SiO_2 в плазме $\text{CF}_4/\text{C}_4\text{F}_8/\text{Ar/He}$

А. М. Ефремов, К.-Н. Kwon 77

УДК 537.525

КОНТРОЛЬ ПАРАМЕТРОВ ТРАВЛЕНИЯ КРЕМНИЯ В ВЧ ПЛАЗМЕ CHF_3 МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

© 2023 г. Д. Б. Мурин¹, *, И. А. Чесноков¹, С. А. Пивоваренок¹, А. М. Ефремов¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Ивановский государственный химико-технологический университет”, Иваново, 153000 Россия

*E-mail: dim86@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 30.06.2022 г.

Принята к публикации 25.07.2022 г.

С помощью метода оптической эмиссионной спектроскопии проведены исследования процессов плазмохимического и реактивно-ионного травления кремния в среде трифторметана (CHF_3). Получены и проанализированы зависимости интенсивностей излучения атомов и молекул от времени травления, вкладываемой мощности и давления плазмообразующего газа.

Ключевые слова: плазма, озонобезопасные фреоны, диагностика, активные частицы, травление, спектральный контроль, интенсивности излучения, трифторметан, кремний

DOI: 10.31857/S054412692270020X, **EDN:** CYGNIE

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие технологии электроники во второй половине 20 века привело к необходимости поиска эффективной альтернативы жидкостным методам размерного травления и очистки поверхностей, используемых материалов. Выбор был сделан в пользу технологий, основанных на использовании неравновесной низкотемпературной газоразрядной плазмы. Основной областью применения плазменных процессов в современной технологии микро- и нанoeлектроники является травление поверхностей полупроводниковых пластин и различных слоев [1]. Под термином “плазменное травление” понимают контролируемое удаление материала с поверхности подложки под воздействием энергетически (ЭАЧ) и химически активных частиц (ХАЧ) плазмы. В зависимости от типов активных частиц, обеспечивающих взаимодействие плазмы с обрабатываемым материалом, процессы плазменного травления подразделяются на три группы [2]: 1) процессы, при которых удаление поверхностных слоев материала происходит в результате химических реакций активных частиц (свободных атомов, радикалов, ионов), так называемое плазмохимическое травление (ПХТ); 2) удаление материала с поверхности происходит в результате физического распыления ионами, которые химически не реагируют с обрабатываемым материалом – ионно-плазменное (ИПТ) травление; 3) процессы, сочетающие совместное воздействие физического распыления и химических реакции (в том числе с химически

активными ионами) – реактивное ионно-плазменное травление (РИПТ).

Характерной чертой современной технологии плазменного травления является использование сложных газовых систем. В таких системах реализуется комплексное воздействие плазмы на обрабатываемый материал с участием нескольких типов активных частиц и, как следствие, с одновременной реализацией нескольких каналов физического и/или химического взаимодействия. Это открывает возможности гибкой настройки и оптимизации выходных параметров процесса. Так, озонобезопасные газовые системы типа $\text{C}_x\text{H}_y\text{F}_z$ (а также их смеси с инертными и молекулярными газами): CF_4 , CHF_3 , CH_2F_2 , CH_3F – являются перспективными плазмообразующими средами при проведении процессов травления полупроводников, в частности кремния [3–7]. Основной целью использования подобных систем является получение свободных атомов галогенов и галогенсодержащих радикалов, которые, обладая высокой химической активностью, позволяют достигать более высоких значений скоростей травления, селективности и анизотропии процесса при формировании топологии микросхем по сравнению с известными жидкостными травителями. В частности, атомарный фтор (F) приводит к непосредственному травлению проводниковых и полупроводниковых материалов, а роль частиц водорода (H), в основном, сводится к восстановлению поверхностных оксидов и/или так называемому “полирующему травлению” обрабатываемой поверхности [8]. Эффек-

тивная реализация и оптимизация плазменных процессов требует знания взаимосвязей между внешними параметрами плазмы, ее параметрами и составом. Одним из основных невозмущающих методов получения такой информации является оптическая эмиссионная спектроскопия (ОЭС) плазмы [9–12]. Исходя из вышесказанного, и была сформулирована цель данной работы, а именно: контроль кинетики плазмохимического травления по излучению активных частиц и продуктов взаимодействия методом ОЭС.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Эксперименты по исследованию параметров плазмы проводились в реакторе индукционно-связанной плазмы (ICP) планарного типа: установка “Платран – 100 ХТ” (13.56 МГц). Данная установка предназначена для плазмохимического травления полупроводниковых материалов, а также металлических пленок. Установка обеспечивает возможность обработки пластин диаметром до 100 мм, а также меньших размеров толщиной от 0.3 до 2 мм. Откачка системы производилась механическим пластинчато-роторным (Leybold VCS, производительность 30 м³/час) и турбомолекулярным (TMP 803 LMTC, производительность 800 л/с) насосами. Контроль рабочего давления в реакторе осуществлялся баратроном с верхним пределом измерения 0.1 Торр. Измерение и контроль расхода плазмообразующего газа проводились при помощи расходомеров с верхним пределом 200 см³/мин. Система контроля температуры предусматривает возможность автоматической стабилизации температуры подложки за счет регулирования скорости потока охлаждающей жидкости.

В качестве плазмообразующего газа в данной работе использовался трифторметан (фреон R-23, CHF₃). Фреон R-23 брали из баллонов с маркой “чистый” (МРТУ 51–77–66), содержание основного газа не менее 99.985%. В качестве внешних (задаваемых) параметров плазмы выступали вкладываемая мощность (200–1250 Вт), потенциал смещения (0...–107 В), давление газа (1–10 мТорр).

Время травления (обработки) варьировалось от 40 с до 3 минут. Образцы исследуемого полупроводникового материала вырезались из кремниевой пластины ($S \sim 1 \text{ см}^2$). До помещения в реактор поверхность образцов очищалась от масляных, пылевых и жировых загрязнений в толуоле и ацетоне. Скорость травления определялась гравиметрическим методом, путем взвешивания образцов до и после обработки в плазме на аналитических весах WA–34.

Спектральные измерения реализовывались с помощью оптоволоконных спектрометров AvaSpec–2048 и AvaSpec–3648, рабочий диапазон длин волн составлял 200–1000 нм. Фиксация

излучения осуществлялась через кварцевое окно в плазмохимическом реакторе. При расшифровке спектров излучения использовались справочники [13, 14].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Метод оптической эмиссионной спектроскопии основан на регистрации излучения плазмы в ультрафиолетовой, видимой и ближней инфракрасной областях спектра. Одним из необходимых условий использования данного метода является точная идентификация спектра излучения исследуемого газа и установление механизмов образования и гибели излучающих состояний частиц. Основной сложностью при интерпретации результатов спектральных измерений является неоднозначная взаимосвязь измеряемых интенсивностей излучения и концентраций соответствующих частиц в основном состоянии.

Перед исследованием процесса травления Si нами были получены спектры излучения ВЧ-плазмы “чистого газа” фреона R-23 (рис. 1). Было обнаружено, что в спектре присутствует группа линий атомарного фтора в области 620–780 нм (наиболее интенсивными являются линии: 623.9, 685.6, 690.2, 703.7, 739.8 и 775.4 нм). Излучения атомарного H представлено 4-мя характерными линиями серии Бальмера: H _{α} (656.5 нм), H _{β} (486.1 нм), H _{γ} (434.1 нм), H _{δ} (410.1 нм). Также были зафиксированы две группы линий атомарного углерода (200–300 и 900–1000 нм), наиболее интенсивными линиями являются: 247.8, 296.8, 477.1, 505.2, 909.4 и 940.5 нм соответственно. Излучение молекулярных компонентов представлено полосами CF в интервале от 203 до 230 нм, из которых можно выделить: 202.9, 208.3, 223.8 и 230.8 нм, CF₂ в интервале от 251 до 276 нм, наиболее интенсивными являются: 251.8, 259.5 и 276.1 нм. Спектр излучения молекул водорода представлен слабо интенсивными полосами α -системы Фулхера (575–625 нм). Излучение молекул углерода представлено тремя системами полос Свана (468.4, 471.5, 473.7; 512.9, 516.5; 547.0, 550.2, 554.0, 558.5 и 563.5 нм). Излучение молекулы CN представлено полосой 431.4 нм. Излучение молекулярного фтора представлено полосой 538.8 нм. Ионный состав плазмы фреона R-23 представлен излучением компонента CN⁺ с длиной волны 443.4 нм.

Кроме этого, в спектре излучения плазмы фреона R-23 была обнаружена полоса с длиной волны 388.3 нм. Был проведен сравнительный анализ спектров излучения фреонов R-12 и R-23, в результате которого было установлено, что вид, отенение и интенсивность полосы 388.3 нм при наложении спектров трифторметана и дифтордихлорметана друг на друга практически идентичны. Исходя из состава плазмообразующих газов (CHF₃

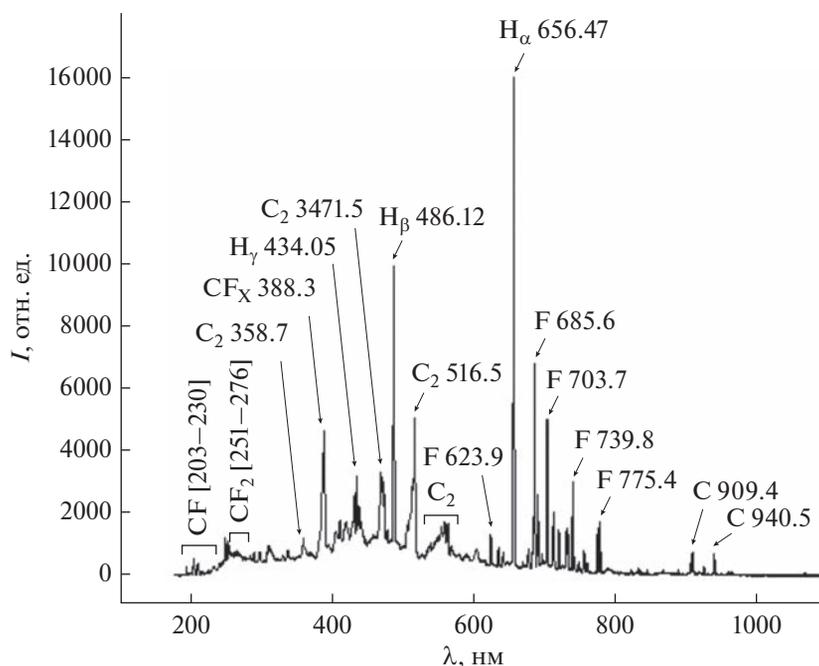


Рис. 1. Спектр излучения ВЧ-плазмы CHF_3 ($p = 2.8$ мТорр, $W = 950$ Вт, $U = 0$ В).

и CF_2Cl_2), можно предположить, что данная полоса относится к молекулярному углероду, либо к фторидам углерода (CF_n , где $n = 1, 2, 3$). Известно, что молекулярный углерод не имеет полосы в данной области спектра. Таким образом, можно предположить, что полоса с длиной волны излучения 388.3 нм принадлежит CF_n (где $n = 1, 2, 3$), хотя, возможно, согласно работы [15] – это может быть молекулярный фтор. Полный список обнаруженных компонентов представлен в табл. 1 и 2.

Следующим этапом работы являлось исследование спектров излучения ВЧ-плазмы фреона R-23 при травлении кремния. Кроме линий атомов и полос молекул характерных для ВЧ-плазмы “чистого” фреона R-23, были обнаружены группы линий атомарного кремния (наиболее интенсивная 288.1 нм), а также полосы излучения SiF в интервале от 258.4 до 336.3 нм. Так же в спектре излучения были зафиксированы полосы молекулярного кремния (в интервале 348–400 нм) и полосы SiH (418.3, 419.9 нм), однако их не удалось проанализировать вследствие слабой интенсивности.

Для анализа влияния внешних параметров разряда на концентрации нейтральных частиц плазмы и кинетику процессов их образования и гибели были выбраны атомарные линии: C (247.8 нм), Si (288.1 нм), H (486.1 нм, 656.5 нм), F (685.6 нм, 703.7 нм) и полосы молекул: CF (202.9 нм), SiF (336.3 нм), CF (388.3 нм), CH (431.4), C₂ (516.5 нм), CF₂ (262.8 нм), F₂ (538.8 нм). Данные излучательные состояния обладают высокой интенсивностью и не перекрываются с соседними

максимумами во всем исследованном диапазоне параметров разряда. Также заметим, что высокие значения энергий возбуждения данных частиц позволяют рассматривать возбуждение электронным ударом как основной механизм заселения верхних состояний. Кроме этого, низкие времена жизни возбужденных состояний обуславливают излучательную дезактивацию как основной механизм гибели возбужденных частиц. Фактически это означает, что для вышеописанных излучательных состояний заселенность возбужденного состояния и интенсивность излучения пропорциональны скорости возбуждения. Следовательно, изменение интенсивности излучения несет информацию об изменении концентрации возбужденных частиц, представляющих основной интерес при анализе и оптимизации плазмохимических процессов с использованием газовых смесей на основе CHF_3 . Также отметим, что в ходе проведения экспериментов было установлено, что целевой процесс травления кремния (появление продуктов взаимодействия плазмы с кремнием) начитается по истечении 40 с. Причиной данного индукционного периода является необходимость удаления активными частицами плазмы пассивирующей пленки SiO_2 ($\text{SiO}_2 + \text{CF}_x \rightarrow \text{SiF}_4 + (\text{CO}, \text{CO}_2, \text{COF}_2)$). Уменьшение индукционного периода возможно при использовании потенциала смещения на подложкодержателе.

Из экспериментальных данных видно (рис. 2), что интенсивности излучения при увеличении времени травления кремния практически не изменя-

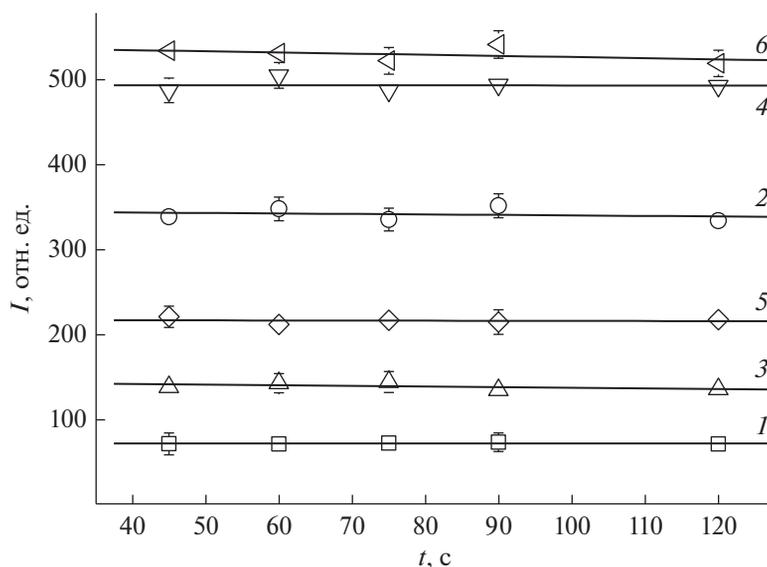


Рис. 2. Зависимости интенсивности излучения линии Si 288.1 нм (1, 3, 5) и полосы SiF 336.3 нм (2, 4, 6) плазмы CHF_3 от времени травления кремния: $p = 2.8$ мТорр, $W = 950$ Вт, $U = 0$ В (1, 2), $U = -61$ В (2, 3), $U = -107$ В (4, 5).

Таблица 1. Атомарные излучающие состояния ВЧ-плазмы CHF_3 при травлении кремния

Элемент	Длина волны, нм	Переход	ϵ_{th} , эВ	Элемент	Длина волны, нм	Переход	ϵ_{th} , эВ	
C	247.8	$1P_1^o - 1S_0$	7.68	F	703.7	$2P_{3/2}^o - 2P_{3/2}$	14.746	
	296.8	$5S_2^o - 3P_2$	4.18		712.7	$2P_{1/2}^o - 2P_{1/2}$	14.764	
	477.1	$3P_2 - 3P_2^o$	10.08		720.2	$2P_{3/2}^o - 2P_{1/2}$	14.746	
	493.2	$1S_0 - 1P_1^o$	10.19		731.1	$2S_{1/2}^o - 2P_{3/2}$	14.68	
	505.2	$1D_2 - 1P_1^o$	10.13		733.1	$4P_{3/2}^o - 4P_{5/2}$	14.387	
	538.0	$1P_1 - 1P_1^o$	9.98		739.8	$4P_{5/2}^o - 4P_{5/2}$	14.372	
	833.5	$1S_0 - 1P_1^o$	9.17		742.5	$4P_{1/2}^o - 4P_{3/2}$	14.399	
	906.2	$3P_1 - 3P_0^o$	8.85		748.9	$2S_{1/2}^o - 2P_{1/2}$	14.68	
	909.4	$3P_2 - 3P_2^o$	8.85		755.2	$4P_{5/2}^o - 4P_{3/2}$	14.371	
	911.1	$3P_1 - 3P_2^o$	8.85		760.7	$2D_{3/2}^o - 2P_{3/2}$	14.387	
	940.5	$1D_2 - 1P_1^o$	9.00		775.4	$2D_{5/2}^o - 2P_{3/2}$	14.583	
	962.0	$3S_1 - 3P_1^o$	8.77		780.1	$2D_{3/2}^o - 2P_{1/2}$	14.614	
	965.8	$3S_1 - 3P_2^o$	8.77		H	397.01	$2P_{1/2}^o - 2S_{1/2}$	13.32
	F	623.9	$4S_{3/2}^o - 4P_{5/2}$			14.683	410.17	$2D_{5/2} - 2S_{1/2}$
634.8		$4S_{3/2}^o - 4P_{3/2}$	14.683	434.05		$2D_{5/2} - 2P_{3/2}^o$	13.05	
641.3		$4S_{3/2}^o - 4P_{1/2}$	14.683	486.12		$2D_{5/2} - 2P_{3/2}^o$	12.74	
677.3		$4D_{5/2}^o - 4P_{5/2}$	14.526	656.47	$2P_{1/2}^o - 2S_{1/2}$	12.08		
683.4		$4D_{3/2}^o - 4P_{3/2}$	14.544	Si	250.6	$3P_2^o - 3P_1$	4.95	
685.6		$4D_{7/2}^o - 4P_{5/2}$	14.504		251.6	$3P_2^o - 3P_2$	4.95	
690.2		$4D_{5/2}^o - 4P_{3/2}$	14.526		252.4	$3P_0^o - 3P_1$	4.92	
696.6		$2P_{1/2}^o - 2P_{3/2}$	14.764		288.1	$1P_1^o - 1D_2$	5.08	

ются во всем исследованном диапазоне. Такое поведение полученных зависимостей обусловлено постоянством параметров разряда и хорошо согласуется с литературными данными [16–18]. В то же время, интенсивности излучения продуктов травления Si линейно возрастают (в ~3 раза) с увеличением потенциала смещения от 0 до –107 В. Это связано с тем, что увеличение смещения на подложкодержателе приводит к росту энергии заряженных частиц, участвующих в процессе травления (за счет появления направленного потока ионов на обрабатываемую поверхность) и, как результат, увеличению скорости травления, а также к эффективной газификации продуктов взаимодействия с обрабатываемой поверхностью.

Изменение мощности, вкладываемой в разряд, и потенциала смещения, подаваемого на подложкодержатель, приводит к росту всех интенсивностей излучательных компонентов (например, Si и SiF рис. 3). Это приводит к росту концентрации активных частиц (например, водорода и фтора), что в свою очередь способствует увеличению скорости травления. Заметим, что при отсутствии смещения (0 В) интенсивности излучения линий Si и полос SiF имеют слабый рост, это связано с недостатком энергии ионов для достижения эффективной скорости ионно-стимулированной десорбции продуктов взаимодействия и деструкции пассивирующей пленки. Причинами слабого роста интенсивностей излучения полос CF 202.9 нм, CF₂ 262.8 нм, F₂ 538.8 нм и линии C 247.8 нм с увеличением вкладываемой мощности в разряд могут являться атомно-молекулярные процессы с участием данных радикалов или же эффективное расходование CF, CF₂ и F₂ в процессах диссоциации.

Из рис. 4 видно, что зависимости интенсивности излучения линии Si 288.1 нм (1, 3, 5) и полосы SiF 336.3 нм (2, 4, 6) от давления плазмообразующего газа при всех исследуемых потенциалах смещения возрастают. Такое поведение зависимостей с ростом давления в системе и смещения на подложкодержателе связано с ростом как концентрации активных частиц, так и их энергии, следовательно, это приведет к увеличению скорости травления. Увеличение концентрации активных частиц также можно объяснить исходя из уравнения Менделеева-Клапейрона, из которого следует, что увеличение давления, при прочих постоянных параметрах, приводит к росту числа активных частиц. На рис. 5 представлены зависимости интенсивности излучения полос CF 202.9 нм, SiF 336.3 нм, CH 431.4 нм, CF₂ 262.8 нм, F₂ 538.8 нм в плазме CHF₃ при травлении кремния от давления плазмообразующего газа. На зависимостях видно, что с увеличением давления газа происходит рост интенсивности излучения SiF, CH и F₂. Данный факт обусловлен увеличением как концентрации активных частиц, участвующих в процес-

Таблица 2. Молекулярные излучающие состояния ВЧ-плазмы CHF₃ при травлении кремния

Частица	Длина волны, нм	Переход	ϵ_{th} , эВ
CF	202.9	$B^2\Delta - X^2\Pi$	–
	208.3		
	213.4		
	230.8		
	239.9		
CF _x	388.3	–	–
CF ₂	251.8	–	–
	255.0		
	259.5		
	262.8		
	328.8		
CH	431.4	$A^2\Delta - X^2\Pi$	–
CH ⁺	443.38	$A^1\Pi - X^1\Sigma$	–
F ₂	538.8	$C^1\Sigma^+ - B^1\Pi$	–
H ₂	583.6	$a^3\Sigma_g^- - a^3\Pi_u^-$	13.9
	584.9		13.9
	588.8		13.9
	599.4		13.9
	601.8		13.9
	603.1		13.9
	606.9		13.9
	612.1		13.9
	616.1		13.9
C ₂	358.7	$c^1\Pi_g - b^1\Pi_u$	–
	360.7		–
	385.2		–
	436.5	$A^3\Pi_g - X^3\Pi_u$	–
	468.4		–
	471.5		–
	473.7		–
	512.9		–
	516.5		–
	547.0		–
	550.2		–
	554.0		–
	558.5		–
	563.5		–
SiF	258.4	$C^2\Delta - X^2\Pi$	–
	296.7	$B^2\Sigma^+ - X^2\Pi$	–
	334.6	$a^4\Sigma^- - X^2\Pi$	–
	336.3		–
SiH	418.3	$A^2\Delta - X^2\Pi$	–
	419.8		–

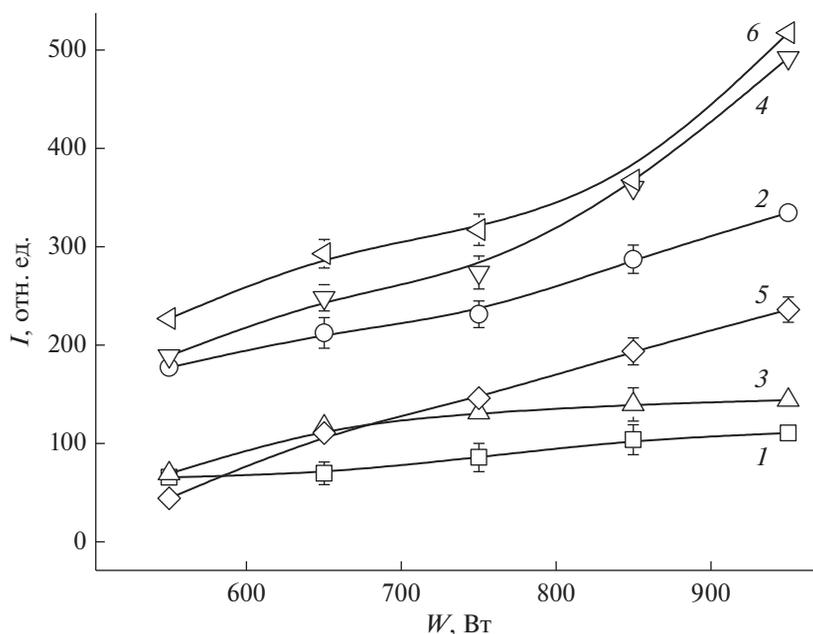


Рис. 3. Зависимости интенсивности излучения линии Si 288.1 нм (1, 3, 5) и полосы SiF 336.3 нм (2, 4, 6) в плазме CHF_3 от мощности, вкладываемой в разряд, при травлении кремния ($p = 2.8$ мТорр, $W = 950$ Вт, $U = 0$ В (1, 2), $U = -61$ В (3, 4), $U = -107$ В (5, 6)).

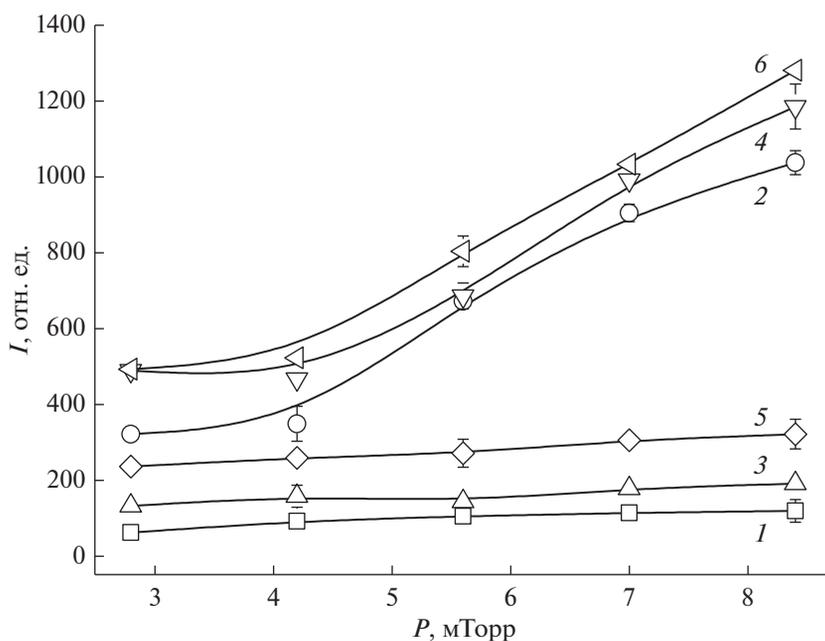


Рис. 4. Зависимости интенсивности излучения линии Si 288.1 нм (1, 3, 5) и полосы SiF 336.3 нм (2, 4, 6) в плазме CHF_3 от давления плазмообразующего газа при травлении кремния ($\tau = 60$ с, $W = 950$ Вт, $U = 0$ В (1, 2), $U = -61$ В (2, 3), $U = -107$ В (4, 5)).

се травления, так и общей концентрации частиц в объеме плазмы. Характер поведения зависимостей интенсивностей излучения CF и CF_2 можно связать с их гибелью в различных атомно-молекулярных процессах, происходящих в объеме плазмы или на поверхности обрабатываемого материала.

На рис. 6 представлены зависимости интенсивности излучения линий C 247.8 нм (1), Si 288.1 нм (2), H_α 656.5 нм (3), F 685.6 нм (4) в плазме CHF_3 при травлении кремния от давления плазмообразующего газа. Уменьшение интенсивности излучения H_α 656.5 и F 685.6 нм может быть связана с

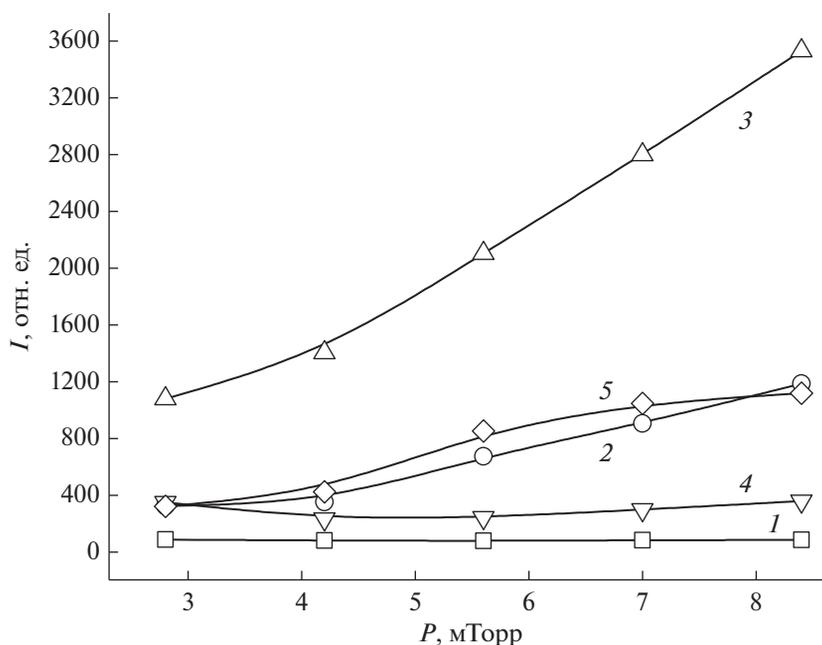


Рис. 5. Зависимости интенсивности излучения полос CF 202.9 нм (1), SiF 336.3 нм (2), CH 431.4 нм (3), CF₂ 262.8 нм (4), F₂ 538.8 нм (5) в плазме CHF₃ от давления плазмообразующего газа при травлении кремния ($\tau = 60$ с, $W = 950$ Вт, $U = 0$ В).

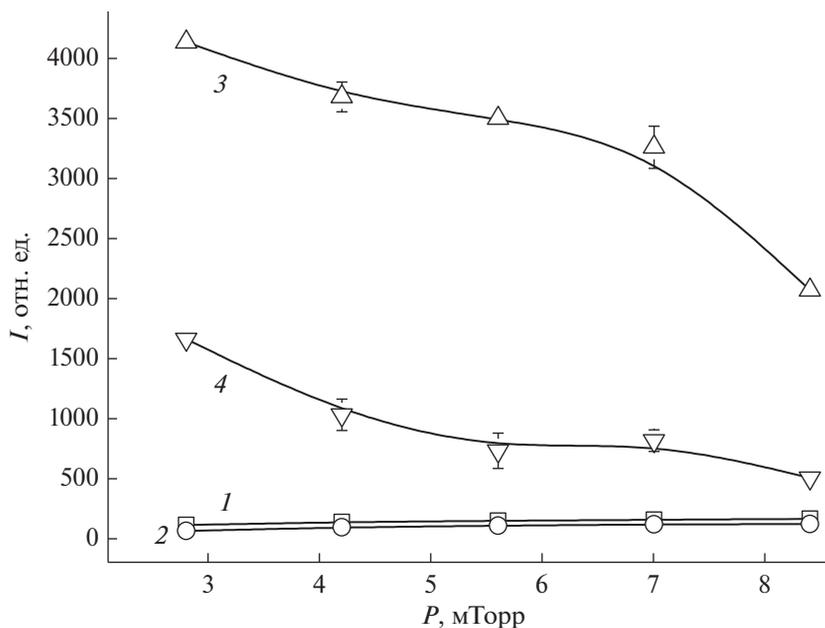


Рис. 6. Зависимости интенсивности излучения линий C 247.8 нм (1), Si 288.1 нм (2), H α 656.5 нм (3), F 685.6 нм (4) в плазме CHF₃ от давления плазмообразующего газа при травлении кремния ($\tau = 60$ с, $W = 950$ Вт, $U = 0$ В).

тем, что данные частицы расходуются на образование фторидов кремния и углерода, а также частиц типа CH_x (что подтверждается данными рис. 5, зависимость 3) как в объеме плазмы, так и на поверхности обрабатываемого материал.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы получены и проанализированы спектры излучения плазмы ВЧ-разряда трифторметана при травлении кремния. Показано, что излучение плазмы ВЧ-разряда представ-

лено атомарными и молекулярными компонентами. Сделано предположение, что зависимости интенсивностей линий и полос от внешних условий разряда определяются возбуждением излучающих состояний при прямых электронных ударах. Получены и проанализированы зависимости интенсивностей излучения атомов и молекул от внешних параметров разряда. Полученные данные вносят вклад в развитие современной плазмохимии, а именно устанавливают взаимосвязи между внешними параметрами плазмы, ее внутренними характеристиками и составом; предлагают оптимальные режимы проведения процессов плазмохимического и реактивно-ионного травления и организации невозмущающих спектральных методов контроля.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00216, <https://rscf.ru/project/22-29-00216/>.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР. Тема № FZZW-2020-0009.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Галперин В.А., Данилкин Е.В., Мочалов А.И.* Процессы плазменного травления в микро- и нанотехнологиях / Под ред. Тимошенко С.П. М.: БИНОМ, 2018. 283 с.
2. *Данилин Б.С., Киреев В.Ю.* Применение низкотемпературной плазмы для травления и очистки материалов / Под ред. Данилин Б.С. М.: Энергоатомиздат, 1987. 264 с.
3. *Glauco F. Bauerfeldt, Graciela Arbilla.* Kinetic analysis of the chemical processes in the decomposition of gaseous dielectrics by a non-equilibrium plasma – Part 1: CF₄ and CF₄/O₂// J. Braz. Chem. Soc. 2000. V. 11. № 2. P. 121.
4. *Yeom G.Y., Kushner M.J.* Si/SiO₂ etch properties using CF₄ and CHF₃ in radio frequency cylindrical magnetron discharges // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 56. P. 857–859.
5. *Rossnagel S.M., Cuomo J.J., Westwood W.D. (Eds.).* Handbook of plasma processing technology. Noyes Publications, Park Ridge, 1990. 338 p.
6. *Ситанов Д.В., Пивоваренок С.А.* Кинетика рекомбинации атомов в плазме хлора на образцах кремния // Физика плазмы. 2018. Т. 44. № 8. С. 624–634.
7. *Gaboriau F., Cartry G., Peignon M.-C., Cardinaud Ch.* Selective and deep plasma etching of SiO₂: Comparison between different fluorocarbon gases (CF₄, C₂F₆, CHF₃) mixed with CH₄ or H₂ and influence of the residence time // J. Vac. Sci. Technol. B. 2002. V. 20. P. 1514–1521.
8. *Пивоваренок С.А., Дунаев А.В., Ефремов А.М., Светцов В.И.* Плазменное наноразмерное травление GaAs в хлоре и хлороводороде // Нанотехника. 2011. № 1 (25). С. 69–71.
9. *Пивоваренок С.А., Дунаев А.В., Мурин Д.Б., Ефремов А.М., Светцов В.И.* Электрофизические параметры и эмиссионные спектры плазмы тлеющего разряда в хлористом водороде // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2011. Т. 54. № 9. С. 48–52.
10. *Дунаев А.В., Пивоваренок С.А., Капинос С.П., Ефремов А.М., Светцов В.И.* Спектральный контроль процесса травления арсенида галлия в хлороводороде // Нанотехника. 2012. № 1 (29). С. 93–95.
11. *Мурин Д.Б., Ефремов А.М., Светцов В.И., Пивоваренок С.А., Годнев Е.М.* Интенсивности излучения и концентрации нейтральных частиц в плазме тлеющего разряда постоянного тока в смесях HCl–H₂ и HCl–O₂ // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2013. Т. 56. № 8. С. 41–44.
12. *Мурин Д.Б., Ефремов А.М., Светцов В.И., Пивоваренок С.А., Овцын А.А., Шабдаров С.С.* Интенсивности излучения и концентрации активных частиц в плазме тлеющего разряда в смесях хлористого водорода с аргонном и гелием // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2013. Т. 56. № 4. С. 29–32.
13. *Пирс Р., Гейдон А.* Отождествление молекулярных спектров. М.: Изд. иностр. лит, 1949. 540 с.
14. *Свентицкий А.Р., Стриганов Н.С.* Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Атомиздат, 1966. 900 с.
15. *DU Wei, YE Chao, CHENG Shan-hua, NING Zhao-yuan* // Plasma Science & Technology. 2002. V. 4. № 6. P. 1535.
16. *Ефремов А.М., Дунаев А.В., Мурин Д.Б.* Параметры плазмы и кинетика травления GaAs в газовых смесях HCl с добавками Ar, H₂ и Cl₂ переменного начального состава // Физика и химия обработки материалов. 2015. № 6. С. 52–61.
17. *Дунаев А.В., Мурин Д.Б.* Исследование травления арсенида галлия в разряде постоянного тока в хлороводород содержащих смесях при низком давлении // Физика плазмы. 2018. Т. 44. № 4. С. 390–396.
18. *Пивоваренок С.А., Мурин Д.Б.* Кинетика травления кремния в плазме трифторметана // Химия высоких энергий. 2022. Т. 56. № 3. С. 223–226.

УДК 537.525

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ЭМИССИОННЫЕ СПЕКТРЫ ПЛАЗМЫ ТЕТРАФТОРМЕТАНА

© 2023 г. Д. Б. Мурин¹, *, С. А. Пивоваренок¹, И. А. Чесноков¹, И. А. Гоголев¹¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Ивановский государственный химико-технологический университет”, Иваново, Россия

*E-mail: dim86@mail.ru

Поступила в редакцию 05.07.2022 г.

После доработки 14.07.2022 г.

Принята к публикации 14.07.2022 г.

Исследованы электрофизические характеристики плазмы тетрафторметана в зависимости от внешних параметров разряда (давление газа, сила тока разряда) в широком диапазоне условий. Показано, что величина температуры газа линейно возрастает с ростом давления газа и тока разряда. Поведение приведенной напряженности электрического поля при малых давлениях типично для электроотрицательных газов. Получены и подробно проанализированы спектры излучения плазмы тетрафторметана. Показано, что излучение плазмы представлено атомарными и молекулярными компонентами, а зависимости интенсивностей излучения линий от внешних условий разряда определяются возбуждением излучающих состояний при прямых электронных ударах. Показано, что характер полученных зависимостей $I = f(i, p)$ не противоречит общим представлениям о кинетике процессов образования и гибели активных частиц в молекулярных газах, что позволяет использовать рассмотренные максимумы для контроля состава плазмы и кинетики плазмохимических процессов.

Ключевые слова: плазма, электрофизические характеристики, фреон, температура газа, удельная мощность, приведенная напряженность электрического поля, эмиссионные спектры, интенсивность излучения, концентрации частиц, излучательные состояния

DOI: 10.31857/S0544126922700089, EDN: CYAVJM

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная техника предъявляет очень высокие требования к интегральным микросхемам по надежности, быстродействию, информационной емкости и другим параметрам. Поэтому основными тенденциями развития микро- и наноэлектроники являются повышение степени интеграции и информационной емкости интегральных микросхем с одновременным уменьшением стоимости бита информации. Для достижения вышеуказанных требований в данной технологии при проведении “сухого” травления металлов и полупроводниковых материалов стали применяться плазмохимические процессы.

В данной работе объектом исследования является тетрафторметан (CF_4 , фреон R-14). Фреон R-14 – бесцветный газ, без запаха. Фреон очень инертен в химическом отношении, поэтому он не горит на воздухе, невзрывоопасен даже при контакте с открытым пламенем. Устойчив к действию кислот и щелочей. Фреон R-14 играет важную роль в промышленности плазменного травления [1, 2], так как может легко диссоциировать на химически активные частицы F и радика-

лы CF_x ($x = 1-3$). Он часто используется для травления Si, Ge, обеспечивая технологически приемлемые скорости взаимодействия, а также удовлетворяет требованиям по разрешению, анизотропии и селективности для большинства известных маскирующих покрытий.

Однако широкое применение плазмообразующих сред на основе фреона R-14 в технологических целях невозможно без предварительного изучения спектральных и электрофизических параметров плазмы для создания наиболее благоприятных и оптимальных технологических режимов обработки. Проработка этого вопроса и явилась целью настоящей работы.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Эксперименты по исследованию свойств плазмы тетрафторметана проводились на плазмохимической установке с реактором проточного типа. Реактор представлял собой цилиндр из молибденового стекла (марка С-49) длиной $l = 56$ см и внешним диаметром $d_{out} = 2.8$ см. Внутренний диаметр реактора d_{in} при этом составлял 2.5 см.

Электроды располагались в боковых отростках и имели вид полых цилиндров из анодированного алюминия. Длина разрядного промежутка составляла 36 см.

Откачка системы осуществлялась форвакуумным насосом ВН-461 (предельное остаточное давление $\sim 2 \times 10^{-2}$ Па). Контроль давления остаточных газов осуществлялся с помощью манометрического термопарного датчика ПМТ-2, соединенного с вакуумметром ВТ-2А. Давление рабочего газа в реакторе измерялось U -образным манометром, рабочей жидкостью которого служило силиконовое масло ($\rho = 1.04$ г/см³). Расход газа измеряли масляным капиллярным реометром, откалиброванным по тетрафторметану с помощью мерной бюретки, известного объема. Тетрафторметан набирали в хлорвиниловую емкость, предварительно откачанную до предельного остаточного давления порядка 1 Па, из металлического баллона с маркой “чистый”, содержание основного газа не менее 99.5%.

Плазма тетрафторметана возбуждалась от высоковольтного трансформатора НОМ 6000/100, первичная обмотка которого питалась от ЛАТРа, последнее позволяло плавно изменять выходное напряжение в диапазоне 0–6000 В. Выход высоковольтного трансформатора соединен с выпрямительным устройством – диодным мостом и конденсатором (10 мкФ) для сглаживания пульсации напряжения, питающего разряд. Сила тока в цепи разряда измерялась миллиамперметром М366 электромагнитной системы.

Температура нейтральных частиц плазмы (T) вычислялась путем решения уравнения теплового баланса реактора с использованием экспериментальных данных по температуре наружной стенки (T_w) [3, 4]. Температура наружной стенки реактора определялась с помощью хромель-копелевой термопары. Для измерения осевой напряженности электрического поля в плазме был использован двухзондовый компенсационный метод [5]. Напряжение между двумя остеклованными зондами (материал медь, диаметр зондов ≈ 0.05 мм, расстояние между зондами 7.7 см), вводимыми в зону разряда, компенсировалось с помощью универсального источника питания УИП-1. При помощи нуль-индикатора (миллиамперметр М906) регистрировалось отсутствие тока в цепи зондов, а напряжение компенсации определялось с помощью мультиметра Ц3421. При определении приведенной напряженности электрического поля (E/N) полагалось, что распределение температуры по радиусу трубки подчиняется функции Бесселя первого рода нулевого порядка [6, 7], а в конкретных расчетах использовалась величина температуры, усредненная на полурадиус реактора ($T_{0.5r}$), при этом распределение величины (E/N) по радиусу реактора не учитывалось.

Спектральные исследования плазмы тетрафторметана методом оптической эмиссионной спектроскопии были реализованы непосредственно с использованием торцевой части реактора, содержащей кварцевое стекло, с помощью ПЗС-спектрометров AvaSpec–2048–2 и AvaSpec–3648. Рабочий диапазон длин волн составлял 200–1000 нм. При расшифровке спектров излучения использовались справочники [8, 9]. Контроль примесей компонентов атмосферного воздуха в основном газе осуществлялся качественно, по наличию или отсутствию полос излучения N_2 , OH и CO в спектрах излучения.

В качестве задаваемых параметров плазмы выступали ток разряда ($i = 15–25$ мА), давление газа ($p = 20–200$ Па).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Эксперименты показали, что увеличение давления тетрафторметана при $i = \text{const}$ приводит к заметному росту осевой напряженности электрического поля (табл. 1, например, в 2.2 раза для $i = 15$ мА и в 2.8 раза для $i = 25$ мА в диапазон $p = 20–200$ Па) и, как следствие, сопровождается линейным ростом удельной мощности (рис. 1), вкладываемой в плазму тетрафторметана $W = iE/\pi r^2$, где i – ток разряда, E – осевая напряженность электрического поля, r – радиус реактора. Аналогичное изменение величины W имеет место и при увеличении тока разряда в условиях неизменного давления газа, которое обеспечивает $E \approx \text{const}$. Поэтому в обоих случаях температура газа увеличивается, следуя поведению W (рис. 2). Из зависимостей рис. 2 видно, что величина температуры газа практически линейно возрастает с ростом давления газа (например, в 1.1 раза для $i = 15$ мА и в 1.2 раза для $i = 25$ мА в диапазоне $p = 20–200$ Па) и тока разряда (≈ 1.2 раза при давлении 200 Па). Данный факт хорошо согласуется с имеющимися в литературе данными для других газов [10].

Приведенная напряженность электрического поля E/N в плазме тетрафторметана практически не зависит (в пределах погрешности эксперимента) от тока разряда при $p = \text{const}$, но заметно уменьшается с ростом давления газа при $i = \text{const}$ (рис. 3). Из рис. 3 видно, что в диапазоне давлений до 80 Па при любом постоянном значении тока разряда в диапазоне 15–25 мА увеличение давления вызывает резкое падение величины E/N . В области давлений выше 80 Па наблюдается менее резкое уменьшение величины приведенной напряженности электрического поля. Такой характер зависимости является типичным для электроотрицательных газов [10] и обусловлен тем, что на начальном этапе (20–80 Па) величина общей концентрации частиц N возрастает значительно

Таблица 1. Влияние давления тетрафторметана на величины осевой напряженности электрического поля и общую концентрацию частиц

P , Па	E , В/см (15 мА)	E , В/см (25 мА)	N , 10^{15} см $^{-3}$ (15 мА)	N , 10^{15} см $^{-3}$ (25 мА)
20	15.58	16.88	4.61	4.49
40	19.48	21.56	9.09	8.78
60	23.90	23.64	13.45	12.93
80	25.71	26.23	17.70	16.81
100	26.75	31.95	21.91	20.42
120	28.31	35.84	26.05	23.92
140	29.87	41.30	30.19	27.16
160	30.91	42.34	34.29	30.55
180	33.25	45.71	38.31	33.87
200	34.55	47.79	42.30	37.12

быстрее (табл. 1, ≈ 4.5 раза на участке 20–80 Па для $i = 15\text{--}25$ мА), чем напряженность поля E в плазме (табл. 1, ≈ 1.7 раза на участке 20–80 Па для $i = 15\text{--}25$ мА).

Ярко выраженная зависимость $E/N = f(p)$ в области $p = 20\text{--}160$ Па указывает на диффузионный ($v_{\text{dif}} > v_{\text{da}}$) или переходный ($v_{\text{dif}} \approx v_{\text{da}}$) режимы разряда, где v_{dif} – частота диффузионной гибели электронов, а v_{da} – частота их диссоциативного прилипания к молекулам тетрафторметана. В обоих случаях, в качестве основного механизма, обуславливающего снижение E/N , следует рассматривать аналогичное изменение коэффициента диффузии и частоты диффузионной гибели

ли электронов. Очевидно также, что уменьшение E/N по мере роста давления газа вызывает падение средней энергии электронов $\bar{\epsilon}$ (из-за увеличения частоты столкновений электронов с “тяжелыми” частицами и роста суммарных потерь энергии в неупругих процессах) и констант скоростей реакций под действием электронного удара, удовлетворяющих условию $\epsilon_{th} \geq \bar{\epsilon}$, где ϵ_{th} – пороговая энергия. Отметим, что абсолютные значения E/N в плазме тетрафторметана ниже аналогичных величин для плазмы хлора ($E/N = 5.8 \times 10^{-15}$ В см 2 при $p = 40$ Па и $i = 20$ мА) и хлористого водорода ($E/N = 3.7 \times 10^{-15}$ В см 2 при $p = 40$ Па и $i = 20$ мА) в аналогичном диапазоне условий [11, 12]. В общем случае, это может быть связано с меньшей

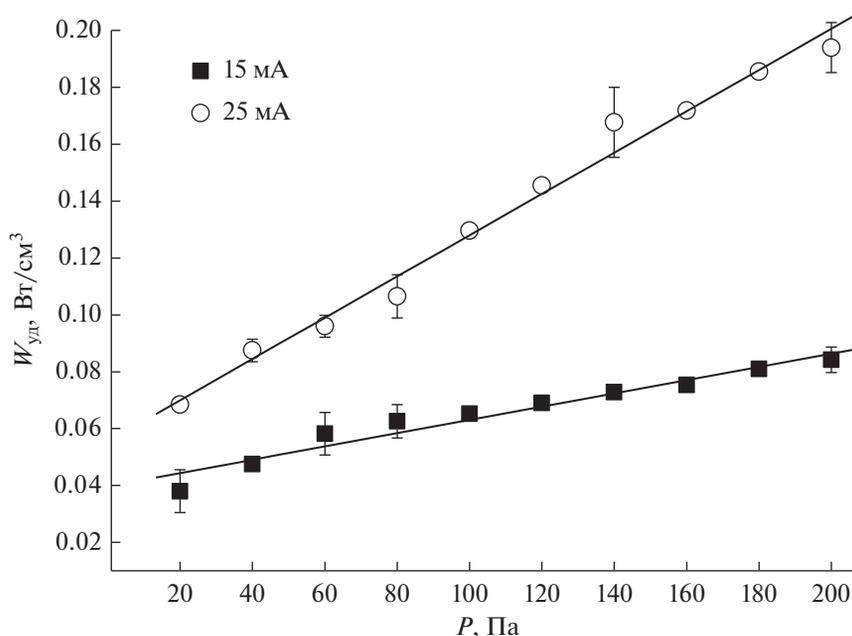


Рис. 1. Зависимость удельной мощности, вкладываемой в разряд, от давления тетрафторметана.

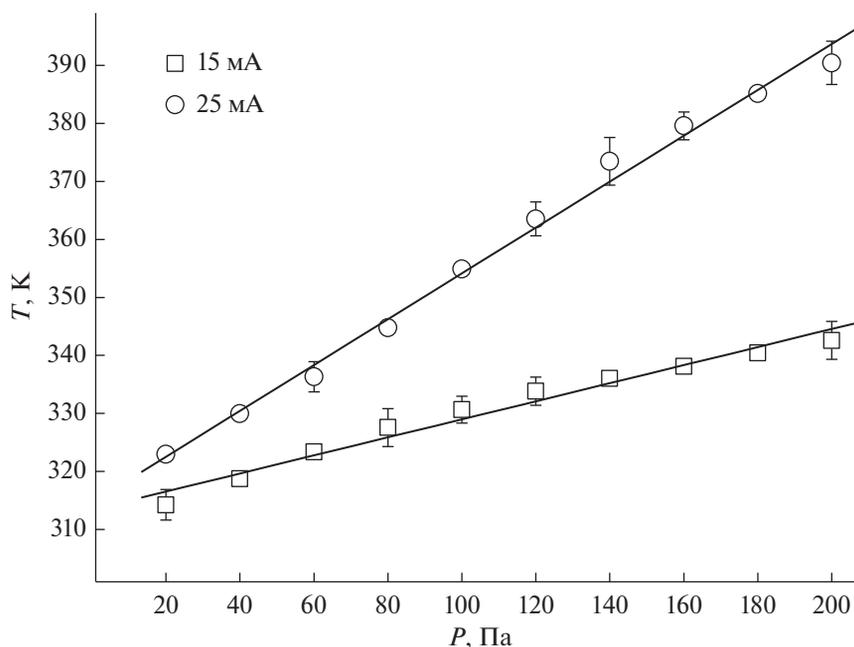


Рис. 2. Зависимости температуры газа T от давления тетрафторметана.

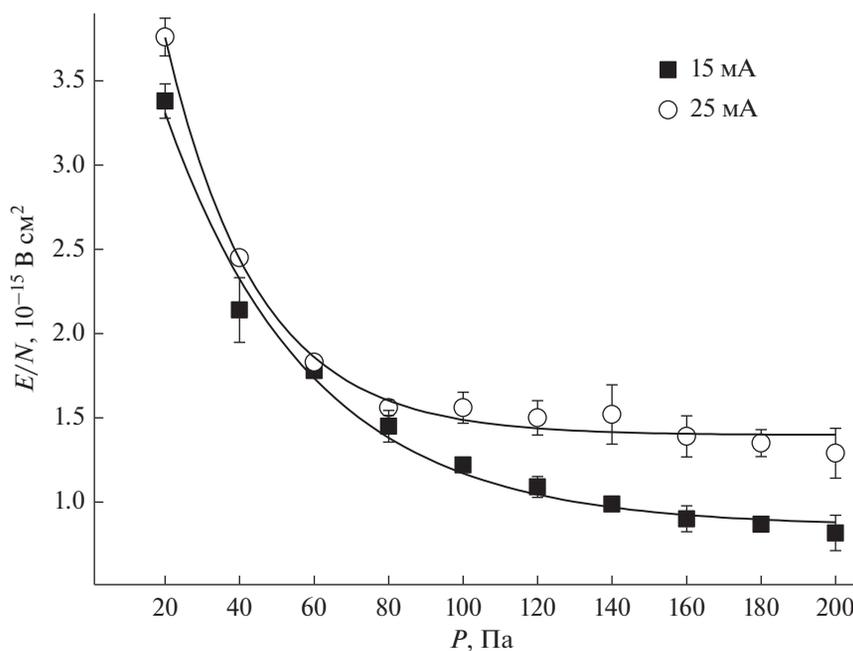


Рис. 3. Зависимость приведенной напряженности электрического поля от давления тетрафторметана.

эффективностью прилипания электронов к молекулам тетрафторметана.

Исследование эмиссионных спектров плазмы тетрафторметана показало наличие в них излучения как атомарных, так и молекулярных компонентов (рис. 4). Так, в спектрах были зафиксированы 3 группы линий атомарного фтора в диапазоне от 620 до 880 нм:

1. Первая группа линий атомарного фтора (620–680 нм) наиболее интенсивные:

- F 624.04 нм ($\epsilon_{th} = 14.68$ эВ, ${}^4S_{3/2}^{\circ} - {}^4P_{5/2}$);
- F 634.85 нм ($\epsilon_{th} = 14.68$ эВ, ${}^4S_{3/2}^{\circ} - {}^4P_{3/2}$);
- F 641.49 нм ($\epsilon_{th} = 14.68$ эВ, ${}^4S_{3/2}^{\circ} - {}^4P_{1/2}$);

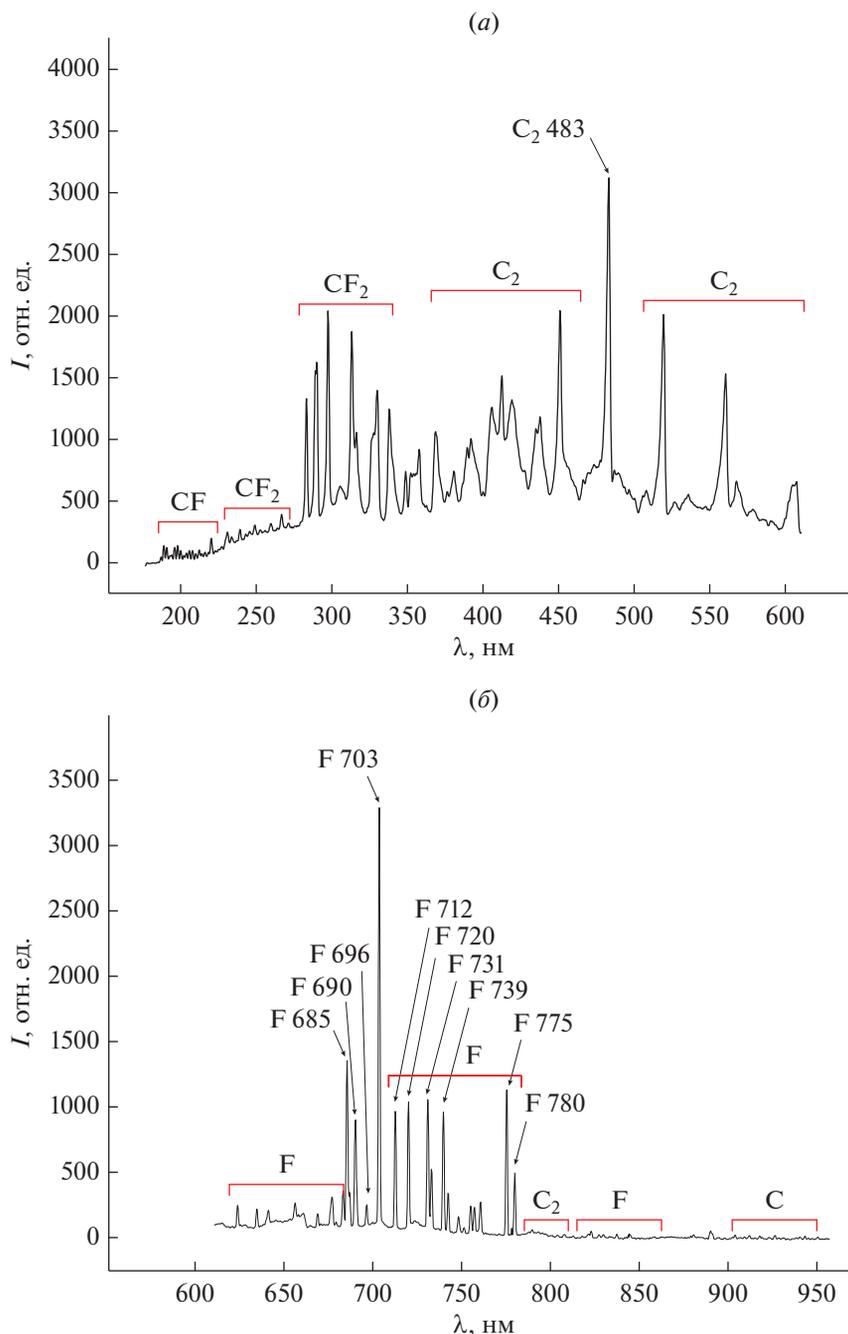


Рис. 4. Общий вид спектра излучения плазмы тетрафторметана ($p = 100$ Па, $i = 25$ мА).

- F 656.37 нм ($\epsilon_{th} = 14.58$ эВ, $^2D_{5/2}^{\circ} - ^4P_{3/2}$, непригодна для анализа, лежит на молекулярной полосе);
- F 669.27 нм ($\epsilon_{th} = 14.58$ эВ, $^2D_{5/2}^{\circ} - ^4P_{3/2}$);
- F 677.20 нм ($\epsilon_{th} = 14.52$ эВ, $^4D_{5/2}^{\circ} - ^4P_{5/2}$).

Обладают относительно невысокой интенсивностью излучения, однако большинство из зафиксированных линий пригодны для анализа.

2. Вторая группа линий атомарного фтора (680–780 нм) наиболее интенсивные:

- F 685.65 нм ($\epsilon_{th} = 14.50$ эВ, $^4D_{7/2}^{\circ} - ^4P_{5/2}$);
- F 690.55 нм ($\epsilon_{th} = 14.52$ эВ, $^4D_{5/2}^{\circ} - ^4P_{3/2}$);
- F 703.84 нм ($\epsilon_{th} = 14.74$ эВ, $^4P_{3/2}^{\circ} - ^2P_{3/2}$);
- F 712.75 нм ($\epsilon_{th} = 14.76$ эВ, $^2P_{1/2}^{\circ} - ^2P_{1/2}$);

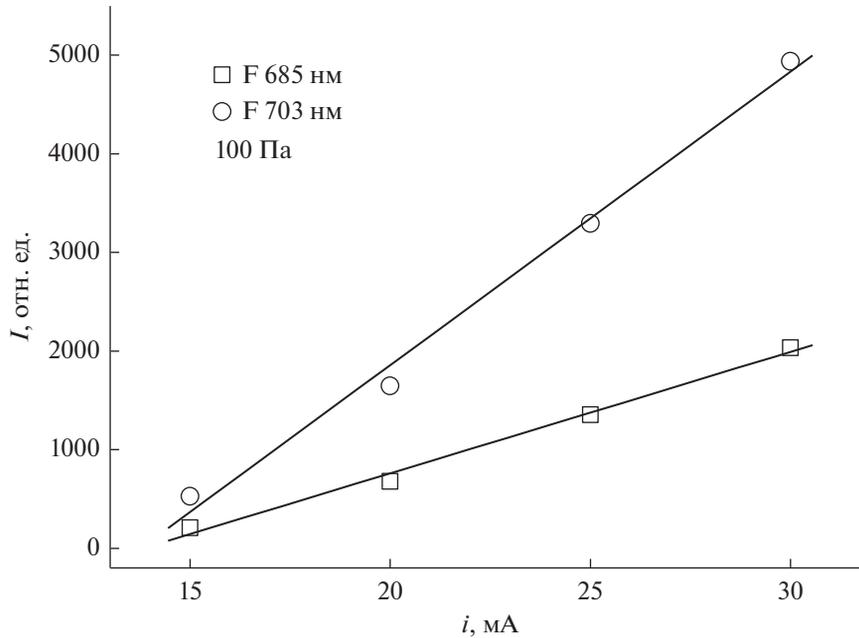


Рис. 5. Зависимости интенсивности излучения атомарных линий фтора от тока разряда.

- F 720.30 нм ($\epsilon_{th} = 14.74$ эВ, ${}^2P_{3/2}^{\circ} - {}^2P_{1/2}$);
- F 731.04 нм ($\epsilon_{th} = 14.68$ эВ, ${}^2S_{1/2}^{\circ} - {}^2P_{3/2}$);
- F 739.86 нм ($\epsilon_{th} = 14.37$ эВ, ${}^4P_{5/2}^{\circ} - {}^4P_{5/2}$);
- F 775.68 нм ($\epsilon_{th} = 14.58$ эВ, ${}^2D_{5/2}^{\circ} - {}^2P_{3/2}$);
- F 780.15 нм ($\epsilon_{th} = 14.61$ эВ, ${}^2D_{3/2}^{\circ} - {}^2P_{1/2}$).

Обладают высокой интенсивностью излучения, все из зафиксированных линий пригодны для анализа.

3. Третья группа линий атомарного фтора (820–880 нм): слабоинтенсивные линии, непригодны для анализа.

Следующим обнаруженным атомарным представителем выступает углерод. В спектрах излучения были обнаружены две слабоинтенсивные группы линий атомарного углерода в областях 240–300 и 900–950 нм.

1. Первая группа линий атомарного углерода (240–300 нм), кроме наиболее интенсивной, непригодна для анализа:

- C 247.53 нм ($\epsilon_{th} = 7.68$ эВ, ${}^1P_1^{\circ} - {}^1S_0$).

2. Вторая группа линий атомарного углерода (900–950 нм), слабоинтенсивные линии, однако хорошо различимы и подходят для анализа, наиболее интенсивные:

- C 918.09 нм ($\epsilon_{th} = 10.35$ эВ, ${}^1D_2^{\circ} - {}^1D_2$);
- C 940.63 нм ($\epsilon_{th} = 9.00$ эВ, ${}^1D_2 - {}^1P_1^{\circ}$).

Далее рассмотрим молекулярные компоненты, зарегистрированные в спектрах излучения тетрафторметана. Было обнаружено излучение молекулярных полос CF_n (где $n = 1, 2, 3$) и C_2 :

1. CF в интервале от 197 до 240 нм (наиболее интенсивные: 203.14, 204.99, 207.28, 209.35 и 219.69 нм). Слабоинтенсивные полосы, все за исключением полосы CF 209 нм, непригодны для анализа.

2. CF_2 в интервале от 252 до 330 нм (наиболее интенсивные: 252.75, 259.08, 263.17, 266.1, 270.77, 282.78, 289.43, 296.99, 305.11, 312.64, 329.68 нм). Интенсивные и хорошо различимые полосы, однако все “лежат” на большой молекулярной полосе, вследствие чего их анализ затруднен.

3. CF_3 607 нм.

4. C_2 в интервалах 350–600 нм и 780–810 нм:

- Наиболее интенсивные: 368.12, 389.19, 391.75, 405.69, 412.12, 418.88, 435.18, 437.42, 450.84, (468.40, 471.50, 473.70 нм) – полосы системы Свана, 483.04, 507.80, 512.90, 516.50, 519.28, 535.88, 547.00, 550.20, 554.00, 558.50, 560.44, 563.50, 567.44 и 607.47 нм. Интенсивные и хорошо различимые полосы, однако все “лежат” на большой молекулярной полосе, вследствие чего их анализ затруднен.

- Система полос Филиппа (максимум на длине волны 790.12 нм). Слабоинтенсивные полосы, однако, могут использоваться при расчете температуры газа посредством спектральных методов (возможность отождествления вращательной температуры и температуры газа).

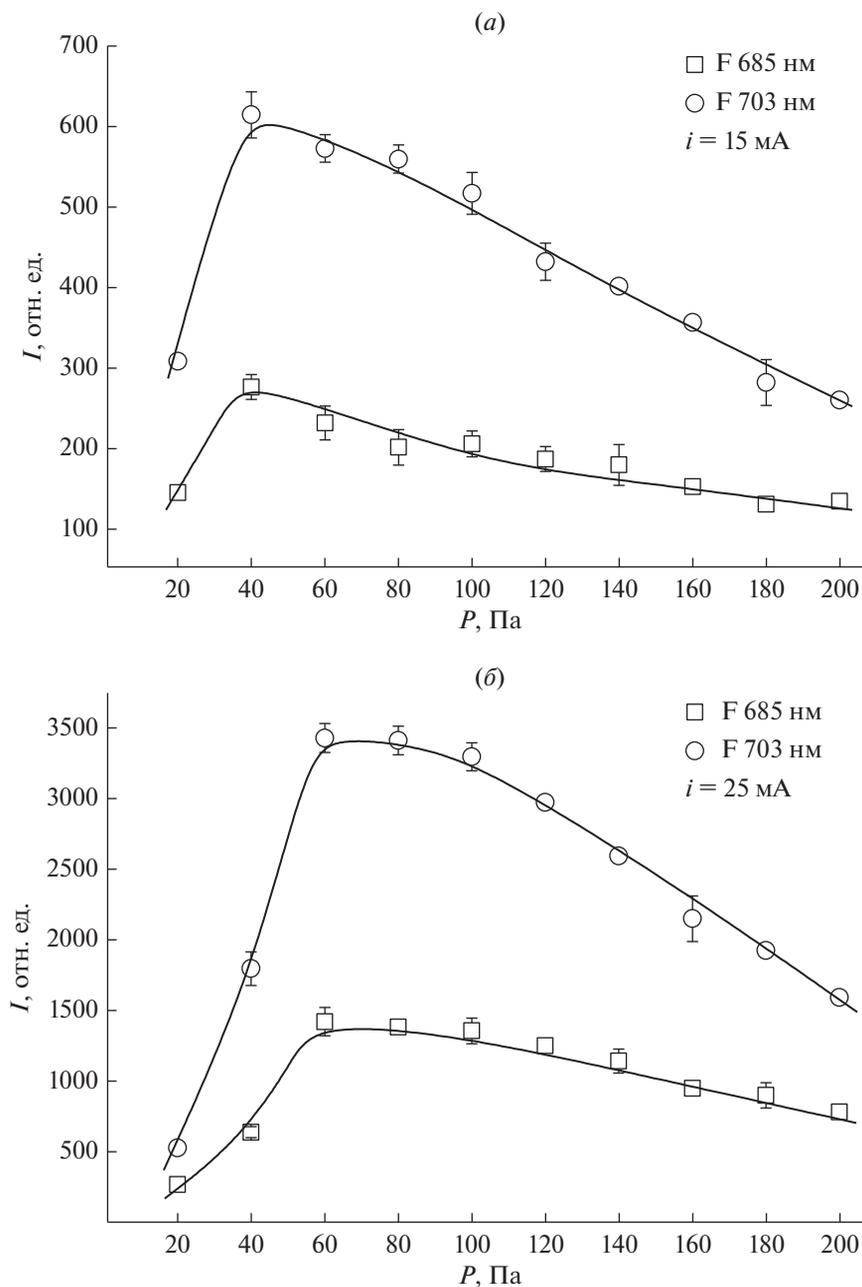


Рис. 6. Зависимости интенсивности излучения атомарных линий фтора от давления тетрафторметана.

Высокие значения энергий возбуждения (излучения) указанных выше излучающих состояний позволяют рассматривать возбуждение атомов и молекул электронным ударом как основной механизм заселения верхних состояний [9]. Кроме этого, низкие времена жизни соответствующих возбужденных состояний позволяют рассматривать излучательную дезактивацию как основной механизм данного процесса. В таком случае интенсивность излучения линий и полос может описываться выражением: $I = k n_e N$, где I – интенсивность

излучения; n_e – концентрация электронов; N – концентрация атомов или молекул газа; k – коэффициент скорости процесса. Выражение для нахождения коэффициента скорости процесса имеет вид: $k = \int_{E_a}^{\infty} \sigma(E) f(E) \sqrt{E} dE$, где $f(E)$ – функция распределения электронов по энергиям, $\sigma(E)$ – зависимость сечения процесса от энергии электронов, E – энергия электронов, E_a – пороговая энергия возбуждения.

Для дальнейшего анализа были выбраны линии F 685.65 и F 703.84 нм, как наиболее интенсивные и не перекрывающиеся с другими линиями и полосами. Для выбранных линий, были получены зависимости интенсивностей излучения от тока разряда (рис. 5) и давления плазмообразующего газа (рис. 6). На графике зависимости интенсивности излучения от тока разряда (рис. 5) с ростом тока наблюдается линейное увеличение интенсивности излучения всех рассматриваемых линий, что соответствует механизму прямого возбуждения излучающих состояний при электронном ударе и свидетельствует об отсутствии вторичных процессов. Влияние электрофизических параметров плазмы на интенсивность излучения линий или полос определяется изменением концентраций частиц и коэффициента скорости процесса. Так, при увеличении тока разряда приведенная напряженность электрического поля, а следовательно, доля быстрых электронов в функции распределения электронов по энергиям и коэффициент скорости возбуждения несколько уменьшаются [13, 14], а концентрация тяжелых частиц растет, что приводит к пропорциональности интенсивности излучения концентрации электронов, т.е. току разряда.

Увеличение давления плазмообразующего газа (рис. 6) приводит к тому, что зависимости интенсивностей излучения атомов фтора на участке 40–60 Па проходят через максимум, далее монотонно спадают. Возможные причины такого поведения полученных экспериментальных зависимостей: 1) на начальном этапе до 60 Па рост концентрации частиц не компенсируется изменением условий возбуждения, характеризуемых параметром kn_e , где $k = f(E/N)$ – константа скорости возбуждения, n_e – концентрация электронов; 2) после 60 Па изменение условий возбуждения начинает преобладать над увеличением концентрации частиц (возможно данный факт связан с тем, что частицы фтора начинают тратиться на образование CF-содержащих радикалов посредством атомно-молекулярных реакций, объемной рекомбинации или гетерогенного взаимодействия). В тоже время характер зависимостей $I = f(i, p)$ не противоречит общим представлениям о кинетике процессов образования и гибели активных частиц в молекулярных газах, где увеличение тока разряда или давления обычно сопровождается увеличением как скоростей диссоциации исходных молекул, так концентраций продуктов диссоциации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены измерения электрофизических характеристик плазмы тетрафторметана в зависимости от внешних параметров разряда в широком диапазоне условий. Показано, что величина тем-

пературы газа линейно возрастает с ростом давления газа и тока разряда. Поведение приведенной напряженности электрического поля типично для электроотрицательных газов. Получены и проанализированы эмиссионные спектры плазмы тетрафторметана. Показано, что излучение плазмы представлено атомарными и молекулярными компонентами, а зависимости интенсивностей линий и полос от внешних условий разряда определяются возбуждением излучающих состояний прямым электронным ударом. Данные по эмиссионной спектроскопии могут быть использованы для контроля состава плазмы.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР. Тема № FZZW-2020-0009.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Данилин Б.С., Киреев В.Ю. Применение низкотемпературной плазмы для травления и очистки материалов / Под ред. Данилин Б.С. М.: Энергоатомиздат, 1987. 264 с.
2. Светцов В.И., Ефремов А.М. Вакуумная и плазменная электроника: учеб. пособие. Иван. гос. хим.-технол. ун-т. Иваново, 2003. 171 с.
3. Лебедев Ю.А. Методы контактной диагностики в неравновесной плазмохимии. М.: Наука, 1981. 142 с.
4. Рохлин Г.Н. Разрядные источники света. Изд. 2-е; перераб. и доп. М.: Энергатамиздат, 1991. 720 с.
5. Мурин Д.Б., Дунаев А.В. Электрофизические параметры и спектры излучения плазмы трихлорида бора // Микроэлектроника. 2018. Т. 47. № 2. С. 106–114.
6. Курпяновская А.П., Светцов В.И., Ситанов Д.В. Влияние условий разряда и температуры стенки на электрические характеристики и излучение положительного столба тлеющего разряда в хлоре // Черкассы, 1990. Деп. в ВИНТИ. № 59. С. 93.
7. Ефремов А.М., Пивоваренок С.А., Светцов В.И. Параметры плазмы и механизмы травления металлов и полупроводников в хлороводороде // Микроэлектроника. 2009. Т. 38. № 3. С. 147–159.
8. Пирс Р., Гейдон А. Отождествление молекулярных спектров. М.: Изд. иностр. лит., 1949. 540 с.
9. Свентицкий А.Р., Стриганов Н.С. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Атомиздат, 1966. 900 с.
10. Ефремов А.М., Мурин Д.Б. Электрофизические параметры плазмы бинарных смесей HCl + Ar, He, H₂, O₂ и Cl₂ // Известия высших учебных заведений. серия: химия и химическая технология. 2021. Т. 58. № 4. С. 14–18.
11. Пивоваренок С.А., Мурин Д.Б., Ситанов Д.В. Влияние состава смеси на электрофизические параметры и спектры излучения плазмы хлороводорода с хлором и гелием // Микроэлектроника. 2021. Т. 50. № 1. С. 43–48.

12. *Пивоваренок С.А., Дунаев А.В., Мурин Д.Б., Ефремов А.М., Светцов В.И.* Электрофизические параметры и эмиссионные спектры плазмы тлеющего разряда в хлористом водороде // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2011. Т. 54. № 9. С. 48–52.
13. *Мурин Д.Б., Ефремов А.М., Светцов В.И., Пивоваренок С.А., Овцын А.А., Шабдаров С.С.* Интенсивности излучения и концентрации активных частиц в плазме тлеющего разряда в смесях хлористого водорода с аргоном и гелием // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2013. Т. 56. № 4. С. 29–32.
14. *Мурин Д.Б., Ефремов А.М., Светцов В.И., Пивоваренок С.А., Годнев Е.М.* Интенсивности излучения и концентрации нейтральных частиц в плазме тлеющего разряда постоянного тока в смесях HCl-H_2 и HCl-O_2 // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2013. Т. 56. № 8. С. 41–44.

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ НИКОГДА НЕ ЗАМЕНИТ ПОЛНОСТЬЮ ЧЕЛОВЕКА

© 2023 г. И. И. Абрамов*

Учреждение образования “Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники”, ул. П. Бровки, 6, Минск, 220013 Республика Беларусь

*E-mail: nanodev@bsuir.edu.by

Поступила в редакцию 27.06.2022 г.

После доработки 12.07.2022 г.

Принята к публикации 12.07.2022 г.

Дан обзор работ автора, связанных с мозгом человека как объектом электроники. Рассмотрены следующие вопросы: предложенная полная электронная интерпретация функционирования мозга и комплексный иерархический подход его исследования; сознание человека; перспективы и проблемы создания сверхума; перспективы использования нанoeлектроники, наноматериалов и нанотехнологий в исследовании мозга человека.

DOI: 10.31857/S0544126922700016, EDN: CXZVQB

1. ВВЕДЕНИЕ

Создание достаточно полной модели мозга человека – мечта создателей искусственного интеллекта. Действительно, современная наука пока не может приблизиться к пониманию эффективности мозга. И в то же время вопрос об объяснении мышления является одной из важных проблем физики [1]. В статье проанализированы основные особенности работы человеческого мозга, а также представлены подходы, способные в некотором роде представить его электронные аналоги. В частности, дан обзор работ автора и рассмотрены следующие вопросы: полная электронная интерпретация функционирования мозга; комплексный иерархический подход его исследования; сознание и квалиа человека; перспективы и проблемы создания сверхума; перспективы использования нанoeлектроники, наноматериалов и нанотехнологий в исследовании мозга человека.

2. ПОЛНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

“Мозг может интерпретироваться в качестве объекта органической гибридной нанoeлектроники, созданной Природой” [2]. Данная интерпретация впервые прозвучала в ответе автора на вопрос о достижениях в области нанoeлектроники на 11-й Международной конференции “СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии”, КрыМиКо’2001, Севастополь, 10–14 сентября 2001 г.

Впоследствии в докладах автора на международных конференциях [3–5], монографиях [6, 7]

и цикле статей [8–11] описаны подробно полная электронная интерпретация функционирования мозга и комплексный иерархический подход его исследования.

Рассмотрим сначала суть предложенной полной электронной интерпретации.

Главная проблема анализа функционирования мозга на строгом уровне обусловлена тем, что его работа основана на очень “запутанном клубке” различных физико-химических процессов. Так, на работу мозга могут оказывать влияние следующие взаимосвязанные процессы: электрические, химические, механические, тепловые и др. Традиционно в нейропсихологии выделяются химические и электрические процессы, причем, предпочтение, как правило, отдается химическим. Из указанного ранее понятно, что эти процессы могут рассматриваться только в качестве доминирующих процессов. Именно с целью попытки “распутать” указанный “клубок” автором была предложена полная электронная интерпретация функционирования мозга.

В ее основе лежит гипотеза I: считается, что доминирующее влияние на функционирование мозга оказывают электрические процессы. Таким образом, предполагается, что обработки информации в мозге идет в основном на уровне электрических процессов. Химические процессы обеспечивают питание нейронных (электрических) цепей мозга и их модификацию. Таким образом, речь идет о гибридной электронике.

Было показано [6, 7, 9], что всю нейронную цепь мозга допустимо интерпретировать в качестве нелинейной электрической цепи первого типа. Са-

мый близкий аналог твердотельной электроники — интегральная схема (ИС) — электрическая цепь второго типа. В результате сравнительного анализа цепей первого и второго типов установлены наиболее важные отличия [6, 7, 9, 12]: 1) нейронная цепь первого типа реализована на органических материалах, ИС — на неорганических; 2) в цепях первого типа основной является ионная проводимость, в ИС — электронная и дырочная; 3) ключевыми активными элементами в нейронных цепях являются каналы (ионные каналы, ионные насосы и др.) — сложные наноэлектромеханические системы (НЭМС) с характеристическими размерами в нанометровом диапазоне. Следовательно, речь идет об органической гибридной наноэлектронике. В ИС основными активными элементами являются диоды и транзисторы. Необходимо отметить, что видов и разновидностей каналов существенно больше, чем диодов и транзисторов; 4) нейронная цепь характеризуется очень сложной топологией и вариацией свойств даже однотипных элементов (тела клеток, аксоны, дендриты, шипики, синапсы и др.); 5) нейронная цепь — сначала растущая, а затем, как правило, регулярно модифицируемая цепь, что достигается в результате взаимодействия электрических и химических процессов, что является важнейшим отличием и преимуществом цепей данного типа; 6) с точки зрения электроники мозг человека, если рассматривать его в качестве информационной системы, — это, прежде всего, нелинейные электрические цепи двух видов, которые не должны модифицироваться и которые могут модифицироваться.

В итоге, цепи первого типа могут демонстрировать очень большое разнообразие в поведении в зависимости как от входящих, так и от проходящих по ним сигналов, которое пока не достигнуто в ИС. Предложенная полная электронная интерпретация позволила рассмотреть, как приблизительно функционирует мозг [6–11]. В частности, выделено три типа режима работы мозга как набора электрических цепей первого типа: 1) при внешнем воздействии; 2) без внешнего воздействия (внутренний); 3) смешанный. При этом все конкретные режимы функционирования мозга: восприятие, воспоминание, мышление и другие психические функции, относятся к одному из выделенных типов. Любой специфический режим работы мозга является результатом прохождения электрического сигнала (сигналов) по соответствующему набору нейронных цепей.

Принципиально важным является вопрос об уровне интеграции M мозга человека как объекта электроники. Традиционно в микро- и наноэлектронике оценка проводится по числу активных элементов. Такими в мозге человека являются каналы (ионные каналы, ионные насосы и др.), которых гораздо больше, чем нейронов. По грубой оценке автора [13] M лежит в диапазоне 10^{19} – 10^{21} .

Согласно более современным данным книги [14] число только натриевых насосов в одном нейроне мозга человека около 10^6 , а каналов — миллионы. Поэтому по уточненной оценке $M \gg 10^{17}$. Вывод же о том, что мозг человека является не просто объектом электроники, а объектом органической гибридной наноэлектроники [6, 7] остается в силе. Потребляемая мозгом с отмеченным уровнем интеграции мощность всего около 20 Вт дополнительно свидетельствует в пользу того, что мы имеем дело именно с наноэлектроникой.

Убедительное и всестороннее нейробиологическое сравнение мозга различных животных было проведено в книге [15]. Важнейший вывод работы [15]: “Ничего особенного в человеческом мозге, повторим еще раз, нет, если не считать удивительно большого числа нейронов”.

Таким образом, принципиальное значение по мнению автора для уникальности мозга человека имеет именно уровень интеграции, который согласно приведенной выше оценке лежит в диапазоне 10^{17} – 10^{21} активных элементов, так как между числом нейронов и числом каналов пропорциональная зависимость [16]. Результатом особенностей мозга человека и является сознание.

3. КОМПЛЕКСНЫЙ ИЕРАРХИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Хотя активные элементы нелинейных электрических (нейронных) цепей мозга, т.е. каналы, функционируют в целом по цифровому принципу: открыт–закрыт, однако, характер обработки информации в мозге и природы жизни более сложный и общий — аналого-цифровой [17]. Бесспорно, это надо учитывать при исследовании мозга. Встает резонный вопрос: как анализировать устройство аналого-цифровой электроники такого фантастического уровня интеграции? Ведь известные изделия твердотельной наноэлектроники только превзошли рубеж в 10^9 активных элементов на кристалле, и, как правило, носят цифровой характер.

Кратко описанная в п. 2 полная электронная интерпретация функционирования мозга (в ее основе лежит *гипотеза 1*) послужила базой предложенного комплексного иерархического подхода его исследования. Подход основан на многоуровневом моделировании в сочетании с экспериментальными методами и подробно описан в работах [6, 7, 10, 12], поэтому здесь выделю только некоторые важные моменты. Для разработки подхода необходимо было принять еще две гипотезы.

Гипотеза 2: функционирование мозга может быть в принципе описано с высокой степенью точности (достаточной) с применением квантовой механики на современном уровне развития. При принятии гипотезы устанавливается та до-

статочная физико-математическая база, на которой может быть основано исследование мозга.

Проведенный анализ вопроса и аргументы приводят к необходимости принять *гипотезу 3*: строгое математическое описание работы мозга с помощью квантовой механики относится к труднорешаемым задачам класса NP. Принятие этой гипотезы означает, что даже строгое моделирование функционирования мозга на уровне квантовой механики, к сожалению, невозможно сейчас и в обозримом будущем. Необходимы приближения, причем серьезные.

Признанный подход исследования сложных систем — метод декомпозиции, т.е. исследования по частям. Этот подход, как известно, интенсивно и эффективно используется для разработки ИС второго типа твердотельной микро- и наноэлектроники, в частности, ультрабольших ИС (УБИС) с уровнем интеграции активных элементов более 10^9 . Конечно, этот уровень гораздо меньше, чем отмеченный уровень интеграции мозга, однако, имеющийся опыт разработки ИС должен быть использован.

Перспективный выход в данном случае — предложенный комплексный иерархический подход на основе многоуровневого моделирования мозга в сочетании с экспериментальными методами. Основные идеи подхода в следующем: 1). Согласно предложенной полной электронной интерпретации функционирования мозга человека допустимо рассматривать как набор нелинейных электрических цепей, а, следовательно, для его исследования могут использоваться подобные, как и для ИС, принципы многоуровневого моделирования; 2). Анализ проблемы показывает, что моделирование мозга должно быть иерархическим в целом, т.е. между уровнями (многоуровневым), и, в частности, т.е. в рамках одного уровня целесообразно применять набор или иерархию моделей. При этом необходимо применять самые различные экспериментальные методы и оборудование. Это связано со многими причинами. Наиболее важно — задание исходных данных и компенсации “потерь” в адекватности моделирования на различных уровнях; 3). Так как задача относится к труднорешаемым класса NP (*гипотеза 3*), то разбиение на уровни не может быть однозначным, и будет зависеть от принципов разбиения, например, от моделируемых функций. В работах автора [6, 7, 10] для этих целей предложено использовать разбиение на уровни организации нервной системы учебника [16], а именно: 1) ионы; 2) молекулы; 3) органы клетки; 4) клетка; 5) локальные сети (зоны); 6) проекционные сети (системы); 7) многочисленные перекрывающиеся сети (поведение животного). Было отмечено, что если отбросить тип носителей заряда (уровень 1), то число уровней равно шести, которое совпадает

с числом известных основных уровней моделирования современных ИС [6, 7].

Проведенный анализ показывает, что так как важнейшим при анализе ИС является этап схемотехнического моделирования, то по аналогии основным и при исследовании мозга может быть также схемотехническое моделирование нейронных нелинейных электрических цепей первого типа. Для этого, однако, будет необходимо разработать многочисленные электрические модели следующих элементов: ионных каналов, ионных насосов, аксонов, дендритов, шипиков, синапсов, тел клеток и др. Учет менее существенных факторов может осуществляться с помощью токов утечки, паразитных элементов в моделях электрических (нейронных) цепей первого типа, учитывающих более значимые процессы. Далее, после схемотехнического моделирования можно строить макромодель локальной цепи и переходить на следующий уровень моделирования, а именно: проекционные сети и т.д. При моделировании каналов, т.е. НЭМС, потребуется, судя по всему, использование многоуровневого моделирования с привлечением, как минимум, элементов квантовой механики, учитывающая сложность этих НЭМС.

Осторожная оценка, проведенная в [6, 7, 10], показывает, что предложенный комплексный иерархический подход, по-видимому, даст положительные результаты при моделировании различных психических функций, включая, мыслительную деятельность.

Преимуществом предложенного подхода и схемы является свойство их открытости. В частности, допустимо учитывать влияние различных химических, тепловых и других значимых процессов, воздействий и факторов, например, глиальных клеток, объемных токов, возможных модификаций в нейронных цепях, которые, как оказалось, могут быть даже во внутренних режимах функционирования мозга. Допустима комбинация и с другими известными подходами, включая коннектомику.

4. СОЗНАНИЕ ЧЕЛОВЕКА

Предложенная теория сознания человека детально описана в статьях [13, 17, 18], а квалиа — в работе [17], поэтому здесь акцентируем внимание на основных моментах.

Суть теории удобно рассматривать на примере достаточно сложного режима функционирования мозга — осознанной обработки сенсорной информации. Согласно полной электронной интерпретации — это смешанный (третий тип) режим работы мозга.

Строго говоря, при анализе осознанной обработки сенсорной информации необходимо рассматривать всю систему [13, 19]: мозг—другие составляющие нервной системы—тело—окру-

жающая среда. К сожалению, детальный анализ явлений в такой системе невозможен, поэтому было проведено рассмотрение в целом на каждом из основных этапов процесса обработки информации.

Преобразования поступающей информации (сигналов) начинается сразу после попадания на рецепторы сенсорных систем человека, так как они, как правило, предназначены для принятия одного вида сигналов, а они могут быть разнообразными: механическими, оптическими, тепловыми, химическими, электрическими и другими. Следует также помнить, что расположение рецепторов в теле носит дискретный характер. Таким образом, сразу же осуществляется редуцирование и декомпозиция входящей информации, причем влияние на эти процессы оказывает не только окружающая среда, но и тело человека.

В результате поступающая информация разделяется (декомпозиция) по внешним и внутренним системам. После первичной обработки стимул, как правило, конвертируется в электрические сигналы. В дальнейшем они распространяются по нервной системе с постоянными преобразованиями из электрических в химические (например, в химических синапсах) сигналы, и наоборот, т.е. происходят регулярные изменения (трансформация). В связи с тем, что в процессе передачи информации принципиальное значение имеют различные каналы, т.е. НЭМС, то влияние оказывают и механические процессы.

После поступления разобранной информации в мозг необходима ее реконструкция в нем же. Для упрощения анализа в дальнейшем проводилось рассмотрение процессов согласно полной электронной интерпретации функционирования мозга, т.е. нейронные цепи считались электрическими цепями, по которым распространяются электрические сигналы.

С целью выделения основных закономерностей было рассмотрено несколько возможных вариантов обработки сенсорной информации. Поступившая разобранной информация об окружающей среде и теле распределяется далее таламусом (за исключением запахов) на карты соответствующих сенсорных систем. Карты – это области коры головного мозга, в которых хранится соответствующая информация в разобранном виде в результате иерархической обработки, осуществленной ранее, и частично заложенной генетически.

При обработке сенсорной информации идет иерархическая сборка информации в результате прохождения электрических сигналов по нейронным цепям соответствующих областей коры. Следовательно, из разобранной информации закодированной и заложенной ранее на хранение может быть воспроизведена в результате прохождения электрических сигналов (декодировка) как старая, так и новая информация, т.е. идет гибкая сбор-

ка поступающей информации из разнообразных фрагментов. Процесс напоминает использование пикселей в экранах телевизоров. Такая реконструированная информация распределена по картам мозга, поэтому ее надо продолжать объединять в единое целое.

Реактивация соответствующих нейронных цепей карт сенсорных систем приводит к формированию коалиции нейронов, ответственной за реконструкцию тех или иных воспоминаний и/или действительности. Далее информация от сенсорных карт поступает в лобные доли для дальнейшего объединения в единое целое. И здесь возможно большое число вариантов. Рассмотрим лишь некоторые, но характерные.

В психологии выделяется две системы мышления [20]: система 1 (автоматическая система) и система 2 (произвольная система). “Система 1 срабатывает автоматически и очень быстро, не требуя или почти не требуя усилий и не давая ощущения намеренного контроля. Система 2 выделяет внимание, необходимое для сознательных умственных усилий, в том числе для сложных вычислений. Действия системы 2 часто связаны с субъективным ощущением деятельности, выбора и концентрации... Система 1 импульсивна и интуитивна, а система 2 способна к рассуждению...” [20].

В работе автора [13] мыслительная деятельность в целом была представлена происходящей по “спирали”. Один из витков спирали работы автоматической системы 1 показан на рис. 1. Сначала следует планирование (моделирование или прогноз) ситуации, а затем – действие. Процесс может продолжаться и дальше. Работа произвольной системы 2 более разнообразна и сложна. Несколько вариантов одного витка “спирали” показаны на рис. 2. В первом варианте (рис. 2а) сначала происходит планирование (моделирование или прогноз) ситуации, затем – действие (точнее его управление мозгом), а далее – осознание. Возможен и более простой вариант работы системы 2 (рис. 2б), а именно: планирование (моделирование или прогноз) ситуации, а далее – осознание. Было отмечено, что из выделенных вариантов витков могут формироваться сложные “спирали” мыслительной деятельности. Сами же ситуации и действия могут разбиваться на составляющие (части), что еще больше усложняет рассмотрение процесса мышления.

В качестве примера был детально рассмотрен случай, когда человек идет по улице [17]. Обычно все происходит в автоматическом (на подсознательном уровне) режиме, т.е. работает система 1. Фактически сигналы, проходящие по объединенной коалиции нейронов, и есть планирование (моделирование или прогноз) ситуации (это объединение нейронов было названо коалицией планирования или прогнозирования [17]). Далее происходит инициация действия (рис. 1) и передача сигналов из

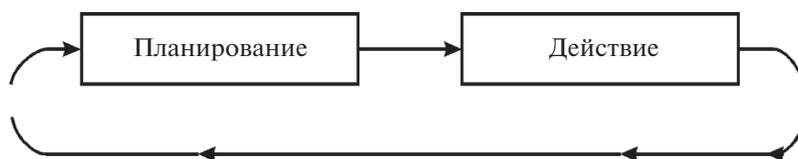


Рис. 1. Виток “спирали” автоматической системы.

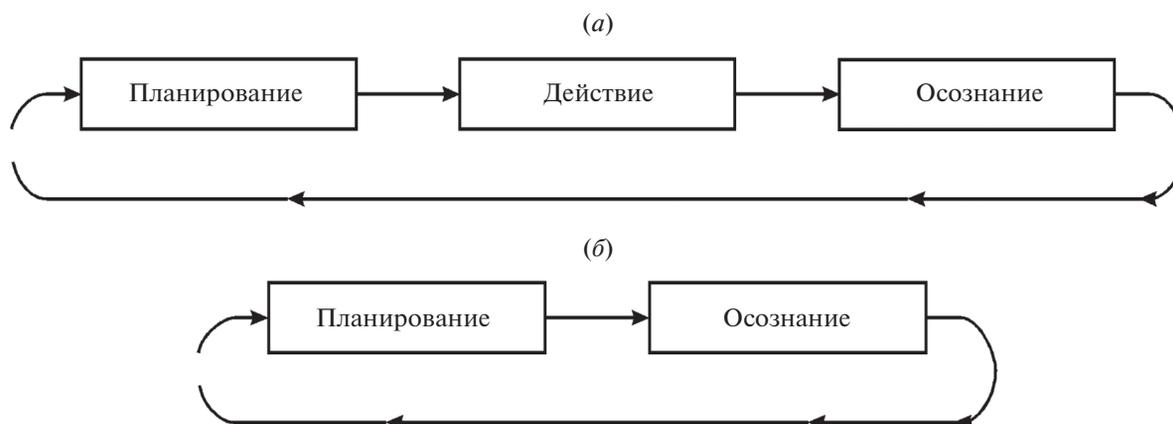


Рис. 2. Возможные варианты витка “спирали” произвольной системы: *а* – с участием “действия”, *б* – без участия “действия”.

мозга соответствующим системам для исполнения. По данным нейробиологии для осуществления таких действий требуется около 100 миллисекунд [21].

Самое интересное происходит в другом случае. Предположим, что коалиция нейронов, хотя бы одной из сенсорных систем, сигнализирует об опасности. В этой ситуации происходит повышение активации и превышение порога осознания, своеобразный резонанс с картами целей, смыслов в лобных долях. Возможно, что соответствующие области лобных долей дополнительно активируются сигналами из таламуса тем самым подготавливая их к приему сигналов от сенсорных карт. В результате такого взаимодействия начинает идти из лобных долей в сенсорные карты обратная (отраженная) волна повышенной активации. По оценкам нейробиологов задержка в волне составляет около 300–500 миллисекунд и более (см., например, [22]).

Энергетический поток, проходящий по выделенной объединенной коалиции нейронов, автор считает осознанием [13, 17]. Отмечалось [17], что так как сознание является системным свойством прежде всего мозга человека, на процесс осознания в рассматриваемом случае может влиять не только ствол, таламус и кора, но и структуры, ответственные за эмоции, речь и др. Важно также то, что коалиция нейронов осознания может не совпадать с коалицией прогнозирования, так как происходит при измененной (как правило, повышенной) акти-

вации. Это необходимо в основном для следующего: 1) выделения “главной” коалиции нейронных цепей и в результате осознания возможной корректировки действий (рис. 2*а*); 2) “отсечки”, подавления влияния второстепенных цепочек; 3) для возможной корректировки (запоминания) карт.

Для осуществления такой сознательной деятельности необходим определенный уровень активации, лежащий в оптимальном для каждого человека диапазоне. Более низкая активация характерна для некоторых измененных состояний сознания (ИСС), например, состояниях сна, некоторых психических расстройств, различных видов комы и др. [18]. В то же время превышение оптимального диапазона активации может приводить к приступам эпилепсии, другим расстройствам. Отмечалось, что кроме уровня активации (сигналов) для прохождения этой волны по коалиции нейронов осознания необходима и определенная степень синхронизации взаимодействующих нелинейных электрических цепей первого типа.

Таким образом, сделан вывод [17]: осознание человека – главный доминирующий процесс энергетической реконструкции в соответствующей коалиции нейронов в оптимальном диапазоне активации бодрствующего состояния человека. В конкретный момент времени коалиция осознания может быть только одной, что и приводит к

известному в психологии феномену “бутылочно-горлышка” (см., например, [22]).

Схематично процесс осознания в рассматриваемом случае показан на рис. 2а. Он характеризуется, как правило, повышенными энергозатратами. Исключением являются ряд ИСС, например, состояние “потока”, медитации [18].

Изложенное выше позволило выделить основные составляющие “спирали” мыслительной деятельности, когда работают система 1 или система 2 [13, 17]. В случае внутреннего режима работы системы 2 возможно исключение инициации действия, т.е. идет только чередование функционирования коалиций прогнозирования и осознания (рис. 2б).

Было рассмотрено детально несколько возможных вариантов мыслительной деятельности [13, 17, 18]. Огромное разнообразие может реализовываться вследствие обмена сигналами между различными областями мозга, выхода некоторых подсознательных процессов на уровень осознания, и наоборот. Многое зависит и от индивидуальных нейронных цепей.

И тем не менее, несмотря на большое разнообразие возможных вариантов, было установлено, что при обработке информации в центральной нервной системе общей и главной закономерностью являются преобразования сигналов и энергетические реконструкции [17].

Рассмотренный энергетический поток по соответствующим нейронным цепям, который составляет предмет нашего осознания, является основным содержанием и рабочей памяти человека. Возможные варианты дальнейшего развития событий неплохо описаны в нейробиологии (см., например, [21]). Так, для более длительного хранения информация попадает в гипокамп, который перенаправляет ее в различные области мозга и таким образом происходит регулярная корректировка сенсорных карт и карт префронтальной коры головного мозга. Важным при этом является степень новизны поступившей информации.

Связанная с сознанием проблема “квалиа” (qualia), т.е. чувственных переживаний человека, проанализирована в статье [17]. При этом был детально рассмотрен, ставший классическим [23], пример ощущения “красного”. Проанализировав физические основы происходящих процессов, было отмечено, что необходимым условием восприятия красного является наличие пигментов красного, а также нормальное развитие ряда других составляющих зрительной системы. В нормальной зрительной системе сигналы поступают согласно описанному выше для обработки в область сенсорной карты, ответственной за красный цвет. Далее собирается коалиция нейронов, ответственных за красный цвет и восприятие соответствующего предмета. В результате прохожде-

ния сигналов по собранной коалиции осознания и происходит энергетическая реконструкция, которая и соответствует ощущению человека увиденного красного предмета. Следовательно, ощущение “красного” происходит в соответствии с сформулированным главным принципом функционирования мозга – преобразований сигналов и энергетических реконструкций. Будут ли эти энергетические реконструкции в мозге человека полностью соответствовать действительности? Ответ ясен: нет! Это связано с тем, что копия, а энергетическая реконструкция – копия, никогда не совпадает с оригиналом полностью.

Таким образом, был сделан вывод, что предложенная теория, сущность которой была кратко изложена выше, может быть отнесена согласно классификации монографии [24] к монистической материалистической теории сознания эмерджентного типа [12, 13, 17].

5. ПЕРСПЕКТИВЫ И ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ СВЕРХРАЗУМА

Рассмотрение вопросов, связанных со сверхразумом, проводилось автором исходя из точки зрения, что человек – биологическая машина, а методологической основой являлись полная электронная интерпретация функционирования мозга и теория сознания человека, описанные выше. Вопросы первоначально рассматривались в [18] и более детально анализировались в [25, 26], поэтому здесь приведу краткую выдержку из указанных статей.

Для избегания недоразумений, прежде всего, определимся с ключевыми понятиями. Сверхразум – “это любой интеллект значительно превосходящий когнитивные возможности человека фактически в любых областях” [27]. Искусственный интеллект (ИИ) человеческого уровня (ИИЧУ) определяем как “способность освоить большинство профессий, по крайней мере тех, которыми мог бы владеть среднестатистический человек” [27]. Хотя и существует большое число определений понятия “интеллект”, автор считает наиболее удачным определение учебника [28]: “интеллект – способность к целенаправленному адаптивному поведению, в том числе умение извлекать пользу из опыта, решать задачи и логически рассуждать”.

Было условно выделено три направления создания ИИЧУ и сверхразума [25]: 1) материалистическое; 2) идеалистическое и 3) гибридное. Рассмотрим их.

В рамках материалистического направления было выделено два наиболее перспективных на настоящий момент времени вида [25]: 1) биологический интеллект; 2) электронный интеллект.

Биологический интеллект можно разделить на много уровней, наивысший из которых — человеческий. Так как Природа реализовала последний, то и ИИЧУ, в принципе, достигим. В книге [27] отмечено, что создание “сравнительно слабой формы сверхразума” путем “биологического улучшения интеллектуальных способностей”, по-видимому, будет возможно. В свое время подход биологического усовершенствования автором был назван “от имеющегося” [29], т.е. это вполне реальный путь достижения сверхразума [25]. Однако при глубокой модернизации важнейшими станут этические проблемы.

Электронный интеллект означает путь создания ИИЧУ и сверхразума на основе электроники. В соответствии с описанной полной электронной интерпретацией работы мозга можно сделать вывод о том, что создание ИИЧУ на основе электроники принципиально возможно, однако, для этого, судя по всему, придется воспроизвести ряд из отмеченных ранее свойств. К наиболее важным автор отнес следующие [18, 25]: 1) фантастический уровень интеграции; 2) аналогово-цифровой характер обработки информации; 3) малые энергетические затраты; 4) малые размеры; 5) гибридизация; 6) индивидуальность и пластичность нейронных цепей. Более детально было проведено сравнение свойств 1–4 с таковыми для современных ИС так как это возможно количественно [25]. Приведу основные результаты сравнения.

Взяв уровень интеграции нанoeлектронных ИС около 5×10^9 активных элементов, была дана оценка, что для достижения уровня интеграции мозга в твердотельной микро- и нанoeлектронике потребуется около 60 лет [18], даже если ее развитие будет продолжаться согласно закону Мура, что проблематично. При оценке за ориентир был взят уровень интеграции мозга в 10^{19} активных элементов. Даже, если взять указанный нижний предел в 10^{17} , оценка по времени сильно не изменится.

Сравнение по энергопотреблению также показало, что мозг человека вне конкуренции [25]. Оценка была проведена, как это принято в микро- и нанoeлектронике, по работе A на одно переключение активного элемента [30]. При этом использовалась формула [30]

$$A = P\tau = IV\tau,$$

где P — потребляемая мощность. Согласно известным нейробиологическим данным [31]: ток I , проходящий через каналы, т.е. НЭМС, — единицы пА, изменение напряжения V на них в среднем несколько десятков мВ (максимальное значение около 100 мВ), среднее время открытия канала τ — 1–2 мс. В результате A ориентировочно лежит в диапазоне (10^{-16} – 10^{-17}) Дж на переключение. В то же время согласно прогнозу [32] энергия переключе-

ния для транзисторов ИС в 2030 году достигнет 0.5×10^{-15} Дж на элемент.

Важно при этом также отметить, что энергопотребление мозга составляет всего от 10 до 25 Вт/час, а сам он весом 1500 г и объемом около 1700 мл. Именно такие цифры автор встречал в литературе (см., например, [14]). Подчеркну, что это невероятно мало и очень экономично для объекта электроники такого фантастического уровня интеграции активных элементов и размеров. ИС твердотельной электроники и здесь явно проигрывают.

Возможны три разновидности электронного интеллекта: 1) аналоговый; 2) цифровой; 3) аналогово-цифровой. Уже отмечалось, что характер обработки информации в мозге аналогово-цифровой, что очень важно [17]. Хотя хорошо известно, что аналоговые функции могут быть реализованы на цифровой основе (см., например, [33]), однако, как отмечалось автором, за это придется “заплатить” увеличением объемов, причем, судя по всему, существенным [25].

В результате проведенного анализа были сделаны следующие основные выводы [18, 25]: 1) Природа при создании мозга решила суперсложную оптимизационную комплексную проблему: а) взаимодействие различных сигналов (механических, оптических, тепловых, химических, электрических и др.); б) гибкости связей; в) малых энергетических затрат; г) малых размеров и др. Аналогичные проблемы в твердотельной электронике еще очень далеки от действительно оптимальных решений даже по отмеченному комплексу вопросов; 2) электронная реализация ИИЧУ в полном объеме в ближайшее время вряд ли возможна; 3) учитывая главный принцип функционирования мозга преобразования сигналов и энергетических реконструкций, воспроизведение, по крайней мере приближенное, сознания и квалиа в рамках электронного интеллекта, возможно в принципе; 4) в рамках материалистического направления (биологического и электронного интеллекты) реализация сверхразума возможна.

В рамках идеалистического направления можно выделить два пути создания ИИЧУ и сверхразума [25]: 1) полная эмуляция (полномасштабное моделирование) мозга; 2) разработка систем моделирования, реализующих ИИЧУ и сверхразум.

Первый путь полной эмуляции мозга многими специалистами считается перспективным. Для этого, однако, понадобится создать хотя бы удовлетворительную теорию функционирования мозга. Так как она в настоящее время отсутствует, то полная эмуляция “вряд ли будет осуществлена в ближайшем будущем” [27]. Автор считает предложенные теории сознания и комплексный подход исследования мозга перспективными для этой цели, хотя их

практическая реализация может потребовать значительных усилий.

Сопоставление различных оценок числа необходимых флопсов компьютеров для моделирования функционирования мозга человека было проведено в [25]. Так, оценка различных авторов варьируется в широком диапазоне от 10^{14} до 10^{18} флопс. Оценка автора для среднего числа активных элементов (каналов) в 10^{19} привела к диапазону от 10^{16} до 10^{19} флопс [25], что позволило сделать вывод о том, что производительности самого мощного суперкомпьютера (на настоящий момент времени это японский “Фуугаку” с производительностью около 4.15×10^{17} флопс) может быть недостаточно для детального моделирования (полной эмуляции) мозга человека.

И тем не менее, даже приближенное моделирование мозга человека будет полезно, например, для “реставрации сознания” человека, теряющего его в результате прогрессирования деменции [25].

Так как быстродействие активных элементов современных ИС намного превосходит быстродействие активных элементов, то, в принципе, возможна реализация различных систем превосходящих мозг человека (второй путь). Наиболее интенсивно это направление с высоким уровнем ИИ (своеобразные прообразы ИИЧУ) развивается в поисковых системах при обработке больших объемов информации в компаниях Google, DeepMind, Amazon, IBM, Apple, Facebook, Baidu, Microsoft и др. (см., например, [25, 34]). В основу наиболее продвинутых таких систем, как правило, положены общие принципы машинного обучения, в частности глубинное (глубокое) обучение с использованием многоуровневых нейронных сетей.

Анализ этого направления в целом позволил автору сделать вывод [25], что даже самые передовые системы ИИ пока не могут сравниться с интеллектуальными возможностями человека по широте спектра и гибкости, способности к развитию, так как являются узкоспециализированными (специальными) системами (слабый ИИ). Не обладают сознанием и квалиа. Несмотря на это, данное направление – важнейшее в развитии ИИ.

Однако, по мнению автора, наиболее перспективным для создания ИИЧУ и сверхразума является гибридное направление [26], в котором используются компоненты как материалистического, так и идеалистического направлений. В этом случае, как правило, применяется электронное аппаратное обеспечение (hardware) и программное обеспечение (software). В последнее время выделяется путь создания интерфейсов “человек–машина” и “человек–компьютер”, который может быть отнесен к wetware (смесь software, hardware и биологии). Анализ указанных путей развития был проведен в [26], поэтому здесь приведу лишь основные результаты.

Было отмечено: 1) идеалистическое направление, строго говоря, относится к гибриднему, так как кроме моделирования для своей реализации требует использования компьютеров, т.е. материалистической основы; 2) к сверхразуму можно отнести вас с интернетом, а также некоторые варианты коллективного разума; 3) перспективным считается метод обратного проектирования (разработки) мозга, когда ИИ строится по образцу человеческого мозга, как правило, с использованием аппаратных компонентов и программного обеспечения.

В последнем случае автор видит определенные перспективы использования разработанных теории сознания и комплексного иерархического подхода исследования мозга. К наиболее известным глобальным программам, в которых предполагается применить этот метод следует отнести: BRAIN Initiative (США) и Human Brain Project (ЕС), подробно рассмотренных в [12, 26, 35]. Главной проблемой здесь будет необходимость разработки методов обработки гигантских объемов информации (в коннектоме человека около 10^{20} байт [36]). Перспективу автор видит в разработке специальных систем ИИ автоматической иерархической обработки получаемой информации.

Важный путь современных исследований – разработка систем нейроморфной электроники. К таким системам следует отнести: SyNAPSE, SpiNNaker, Neurogrid, HICANN. В их основу положены различные архитектурные решения с применением отличающихся, как правило, нанoeлектронных ИС. Отмечу также программу DARPA (Управление перспективных исследовательских проектов Министерства обороны США) “Когнитивные вычислительные системы” с амбициозными целями, ведущие к созданию ИИЧУ.

Несмотря на колоссальные сложности, автор считает метод обратного проектирования мозга важным путем, ведущим к разработке ИИЧУ.

Отмечу, что рядом специалистов метод обратного проектирования мозга считается затратным и можно попытаться создать более оптимальное устройство по сравнению с мозгом человека. К таким проектам можно отнести Open Cog, LIDA. Замечу, однако, что в этих проектах за основу взята определенная информация о мозге.

Интересным и перспективным в рамках данного направления следует считать создание разнообразных смесей (wetware). Отмечу следующие первые примеры: “стимосиверы” Х. Дельгадо [37], “щадающие методы стимуляции”, разработанные под руководством академика Н.П. Бехтеревой [38]. Успешными примерами интерфейсов “человек–машина” являются кохлеарные импланты, импланты сетчатки, экзоскелеты и др. Перспективным является использование различных микроэлектромеханических систем (МЭМС) и НЭМС [12]. Путь различных дополнений тела превраща-

ет человека в киборга, т.е. *кибернетический организм*. Киборгизация считается будущим человечества, в частности Р. Курцвейлом.

Итак, если и будут созданы компактные системы ИИЧУ и сверхразума, то, скорее всего, это произойдет в рамках гибридного направления. К основным направлениям развития в настоящее время следует отнести [26]: 1) продолжение усиления человеческого интеллекта; 2) симбиоз ИИ и человеческого интеллекта; 3) создание специализированных систем ИИ, прежде всего для обработки больших объемов данных.

Эволюция интеллекта, по мнению автора, будет происходить по “биологическому сценарию”. При этом было выделено три основных варианта [26]: 1) уничтожение менее развитого интеллекта более развитым; 2) подчинение менее развитого интеллекта более развитым; 3) мирное сосуществование интеллектов разного уровня. В связи с этим прогнозы специалистов нашего совместного существования со сверхразумом лежат в очень широком диапазоне, перекрывающих отмеченные варианты от крайне пессимистического (уничтожение человечества) до эйфорически оптимистического (безоблачного совместного существования). Детально пессимистические и оптимистические прогнозы развития событий были рассмотрены в статье [26], поэтому здесь отмечу только основные моменты.

Во-первых, так как практически невозможно предсказать поведение сверхразума, особое внимание необходимо уделить методам контроля над ним. К сожалению, ни один из известных предложенных методов контроля не обеспечивает полной надежной защиты. Поэтому уничтожение человечества не является невероятным сценарием развития событий. Перспективу, по-видимому, представит использование целого комплекса, иерархии методов контроля сверхразума, вплоть до его уничтожения.

Во-вторых, ситуация с безопасностью в области ИИ даже в более простых системах не вдохновляет. Известно огромное число случаев ошибок в них, приводящих даже к трагедиям, катастрофам. Особое беспокойство вызывает использование ИИ в различных системах вооружений.

В-третьих, с помощью систем ИИ уже достигнуты значительные успехи, прежде всего, в областях при обработке больших массивов данных, при принятии решений, требующих учета влияния множества факторов и возможных ситуаций. Ясно, что системы ИИ будут и далее развиваться, тем более, что в данную область вкладываются все более колоссальные инвестиции.

В-четвертых, возможно, нам необходимо изменить свой взгляд на развитие ИИ. Один из возможных вариантов развития ИИ — это симбиоз человека и систем ИИ. Второй взгляд — рассмат-

ривать системы ИИ как “наших детей”. Эта точка зрения полностью согласуется с вариантом “бессмертия”, реализованного Природой, когда мы, образно говоря, передаем “эстафетную палочку” следующим поколениям.

В-пятых, наивно полагать, что сверхразум, если он будет создан, не будет допускать ошибок. Это может происходить вследствие отсутствия у него, хотя бы иногда, полных исходных данных. И тем не менее, создание сверхразума будет величайшим достижением человечества, так как поможет нам решить ряд серьезных проблем в частности, освоения Вселенной, разработки методов лечения некоторых пока непобежденных болезней человека и многих других.

6. ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ, НАНОМАТЕРИАЛОВ И НАНОТЕХНОЛОГИЙ В ИССЛЕДОВАНИИ МОЗГА ЧЕЛОВЕКА

Учитывая описанные интерпретацию мозга как объекта органической гибридной наноэлектроники и комплексный иерархический подход его исследования, особую перспективу представляет масштабное применение достижений наноэлектроники, наноматериалов и нанотехнологий (наноуик в целом) для изучения и лечения мозга человека. Данный вопрос подробно рассматривался в пленарном докладе на Международной конференции КрыМиКо’2015 [39] в дальнейшем опубликованном в статье [12]. В связи с этим здесь выделю лишь основные моменты.

Предложенная интерпретация позволила связать психические заболевания с отклонением функционирования электрических (нейтронных) цепей мозга от нормальных режимов работы. Отклонения могут быть вызваны следующими основными факторами и их совместным влиянием [12]: 1) связанные с разрушением цепей; 2) вызванные неправильными связями функционирующих цепей; 3) определяемые изменением конструктивно-технологических и электрофизических параметров цепей, включая биохимические процессы в них. Отмечу, что индивидуальность нейронных цепей фактически и является предопределяющей материальной основой субъективности [12], а следовательно, и психических заболеваний.

Наиболее существенные и очевидные нарушения в функционировании цепей связаны с факторами групп 1 и 2, и именно на их установление нацелен проект по коннектому человека [36]. Ситуация намного сложнее с факторами группы 3, поэтому они были более детально проанализированы в [12, 39].

Так, биохимические процессы, протекающие в процессе функционирования нейронных цепей, могут приводить к самым различным их мо-

дификациям, а именно [6, 7]: новым связям между нейронами; молекулярным изменениям в синапсах; синтезу РНК, белков, проводящих к структурным изменениям в синапсах, шипиках, дендритах, аксонах, ядре клетки и др. С точки зрения микро- и нанoeлектроники эти модификации по сути являются изменениями в конструктивно-технологических и электрофизических параметров соответствующих участков электрических (нейронных) цепей. Понятно, что влияние таких изменений может быть важным, что, по существу, и подтверждают многочисленные экспериментальные данные для различных психических расстройств (см., например, [35, 40]). Замечу, что к наномасштабу относятся объекты, в которых хотя бы одно из измерений находится в диапазоне от 1 до 100 нм. Именно в этом диапазоне находятся характеристические размеры основных биологических структур мозга (гены, каналы в мембранах, ДНК, РНК, нейромедиаторы, белки и др.). Это принципиально важно, так как при создании мозга Природой интенсивно использовались нанобъекты.

Таким образом, главным направлением при лечении психических заболеваний должно быть восстановление нормального функционирования поврежденных вследствие отмеченных факторов электрических (нейронных) цепей мозга или иная корректировка их работы [12], причем особую перспективу для этого могут представить наобъекты.

В работах [12, 39] были выделены основные задачи, которые могут решаться с использованием нанoeлектроники, наноматериалов и нанотехнологий (нанонаук в целом), а именно: 1) исследование; 2) лечение; 3) диагностика; 4) мониторинг; 5) контроль нейронных цепей и других составляющих мозга. Следовательно, стратегическими направлениями должны стать разработки новых инструментов и методов лечения, так как для них, к сожалению, в настоящее время характерен общий недостаток – грубость [12].

Отмечу лишь несколько перспективных направлений из выделенных в [12, 39]: 1) интерфейсы “мозг–машина” (“мозг–компьютер”), включая нейроимпланты, нейрочипы, нейрокомпьютеры; 2) использование различных МЭМС и НЭМС; 3) стимуляция глубинных структур мозга с помощью более миниатюрных электродов, наноустройств (нанотрубки, нанoeлектроды, наносенсоры и др.); 4) восстановление электрических связей между нейронами и нейронными цепями с использованием проволок, трубок с диаметром микрометрового и нанометрового диапазонов, в том числе доставки химических средств; 5) устройства оптогенетики; 6) в качестве средств доставки необходимых материалов могут использоваться различные микро- и нанобъекты, например, сферы, частицы, капсулы, цилиндры и др.,

при использовании различных воздействий (электромагнитных, ультразвуковых, тепловых и др.).

Кардинальным решением ряда отмеченных задач может быть возврат к идее Р. Фейнмана и А. Хибса, которая сначала казалась многим несерьезной, о создании “микроскопических роботов”, “крошечных механических “хирургов”, “крошечных автоматов” [41]. Успех здесь может быть достигнут путем создания ремонтных бригад микро- и нанороботов с использованием достижений нанoeлектроники, наноматериалов и нанотехнологий (нанонаук в целом).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье проведен обзор работ автора, связанных с мозгом человека. Изложена суть предложенной полной интерпретации функционирования мозга. В частности, мозг интерпретирован как объект органической гибридной нанoeлектроники. С точки зрения автора, ключевыми активными элементами в нейронных (электрических) цепях мозга являются каналы (ионные каналы, ионные насосы и др.) – НЭМС с характеристическими размерами в нанометровом диапазоне. Принципиально важным для этой интерпретации является уровень интеграции мозга человека, который согласно оценке автора, лежит в диапазоне 10^{17} – 10^{21} активных элементов. Этот фантастический уровень интеграции мозга человека позволяет наметить комплексный иерархический подход исследования мозга, основанный на подобию с современными методами анализа известных объектов твердотельной нанoeлектроники, несмотря на то, что задача здесь грандиозной сложности. Рассмотрев феномен сознания человека в рамках разработанной теории, удалось выделить главный принцип функционирования мозга при обработке информации – принцип преобразований сигналов и энергетических реконструкций. На этой методологической основе рассмотрены перспективы и проблемы создания сверхума. Проанализированы как пессимистический, так и оптимистический вариант развития событий. К сожалению, самый трагический вариант (уничтожение человечества) не является невероятным сценарием развития событий. В соответствии с предложенной интерпретацией мозга как объекта органической гибридной нанoeлектроники показана большая перспектива использования нанoeлектроники, наноматериалов и нанотехнологий (нанонаук в целом) в его исследовании и лечении. Последнее представляется особенно важным.

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю признательность Владимиру Федоровичу Лукичеву за ценные замечания, позволившие улучшить статью, а также моим ученицам Н.В. Коломейцевой и И.Ю. Щербаковой за подготовку рукописи работы к печати.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гинзбург В.Л.* “Физический минимум” — какие проблемы физики и астрофизики представляются особенно важными и интересными в начале XXI века? // УФН. 2007. Т. 177. № 4. С. 345–346.
2. *Абрамов И.И.* Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34–37.
3. *Абрамов И.И.* Мозг — объект органической гибридной наноэлектроники // “Нанотехнологии — 2012”. Труды Международной научно-технической конференции. г. Таганрог. Ростовская область. Россия. 25–29 июня, 2012. С. 17–18.
4. *Абрамов И.И.* Мозг — объект наноэлектроники // 22-я Международная Крымская конференция “СВЧ — техника и телекоммуникационные технологии”. Материалы конференции. Крым Украина 2012. Т. 1. С. 17–19.
5. *Abramov I.I.* The brain is a nanoelectronic object // International Conference “Micro- and Nanoelectronics — 2012”. Book of Abstracts. October 1st–5th, 2012. Moscow-Zvenigorod, Russia. P. 01–10.
6. *Абрамов И.И.* Мозг как объект электроники. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2012. 80 с.
7. *Abramov I.I.* Brain as an Object of Electronics. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2013. 76 p.
8. *Абрамов И.И.* Мозг — объект органической гибридной наноэлектроники, или взгляд со стороны. Часть I // Нано- и микросистемная техника. 2013. № 1. С. 52–54.
9. *Абрамов И.И.* Мозг — объект органической гибридной наноэлектроники, или взгляд со стороны. Часть II // Нано- и микросистемная техника. 2013. № 3. С. 45–53.
10. *Абрамов И.И.* Мозг — объект органической гибридной наноэлектроники, или взгляд со стороны. Часть III // Нано- и микросистемная техника. 2013, № 5. С. 45–54.
11. *Абрамов И.И.* Мозг — объект органической гибридной наноэлектроники, или взгляд со стороны. Часть IV // Нано- и микросистемная техника. 2013, № 6. С. 49–53.
12. *Абрамов И.И.* Перспективы использования наноэлектроники, наноматериалов и нанотехнологий в исследовании и медицине мозга человека // Нано- и микросистемная техника. 2016. № 1. С. 49–64.
13. *Абрамов И.И.* Сознание человека, или возможности электроники. Часть I // Нано- и микросистемная техника. 2018. Т. 20. № 5. С. 308–320.
14. *Магрини М.* Мозг. Инструкция пользователя. М.: Изд-во АСТ, 2019. 288 с.
15. *Херкулано-Хузел С.* Мозг. Такой ли он особенный? М.: Изд-во АСТ, 2019. 288 с.
16. *Шепард Г.* Нейробиология: в 2-х т. Т. 1. М.: Мир, 1987. 454 с.
17. *Абрамов И.И.* Сознание человека, или возможности электроники. Часть III // Нано- и микросистемная техника. 2019. Т. 21. № 9. С. 555–574.
18. *Абрамов И.И.* Сознание человека, или возможности электроники. Часть II // Нано- и микросистемная техника. 2018. Т. 20. № 6. С. 368–384.
19. *Абрамов И.И.* Мозг человека — шедевр естественной электроники. Проблемы и перспективы исследования // Материалы Междунар. науч.-техн. конф. “Актуальные проблемы радио- и кинотехнологий”. 2017. Россия. Санкт-Петербург. С. 79–86.
20. *Канеман Д.* Думай медленно... решай быстро. М.: Изд-во АСТ, 2016. 653 с.
21. *Cognition, brain, and consciousness. Introduction to cognitive neuroscience. Second Edition / Ed. by Baars V.J., Gage N.M.. Amsterdam: Elsevier, 2010. 658 p.*
22. *Деан С.* Сознание и мозг. Как мозг кодирует мысли. М.: Карьера Пресс, 2018. 416 с.
23. *Чалмерс Д.* Сознание: В поисках фундаментальной теории. М.: УРСС: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2013. 512 с.
24. *Revonsuo A.* Consciousness. The Science of Subjectivity. Hove and New York: Psychology Press, Taylor & Francis Group. 2010. 324 p.
25. *Абрамов И.И.* Перспективы и проблемы создания сверхума. Часть I // Нано- и микросистемная техника. 2020. № 1. С. 46–56.
26. *Абрамов И.И.* Перспективы и проблемы создания сверхума. Часть II // Нано- и микросистемная техника. 2020. № 2. С. 112–120.
27. *Бостром И.* Искусственный интеллект. Этапы. Угрозы. Стратегии. М.: Манн, Иванов и Фербер, 2016. 496 с.
28. *Майерс Д.* Психология. Мн.: Попурри, 2006. 848 с.
29. *Абрамов И.И.* Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. IV. Квантовомеханические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24–32.
30. *Валиев К.А.* Микроэлектроника: достижения и пути развития. М.: Наука, 1986. 144 с.
31. *Николлс Дж.Г., Мартин А.Р., Валлас Б.Дж., Фукс П.А.* От нейрона к мозгу. М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 672 с.
32. *International technology roadmap for semiconductors 2.0: 2015 Edition. Executive report.*
33. *Абрамов И.И., Дворников О.В.* Проектирование аналоговых микросхем для прецизионных измерительных систем. Мн.: Акад. упр. при Президенте Республики Беларусь, 2006. 286 с.
34. *Метц К.* Создатели искусственного гения: О бунтарях, которые наделили интеллектом Google, Facebook и весь мир. Минск: Попурри, 2021. 320 с.
35. *Каку М.* The future of the mind: the scientific quest to understand, enhance, and empower the mind. New York: Doubleday Publishers, 2014. 400 p.

36. *Seung S.* Connectome: How the brain's wiring makes us who we are. New York: Houghton Mifflin Harcourt. 2012. 384 p.
37. *Дельгадо Х.* Мозг и сознание. М.: Мир, 1971. 264 с.
38. Лечебная электрическая стимуляция мозга и нервов человека / Под общ. ред. Н.П. Бехтеревой. М.: АСТ; СПб.: Сова; Владимир: ВКТ, 2008. 464 с.
39. *Абрамов И.И.* Перспективы использования нанoeлектроники, наноматериалов и нанотехнологий в медицине мозга человека // 25-я Международная Крымская конференция "СВЧ – техника и телекоммуникационные технологии". Материалы конференции. Крым, Севастополь 2015. Т. 1. С. 25–26.
40. *Джуан С.* Странности нашего мозга. М.: РИПОЛ классик. 2011. 352 с.
41. *Фейнман Р.* Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир // Химия и жизнь – XXI век. 2002. № 12. С. 20–26.

РАСЧЕТ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ПЛОТНОСТИ ТОКА ВНУТРИ ТОНКОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СЛОЯ С УЧЕТОМ СКИН-ЭФФЕКТА

© 2023 г. Э. В. Завитаев¹*, О. В. Русаков², Е. П. Чухлеб³

¹Мытищинский филиал Московского государственного

технического университета им. Н.Э. Баумана, Мытищи, 141005 Россия

²Государственный гуманитарно-технологический университет, Орехово-Зуево, 142611 Россия

³Муниципальное учреждение дополнительного образования Центр дополнительного образования “Малая академия наук Импульс”, Черноголовка, 142432 Россия

*E-mail: EduardZavitaev@yandex.ru

Поступила в редакцию 01.08.2022 г.

После доработки 01.08.2022 г.

Принята к публикации 15.09.2022 г.

Впервые решена задача о распределении электрического поля и электрического тока внутри тонкого металлического слоя при наличии скин-эффекта с учетом зеркально-диффузного характера отражения электронов от внутренних поверхностей слоя. Рассмотрены предельные случаи и проведено обсуждение полученных результатов.

Ключевые слова: тонкий слой, скин-эффект, электрическое поле

DOI: 10.31857/S0544126922700193, **EDN:** CXYORE

1. ВВЕДЕНИЕ

Научная проблема экранировки электрического поля внутри малых проводящих объектов, представляет значительный интерес в теоретической физике, микроэлектронике, оптоэлектронике и тонкопленочных технологиях [1–3]. Актуальность изучения данной проблемы обуславливается тем, что классические размерные эффекты, оказывающие существенное влияние на электрические и оптические свойства тонких пленок, проволок и мелких частиц, требуют детального кинетического расчета.

Практическая значимость изучения проблемы экранировки внешнего электрического поля обусловлена широким спектром применения тонких пленок, проволок и мелких частиц в микро- и оптоэлектронике. В частности, это связано с важным прикладным значением тонких, в том числе поликристаллических и металлических пленок, поэтому к их параметрам и свойствам предъявляются довольно высокие требования. Например, тонкие пленки могут использоваться в качестве проводящих, светоотражающих, защитных покрытий.

В современных работах [4–6] впервые построена кинетическая теория высокочастотной электропроводности и постоянной Холла тонкой проводящей пленки с учетом различных коэффициентов зеркальности ее поверхностей. В работе [7]

рассмотрено поведение электронной плазмы в тонкой металлической пластине в переменном электрическом поле. Особенность этих работ заключается в том, что расчеты базируются на применении уравнения Больцмана и с помощью введения соответствующих граничных условий позволяют учесть не только объемное, но и поверхностное рассеяние носителей заряда.

В перечисленных работах не учитывается проявление скин-эффекта из предположения, что толщина слоя мала по сравнению с характерной глубиной скин-слоя. Однако указанное условие может нарушаться, поэтому необходимо последовательное построение теории с учетом проявления данного размерного эффекта.

В настоящей работе моментным методом [8] рассчитана функция распределения, описывающая линейный отклик электронов в однородном металлическом слое на переменное электрическое поле, ориентированное параллельно его поверхности. По найденной функции распределения удается рассчитать зависимость напряженности электрического поля внутри слоя, плотности тока и полного тока через поперечное сечение слоя от “скин-параметра” (отношения толщины слоя к глубине скин-слоя), от отношения толщины слоя к длине свободного пробега электронов и часто-

ты, а также от коэффициентов зеркальности поверхностей металла.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается тонкий металлический слой толщиной b и шириной L , к которому приложено переменное напряжение частоты ω . Электрическое поле параллельно слою и направлено вдоль координатной оси Z , ось X перпендикулярна слою. Напряженность поля \mathbf{E} может быть выражена в зависимости от времени t :

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t). \quad (1)$$

Исходя из того, что неравновесная функция Ферми-Дирака для электронов $f(x, \mathbf{v}) = f_0(\epsilon) + f_1(x, \mathbf{v})$ удовлетворяет уравнению Больцмана [9], имеем:

$$v_x \frac{\partial f_1}{\partial x} + e v_z E \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} - i\omega f_1 = -\frac{f_1}{\tau}, \quad (2)$$

где e – заряд электронов, v_z, v_x – соответствующие проекции вектора их скорости на координатные оси, τ – электронное время релаксации.

Здесь $f_0'(\epsilon) = -\delta(\epsilon - \epsilon_F)$, где δ – дельта-функция Дирака, ϵ_F – энергия Ферми, $\epsilon = mv^2/2$ – кинетическая энергия электронов, v – модуль вектора скорости электронов, m – эффективная масса электронов.

Плотность высокочастотного тока \mathbf{j} , вызванного приложенным напряжением, рассчитывается по формуле:

$$\mathbf{j} = en \langle \mathbf{v} \rangle = en \left[\int f_0 d^3 \mathbf{v} \right]^{-1} \int f_1 \mathbf{v} d^3 \mathbf{v}. \quad (3)$$

Здесь n – концентрация электронов проводимости, определяемая с помощью распределения Ферми-Дирака:

$$n = 2 \left(\frac{m}{h} \right)^3 \int f_0 d^3 \mathbf{v} = 2 \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{4\pi v_F^3}{3},$$

где h – постоянная Планка, v_F – скорость Ферми [10].

В формуле (3) использована стандартная нормировка функции распределения f , при которой плотность электронных состояний равна $2/h^3$.

Однозначное решение поставленной задачи возможно при выборе граничного условия для неиз-

вестной функции f_1 на верхней и нижней границе металлического слоя. В качестве такого принимаем условия зеркально-диффузного отражения электронов от его поверхности:

$$\begin{cases} f_1(v_x, x) = q_1 f_1(-v_x, x), & v_x < 0, \quad x = b, \\ f_1(v_x, x) = q_2 f_1(-v_x, x), & v_x > 0, \quad x = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где q_1 и q_2 – коэффициенты зеркальности (вероятности зеркального отражения): $0 \leq q_i \leq 1$ ($i = 1, 2$).

При $q_i = 0$ получаем условие диффузного отражения электронов проводимости от внутренней поверхности металлического слоя, а при $q_i = 1$ условие чисто зеркального отражения. При значениях $q_i \neq 0$ и $q_i \neq 1$ получаем различные варианты смешанного зеркально-диффузного отражения электронов.

Связь между \mathbf{E} и \mathbf{j} в случае, когда толщина слоя сравнима с длиной свободного пробега электронов в металле Λ (или меньше ее: $b < \Lambda$), оказывается существенно нелокальной. Взяв в уравнении (2) поле \mathbf{E} в виде (1), найдем функцию распределения f_1 как решение этого уравнения. Затем, используя выражение (3), определим плотность тока \mathbf{j} внутри слоя.

Кроме того, для решения поставленной задачи необходимо использовать уравнение для напряженности электрического поля внутри слоя. Такое уравнение получаем из системы уравнений Максвелла без учета тока смещения, который пренебрежимо мал по сравнению с током проводимости:

$$\Delta \mathbf{E} = -i\omega \mu_0 \mathbf{j}. \quad (5)$$

3. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Подставив в уравнение (2) функцию

$$f_1(x, \mathbf{v}) = g(x, \mathbf{v}) \delta(\epsilon - \epsilon_F) \exp(-i\omega t),$$

получим

$$vg + v_x \frac{\partial g}{\partial x} - e v_z E(x) = 0, \quad (6)$$

где $v = 1/\tau - i\omega$ – комплексная частота рассеяния.

Решение уравнения (6) проведем с помощью моментного метода [8]:

$$g = a_1(x) v_z + a_2(x) v_z \text{sign}(v_x). \quad (7)$$

С учетом (7) уравнение (6) принимает вид

$$\begin{aligned} & v(a_1 v_z + a_2 v_z \text{sign}(v_x)) + v_x v_z \frac{\partial a_1}{\partial x} + \\ & + v_x v_z \text{sign}(v_x) \frac{\partial a_2}{\partial x} - e v_z E(x) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Умножим выражение (8) на v_z и проинтегрируем по пространству скоростей:

$$va_1 \int v_z^2 d^3 \mathbf{v} + va_2 \int v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} + \frac{\partial a_1}{\partial x} \int v_x v_z^2 d^3 \mathbf{v} + \frac{\partial a_2}{\partial x} \int v_x v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} - eE(x) \int v_z^2 d^3 \mathbf{v} = 0.$$

Далее вычислим значения всех четырех интегралов и подставим их в последнее равенство

$$\begin{aligned} \int v_z^2 d^3 \mathbf{v} &= \int_0^{v_F} v_{\perp} dv_{\perp} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}}^{\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}} v_z^2 dv_z = \frac{4\pi}{15} v_F^5; \\ \int v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} &= \int_0^{v_F} v_{\perp} \left(\int_{-\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}}^{\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}} v_z^2 dv_z \right) dv_{\perp} \times \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} \text{sign}(\cos\varphi) d\varphi = 0; \\ \int v_x v_z^2 d^3 \mathbf{v} &= \int_0^{v_F} v_{\perp}^2 dv_{\perp} \int_0^{2\pi} \cos\varphi d\varphi \int_{-\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}}^{\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}} v_z^2 dv_z = 0; \\ \int v_x v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} &= \int_0^{v_F} v_{\perp}^2 \left(\int_{-\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}}^{\sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}} v_z^2 dv_z \right) dv_{\perp} \times \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} \cos\varphi \text{sign}(\cos\varphi) d\varphi = \frac{\pi}{12} v_F^6. \end{aligned}$$

В результате приходим к уравнению

$$\frac{4}{5} va_1 + \frac{v_F}{4} \frac{\partial a_2}{\partial x} = \frac{4}{5} eE(x). \quad (9)$$

Умножим выражение (8) на $v_z \text{sign}(v_x)$ и проинтегрируем по пространству скоростей:

$$\begin{aligned} va_1 \int v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} + va_2 \int v_z^2 \text{sign}^2(v_x) d^3 \mathbf{v} + \\ + \frac{\partial a_1}{\partial x} \int v_x v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} + \frac{\partial a_2}{\partial x} \int v_x v_z^2 \text{sign}^2(v_x) d^3 \mathbf{v} - \\ - eE(x) \int v_z^2 \text{sign}(v_x) d^3 \mathbf{v} = 0. \end{aligned}$$

Найдем выражения двух оставшихся интегралов

$$\begin{aligned} \int v_z^2 \text{sign}^2(v_x) d^3 \mathbf{v} &= \int v_z^2 d^3 \mathbf{v} = \frac{4\pi}{15} v_F^5; \\ \int v_x v_z^2 \text{sign}^2(v_x) d^3 \mathbf{v} &= \int v_x v_z^2 d^3 \mathbf{v} = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, приходим к уравнению

$$\frac{4}{5} va_2 + \frac{v_F}{4} \frac{\partial a_1}{\partial x} = 0. \quad (10)$$

Решая совместно систему уравнений (9) и (10), получим

$$\frac{\partial^2 a_1}{\partial x^2} - \lambda^2 a_1 = -\frac{\lambda^2 e}{v} E(x). \quad (11)$$

В уравнении (11) перейдем к безразмерной переменной $\xi = x/b$, $\partial \xi = \partial x/b$:

$$\frac{\partial^2 a_1}{\partial \xi^2} - \lambda^2 b^2 a_1 = -\frac{\lambda^2 e b^2}{v} E(\xi), \quad (12)$$

где $v\tau = 1 - i\omega\tau = 1 - i\Omega v_F \tau/b = 1 - i\Omega/\Delta = \chi/\Delta$, $\lambda = 16v/(5v_F)$, Ω – безразмерная частота электрического поля, Δ – безразмерная обратная длина свободного пробега электронов, $\chi = \Delta - i\Omega$ – безразмерная комплексная частота рассеяния электронов.

Преобразуем уравнение (5) для напряженности электрического поля внутри слоя как

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = -i\omega\mu_0 b^2 j_z.$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = -i\omega\mu_0 b^2 \frac{ne}{m} a_1(\xi),$$

Для полученного уравнения будем использовать граничные условия

$$\begin{cases} E|_{\xi=1} = E_0, \\ E|_{\xi=0} = E_0. \end{cases} \quad (13)$$

Плотность тока внутри слоя определяется соотношением (3), которое после соответствующих преобразований примет вид [8]:

$$j_z = \frac{ne}{m} \exp(-i\omega t) a_1(\xi). \quad (14)$$

Подставим (14) в полученное уравнение

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = -i\omega\mu_0 b^2 \frac{ne}{m} \exp(-i\omega t) a_1(\xi),$$

которое для амплитуды напряженности электрического поля внутри слоя можно записать в виде

или

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = A a_1(\xi), \quad (15)$$

где $A = -i\omega\mu_0 b^2 ne/m = -2ib^2 / (\delta^2 e\tau) = -2i\psi^2 / (e\tau)$. Здесь учтено, что глубина скин-слоя δ связана с объемной статической удельной проводимостью металла $\sigma_0 = ne^2\tau/m$ соотношением $2/\delta^2 = \sigma_0\omega\mu_0$, а “скин-параметр” $\psi = b/\delta$.

Объединим в систему уравнения (12) и (15)

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 a_1}{\partial \xi^2} - \lambda^2 b^2 a_1 = -\frac{\lambda^2 eb^2}{v} E(\xi), \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = A a_1(\xi). \end{cases}$$

Обозначив константы

$$\begin{cases} C = \lambda^2 b^2 = \frac{16^2 v^2 b^2}{5^2 v_F^2} = \frac{16^2}{5^2} \chi^2, \\ B = -\frac{\lambda^2 eb^2}{v} = -\frac{16^2 v^2 b^2 e}{5^2 v_F^2 v} = -\frac{16^2 v b^2 e}{5^2 v_F^2} = -\frac{16^2 \chi eb}{5^2 v_F}, \end{cases} \quad (16)$$

получим

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 a_1}{\partial \xi^2} - C a_1 = B E(\xi), \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = A a_1(\xi). \end{cases} \quad (17)$$

Будем искать решение системы (17) в виде

$$E(\xi) = k a_1(\xi), \quad (18)$$

где k – некоторая константа.

Произведем замену в уравнениях (17), используя (18), тогда система примет следующий вид

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} - (Bk + C) E = 0, \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} = \frac{A}{k} E. \end{cases} \quad (19)$$

Откуда

$$\frac{A}{k} E(\xi) - (Bk + C) E(\xi) = 0 \Rightarrow \frac{A}{k} = Bk + C, \quad (20)$$

или

$$Bk^2 + Ck - A = 0,$$

следовательно

$$k_{1,2} = \frac{-C \pm \sqrt{C^2 + 4BA}}{2B}. \quad (21)$$

Подставляя (21) в первое уравнение системы (19) получим

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} - \left[\frac{C}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{C^2 + 4BA} \right] E = 0,$$

или

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi^2} - \mu_{1,2}^2 E = 0, \quad (22)$$

где $\mu_{1,2}^2 = \frac{C}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{C^2 + 4BA} = \frac{A}{k_{1,2}}$ в силу (20).

Запишем $\mu_{1,2}^2$ в безразмерной форме:

$$\begin{aligned}\mu_{1,2}^2 &= \frac{16^2 \chi^2}{2 \times 5^2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{25i\psi^2 b}{32\chi^3 v_F \tau}} \right) = \\ &= \left| \Delta = \frac{b}{v_F \tau} \right| = \frac{16^2 \chi^2}{2 \times 5^2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{25i\psi^2 \Delta}{32\chi^3}} \right).\end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned}k_{1,2} &= \frac{A}{\mu_{1,2}^2} = \frac{-2i\psi^2 / (e\tau)}{\frac{16^2 \chi^2}{2 \times 5^2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{25i\psi^2 \Delta}{32\chi^3}} \right)} = \\ &= \frac{\chi}{2e\tau\Delta} \left(1 \mp \sqrt{1 + \frac{25i\psi^2 \Delta}{32\chi^3}} \right).\end{aligned}$$

Окончательно получим

$$\begin{aligned}\mu_{1,2} &= \frac{16\chi}{5\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \sqrt{1 + \frac{25i\psi^2 \Delta}{32\chi^3}}}, \\ k_{1,2}^* &= e\tau k_{1,2} = \frac{\chi}{2\Delta} \left(1 \mp \sqrt{1 + \frac{25i\psi^2 \Delta}{32\chi^3}} \right).\end{aligned}\tag{23}$$

Решение дифференциального уравнения (22) можно представить как

$$\begin{aligned}E(\xi) &= C_1 \exp(\mu_1 \xi) + C_2 \exp(-\mu_1 \xi) + \\ &+ C_3 \exp(\mu_2 \xi) + C_4 \exp(-\mu_2 \xi).\end{aligned}\tag{24}$$

Тогда, с учетом (18),

$$\begin{aligned}a_1(\xi) &= \frac{C_1}{k_1} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2}{k_1} \exp(-\mu_1 \xi) + \\ &+ \frac{C_3}{k_2} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4}{k_2} \exp(-\mu_2 \xi).\end{aligned}\tag{25}$$

Из (10), с учетом (25), найдем

$$\begin{aligned}a_2(\xi) &= -\frac{5v_F}{16vb} \frac{\partial a_1(\xi)}{\partial \xi} = -\frac{1}{\lambda b} \frac{\partial a_1(\xi)}{\partial \xi} = -\frac{1}{\sqrt{C}} \frac{\partial a_1(\xi)}{\partial \xi} = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{C}} \left(\frac{\mu_1 C_1}{k_1} \exp(\mu_1 \xi) - \frac{\mu_1 C_2}{k_1} \exp(-\mu_1 \xi) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mu_2 C_3}{k_2} \exp(\mu_2 \xi) - \frac{\mu_2 C_4}{k_2} \exp(-\mu_2 \xi) \right).\end{aligned}\tag{26}$$

Тогда из выражений (7), (25) и (26) следует:

$$\begin{aligned}g(\xi) &= \left(\frac{C_1}{k_1} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2}{k_1} \exp(-\mu_1 \xi) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{C_3}{k_2} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4}{k_2} \exp(-\mu_2 \xi) \right) v_z - \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{C}} \left(\frac{\mu_1 C_1}{k_1} \exp(\mu_1 \xi) - \frac{\mu_1 C_2}{k_1} \exp(-\mu_1 \xi) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mu_2 C_3}{k_2} \exp(\mu_2 \xi) - \frac{\mu_2 C_4}{k_2} \exp(-\mu_2 \xi) \right) v_z \text{sign}(v_x).\end{aligned}\tag{27}$$

Применим граничные условия (13) и (4) для нахождения коэффициентов C_1, C_2, C_3 и C_4 :

$$\begin{cases} E|_{\xi=0} = E_0, & \left\{ g(v_x, \xi) = q_2 g(-v_x, \xi), v_x > 0, \xi = 0, \right. \\ E|_{\xi=1} = E_0, & \left. \left\{ g(v_x, \xi) = q_1 g(-v_x, \xi), v_x < 0, \xi = 1. \right. \right. \end{cases} \quad (28)$$

Тогда из (28), с учетом (24) и (27), получим систему уравнений

$$\begin{cases} C_1 + C_2 + C_3 + C_4 = E_0, & C_1 \exp(\mu_1) + \\ & + C_2 \exp(-\mu_1) + C_3 \exp(\mu_2) + C_4 \exp(-\mu_2) = E_0, \\ \frac{C_1}{k_1} \left[1 - q_2 - \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right] + \frac{C_2}{k_1} \left[1 - q_2 + \right. \\ & \left. + \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right] + \frac{C_3}{k_2} \left[1 - q_2 - \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right] + \\ & + \frac{C_4}{k_2} \left[1 - q_2 + \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right] = 0, & \frac{C_1 e^{\mu_1}}{k_1} \left[1 - q_1 + \right. \\ & \left. + \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right] + \frac{C_2 e^{-\mu_1}}{k_1} \left[1 - q_1 - \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right] + \\ & + \frac{C_3 e^{\mu_2}}{k_2} \left[1 - q_1 + \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right] + \\ & + \frac{C_4 e^{-\mu_2}}{k_2} \left[1 - q_1 - \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right] = 0. \end{cases}$$

С учетом переобозначений

$$\begin{cases} C_1 + C_2 + C_3 + C_4 = E_0, \\ e_1 C_1 + e_2 C_2 + e_3 C_3 + e_4 C_4 = E_0, \\ D_1 C_1 + D_2 C_2 + D_3 C_3 + D_4 C_4 = 0, \\ B_1 C_1 + B_2 C_2 + B_3 C_3 + B_4 C_4 = 0, \end{cases} \quad (29)$$

где обозначенные коэффициенты

$$\begin{cases} e_1 = \exp(\mu_1), e_2 = \exp(-\mu_1), e_3 = \exp(\mu_2), \\ e_4 = \exp(-\mu_2); & D_1 = \frac{1}{k_1} \left[1 - q_2 - \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right], \\ D_2 = \frac{1}{k_1} \left[1 - q_2 + \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right], & D_3 = \frac{1}{k_2} \left[1 - q_2 - \right. \\ & \left. - \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right], & D_4 = \frac{1}{k_2} \left[1 - q_2 + \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_2) \right]; \\ B_1 = \frac{e^{\mu_1}}{k_1} \left[1 - q_1 + \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right], & B_2 = \frac{e^{-\mu_1}}{k_1} \left[1 - q_1 - \right. \\ & \left. - \frac{\mu_1}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right], & B_3 = \frac{e^{\mu_2}}{k_2} \left[1 - q_1 + \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right], \\ B_4 = \frac{e^{-\mu_2}}{k_2} \left[1 - q_1 - \frac{\mu_2}{\sqrt{C}}(1 + q_1) \right], \end{cases}$$

или в безразмерной форме:

$$\left\{ \begin{array}{l} e_1 = \exp(\mu_1), \quad e_2 = \exp(-\mu_1), \\ e_3 = \exp(\mu_2), \quad e_4 = \exp(-\mu_2); \\ D_1^* = \frac{D_1}{e\tau} = \frac{1}{k_1^*} \left[1 - q_2 - \frac{\mu_1}{\sqrt{C}} (1 + q_2) \right], \\ D_2^* = \frac{D_2}{e\tau} = \frac{1}{k_1^*} \left[1 - q_2 + \frac{\mu_1}{\sqrt{C}} (1 + q_2) \right], \\ D_3^* = \frac{D_3}{e\tau} = \frac{1}{k_2^*} \left[1 - q_2 - \frac{\mu_2}{\sqrt{C}} (1 + q_2) \right], \\ D_4^* = \frac{D_4}{e\tau} = \frac{1}{k_2^*} \left[1 - q_2 + \frac{\mu_2}{\sqrt{C}} (1 + q_2) \right]; \\ B_1^* = \frac{B_1}{e\tau} = \frac{e^{\mu_1}}{k_1^*} \left[1 - q_1 + \frac{\mu_1}{\sqrt{C}} (1 + q_1) \right], \\ B_2^* = \frac{B_2}{e\tau} = \frac{e^{-\mu_1}}{k_1^*} \left[1 - q_1 - \frac{\mu_1}{\sqrt{C}} (1 + q_1) \right], \\ B_3^* = \frac{B_3}{e\tau} = \frac{e^{\mu_2}}{k_2^*} \left[1 - q_1 + \frac{\mu_2}{\sqrt{C}} (1 + q_1) \right], \\ B_4^* = \frac{B_4}{e\tau} = \frac{e^{-\mu_2}}{k_2^*} \left[1 - q_1 - \frac{\mu_2}{\sqrt{C}} (1 + q_1) \right], \end{array} \right. \quad (30)$$

$$\text{где } \frac{\mu_1}{\sqrt{C}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{25i\Psi^2\Delta}{32\chi^3}} \right)^{1/2}, \quad \frac{\mu_2}{\sqrt{C}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \times, \quad \left(1 - \sqrt{1 + \frac{25i\Psi^2\Delta}{32\chi^3}} \right)^{1/2}.$$

Проведем решение системы (29) стандартными методами. Для этого представим ее как

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\left(1 - \frac{B_2}{B_1} \right) \frac{B_3 D_1 - B_1 D_3}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + 1 - \frac{B_3}{B_1} \right] C_3 + \\ + \left[\left(1 - \frac{B_2}{B_1} \right) \frac{B_4 D_1 - B_1 D_4}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + 1 - \frac{B_4}{B_1} \right] C_4 = E_0, \\ \left[\frac{B_3 D_1 - B_1 D_3}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + \frac{e_3 B_1 - e_1 B_3}{e_2 B_1 - e_1 B_2} \right] C_3 + \\ + \left[\frac{B_4 D_1 - B_1 D_4}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + \frac{e_4 B_1 - e_1 B_4}{e_2 B_1 - e_1 B_2} \right] C_4 = \frac{E_0}{e_2 - e_1} \frac{B_2}{B_1}, \\ C_2 = \frac{B_3 D_1 - B_1 D_3}{B_1 D_2 - B_2 D_1} C_3 + \frac{B_4 D_1 - B_1 D_4}{B_1 D_2 - B_2 D_1} C_4, \\ C_1 = -\frac{B_2}{B_1} C_2 - \frac{B_3}{B_1} C_3 - \frac{B_4}{B_1} C_4. \end{array} \right.$$

С учетом новых обозначений система примет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 C_3 + A_2 C_4 = E_0, \\ A_3 C_3 + A_4 C_4 = E_0, \\ C_2 = \frac{B_3 D_1 - B_1 D_3}{B_1 D_2 - B_2 D_1} C_3 + \frac{B_4 D_1 - B_1 D_4}{B_1 D_2 - B_2 D_1} C_4, \\ C_1 = -\frac{B_2}{B_1} C_2 - \frac{B_3}{B_1} C_3 - \frac{B_4}{B_1} C_4, \end{array} \right. \quad (31)$$

где обозначенные коэффициенты

$$\begin{cases} A_1 = \left(1 - \frac{B_2}{B_1}\right) \frac{B_3 D_1 - B_1 D_3}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + 1 - \frac{B_3}{B_1}, \\ A_2 = \left(1 - \frac{B_2}{B_1}\right) \frac{B_4 D_1 - B_1 D_4}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + 1 - \frac{B_4}{B_1}, \\ A_3 = \left(e_2 - \frac{e_1 B_2}{B_1}\right) \left[\frac{B_3 D_1 - B_1 D_3}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + \frac{e_3 B_1 - e_1 B_3}{e_2 B_1 - e_1 B_2} \right], \\ A_4 = \left(e_2 - \frac{e_1 B_2}{B_1}\right) \left[\frac{B_4 D_1 - B_1 D_4}{B_1 D_2 - B_2 D_1} + \frac{e_4 B_1 - e_1 B_4}{e_2 B_1 - e_1 B_2} \right]. \end{cases} \quad (32)$$

После решения системы (31) получим следующие выражения для коэффициентов в безразмерной форме:

$$\begin{cases} C_4^* = \frac{C_4}{E_0} = \frac{A_3 - A_1}{A_2 A_3 - A_1 A_4}, \quad C_3^* = \frac{C_3}{E_0} = \frac{A_2 - A_4}{A_2 A_3 - A_1 A_4}, \\ C_2^* = \frac{C_2}{E_0} = \frac{(B_3 D_1 - B_1 D_3)(A_2 - A_4) + (B_4 D_1 - B_1 D_4)(A_3 - A_1)}{(B_1 D_2 - B_2 D_1)(A_2 A_3 - A_1 A_4)}, \\ C_1^* = \frac{C_1}{E_0} = \frac{(B_3 D_1 - B_1 D_3)(A_4 - A_2) + (B_4 D_1 - B_1 D_4)(A_1 - A_3) \frac{B_2}{B_1}}{(B_1 D_2 - B_2 D_1)(A_2 A_3 - A_1 A_4)} - \\ - \left(\frac{A_2 - A_4}{A_2 A_3 - A_1 A_4} \frac{B_3}{B_1} + \frac{A_3 - A_1}{A_2 A_3 - A_1 A_4} \frac{B_4}{B_1} \right). \end{cases} \quad (33)$$

Для данной системы безразмерных коэффициентов выражения (24)–(26) примут вид:

$$E(\xi) = E_0 \left(C_1^* \exp(\mu_1 \xi) + C_2^* \exp(-\mu_1 \xi) + C_3^* \exp(\mu_2 \xi) + C_4^* \exp(-\mu_2 \xi) \right), \quad (34)$$

$$a_1(\xi) = E_0 e \tau \left(\frac{C_1^*}{k_1^*} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2^*}{k_1^*} \exp(-\mu_1 \xi) + \frac{C_3^*}{k_2^*} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4^*}{k_2^*} \exp(-\mu_2 \xi) \right), \quad (35)$$

$$a_2(\xi) = -\frac{E_0 e \tau}{\sqrt{C}} \left(\frac{\mu_1 C_1^*}{k_1^*} e^{\mu_1 \xi} - \frac{\mu_1 C_2^*}{k_1^*} e^{-\mu_1 \xi} + \frac{\mu_2 C_3^*}{k_2^*} e^{\mu_2 \xi} - \frac{\mu_2 C_4^*}{k_2^*} e^{-\mu_2 \xi} \right), \quad (36)$$

где коэффициент $C = \frac{16^2}{5^2} \chi^2$ (см. (16)).

Таким образом, система безразмерных коэффициентов (33) с учетом сделанных обозначений (23), (30) и (32), полностью определяет выражения (34)–(36), а значит, полностью определяет отклонение $f_1(x, \nu)$ функции распределения от

равновесной в случае зеркально-диффузного отражения электронов на верхней и нижней границе слоя с учетом скин-эффекта.

4. РАСЧЕТ НАПРЯЖЕННОСТИ И ТОКА

Плотность тока внутри слоя определяется соотношением (14), с учетом (35) формула примет вид:

$$j_z = \frac{ne^2\tau E_0 e^{-i\omega t}}{m} \left(\frac{C_1^*}{k_1^*} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2^*}{k_1^*} \exp(-\mu_1 \xi) + \frac{C_3^*}{k_2^*} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4^*}{k_2^*} \exp(-\mu_2 \xi) \right).$$

Выражение для амплитуды плотности тока в слое можно записать следующим образом:

$$j_z = j_{0z} \left(\frac{C_1^*}{k_1^*} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2^*}{k_1^*} \exp(-\mu_1 \xi) + \frac{C_3^*}{k_2^*} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4^*}{k_2^*} \exp(-\mu_2 \xi) \right), \quad (37)$$

здесь учтено, что $j_{0z} = \sigma_0 E_0$, $\sigma_0 = ne^2\tau/m$ – объемная статическая удельная проводимость металла.

Для удобства численных расчетов введем безразмерную величину амплитуды плотности тока

$$J^*(\Delta, \Omega, \xi, q_1, q_2, \Psi) = \frac{C_1^*}{k_1^*} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2^*}{k_1^*} \exp(-\mu_1 \xi) + \frac{C_3^*}{k_2^*} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4^*}{k_2^*} \exp(-\mu_2 \xi). \quad (38)$$

Проинтегрировав выражение (37), определяем полный ток, текущий через поперечное сечение тонкого металлического слоя:

$$\begin{aligned} I &= \int_0^b j_z dS = \int_0^b j_z L dx = Lb \int_0^1 j_z d\xi = \\ &= j_{0z} Lb \int_0^1 \left(\frac{C_1^*}{k_1^*} \exp(\mu_1 \xi) + \frac{C_2^*}{k_1^*} \exp(-\mu_1 \xi) + \frac{C_3^*}{k_2^*} \exp(\mu_2 \xi) + \frac{C_4^*}{k_2^*} \exp(-\mu_2 \xi) \right) d\xi = j_{0z} Lb \left(\frac{C_1^*}{\mu_1 k_1^*} \times \right. \\ &\times \exp(\mu_1 \xi) - \frac{C_2^*}{\mu_1 k_1^*} \exp(-\mu_1 \xi) + \frac{C_3^*}{\mu_2 k_2^*} \exp(\mu_2 \xi) - \left. \frac{C_4^*}{\mu_2 k_2^*} \exp(-\mu_2 \xi) \right) \Big|_0^1 = I_{0z} \left(\frac{C_1^*}{\mu_1 k_1^*} (e^{\mu_1} - 1) - \right. \\ &\left. - \frac{C_2^*}{\mu_1 k_1^*} (e^{-\mu_1} - 1) + \frac{C_3^*}{\mu_2 k_2^*} (e^{\mu_2} - 1) - \frac{C_4^*}{\mu_2 k_2^*} (e^{-\mu_2} - 1) \right), \quad (39) \end{aligned}$$

где $I_{0z} = j_{0z} Lb$.

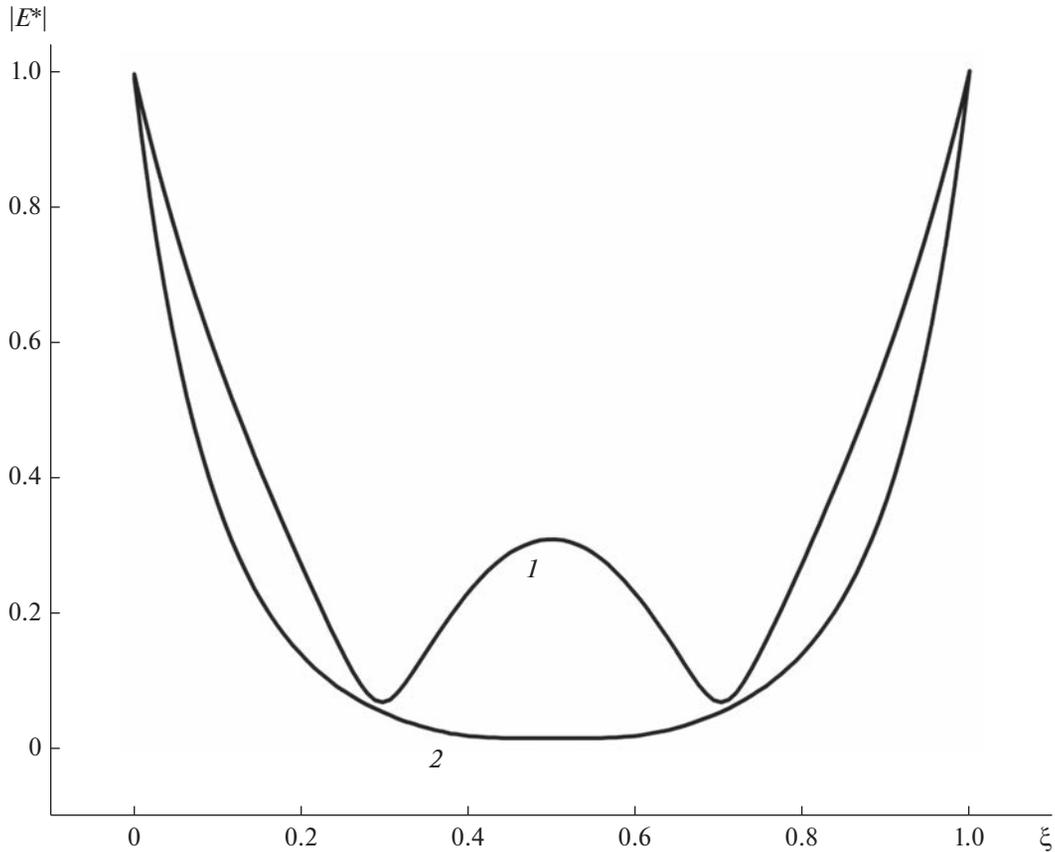


Рис. 1. Зависимость модуля амплитуды безразмерной напряженности электрического поля от безразмерной координаты внутри слоя ξ . 1 – $\psi = 10, \Delta = 1, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 2 – $\psi = 10, \Delta = 10, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 1$.

Также введем безразмерную величину полного тока и безразмерную величину напряженности:

$$I^*(\Delta, \Omega, q_1, q_2, \psi) = \frac{C_1^*}{\mu_1 k_1^*} (e^{\mu_1} - 1) - \frac{C_2^*}{\mu_1 k_1^*} (e^{-\mu_1} - 1) + \frac{C_3^*}{\mu_2 k_2^*} (e^{\mu_2} - 1) - \frac{C_4^*}{\mu_2 k_2^*} (e^{-\mu_2} - 1), \quad (40)$$

$$E^*(\Delta, \Omega, \xi, q_1, q_2, \psi) = C_1^* e^{\mu_1 \xi} + C_2^* e^{-\mu_1 \xi} + C_3^* e^{\mu_2 \xi} + C_4^* e^{-\mu_2 \xi}. \quad (41)$$

В случае отсутствия скин-эффекта ($\psi = 0$) из (37) с помощью предельного перехода имеем

$$j_z = \frac{j_{0z} \Delta}{\chi} \left(1 + U_1^* \exp\left(\frac{16\chi}{5} \xi\right) + U_2^* \exp\left(-\frac{16\chi}{5} \xi\right) \right), \quad (42)$$

где

$$U_1^* = \frac{(q_1 - 1) + q_1 (q_2 - 1) \exp\left(-\frac{16\chi}{5}\right)}{2 \exp\left(\frac{16\chi}{5}\right) - 2q_1 q_2 \exp\left(-\frac{16\chi}{5}\right)},$$

$$U_2^* = \frac{q_2 (q_1 - 1) + (q_2 - 1) \exp\left(\frac{16\chi}{5}\right)}{2 \exp\left(\frac{16\chi}{5}\right) - 2q_1 q_2 \exp\left(-\frac{16\chi}{5}\right)}.$$

Заметим, что результат (42), полученный после применения формулы (37) в случае отсутствия скин-эффекта, когда “скин-параметр” $\psi = 0$, совпадает с результатами работы [8] в случае отсутствия поправки к закону Видемана-Франца.

При неограниченном увеличении толщины слоя ($\Delta \gg 1$) применение формул (34) и (37) позволяет

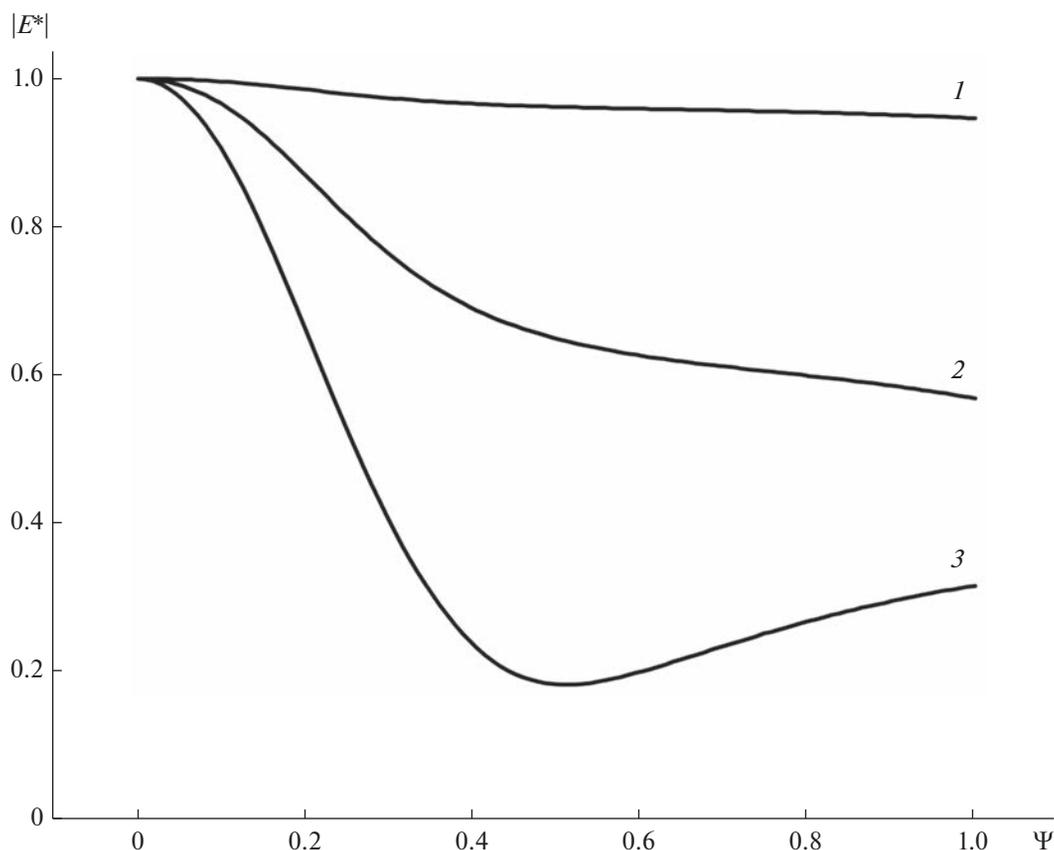


Рис. 2. Зависимость модуля амплитуды безразмерной напряженности электрического поля от безразмерного “скин-параметра” ψ . 1 – $\xi = 1$, $\Delta = 1$, $\Omega = 1$, $q_1 = q_2 = 0.1$, 2 – $\xi = 0.9$, $\Delta = 1$, $\Omega = 1$, $q_1 = q_2 = 0.1$, 3 – $\xi = 0.5$, $\Delta = 1$, $\Omega = 1$, $q_1 = q_2 = 0.1$.

получить результаты соответствующие классическому скин-эффекту в макроскопическом слое.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 1 представлена зависимость модуля амплитуды безразмерной напряженности электрического поля $|E^*(\xi)|$ от безразмерной координаты внутри слоя ξ . Обе кривые построены для случая сильного скин-эффекта ($\psi = 10$). Отличие состоит в том, что кривая 1 соответствует слою, у которого толщина b равна длине свободного пробега электронов Λ ($\Delta = 1$), а кривая 2 соответствует макроскопическому слою ($\Delta \gg 1$). Как видно из рисунка это обстоятельство заметно сказывается на величине модуля амплитуды безразмерной напряженности электрического поля $|E^*(\xi)|$. Практически во всем объеме слоя ход кривой 1 носит некоторый осциллирующий характер, что связано с прохождением величины $|E^*(\xi)|$ через квазирезонансы – области, где вклад от различных траекторий электронов с одинаковыми фазами складывается, а с разными – уничтожается. Анализ хода кривой 2 напротив показывает, что в случае сильного скин-эффекта электрическое поле отсутствует практически во всем объеме макроско-

пического слоя, за исключением небольшого поверхностного слоя (назовем его слоем Кнудсена), глубина которого будет порядка длины свободного пробега электронов Λ . По мере роста размера слоя (увеличения Δ) осцилляции на кривой 1 будут сглаживаться. Это произойдет за счет увеличения объемного рассеяния электронов и преобладания его над поверхностным. При больших значениях безразмерной обратной длины свободного пробега электронов Δ ($\Delta \gg 1$) кривые 1 и 2 будут практически совпадать.

С помощью рис. 2, на котором представлена зависимость модуля амплитуды безразмерной напряженности электрического поля $|E^*(\psi)|$ от безразмерного “скин-параметра” ψ , можно выявить особенности поведения электрического поля, когда проявляется его экранировка. Кривые на рисунке построены при различных значениях безразмерной координаты внутри слоя ξ . Из анализа хода кривых следует, что наличие скин-эффекта приводит к заметному изменению электрического поля в середине слоя по указанным выше причинам (см. описание рис. 1).

На рис. 3 приведены графики зависимости модуля амплитуды безразмерной плотности тока

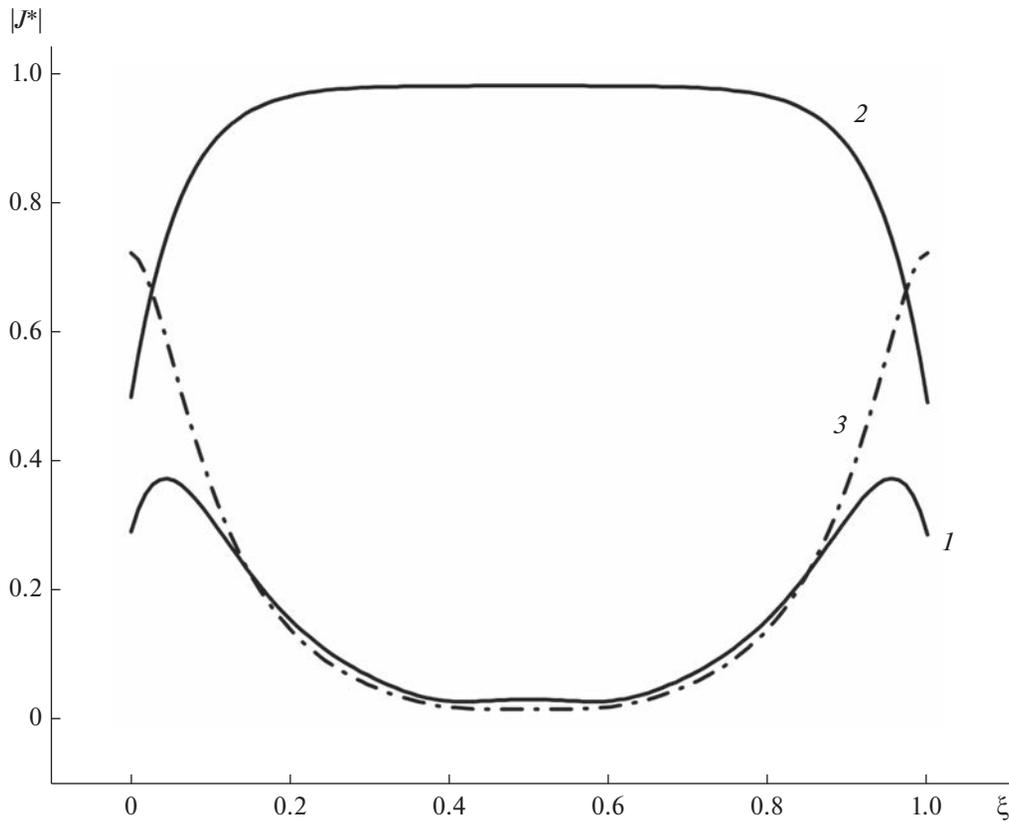


Рис. 3. Зависимость модуля амплитуды безразмерной плотности тока от безразмерной координаты внутри слоя ξ . 1 – $\psi = 10, \Delta = 5, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 2 – $\psi = 0, \Delta = 5, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 3 – $\psi = 10, \Delta = 10, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 1$.

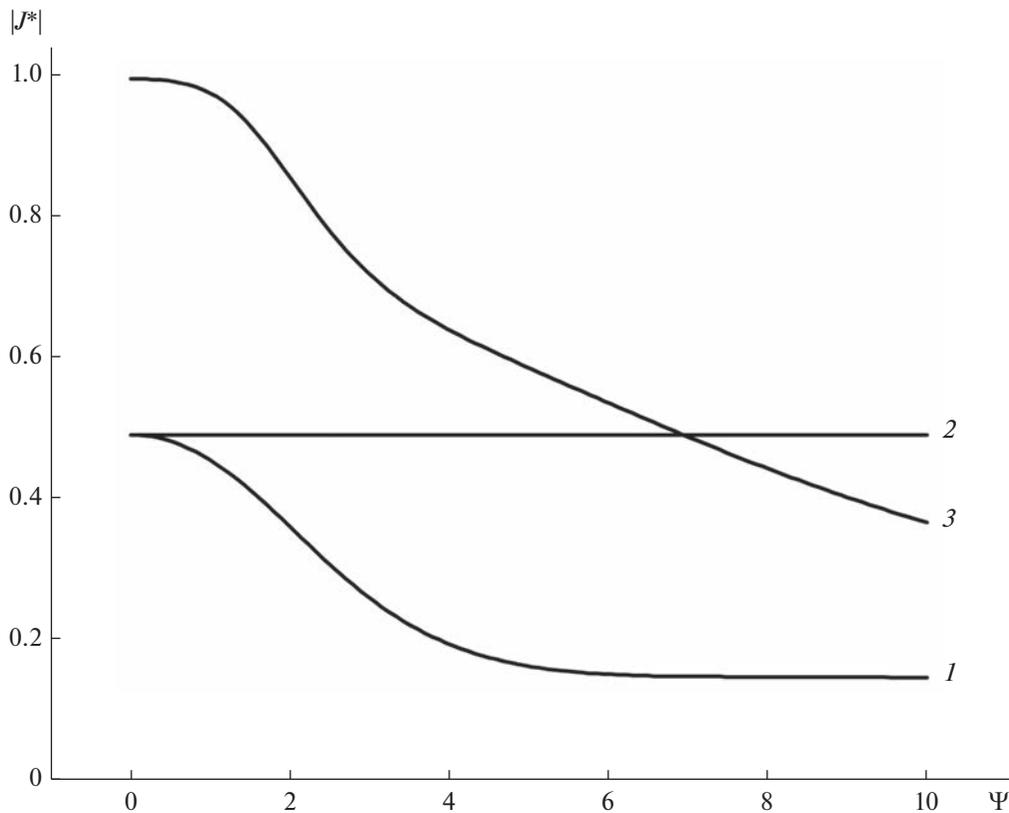


Рис. 4. Зависимость модуля амплитуды безразмерной плотности тока от безразмерного “скин-параметра” ψ . 1 – $\xi = 0.1, \Delta = 1, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 2 – $\xi = 0.1, \Delta = 1, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 3 – $\xi = 0.1, \Delta = 10, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 1$.

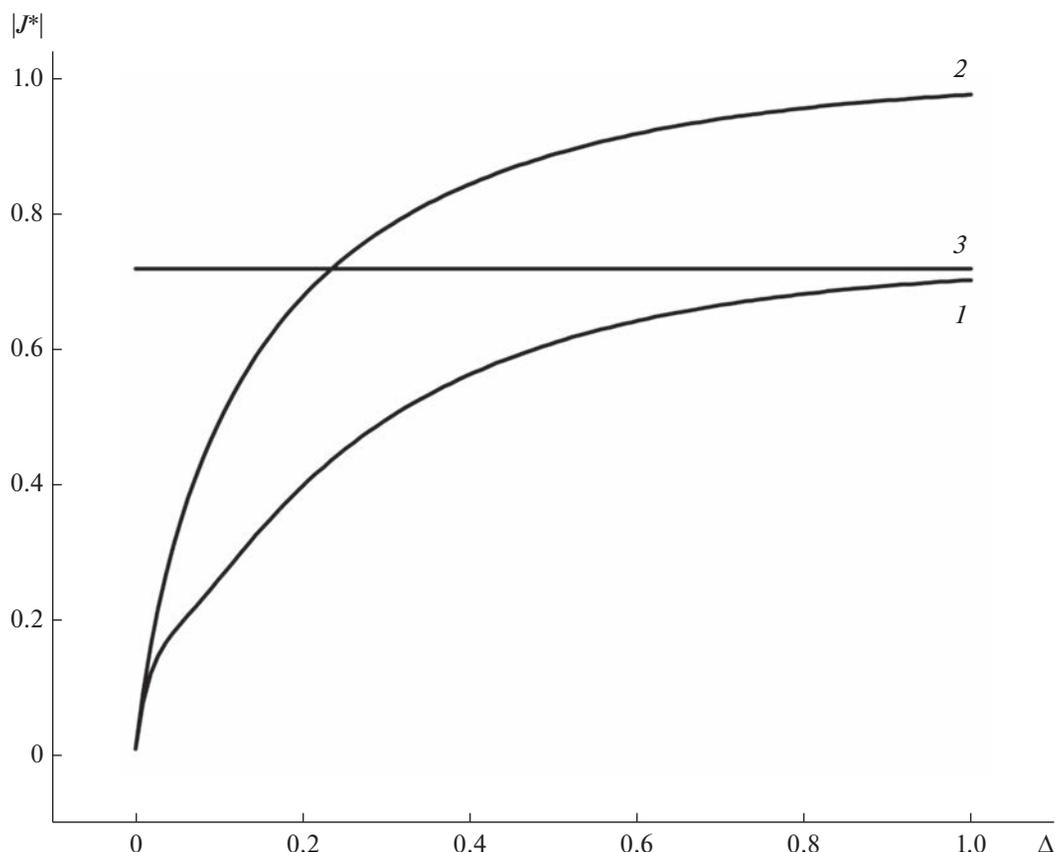


Рис. 5. Зависимость модуля амплитуды безразмерной плотности тока от безразмерной обратной величины длины свободного пробега электронов Δ . 1 – $\psi = 3, \xi = 0.1, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 2 – $\psi = 0, \xi = 0.1, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 0$, 3 – $\psi = 3, \xi = 0.1, \Omega = 1, q_1 = q_2 = 1$.

$|J^*(\xi)|$ от безразмерной координаты внутри слоя ξ . Кривые 1 и 3 построены для случая сильного скин-эффекта ($\psi = 10$). Кривая 2 построена без учета скин-эффекта ($\psi = 0$). Наиболее интересно поведение хода этих кривых в слое Кнудсена вблизи поверхностей слоя. Анализ хода кривых 1 и 2 (результаты 1 и 2 получены с помощью кинетического подхода) показывает, что в приповерхностном слое имеет место некоторое увеличение плотности тока за счет поверхностного рассеяния электронов. Причем следует отметить наличие на кривой 1 максимума плотности тока. Анализ хода кривой 3, которая соответствует классическому скин-эффекту, показывает монотонное убывание безразмерной плотности тока $|J^*(\xi)|$ в слое Кнудсена.

На рис. 4 отображена зависимость модуля амплитуды безразмерной плотности тока $|J^*(\psi)|$ внутри слоя от безразмерного “скин-параметра” ψ . При малых значениях “скин-параметра” ψ ($\psi \ll 1$) графики 1 и 2, полученные с помощью кинетического подхода, совпадают, т.к. в этом случае скин-эффект практически не проявляется. По мере роста “скин-параметра” ψ кривая 1 асимптотически приближается к кривой 3, соответствующей классическому скин-эффекту в макроскопическом слое, когда $\Delta \gg 1$.

На рис. 5 показана зависимость модуля амплитуды безразмерной плотности тока $|J^*(\Delta)|$ внутри слоя от безразмерной обратной длины свободного пробега электронов Δ . При малых значениях толщины слоя ($\Delta \ll 1$) кривые 1 и 2, полученные с помощью кинетического подхода, выходят из нуля. Плотность тока в этом случае крайне мала, т.к. ток в основном обусловлен поверхностным рассеянием электронов на границе слоя, а объемное рассеяние электронов практически отсутствует. Если толщина слоя достаточно большая ($\Delta \gg 1$), то имеет место классический скин-эффект. При этом кривая 1 асимптотически приближается к кривой 3, построенной для макроскопического слоя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2016. 656 с.
2. Моисеев И.О., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. Влияние скин-эффекта на поглощение электромагнитного излучения металлической частицей // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 1. С. 87–92.

3. *Завитаев Э.В., Русаков О.В., Юшканов А.А.* Скин-эффект в тонкой цилиндрической проволоке из металла // ФТТ. 2012. Т. 54. Вып. 6. С. 1041–1047.
4. *Савенко О.В.* Расчет высокочастотной электропроводности и постоянной холла для тонкой металлической пленки // Вестник МГОУ. Серия: Физика-Математика. 2016. № 4. С. 43–55.
5. *Кузнецова И.А., Романов Д.Н., Савенко О.В., Юшканов А.А.* Расчет высокочастотной электропроводности тонкого полупроводникового слоя в случае различных коэффициентов зеркальности его поверхностей // Микроэлектроника. 2017. Т. 46. № 4. С. 275–283.
6. *Кузнецова И.А., Савенко О.В., Юшканов А.А.* Влияние граничных условий на электрические и гальваноманнитные свойства тонкой металлической пленки // Поверхность. Рентген-, синхротрон. и нейтрон. исслед. 2017. № 11. С. 52–60.
7. *Березкина С.В., Кузнецова И.А., Юшканов А.А.* Поведение электронной плазмы в тонкой металлической пластине в переменном электрическом поле // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 5. С. 1–7.
8. *Завитаев Э.В., Русаков О.В., Чухлеб Е.П.* Электрическая проводимость тонкого металлического слоя с учетом отклонения от закона Видемана–Франца // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2022. № 8. С. 36–42.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика, т. 10. Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2007. 536 с.
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Часть 1. М.: Физматлит, 2010. 616 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 621.382550.34.013.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ СУПЕРЪЯЧЕЙКИ И ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В TlInTe_2

© 2023 г. М. М. Асадов^{1, 2, *}, С. Н. Мустафаева³, С. С. Гусейнова³, В. Ф. Лукичев^{4, **}¹Институт катализа и неорганической химии им. М.Ф. Нагиева, Министерство науки и образования Азербайджана, пр. Г. Джавида, 113, Баку, AZ-1143 Азербайджан²Научно-исследовательский институт “Геотехнологические проблемы нефти, газа и химии” АГУНП, пр. Азадлыг, 20, Баку, AZ-1010 Азербайджан³Институт физики, Министерство науки и образования Азербайджана, пр. Г. Джавида, 13, Баку, AZ-1143 Азербайджан⁴Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН, Нахимовский просп., 36, корп. 1, Москва, 117218 Россия

*E-mail: mirasadov@gmail.com

**E-mail: lukichev@ftian.ru

Поступила в редакцию 19.09.2022 г.

После доработки 21.09.2022 г.

Принята к публикации 22.09.2022 г.

Локальное окружение атомов в полупроводниковом соединении TlInTe_2 с тетрагональной сингонией исследовано методом теории функционала плотности (DFT). Введение точечного дефекта (вакансий индия) в решетку TlInTe_2 моделировалось с использованием суперъячеек. DFT-моделирование электронных свойств (полные и локальные парциальные плотности состояний электронов (PDOS)) проводилось как для примитивной ячейки TlInTe_2 (16 атомов на элементарную ячейку), так и для дефектной суперъячейки $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ (где V_{In} – вакансия In) состоящей из 32 атомов. DFT-GGA расчеты зонной структуры $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ показали, что ширина запрещенной зоны (E_g) составляет $E_g = 1.21$ эВ. Это значение значительно отличается от экспериментального значения. Для корректировки взаимодействия частиц в решетке использовали модель Хаббарда. Рассчитанная DFT-GGA + U (U – потенциал Хаббарда) запрещенная зона $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ составляет $E_g = 0.97$ эВ. Для суперъячейки $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ вычислены энергии образования вакансии, химический потенциал индия, а также стандартная энтальпия образования TlInTe_2 . При объяснении влияния различных факторов на явления переноса в TlInTe_2 , их теплопроводность и электропроводность использованы как DFT-расчетные, так и экспериментальные данные. С учетом экспериментальных данных для кристаллов p - TlInTe_2 установлен механизм проводимости в направлении структурных цепочек (c -оси кристалла). В интервале температур $T = 148\text{--}430$ К оценили величину запрещенной зоны $E_g = 0.94$ эВ и энергию активации примесной проводимости $E_i = 0.1$ эВ (при 210–300 К). При температурах $T \leq 210$ К в кристаллах p - TlInTe_2 имеет место прыжковая проводимость на постоянном токе. С учетом этого для p - TlInTe_2 вычислены следующие физические параметры: плотность состояний, локализованных вблизи уровня Ферми, их энергетический разброс и среднее расстояние прыжков.

Ключевые слова: моделирование, *ab-initio* расчет, электронная структура, TlInTe_2 , точечный дефект, In-вакансия, плотность состояний электронов, перенос заряда

DOI: 10.31857/S0544126922700181, EDN: CXXQYI

1. ВВЕДЕНИЕ

Разработка новых принципов работы и полупроводниковых материалов, повышающих функциональность, быстродействие и компактность электронных устройств, является актуальной задачей. В этом плане, повышение эффективности термоэлектрических материалов является важной задачей. Расчет электронной зонной структуры

материала позволяет корректировать его состав и свойства. Другими словами, теоретическими и экспериментальными исследованиями зависимости состав-свойства-кристаллическая структура-электронная структура можно улучшить термоэлектрические характеристики материалов. Технология изготовления, в частности, полупроводниковых термоэлектрических устройств развивается таким образом.

Связь между тепловыми и электрическими процессами в полупроводниках вызывает термоэлектрические явления. В этом случае важным является выбор современных термоэлектрических материалов. Одним из таких материалов является полупроводник TlInTe_2 [1–4]. В TlInTe_2 ширина запрещенной зоны меняется в зависимости от стехиометрического состава. Наш интерес к материалам на основе TlInTe_2 стимулируется изучением электронных свойств. Изменение свойств в кристаллах TlInTe_2 может произойти, в частности, при дефектообразовании, замещении как катионов, так и анионов.

Структурные и электронные свойства кристаллов TlInTe_2 исследованы экспериментально [1, 2] и теоретически [3, 4]. Однако влияние состава на дефектную зонную структуру TlInTe_2 не изучено, а это необходимо для изучения характеристик материала с заданными свойствами. Появление дефектов в решетке кристаллов приводит к изменениям также электронной структуры. Кроме того, концентрация адсорбированных атомов на поверхности и скорость их миграции оказывают влияние на концентрацию вакансий в кристалле.

TlInTe_2 имеет многодолинную зонную структуру [3, 4]. Такая структура способствует высоким коэффициентам Зеебека и термоэлектрической добротности TlInTe_2 . Кроме того из-за слабой связи катионов Tl^+ с другими ионами и сильного фононного ангармонизма структуры TlInTe_2 имеет низкую решеточную теплопроводность ($k_1 = 0.37 \text{ В/(м К)}$) при комнатной температуре. Это значение теплопроводности в несколько раз меньше по сравнению со значением k_1 для термоэлектрических материалов Bi_2Te_3 (1.4 В/(м К)) и PbTe (1.95 В/(м К)). Из-за низкого значения k_1 термоэлектрическая добротность материала TlInTe_2 при комнатной температуре сильно повышается и может достигать 1.78 и 1.84 для p - и n -типа TlInTe_2 соответственно.

В этой работе мы исследуем два объекта: суперъячейку TlInTe_2 с точечными дефектами (вакансии индия V_{In}) и кристаллы TlInTe_2 . Аналогично бинарному соединению TlSe (тетрагональная сингония, пространственная группа (пр. гр.) $D_{4h}^{18} - I4/mcm$; $a = 8.02 \text{ \AA}$ и $c = 7.00 \text{ \AA}$, $Z = 4$. $T = 300 \text{ К}$) тройное соединение TlInTe_2 также имеет объемно-центрированную тетрагональную структуру [5].

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

В рамках теории функционала плотности (DFT) проведены расчеты зонной электронной структуры с дефектом типа вакансии суперъячеек TlInTe_2 . Расчеты проводили с помощью программного пакета

АТК [6–8]. Для расчетов использовали функционалы, учитывающие как локальный, так и нелокальные обмены частиц в кристалле TlInTe_2 . Использовали электронные конфигурации нейтральных атомов в их основных состояниях: $\text{Tl} - [\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$, $\text{In} - [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^1$, $\text{Te} - [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^4$. DFT-расчеты проводили как для элементарной ячейки TlInTe_2 (16 атомов на элементарную ячейку), так и для суперъячейки $\text{TlInTe}_2-V_{\text{In}}$ (суперъячейка из 32 атомов).

Метод DFT реализовывали в рамках приближения обобщенного градиента (Generalized Gradient Approximation-GGA) [6–8]. Электронно-ионные взаимодействия учитывались через псевдопотенциалы с использованием обменно-корреляционного функционала PBE [9]. Функционал GGA по сравнению с приближением локальной плотности (LDA), согласно предварительным расчетам, позволяет адекватно описывать свойства TlInTe_2 при образовании вакансий индия V_{In} .

DFT-расчеты $\text{TlInTe}_2-V_{\text{In}}$ проводились в следующей последовательности. Элементарную кристаллическую ячейку TlInTe_2 релаксировали и оптимизировали с допусками к силе и напряжению 0.01 и 0.01 эВ/Å³ соответственно. Принимали, что при релаксации ячейки в стационарной точке на поверхности потенциальной энергии силы, действующие на атомы, равны нулю. Оптимизация геометрии и расчеты полной энергии по зоне Бриллюэна TlInTe_2 с тетрагональной сингонией (рис. 1) проводились в суперъячейке $\text{TlInTe}_2-V_{\text{In}}$ (32 атома на элементарную ячейку). Интегрирование в обратном пространстве и вычисления электронной плотности проведены по схеме Монкхорста–Пака [10] с сеткой $2 \times 2 \times 2$ k -точек зоны Бриллюэна. Рассчитаны зонная структура (BS), общая и локальные парциальные плотности состояний (PDOS) для всех атомов в элементарной ячейке TlInTe_2 . Кинетическая энергия отсечки составляла 500 эВ.

Оптимизацию считали завершенной, когда вычисленные энергетические градиенты были ниже порогового значения потенциальной энергии. Таким образом, расчеты структурных и энергетических характеристик выполняли для оптимизированной структуры TlInTe_2 , соответствующей минимуму энергии.

Величину ширины запрещенной зоны (E_g) суперъячейки $\text{TlInTe}_2-V_{\text{In}}$ корректировали с использованием функционала GGA + U (U – параметр кулоновского взаимодействия) [11–13]. В этом случае учитывали вклад d -состояний атомов Tl, In и Te, который повышает силу ковалентной связи в энергетическом зазоре E_g .

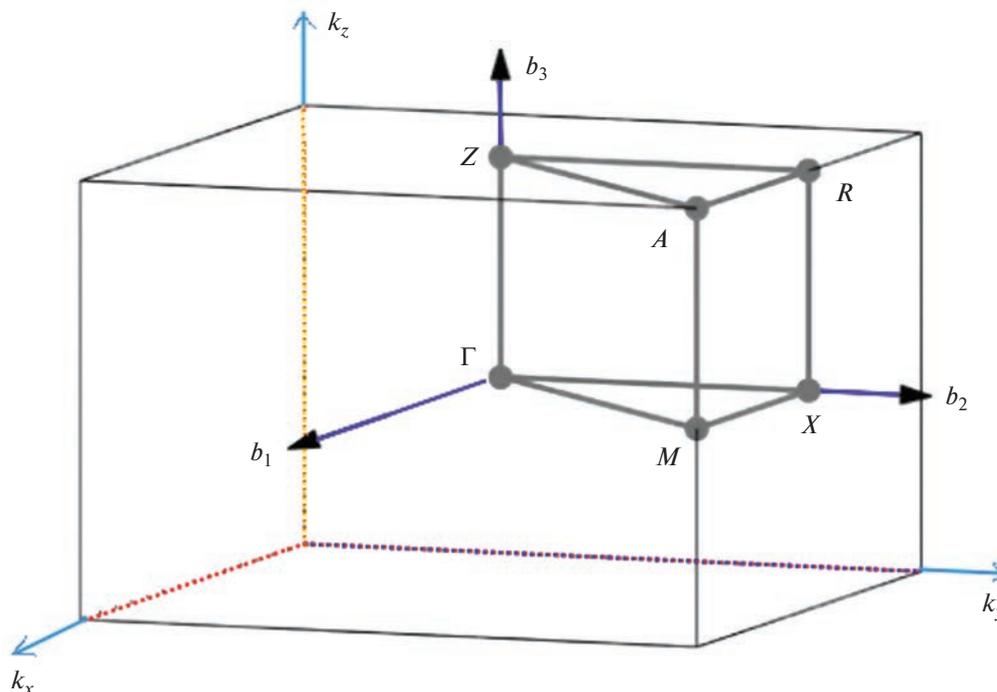


Рис. 1. Первая зона Бриллюэна кристалла TlInTe_2 с тетрагональной сингонией.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Модели парного взаимодействия

В модели ионного кристалла, последний состоит из положительных и отрицательных ионов. За счет кулоновского притяжения электрических зарядов происходит их объединение. Также существуют другие силы притяжения атомов, которые имеют дисперсионную природу. В квантовой механике электроны в атоме находятся в непрерывном движении, и в заданный момент система “электрон-остов” представляет собой мгновенный диполь.

В ионном кристалле дисперсионные силы притяжения (Ван-дер-Ваальсово взаимодействие) возникают за счет взаимодействия диполей между атомами. Эти силы спадают с увеличением расстояния между частицами. В модели Борна–Майера [14] ионное парное взаимодействие представляется в виде: $V_{ij}(R_{ij}) = Z_i Z_j / R_{ij} + \lambda_{ij} \exp(-R_{ij} / \rho_{ij}) - c_{ij} / R_{ij}^6$, где $Z = ze$ – заряд иона, λ – предэкспоненциальный множитель перед потенциалом отталкивания, λ_{ij} – силовой параметр Ван-дер-Ваальсова взаимодействия, ρ_{ij} – эмпирический параметр жесткости, c_{ij} – параметр диполь-дипольного взаимодействия. В молекуле заряды взаимодействуют с силой $z^2(e^2/R^2)$, где z – заряд иона, e – заряд электрона, R – расстояние между центрами двух (и/или трех) сферических ионов. Суммарное кулоновское отталкивание иона оказывается меньше

суммарного кулоновского притяжения в ионном кристалле. Модель ионного кристалла позволяет оценить энергию решетки, упругие и термические свойства соединений.

Из-за частично ковалентного характера химических связей в полупроводниках (например, TlInTe_2 : $\text{Tl}^+ \text{In}^{3+} \text{Te}_2^{2-}$) использование потенциала в форме Борна–Майера не корректно. Вклад ковалентной связи в электростатических взаимодействиях учитывается различными способами. Например, вместо формальных зарядов z_i используют эмпирические эффективные атомные заряды fz_i . Здесь степень ионного вклада связи f меняется от 0 (чисто ковалентная связь) до 1 (чисто ионная связь): $V_{ij}(R_{ij}, f) = f^2 Z_i Z_j / R_{ij} + \lambda_{ij} \exp(-R_{ij} / \rho_{ij}) - c_{ij} / R_{ij}^6$. Такой подход понижает величину электростатических взаимодействий. С целью увеличения жесткости связи на коротких расстояниях в металлических системах часто используется потенциал Морзе (V_M): $V_M = D_{ij} \{1 - \exp[-\sigma_{ij}(R_{ij}^0 - R_{ij})]\}^2 - D_{ij}$, где R_{ij}^0 – сумма ковалентных радиусов i и j при минимуме потенциала, D_{ij} – энергия диссоциации ковалентной связи $i - j$, σ_{ij} – параметр мягкости потенциала Морзе ($\sigma_{ij} \cong 1/2\rho_{ij}$).

С учетом вышеуказанных моделей полный парный потенциал в ионно-ковалентном приближении можно записать в вид:

$$V_{ij}(R_{ij}, f) = f^2 \left[\frac{Z_i Z_j}{R_{ij}} + \lambda_{ij} \exp\left(-\frac{R_{ij}}{\rho_{ij}}\right) \right] - (1 - f^2) D_{ij} \left\{ \exp\left[2\sigma_{ij}(R_{ij}^0 - R_{ij})\right] - 2\exp\left[\sigma_{ij}(R_{ij}^0 - R_{ij})\right] - c_{ij}/R_{ij}^6 \right\}$$

Химические связи в полупроводниковых соединениях не могут быть описаны только в ионном или только в ковалентном приближении. В халькогеидах химические связи представляют сумму между ионным и ковалентным типами связи.

Кристаллические структуры соединений TlMX_2 ($M = \text{In, Ga}$; $X = \text{S, Se, Te}$) [11, 15–19] можно описать как чередующиеся атомные цепочки и/или слои с разной электронной плотностью. Вследствие цепочечно-слоистой структуры такие материалы обладают уникальными механическими, магнитными, оптическими и термоэлектрическими свойствами. Объяснение физических свойств таких анизотропных кристаллических структур требует понимания природы химической связи и заполнения орбит в электронной структуре. Расстояния и силы связи между частицами в различных направлениях в кристаллах TlMX_2 неодинаковы, что приводит к анизотропии.

Нарушение стехиометрического соотношения между компонентами, например, в TlInTe_2 может приводить к формированию точечных дефектов и изменению свойств. TlInTe_2 с нейтральными вакансиями является примером материала с дефектной структурой.

Исходя из ионной формулы TlInTe_2 ($\text{Tl}^+ \text{In}^{3+} \text{Te}_2^{2-}$) примем, что каждый катион In^{3+} образует четыре ковалентные связи с четырьмя ближайшими анионами Te_2^{2-} . За счет этого в структуре TlInTe_2 вдоль c -оси кристалла формируются “цепочки” типа In-Te. Эти цепочки распространяются вдоль тетрагональной c -оси кристалла TlInTe_2 , и они связываются между собой катионами Tl^+ . В элементарной ячейке TlInTe_2 каждый катион Tl^+ окружен восемью анионами Te_2^{2-} и при этом кристаллическая решетка искажается.

3.1.1. Суперъячейка

Для изучения особенностей электронных свойств и зонной структуры, в частности, полупроводниковых соединений типа TlMX_2 применяются неэмпирические квантовые расчеты [19]. В этом случае из экспериментальных данных используются только заряды ядер атомов. Условные вклады (ионная, ковалентная, донорно-акцепторная, металлическая связь) в химическую связь не используются. Рассчитывают распределение электронной плотности в поле нескольких ядер.

Экспериментальные исследования электронной структуры нестехиометрического соединения TlInTe_2 отсутствуют.

Рассмотрим результаты моделирования структуры $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ в 32-атомной суперъячейке. Кристаллическую решетку (рис. 2 [4]) предварительно релаксировали и в такой решетке создавали вакансию индия (V_{In}).

На рис. 3 приведена структура суперъячейки TlInTe_2 с вакансией индия. В дефектной структуре $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ вакансия V_{In} окружена неспаренными электронами атомов теллура. В этом случае вакансия V_{In} может принимать электроны и связываться с другими атомами TlInTe_2 . Тогда в структуре $\text{TlInTe}_2\text{-V}_{\text{In}}$ вакансия V_{In} заряжается отрицательно и выполняет функцию акцептора (полупроводник p -типа). Наоборот, если в TlInTe_2 имеется вакансия теллура V_{Te} , которая окружена неспаренными электронами атомов In, то вакансия V_{Te} должна быть донором (полупроводник n -типа).

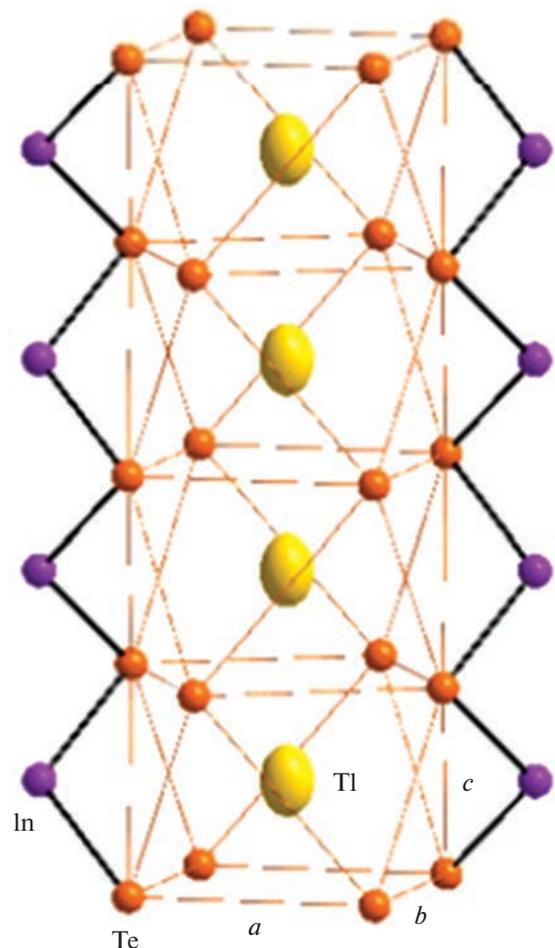


Рис. 2. Структура суперъячейки TlInTe_2 , содержащей 32 атома.

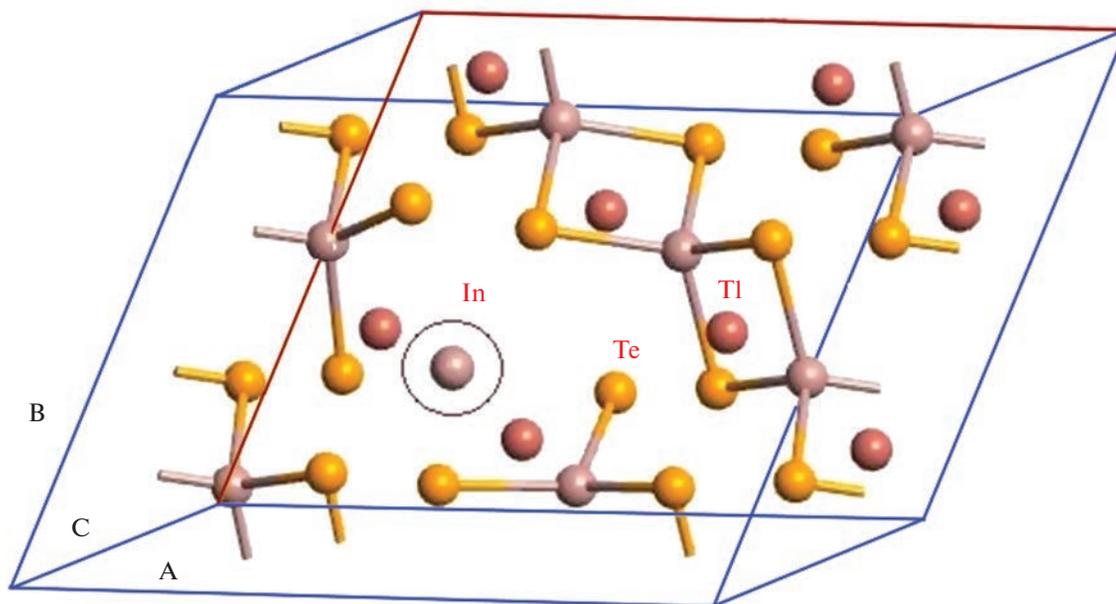


Рис. 3. Суперъчейка TlInTe_2 , содержащая 32 атома и вакансию индия.

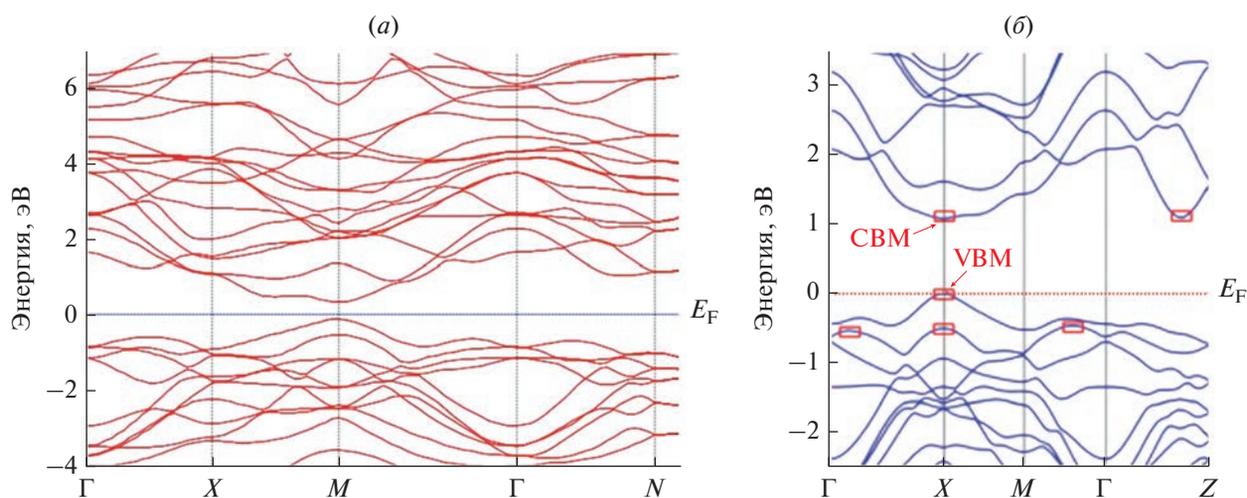


Рис. 4. DFT-GGA + U рассчитанная зонная структура суперъчейки TlInTe_2 , состоящей из 32 атомов и вакансии индия.

3.1.2. Зонная структура

На рис. 4 приведена DFT-GGA + U рассчитанная зонная структуры суперъчейки $\text{TlInTe}_2 - V_{\text{In}}$ с вакансией индия. Валентная зона состоит из двух областей, разделенных непрямой щелью (~ 0.1 эВ). Дно валентной полосы наблюдается в точке Γ зоны Бриллюэна ниже энергии -4 эВ. Энергетические зоны вблизи уровня Ферми (E_F) не имеют заметной дисперсии в направлении ΓM и ΓZ , что указывает на слабое взаимодействие меж-

ду атомными слоями в кристаллической структуре $\text{TlInTe}_2 - V_{\text{In}}$.

Сравнение DFT расчетных данных для $\text{TlInTe}_2 - V_{\text{In}}$ (рис. 4а) и TlInTe_2 (рис. 4б, [3]) показывает, что энергетические зоны, распределения плотностей электронных состояний и топология поверхности Ферми этих структур аналогичны.

Рассмотрим значение E_g в TlInTe_2 , которое характеризует минимальную энергию перехода элек-

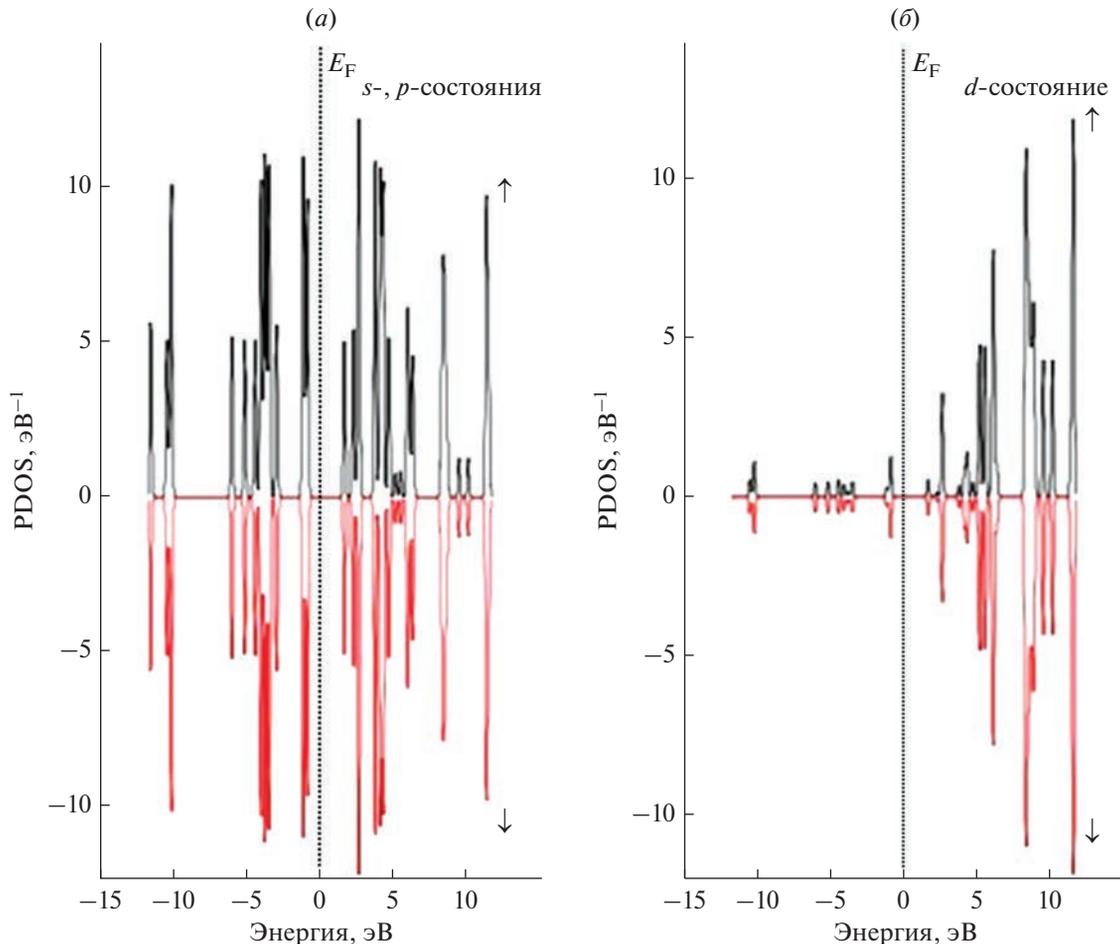


Рис. 5. DFT-GGA + U рассчитанная парциальная плотность состояний электронов (PDOS) в суперъячейке TlInTe₂-V_{In}, содержащей 32 атома. а) *s*-, *p*-состояния, б) *d*-состояния атомов Tl, In и Te вблизи уровня Ферми. 0 эВ соответствует уровню Ферми. Спин-вверх (↑) и спин-вниз (↓) состояния атомов.

трона из валентной зоны в зону проводимости. DFT-GGA расчетное значение запрещенной зоны E_g суперъячейки TlInTe₂-V_{In} было ($E_g = 1.21$ эВ) выше, чем экспериментальное значение E_g для TlInTe₂ [5]. Рассчитанная нами DFT-GGA + U способом запрещенная зона TlInTe₂-V_{In} составляет $E_g = 0.97$ эВ (рис. 4а), что близко к экспериментальным значениям для TlInTe₂.

3.1.3. Плотность состояний

На рис. 5а, б показаны распределения парциальных электронных плотностей состояний (PDOS) атомов Tl, In и Te в суперъячейке TlInTe₂ с In-вакансией. Анализ PDOS вкладов отдельных атомов TlInTe₂-V_{In} показывает, что нижняя часть валентной зоны (в интервале от -5.5 до 5.5 эВ) образована, сначала 5*p*-состояниями теллура. По мере увеличения энергии вклад в DOS начинают

давать гибридные In 4*d*- и Tl 6*p*-состояния. Поэтому в зонной структуре TlInTe₂-V_{In} верхняя часть валентной зоны (от -1.9 эВ до E_F) и дно зоны проводимости определяются 4*d*-состояниями атомов индия. Состояния таллия не вносят значительного вклада в DOS в рассматриваемой энергетической области (рис. 5а, б).

PDOS спин-вверх (↑) и спин-вниз (↓) состояний атомов в TlInTe₂-V_{In} аналогичны. PDOS *s*-, *p*-, *d*-состояний атомов Tl, In и Te указывает на то, что в TlInTe₂-V_{In} общий локальный магнитный момент составляет 0.00μ_B.

Из DOS следует, что присутствие в структуре монослота тетрагонального TlInTe₂ In-вакансий приводит к изменению электронной структуры в области запрещенной зоны. В халькогенидных материалах анионные вакансии могут формировать на поверхности кристаллитов поверхностные состояния акцепторного типа. Они могут привести к из-

Таблица 1. Рассчитанные нами параметры тетрагонального кристалла на основе TlInTe_2 (пр. гр. $D_{4h}^{18} - I4/mcm$)

Параметр	DFT-GGA + U расчет ($\text{TlInTe}_2 - \text{V}_{\text{In}}$)	Литература (TlInTe_2)
E_g , эВ	0.97	0.963 $E \perp c$, 0.976 $E \parallel c$ $T = 290$ К [5] 0.72 [2], 0.650 [21], 0.66 [22]
a и c , Å	8.111 и 7.177	8.494 и 7.181 [1, 5], 8.704 и 7.325 [3] 7.160 и 7.160 [21]
$-\Delta_f H_{298}^\circ$, эВ	1.523	1.452 [21]

гибу электронных зон у поверхности материала [19]. А микропримеси и точечные дефекты в этих кристаллитах могут формировать поверхностные состояния донорного типа. В зависимости от энергии этих донорных состояний, а также от величины поверхностной плотности халькогенидных вакансий, акцепторные состояния могут заполняться электронами с поверхностных донорных состояний. В этом случае за счет искривления зон у поверхности халькогенида величина и знак поверхностного заряда могут измениться. Таким образом,

формирование In-вакансий в TlInTe_2 может повысить поверхностную плотность состояний в кристаллитах.

3.1.4. Энергию образования вакансии

Энергию образования $E_f^{\text{V}_{\text{In}}^x}$ нейтральной вакансии индия в In-подрешетке суперъядчейки $\text{TlInTe}_2 - \text{V}_{\text{In}}$ вычисляли по уравнению [8]

$$E_f^{\text{V}_{\text{In}}^x} = E_{\text{tot}}^{\text{V}_{\text{In}}^x + \text{bulk}} [\text{Tl}(\text{In})_{n-1}(\text{Te}_2)_n] - E_{\text{tot}}^{\text{bulk}} [\text{Tl}(\text{In})_n(\text{Te}_2)_n] + \mu_{\text{In}}, \quad (1)$$

где $E_{\text{tot}}^{\text{V}_{\text{In}}^x + \text{bulk}}$ – полная энергия суперъядчейки объемного вещества (bulk) с нейтральной вакансией индия V_{In}^x , $E_{\text{tot}}^{\text{bulk}}$ – полная энергия суперъядчейки объемного TlInTe_2 без In-вакансии, n – количество атомов в суперъядчейке TlInTe_2 , μ_{In} – химический потенциал In (т.е. энергия добавления одной частицы в систему без совершения работы).

Рассчитанное нами значение $\mu_{\text{In}} = 2.11$ эВ соответствует значению $\mu_{\text{In}} = 2.14$ эВ [20]. DFT-расчет энергии образования In-вакансии в суперъядчейке $\text{TlInTe}_2 - \text{V}_{\text{In}}$ составлял: $E_f^{\text{V}_{\text{In}}^x} = 1.17$ эВ.

3.1.5. Энтальпия образования

Стандартная энтальпия образования ($\Delta_f H_T^\circ$) TlInTe_2 при температуре T вычисляется уравнением

$$\Delta_f H_T^\circ (\text{TlInTe}_2) = \Delta_f H_0^\circ (\text{TlInTe}_2) + \int_0^T [\Delta C_p (\text{TlInTe}_2)] dT \approx \Delta_f H_0^\circ (\text{TlInTe}_2). \quad (2a)$$

Рассчитанное значение теплоемкости (ΔC_p) твердого TlInTe_2 с учетом справочных данных незначительно отличается от суммы теплоемкостей компонентов: $C_p(\text{Tl}) + C_p(\text{In}) + C_p(\text{Te}_2)$. Это соответствует правилу Неймана–Коппа, согласно которому теплоемкость химического соединения при

комнатной температуре равна сумме теплоемкостей составляющих его элементов. Если вклады C_p в уравнении (2a) принимать равными нулю, то энтальпию образования TlInTe_2 при T можно выразить как изменение внутренней энергии $\Delta_f U_0^\circ (\text{TlInTe}_2)$

$$\Delta_f H_T^\circ (\text{TlInTe}_2) = \Delta_f U_0^\circ (\text{TlInTe}_2) = E_{\text{tot}}^\circ (\text{TlInTe}_2) - [E_{\text{tot}}^\circ (\text{Tl}) + E_{\text{tot}}^\circ (\text{In}) + 2E_{\text{tot}}^\circ (\text{Te})], \quad (26)$$

где E_{tot}° – полная стандартная энергия суперъядчейки TlInTe_2 на формульную единицу.

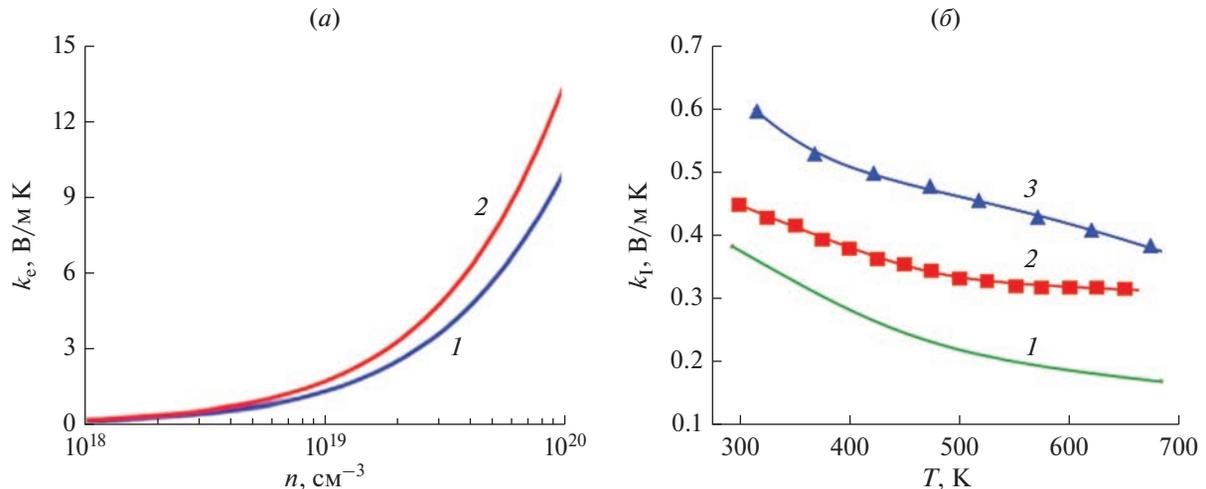


Рис. 6. Расчетные электронный и фононный вклады теплопроводности как функции плотности носителей (при $T = 298$ К) и температуры. а) кривые 1 и 2 обозначают p - и n -легированный TlInTe_2 соответственно [3]. б) кривая 1 – [3], кривая 2 – [25], кривая 3 – [4].

DFT-GGA + U рассчитанная таким образом энтальпия образования $\Delta_f H_{298}^0(\text{TlInTe}_2)$ составляет -1.523 эВ, которая согласуется с данными [21]. Также наблюдается согласие результатов расчетов и экспериментов по определению других параметров кристалла на основе TlInTe_2 (табл. 1).

3.2. Явления переноса
3.2.1. Тепловые свойства

Легированные полупроводники, как известно, являются эффективными термоэлектриками [23]. Добротность термоэлектрических материалов $ZT = \frac{\sigma S^2}{k} T$, где σ – электропроводность, S – коэффициент Зеебека, k – теплопроводность, T – абсолютная температура. Здесь $\sigma = \frac{1}{\rho} = en\mu$, где e – заряда электрона, n – концентрация основных носителей заряда, μ – подвижность. Параметр ZT зависит от различных факторов, в частности, от ширины запрещенной зоны. Для прямозонных материалов E_g больше $6k_B T$ [24], где k_B – постоянная Больцмана. При значении $E_g < 6k_B T$ в системе появляются неосновные носители заряда. А уровень Ферми должен находиться вблизи запрещенной зоны.

Принимается, что теплопроводность материала состоит из двух частей: $k = k_e + k_{ph}$, где k_{ph} – теплопроводность упругих колебаний решетки (или фононная теплопроводность k_{ph}) и k_e – теплопроводность свободных электронов. Решеточная теплопроводность в кристаллических телах в ос-

новном осуществляется фононами, тогда как диффузионные явления считаются важной колебательной единицей в аморфных твердых телах.

Учет сильного фононного ангармонизма взаимодействия атомов в кристалле может приводить к появлению взаимодействия фононов. Такие процессы могут дать вклад в ограничение теплопроводности материала.

Путем замещения в катионной и/или анионной подрешетках в TlInTe_2 возможно изменить влияние неосновных носителей заряда на термоэлектрические свойства. На рис. 6а, б представлены зависимости электронной и фононной теплопроводности при различных значениях n (концентрация носителей) и T . Из рис. 6а, б следует, что кристаллы TlInTe_2 p - и n -типа имеют низкую решеточную теплопроводность от 0.37 до 0.6 В/(м К)) при комнатной температуре. Таким образом, низкую решеточную теплопроводность TlInTe_2 при комнатной температуре связывают с сильным фононным ангармонизмом структуры [3, 4].

Необычное поведение решеточной теплопроводности кристаллов TlXTe_2 ($X = \text{Ga}, \text{In}$) согласно [26] не могут быть охарактеризованы только фононами или диффузонами явлениями. Расчетное значение k_{ph} , основанное на первопринципах теории функционала плотности и квазиклассическом уравнении переноса Больцмана (БТЕ), составляет лишь половину экспериментального значения. Предлагается, что слабая связь между атомами Тl и цепочками XTe_2 приводит к сильному колебательному ангармонизму, который подавляет длину свободного пробега большей части фононных мод ниже предела Иоффе–Регеля. Такой ангармонизм нарушает условие квазикласси-

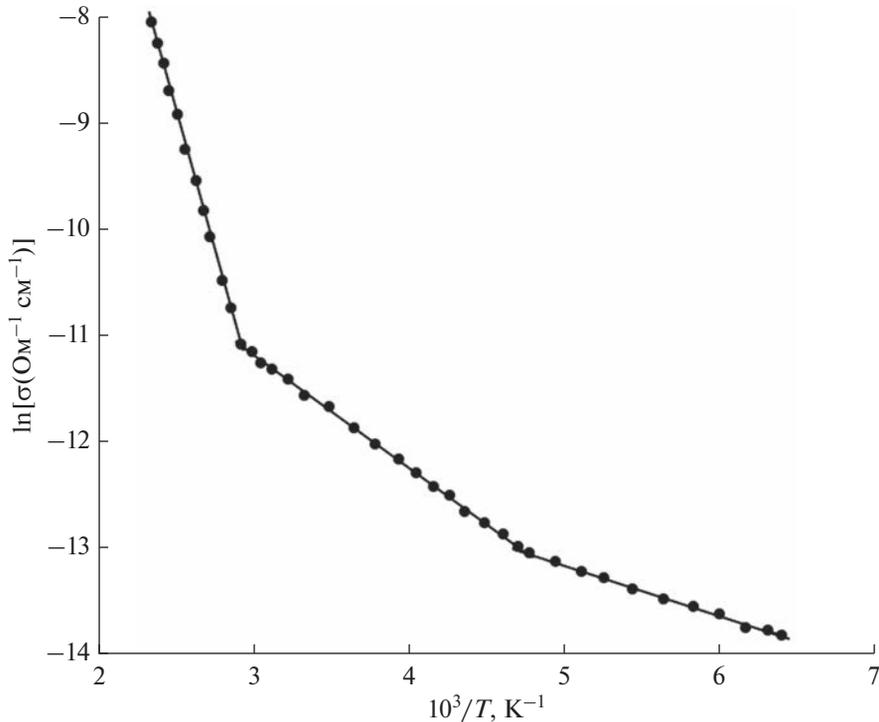


Рис. 7. Температурная зависимость проводимости кристалла p -ТлInTe₂ вдоль кристаллографической c -оси.

ческого БТЭ. Низкий k_{ph} TlXTe₂ ($X = Ga, In$) можно объяснить с помощью двухканальной транспортной модели.

3.2.2. Электрические свойства

На рис. 7 представлена экспериментально полученная температурная зависимость проводимости кристалла p -ТлInTe₂ вдоль кристаллографической c -оси в области температур 148–430 К [5].

Указанная зависимость состояла из трех участков. По наклону высокотемпературной ветви зависимости $\sigma(10^3/T)$ в ТлInTe₂ мы определили энергию активации проводимости, которая соответствовала значению ширины запрещенной зоны в p -ТлInTe₂ $E_g = 0.94$ эВ. В области температур 210–300 К проявлялся мелкий примесный уровень с энергией активации 0.1 эВ. При $T \ll 210$ К температурная зависимость проводимости p -ТлInTe₂ ослабевала и имела наклон примерно 0.04 эВ. Такой характер поведения проводимости в p -ТлInTe₂ при низких температурах присущ прыжковому механизму переноса заряда с переменной длиной прыжка.

В вышеуказанном случае в p -ТлInTe₂ ток переносится носителями заряда, находящимися в локализованных вблизи уровня Ферми состояниях. Такого типа проводимость наблюдается, в частности,

в легированных оловом ТлInS₂ [19]. В запрещенной зоне таких материалов вблизи уровня Ферми имеется энергетическая полоса с высокой плотностью состояний. По этим состояниям осуществляются прыжки носителей заряда из одного локализованного состояния в другое. Это так называемая активационная прыжковая проводимость.

Прыжковая проводимость в полупроводниковых материалах проявляется обычно при низких температурах, когда для наблюдения примесной, а тем более собственной проводимости еще не достигнута нужная температура. Температурная зависимость прыжковой проводимости подчиняется закономерности Мотта [27]:

$$\sigma \propto \exp\left[-(T_0/T)^{1/4}\right], \quad (3)$$

с наклоном

$$T_0 = \frac{16}{kN_F a^3}, \quad (4)$$

где N_F — плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми; a — радиус локализации волновой функции. Таким образом, проводимость полупроводников на постоянном токе адекватно описывается при помощи следующих двух параметров: плотности состояний на уровне Ферми и радиуса локализации волновой функции.

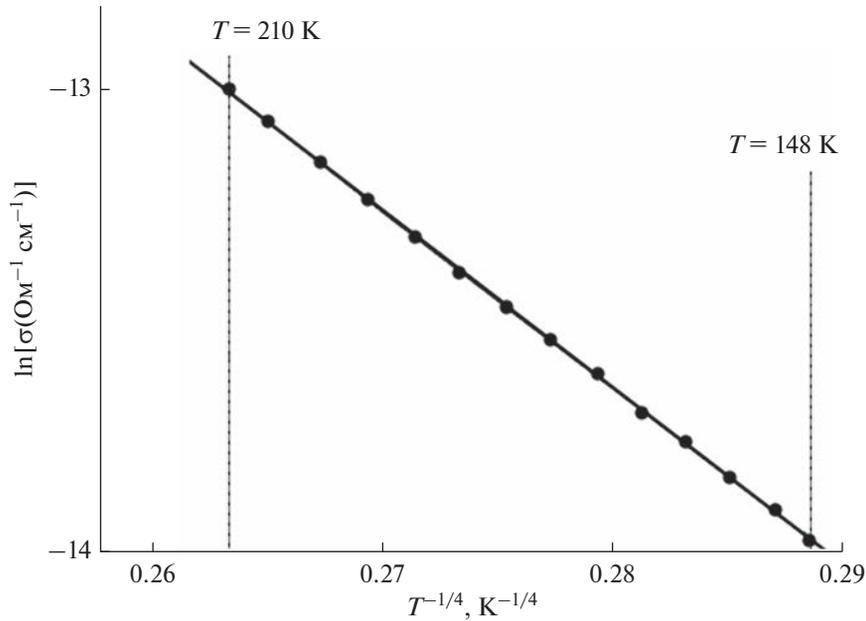


Рис. 8. Низкотемпературная зависимость $\lg\sigma$ от $T^{-1/4}$ для полупроводника p -TlInTe₂.

Построенный нами график зависимости $\lg\sigma$ от $T^{-1/4}$ для образца p -TlInTe₂ в температурной области 148–210 К представлен на рис. 8. Из наклона зависимости $\lg\sigma$ от $T^{-1/4}$ определили значение $T_0 = 3.6 \times 10^6$ К. По экспериментально найденному значению T_0 из формулы (4) определили плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми в p -TlInTe₂: $N_F = 6.5 \times 10^{18}$ эВ⁻¹ см⁻³. При этом для радиуса локализации взято значение $a = 20$ Å.

По формуле [27]:

$$R = \frac{3}{8} a (T_0/T)^{1/4}, \quad (5)$$

в TlInTe₂ определено расстояние прыжков при различных температурах. Так, при $T = 148$ К значение R составляло 94 Å, а при $T = 210$ К $R = 86$ Å, т.е. среднее расстояние прыжков (R_{av}) в p -TlInTe₂ составляло 90 Å. Значение R_{av} в 4.5 раза превышало среднее расстояние между центрами локализации носителей заряда в p -TlInTe₂.

По формуле [27]:

$$\Delta E = \frac{3}{2\pi R^3 N_F}, \quad (6)$$

оценили энергетический разброс ловушечных состояний вблизи уровня Ферми (ΔE). Значение ΔE составляло 100 мэВ. Именно в этой энергетической полосе ΔE в запрещенной зоне TlInTe₂ происходит прыжковый перенос заряда. При этом сред-

нее значение энергии активации прыжков (ΔW) в TlInTe₂, определенное по формуле [28]:

$$\Delta W = \frac{(kT)^{3/4}}{[N_F a^3]^{1/4}}, \quad (7)$$

в температурном интервале $T = 148$ –210 К, составляло $\Delta W = 80$ мэВ.

Нами оценена также концентрация локализованных состояний (N_l), ответственных за перенос заряда в p -TlInTe₂ на постоянном токе:

$$N_l = N_F \Delta E \quad (8)$$

Значение N_l составляло 6.5×10^{17} см⁻³.

4. ВЫВОДЫ

DFT-моделирование зонной структуры, общей и парциальной плотности состояний (PDOS) позволили анализировать электронные свойства суперъячейки узкозонного полупроводника TlInTe₂-V_{In}, состоящей из 32 атомов и вакансий индия (V_{In}). Расчетные параметры релаксированной решетки суперъячейки TlInTe₂-V_{In} с вакансией индия аналогичны данным для кристалла TlInTe₂ с тетрагональной сингонией: $a = 8.111$ Å, $c = 7.177$ Å, пр. гр. $P6_3/mmc$, (194). Установлено, что зонная структура суперъячейки TlInTe₂-V_{In} с вакансией индия, как и объемных кристаллов TlInTe₂, имеет непрямую энергетическую зону. Применение функционала GGA + U позволяет

корректировать несоответствия между DFT-расчетными и экспериментальными значениями ширины запрещенной зоны E_g в TlInTe_2 . За счет учета d -состояний атомов TlInTe_2 в PDOS завышается вклад ковалентной химической связи и энергетической зазор E_g сужается от 1.21 до 0.97 эВ. DFT-расчетная энергия образования нейтральной вакансии индия в суперъячейке TlInTe_2 составляет 1.17 эВ. Расчетная энтальпия образования TlInTe_2 - V_{In} согласуется с данными для TlInTe_2 .

При комнатной температуре p - и n -типа TlInTe_2 имеют низкую решеточную теплопроводность, которая связана с сильным фоновым ангармонизмом структуры. При температурах 148–210 К проводимость кристаллов p - TlInTe_2 соответствует прыжковому механизму переноса заряда с переменной длиной прыжка. Определена плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми в p - TlInTe_2 : $N_F = 6.5 \times 10^{18} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-3}$. Вычисленное среднее расстояние прыжков в p - TlInTe_2 составляло 90 Å, а энергетический разброс ловушечных состояний вблизи уровня Ферми $\Delta E = 100$ мэВ. Значение ΔE согласуется с оцененным средним значением энергии активации прыжков (ΔW) в p - TlInTe_2 , которое составляло $\Delta W = 80$ мэВ. Оцененная концентрация локализованных состояний в запрещенной зоне p - TlInTe_2 составляла $N_t = 6.5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при частичной поддержке Фонда развития науки при Президенте Азербайджанской Республики (EIF) (грант № EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/05/1-M-07) и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) (проект 18-57-06001 № Az_a2018).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Muller D., Eulenberger G., Hahn H. Uber ternare Thalliumchalkogenide mit Thalliumselenidstruktur // Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie, 1973. V. 398. № 2. P. 207–220. <https://doi.org/10.1002/zaac.19733980215>
2. Al-Ghamdi A.A., Nagat A.T., Al-Hazmi F.S., Al-Heniti S., Bahabri F.S., Mobarak M.M., Alharbi S.R. Growth and Electrical Characterization of TlInTe_2 Single Crystal // Journal of the King Abdulaziz Univ. Sci. 2008. V. 20. P. 27–38.
3. Ding G., He J., Cheng Z. X., Wang X., Li S. Low lattice thermal conductivity and promising thermoelectric figure of merit of Zintl type TlInTe_2 // Journal of Materials Chemistry C. 2018. V. 6. P. 13269–13274. <https://doi.org/10.1039/c8tc034>
4. Jana M.K., Pal K., Warankar A., Mandal P., Waghmare U.V., Biswas K. Intrinsic Rattler-Induced Low Thermal Conductivity in Zintl Type TlInTe_2 // Journal of the American Chemical Society. 2017. V. 139. № 12. P. 4350–4353. <https://doi.org/10.1021/jacs.7b01434>
5. Madelung O. Semiconductors: Data Handbook. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York. 3rd edition. 2004. 691 c. ISBN 978-3-642-62332-5
6. Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Mamedov A.N. Dielectric Properties and Heat Capacity of $(\text{TlInSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaTe}_2)_x$ Solid Solutions // Inorganic Materials. 2015. V. 51. № 8. P. 772–778. <https://doi.org/10.1134/S0020168515080051>
7. Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F. Ab Initio Calculations of the Electronic Properties and the Transport Phenomena in Graphene Materials // Physics of the Solid State. 2020. V. 62. № 11. P. 2224–2231. <https://doi.org/10.1134/S1063783420110037>
8. Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F. Ab initio modeling of the location and properties of ordered vacancies on the magnetic state of a graphene monolayer // Physics of the Solid State. 2021. V. 63. № 5. P. 797–806. <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>
9. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Physical Review Letters. V. 77. P. 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
10. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // Physical Review B. 1976. V. 13. № 12. P. 5188–5192. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5188>
11. Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Guseinova S.S., Dzhabarov A.I., Lukichev V.F. Electronic, dielectric properties and charge transfer in a $\text{TlGaS}_2:\text{Nd}^{3+}$ single crystal at direct and alternating current // Physics of the Solid State. 2022. Vol. 64. No. 4. P. 432–439. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.04.53497.251>
12. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1963. V. 276. № 1365. P. 238–257. <https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204>
13. Peles A. GGA + U method from first principles: application to reduction–oxidation properties in ceria-based oxides // Journal of Materials Science. 2012. V. 47. № 21. P. 7542–7548. <https://doi.org/10.1007/s10853-012-6423-1>
14. Born M., Mayer J.E. Zur Gittertheorie der Ionenkristalle // Zeitschrift für Physik. 1932. Vol. 75. No 1-2. P. 1–18. <https://doi.org/10.1007/bf01340511>
15. Mustafaeva S.N., Gasyimo Sh.G., Asadov M.M. Electrical properties of TlGaTe_2 single crystals under hydrostatic pressure // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2011. V. 72. № 6. P. 657–660. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2011.02.007>

16. *Mustafaeva S.N., Gasymov Sh.G., Asadov M.M.* DC-Electrical Properties of TlGaTe₂ Single Crystals under Hydrostatic Pressure // *Physics Research International*. 2011. Article ID 513848. P. 1–5. <https://doi.org/10.1155/2011/513848>
17. *Mustafaeva S.N., Gasymov Sh.G., Asadov M.M.* Conductivity anisotropy of a TlGaTe₂ chain single crystal under hydrostatic pressure // *Physics of the Solid State*. 2012. Вып. 54. № 1. P. 44–47. <https://doi.org/10.1134/s1063783412010246>
18. *Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Ismailov A.A.* Effect of gamma irradiation on the dielectric properties and electrical conductivity of the TlInS₂ single crystal // *Physics of the Solid State*. 2009. V. 51. № 11. P. 2269–2273. <https://doi.org/10.1134/s1063783409110122>
19. *Мустафаева С.Н., Асадов М.М., Гусейнова С.С., Гасанов Н.З., Лукичев В.Ф.* Ab initio расчеты электронных свойств, частотная дисперсия диэлектрических коэффициентов и край оптического поглощения монокристаллов TlInS₂(Sn) // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64. Вып. 6. С. 628–638. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.06.52388.299>
20. *Job G., Rüffler R.* *Physikalische Chemie*. Vieweg + Teubner Verlag. Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH. 2011. ISBN 978-3-8351-0040-4
21. TlInTe₂. ID:mp-22791 // <https://materialsproject.org/materials/mp-22791/>
22. *Wakita K., Shim Y., Orudzhev G., Mamedov N., Hashimzade F.* Band structure and dielectric function of TlInTe₂ // *Phys. Status Solidi A*, 2006. V. 203. № 11. P. 2841–2844. <https://doi.org/10.1002/pssa.200669566>
23. *Thermoelectrics Handbook. Macro to Nano.* Ed. D.M. Rowe. CRC. Taylor & Francis Group, LLC. Boca Raton, US. (2006). 954 p. ISBN13: 978-0-8493-2264-8.
24. *Sofo J.O., Mahan G.D.* Optimum band gap of a thermoelectric material // *Physical Review B*. 1994. V. 49. № 7. P. 4565–4570. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.4565>
25. *Matsumoto H., Kurosaki K., Muta H., Yamanaka S.* Systematic investigation of the thermoelectric properties of TIMTe₂ (M = Ga, In, or Tl) // *Journal of Applied Physics*, 2008. V. 104. № 7. P. 073705–4. <https://doi.org/10.1063/1.2987471>
26. *Wu M., Enamullah, Huang L.* Unusual lattice thermal conductivity in the simple crystalline compounds TlXTe₂ (X = Ga, In) // *Physical Review B*. 2019. V. 100. № 7. P. 075207–. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.075207>
27. *Mott N.F., Davis E.A.* *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, 2nd ed. (Oxford Univ. Press, New York, 2012). ISBN 978-0-19-964533-6
28. *Shklovskii B.I., Efros A.L.* *Electronic Properties of Doped Semiconductors*. Springer Series in Solid-State Sciences. Heidelberg. 1984. 388 p. ISBN 978-3-662-02405-8

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 621.382.323

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПОСТРОЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ МЕТАМОРФНОГО 0.15 мкм МНЕМТ InAlAs/InGaAs ТРАНЗИСТОРА

© 2023 г. В. В. Локотко¹, *, И. С. Васильевский¹, Н. И. Каргин¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

*E-mail: vasilii.lokotko@gmail.com

Поступила в редакцию 17.06.2022 г.

После доработки 11.07.2022 г.

Принята к публикации 11.07.2022 г.

В статье рассматривается высокоточная методика моделирования InAlAs/InGaAs МНЕМТ транзисторов СВЧ диапазона частот с длиной затвора 0.15 мкм. Описанная методика учитывает нелинейные зависимости внутренних параметров от приложенных напряжений. Установлено, что максимальная ошибка моделирования не превышает 1.5% в диапазоне частот от 1 до 50 ГГц.

Ключевые слова: МНЕМТ, экстракция, нелинейная модель

DOI: 10.31857/S0544126922700053, **EDN:** CXYGKP

1. ВВЕДЕНИЕ

Технологический прогресс в области систем радиосвязи требует наличия электронной схемы с возможностью работы на сверхвысоких частотах. Одним из ключевых элементов в тракте приемника является маломощный усилитель. При этом к нему предъявляется ряд требований по коэффициенту шума и усилению в широком частотном диапазоне. Для нахождения компромиссов необходимо на этапе проектирования разработать модель, которую можно использовать для разработки усилителя. В настоящее время существует множество способов проектирования эмпирической модели транзистора. Все они могут быть классифицированы как аналитические, [1–3] на основе оптимизации [4–6] и гибридные методы (на основе частичной оптимизации) [7–9]. Аналитические методы основаны на приближенных выражениях и измерениях в интересующей рабочей точке. Чаще всего они страдают от погрешностей измерений из-за крайне низких значений параметров, приводящих к ошибочному извлечению элементов схемы. Как правило, эти методы требуют большого объема измерений. Для преодоления таких ограничений были разработаны методы моделирования на основе алгоритмов оптимизации. Они не требуют тщательных начальных оценок параметров модели и обеспечивают хорошее соответствие между измеренными и смоделированными характеристиками устройства. Однако, существует проблема локального минимума, кроме того, эти методы часто дают нефизические значения элементов схемы, что приводит к ошибочной модели наряду с увеличением затраченного. Гибридные

методы лишены указанных недостатков, в них определен набор элементов схемы вычисляется с использованием аналитически аппроксимированных выражений, а остальные определяются с помощью подходящих алгоритмов оптимизации.

Существующие САПР, предназначенные для проектирования СВЧ-устройств (такие, как ADS, Microwave Office, Serenade и др.), обычно решают широкий спектр задач, при этом в некоторых узкоспециализированных случаях могут выдавать ошибочные результаты. Так при проектировании малосигнальных моделей транзистора, данные САПР используют только оптимизационные методы, что приводит к физически не обоснованным результатам, при отсутствии начальных условий. Использование узкоспециализированных программ позволит повысить эффективность проектирования СВЧ-устройств (в том числе МШУ), а именно: упростить и ускорить определенный этап проектирования устройства, улучшить качественные показатели, а также снизить требования к квалификации разработчиков. Использование нелинейных моделей позволяет характеризовать транзистор при отсутствии измеренных S -параметров при определенных напряжениях смещения и питания. Как правило точность модели уменьшается по мере увеличения числа параметров. Большое количество параметров так же приводит к увеличению времени определения параметров транзистора. В данной статье описывается методика формирования 16-элементной нелинейной модели для метаморфного 0.15 мкм МНЕМТ InAlAs/InGaAs транзистора, состоящая из 46 параметров. Процент ошибок в диапазоне от 1 до 50 ГГц

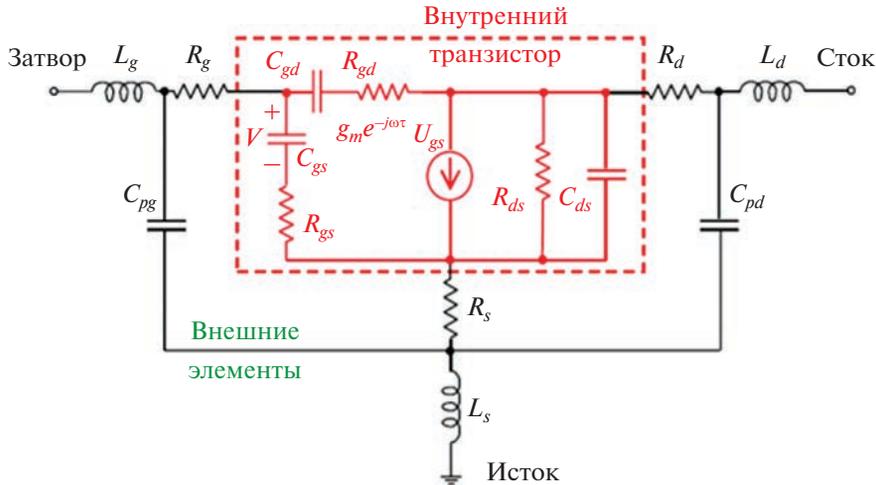


Рис. 1. Эквивалентная схема полевого транзистора.

не превышает 3.5% для линейной и 1.5% для нелинейной модели.

2. МЕТОДИКА

Эквивалентная схема полевого транзистора может быть разделена на внутреннюю часть, значения которой являются функцией напряжения смещения и питания $f(U_{gs}, U_{ds})$, и внешнюю часть, которая не зависит от прикладываемых напряжений $f(U_{gs}, U_{ds}) = const$. Каждый элемент рассчитывается путем решения аналитических уравнений или оптимизации S -параметров. Точное измерение S -параметра является обязательным условием для определения значений параметров эквивалентной схемы транзистора.

На рис. 1 представлена эквивалентная схема полевого транзистора, состоящая из двух основных частей: внутренней и внешней. Внутренняя часть представляет собой непосредственно структуру транзистора, а внешняя описывает паразитные параметры.

Внешняя часть состоит из 8 элементов: R_g, L_g, C_{pg} – паразитные сопротивление, индуктивность и емкость затвора; R_d, L_d, C_{pd} паразитные сопротивление, индуктивность и емкость стока; R_s, L_s паразитные сопротивление и индуктивность истока. Внутренняя часть состоит из 7 элементов R_{ds}, C_{ds} – внутренние сопротивление и емкость перехода сток-исток, R_{gd}, C_{gd} – внутренние сопротивление и ёмкость перехода сток-затвор; R_{gs}, C_{gs} – внутренние сопротивление и емкость перехода исток-затвор; $g_m U_{gs}$ – эквивалентный источник тока, где $g = g_m e^{-j\omega\tau}$, τ – время задержки, g_m – крутизна транзистора, U_{gs} напряжение истоком и затвором.

На рис. 2 представлена блок схема методики моделирования транзистора. Методика построения

модели НЕМТ транзистора состоит из нескольких этапов. На первом этапе проводятся измерения S -параметров исследуемого транзистора в широком диапазоне частот для различных напряжений смещения и питания. На втором этапе определяются внешние и внутренние параметры эквивалентной схемы транзистора. На третьем этапе определяются параметры нелинейной модели методом минимизации среднеквадратичной ошибки.

Экстракция паразитных емкостей

Часто выделяют два набора паразитных емкостей. Первые обусловлены контактными площадками или контактами зондов, C_{pg}, C_{pd} и C_{dsp} ; и те, которые учитывают межэлектродные емкости C_{gsi}, C_{dgi} и C_{dsi} . Расчет таких емкостей, описанный в [6], требует начальных условий, полученных из эмпирических предположений, основанных на топологии транзистора. Для упрощения расчетов, межэлектродными емкостями часто пренебрегают многие авторы [7, 8], поскольку эти значения всегда относительно малы. В данной статье C_{dgp} также игнорируется для упрощения расчета.

Емкости контактных площадок C_{pg} и C_{pd} могут быть извлечены в режиме “холодного” полевого транзистора ($U_{ds} = 0$ В, $U_{gs} \leq 0$ В) на низких частотах (порядка 1 ГГц). Согласно [1], эквивалентная схема в данных условиях может быть представлена, как показано на рис. 3. В этом случае из мнимой части Y -параметров можно извлечь контактные емкости следующими отношениями:

$$\text{Im}(Y_{11}) = \omega(C_{pg} + C_b); \tag{1}$$

$$\text{Im}(Y_{12}) = -\omega C_b; \tag{2}$$

$$\text{Im}(Y_{22}) = \omega(C_{pd} + C_b), \tag{3}$$

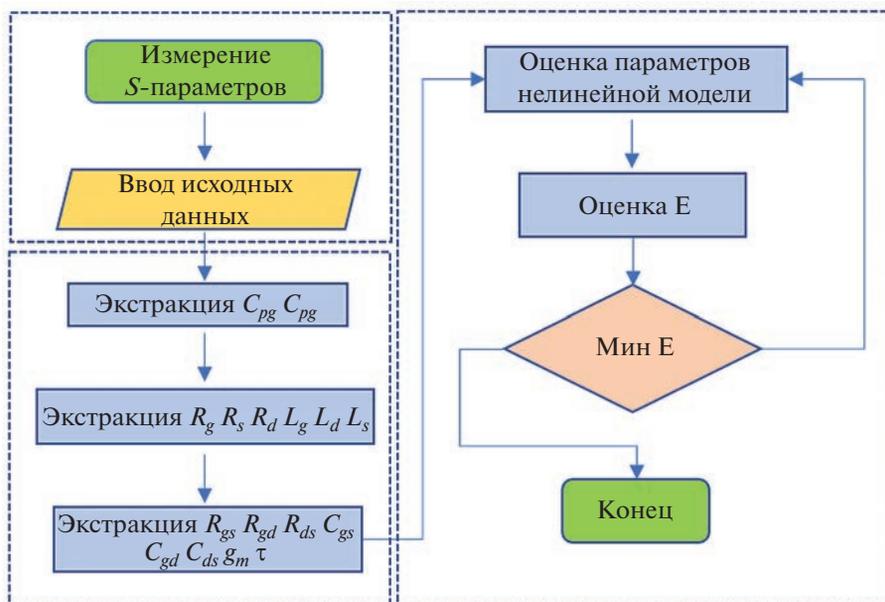


Рис. 2. Блок-схема методики моделирования транзистора.

где C_b – емкость внутренней части цепи, при ($U_{ds} = 0, U_{gs} \leq 0$).

Емкости контактных площадок определялись путем вычисления наклона мнимых частей Y -па-

раметров. В статье [9] говорится, что напряжение смещения $U_{gs} \leq 0$ В подавляет проводимость затвора. Это позволяет точнее определять значения емкости контактных площадок, при использовании меньших значений напряжения смещения.

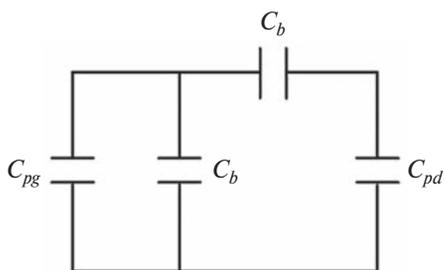


Рис. 3. Эквивалентная схема в режиме ($U_{ds} = 0, U_{gs} \leq 0$).

Экстракция паразитных индуктивностей и сопротивлений

Согласно [1], эквивалентная схема в условиях $U_{ds} = 0$ В, $U_{gs} \leq 0$ В, может быть представлена как показано на рис. 4. Паразитные индуктивности и сопротивления определены из измерения импеданса в “холодном” режиме работы транзистора путем анализа Z -параметров:

$$Z_{11} = R_g + R_s + j\omega(L_s + L_g), \tag{4}$$

$$Z_{12} = R_{ch}/2 + R_s + j\omega L_s, \tag{5}$$

$$Z_{22} = R_d + R_s + R_{ch} + j\omega(L_s + L_d), \tag{6}$$

где R_g, L_g – паразитные емкость, индуктивность и сопротивление затвора; R_d, L_d – паразитные емкость, индуктивность и сопротивление стока; R_s, L_s – паразитные сопротивление и индуктивность истока; R_{ch} – сопротивление канала.

В данной работе мы пренебрегали сопротивлением канала R_{ch} , как это было предложено в [6], что облегчает определение паразитных сопротивлений.

Значения индуктивностей определялись из линейных зависимостей мнимых частей импеданса, а сопротивления – из действительных частей импеданса в частотном диапазоне выше 30 ГГц, чтобы минимизировать погрешность от остаточных ем-

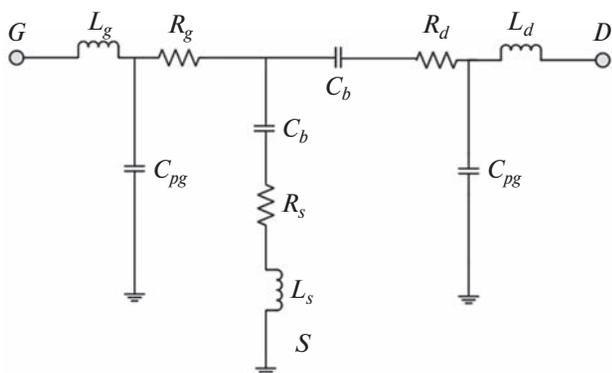


Рис. 4. Эквивалентная схема в “холодном режиме” ($U_{ds} = 0, U_{gs} \leq 0$).

костных элементов. Действительные и мнимые части приводились к частотным формам путем умножения на круговую частоту ω и построения соответствующих зависимостей $\omega \text{Im}(Z)$ и $\omega^2 \text{Re}(Z)$ от ω^2 .

Расчет внутренних параметров

Для определения значений внутренних параметров транзистора необходимо извлечь внешние параметры из измеренных Y -параметров путем матричных преобразований:

$$Y^i = \left[\left[[Y^m - Z^R]^{-1} - \omega Y \right]^{-1} - \omega Z^L \right]^{-1}; \quad (7)$$

$$Z^R = \begin{bmatrix} R_g + R_s & R_s \\ R_s & R_d + R_s \end{bmatrix}; \quad (8)$$

$$Y^C = \begin{bmatrix} C_{pg} & 0 \\ 0 & C_{pd} \end{bmatrix}; \quad (9)$$

$$Z^L = \begin{bmatrix} L_g + L_s & L_s \\ L_s & L_d + L_s \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где Y^m – матрица измеренных Y -параметров транзистора.

Внутренние параметры транзистора определяются путем решения системы линейных комплексных уравнений (11)–(16):

$$Y_{11} = (R_{gs} \omega^2 C_{gs}^2 + j \omega C_{gs}) / D_1 + (R_{gd} \omega^2 C_{gd}^2 + j \omega C_{gd}) / D_2; \quad (11)$$

$$Y_{12} = -(R_{gd} \omega^2 C_{gd}^2 + j \omega C_{gd}) / D_2; \quad (12)$$

$$Y_{21} = g_m e^{(-j\omega\tau)} / (1 + j \omega C_{gs} R_{gs}) - (R_{gd} \omega^2 C_{gd}^2 + j \omega C_{gd}) / D_2; \quad (13)$$

$$Y_{22} = 1 / R_{ds} + j \omega C_{ds} + (R_{gd} \omega^2 C_{gd}^2 + j \omega C_{gd}) / D_2; \quad (14)$$

$$D_1 = 1 + \omega^2 R_{gs}^2 C_{gs}^2; \quad (15)$$

$$D_2 = 1 + \omega^2 R_{gd}^2 C_{gd}^2. \quad (16)$$

В некоторых работах [1–3] на этом этапе для определения параметров R_{gs} , R_{gd} , C_{gs} , C_{gd} используется предположение что D_1 и D_2 примерно равны единице на низких частотах. Однако такое допущение может повлиять на точность расчета на высоких частотах. Для повышения точности используется выражения, в которых ωCR выражены через соответствующие мнимые и действительные части Y -параметров.

$$D_1 = 1 + \left[\frac{\text{Re}(Y_{12} + Y_{11})}{\text{Im}(Y_{12} + Y_{11})} \right]^2; \quad (17)$$

$$D_2 = 1 + \left[\frac{\text{Re}(Y_{12})}{\text{Im}(Y_{12})} \right]^2. \quad (18)$$

Нелинейная модель

Используемая в данной работе нелинейная модель разработана на основе модели Angelov [10]. Подход состоит в том, чтобы учесть нелинейность всех внутренних параметров транзистора, в то время как в работе [10] нелинейно описываются такие параметры на g_m , C_{gs} и C_{gd} . Каждый элемент внутренней цепи транзистора является функцией $f(U_{gs}, U_{ds})$, двух переменных U_{ds} и U_{gs} . Учет нелинейности всех внутренних параметров обеспечивает высокую точность. Также нелинейная модель позволяет формировать матрицы S -параметров при отсутствии проведенных измерений. Предложенная эмпирическая гибридная модель задается набором нелинейных уравнений (19)–(26):

$$C_{ds}(U_{gs}, U_{ds}) = C_{ds0} (1 + \text{th}(a_1 + a_2 U_{gs} + a_3 U_{ds})); \quad (19)$$

$$C_{gd}(U_{gs}, U_{ds}) = C_{gd0} (1 + \text{th}(b_1 + b_2 U_{gs} + b_3 U_{ds})) + (U_{gs} + b_4 U_{ds}); \quad (20)$$

$$C_{gs}(U_{gs}, U_{ds}) = C_{gs0} (1 + \text{th}(c_1 + c_2 U_{gs} + c_3 U_{ds})) \times (1 + \text{th}(c_4 + c_5 U_{gs})); \quad (21)$$

$$R_{ds}(U_{gs}, U_{ds}) = R_{ds0} (1 - \text{th}(d_1 U_{gs} + d_2 U_{ds} + d_3)) + (U_{gs} - d_4 U_{ds}); \quad (22)$$

$$R_{gs}(U_{gs}, U_{ds}) = R_{gs0} (1 + \text{th}(e_1 U_{ds} + e_2)) \times (1 + \text{th}(e_3 U_{gs} + e_4)); \quad (23)$$

$$R_{gd}(U_{gs}, U_{ds}) = R_{gd0} (1 + \text{th}(f_1 + f_2 U_{gs} + f_3 U_{ds})) \times (1 + \text{th}(f_4 U_{gs} + f_5)); \quad (24)$$

$$\tau(U_{gs}, U_{ds}) = \tau_0 (1 + \text{th}(g_1 + g_2 U_{gs} + g_3 U_{ds})); \quad (25)$$

$$g_m(U_{gs}, U_{ds}) = g_{m0} (1 + \text{th}(h_1 + h_2 U_{gs} + h_3 U_{ds})) \times (1 + \text{th}(h_4 + h_5 U_{gs} + h_6 U_{ds})). \quad (26)$$

Параметры модели определяются методом наименьших квадратов для каждого уравнения. Точность модели определяется расчетом значения среднеквадратической ошибки отклонения измеренных и смоделированных S -параметров по формуле (27):

$$E(U_{gs}, U_{ds}) = 100 \sqrt{\frac{\sum (x_i(U_{gs}, U_{ds}) - \mu(U_{gs}, U_{ds}))^2}{N}} \%, \quad (27)$$

где $x_i(U_{gs}, U_{ds})$ – разница между измеренными и смоделированными S -параметрами в частотном диапазоне от 0.1 до 50 ГГц, $\mu(U_{gs}, U_{ds})$ – среднее значение между измеренными и смоделированными

Таблица 1. Значения внешних параметров эквивалентной схемы транзистора

R_g , Ом	0.17	L_g , пГ	41.1
R_s , Ом	2.03	L_s , пГ	6.3
R_d , Ом	2.97	L_d , пГ	59.4
C_{pg} , фФ	18.0	C_{pd} , фФ	28.6

Таблица 2. Значения внутренних параметров при разных напряжениях питания U_{ds}

	$U_{gs} = -0.1$ В $U_{ds} = 1$ В	$U_{gs} = -0.1$ В $U_{ds} = 1.5$ В	$U_{gs} = -0.1$ В $U_{ds} = 2$ В
C_{gs} , фФ	218.1	223.0	226.4
C_{gd} , фФ	34.1	30.2	28.5
C_{ds} , фФ	89.6	93.8	93.7
R_{gs} , Ом	4.0	4.1	4.2
R_{gd} , Ом	16.8	22.7	25.3
R_{ds} , Ом	67.0	93.6	113.7
g_m , мС	223.3	246.8	256.3
τ , пс	0.75	1.04	1.28

ными S -параметрами в частотном диапазоне от 0.1 до 50 ГГц; N – количество измерений.

Для аппроксимации зависимости тока стока I_d от прикладываемых напряжений питания U_{ds} и смещения U_{gs} использовалась модифицированная модель Angelov по формуле (28):

$$I_d(U_{gs}, U_{ds}) = I_{pk} \left(1 + \text{th} \left(P_1 U_{gs} + P_2 U_{gs}^2 \right) \right) \text{th} \left(\alpha U_{ds} \right)^n, \quad (28)$$

где U_{gs} – напряжение затвор-исток, U_{ds} – напряжение сток-исток, I_d – ток стока, I_{pk} , P_1 , P_2 , α , n – коэффициенты аппроксимации.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Рассмотрим экстракцию значений элементов малосигнальной схемы СВЧ транзистора изготовленного по отечественной 0.15 мкм GaAs НЕМТ-технологии. Измерения S -параметров проводились в диапазоне от 0.1 до 50 ГГц при напряжении питания U_{ds} от 0 до 2.5 В и напряжении смещения U_{gs} от -0.6 до -0.05 В. Измерительный стенд включал источник питания AMCAD pivsystem, векторный анализатор цепей компании Keysight N5245A и ручную зондовую станцию, объединённых системой GPIB.

В результате процедуры экстракции были получены параметры транзистора, представленные в табл. 1–4.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 5 представлены зависимости $\omega \text{Im}(Z)$ и $\omega^2 \text{Re}(Z)$ от ω^2 в диапазоне частот от 0.5 до 10 ГГц для значений паразитных параметров, указанных в табл. 1.

Как видно из рис. 5, полученные зависимости точно аппроксимируются полученными в ходе экстракции паразитных параметров в полосе от 0.1 до 50 ГГц, что является достаточным для использования полученных данных в расчете внутренних параметров.

На рис. 6 представлены зависимости S -параметры, полученные по формулам (11)–(18) для значений внутренних параметров из табл. 2.

Из рис. 6 следует, что смоделированные S -параметры согласуются с измеренными. При этом разница между смоделированными и измеренными данными не превышает 1 дБ в полосе частот от 0.1 до 50 ГГц.

На рис. 7 представлены поверхности описывающие зависимости параметров нелинейной модели от приложенных напряжений питания и смещения, рассчитанные по формулам (19)–(26).

Таблица 3. Значения оптимизационных параметров нелинейной модели

C_{ds0}	a_1	a_2	a_3	C_{gd0}	b_1
63.02×10^{-15}	0.22	0.75	0.03	40.02×10^{-15}	-0.68
b_2	b_3	b_4	C_{gs0}	c_1	c_2
-0.54	0.16	-7.93	175.87×10^{-15}	0.16	2.56
c_3	c_4	c_5	R_{ds}	d_1	d_2
0.28	-0.27	2.72	661.57	-16.39	-0.83
d_3	d_4	R_{gs}	e_1	e_2	e_3
-7.33	-72.79	3.38	0.08	-0.06	10.11
e_4	R_{gd}	f_1	f_2	f_3	f_4
6.06	20.07	-1.25	-1.02	0.51	2.37
f_5	g_{m0}	h_1	h_2	h_3	h_4
5.63	0.16	2.05	8.63	0.62	-0.43
h_5	h_6	τ_0	g_1	g_2	g_3
-0.12	0.08	1.13×10^{-12}	1.03	-0.18	0.31

Таблица 4. Значения оптимизационных параметров модели тока стока транзистора

I_{pk}	P_1	P_2	a	n
0.09	1.18	-4.22	0.44	0.55

На рис. 8 предоставлено двумерное представление ошибки $E(U_{gs}, U_{ds})$ измеренных и смоделированных S -параметров от приложенных напряжений питания U_{ds} и смещения U_{gs} в диапазоне

частот от 0.1 до 50 ГГц для линейной и нелинейной модели. Из рисунка следует, что нелинейная модель точно описывает поведение транзистора во всех измеренных режимах работы. Макси-

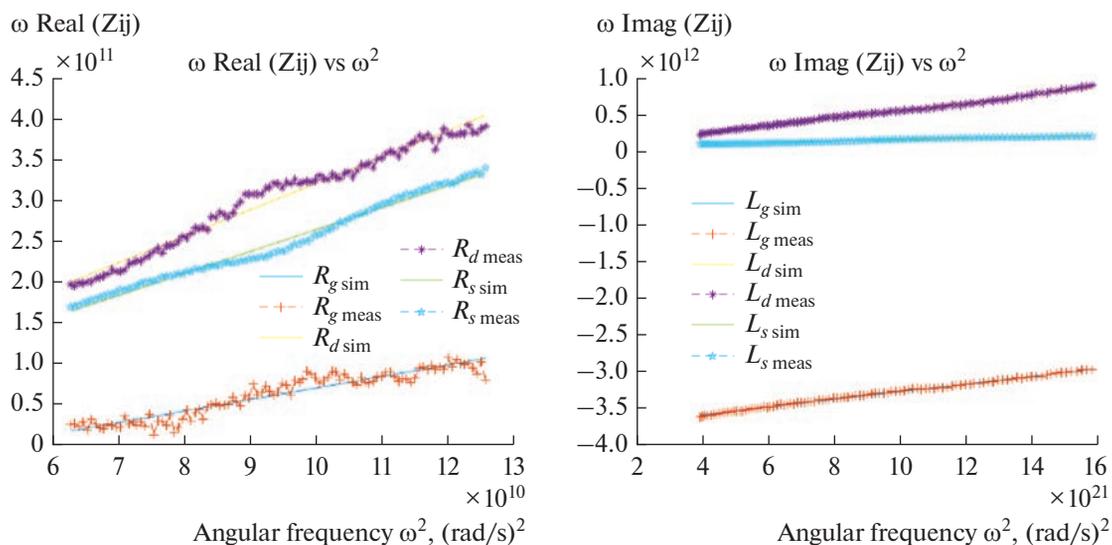


Рис. 5. Зависимости значения внешних параметров малосигнальной модели в диапазоне от 1 до 10 ГГц. Сплошные линии — аппроксимация, наборы точек — измеренные данные.

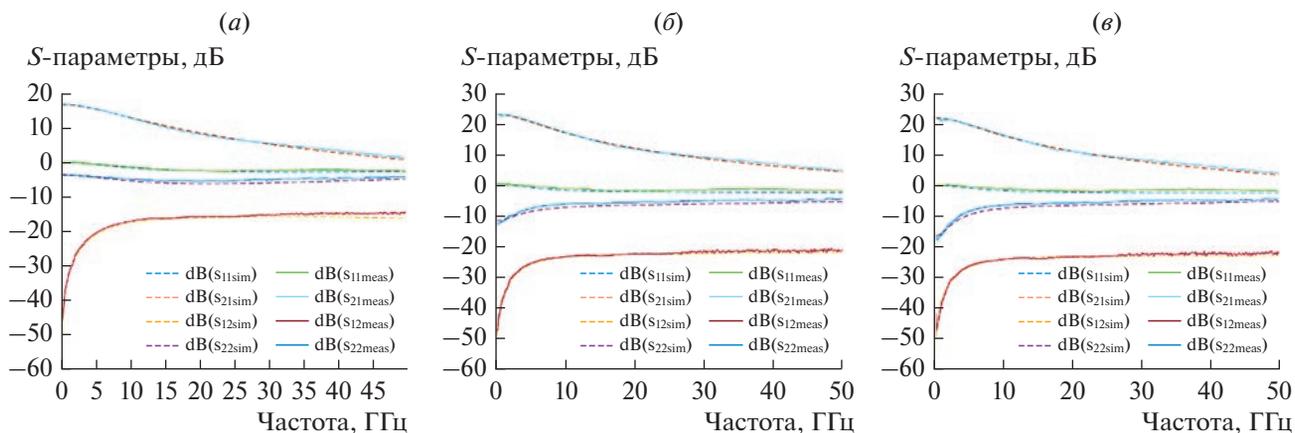


Рис. 6. Сравнение измеренных и смоделированных S -параметров при напряжении питания и смещения согласно табл. 2: (а) $U_{gs} = -0.1$ В, $U_{ds} = 1$ В; (б) $U_{gs} = -0.1$ В, $U_{ds} = 1.5$ В; (в) $U_{gs} = -0.1$ В, $U_{ds} = 2$ В.

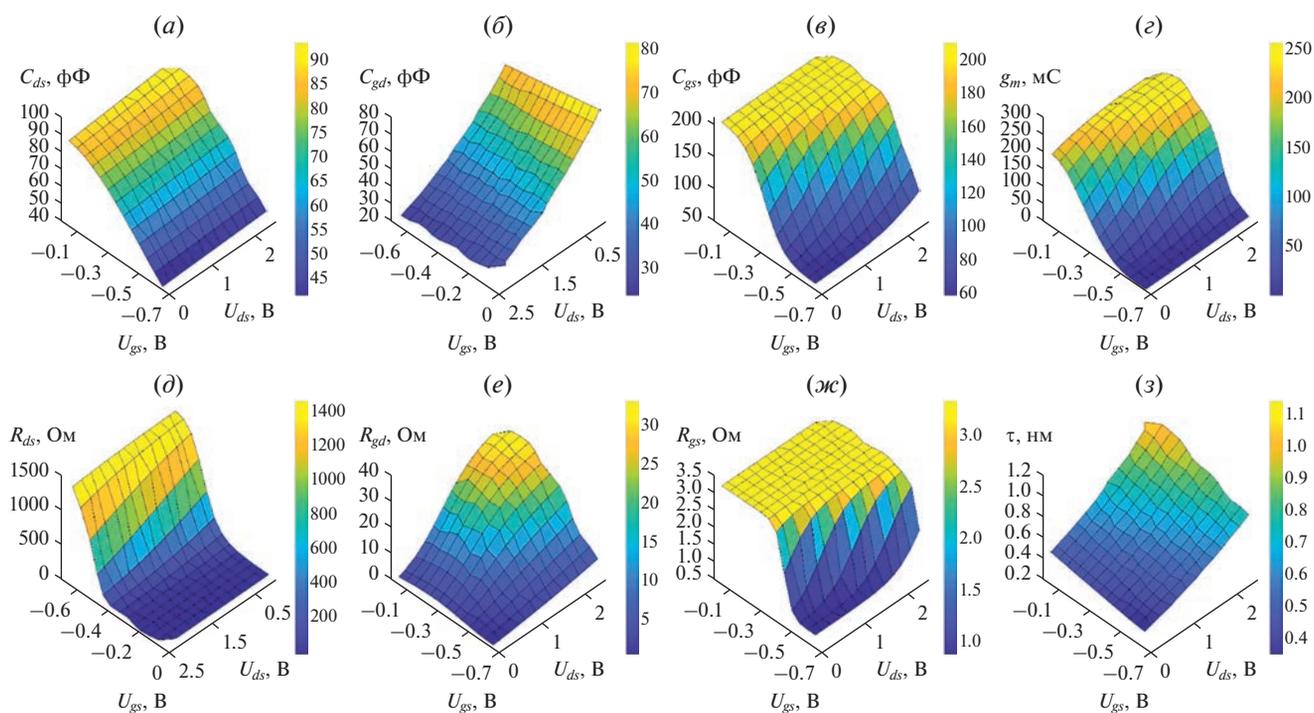


Рис. 7. Зависимости внутренних параметров транзистора от приложенных напряжения питания и смещения согласно формулам (19)–(26): (а) $C_{ds}(U_{gs}, U_{ds})$; (б) $C_{gd}(U_{gs}, U_{ds})$; (в) $C_{gs}(U_{gs}, U_{ds})$; (г) $g_m(U_{gs}, U_{ds})$; (д) $R_{ds}(U_{gs}, U_{ds})$; (е) $R_{gd}(U_{gs}, U_{ds})$; (ж) $R_{gs}(U_{gs}, U_{ds})$; (з) $\tau(U_{gs}, U_{ds})$.

мальное значение ошибки не превышает 1.5% в частотном диапазоне от 0.1 до 50 ГГц, при этом в модели используется всего 46 оптимизационных параметров, за счет этого достигается меньшее время расчета. Максимальное значение ошибки линейной модели не превышает 3.5%.

На рис. 9 представлены зависимости тока стока I_d от прикладываемого напряжения сток-исток U_{ds} при различных напряжениях на затвор-исток U_{gs} . Из рисунка следует, что теоретически

рассчитанные ВАХ совпадают с экспериментальными зависимостями.

С целью определения факторов, оказывающих доминирующее влияние на точность моделирования S -параметров транзистора, было проведено вариационное исследование точности в диапазоне $\pm 20\%$ от номинальных значений внутренних параметров нелинейной модели транзистора. На основе этих данных были получены двумерные поверхности, описывающие E (%) в зависимости

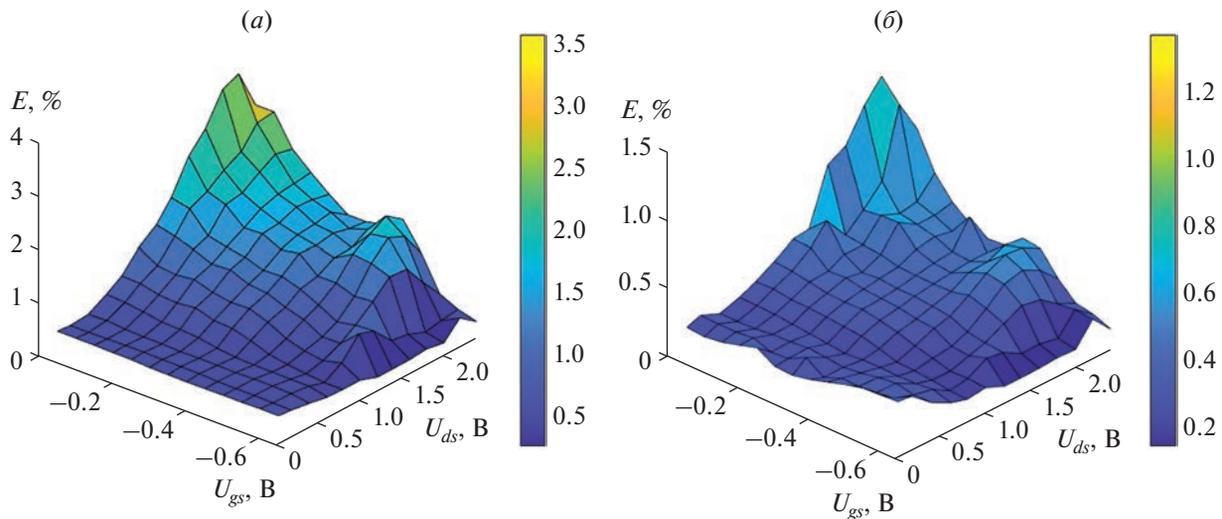


Рис. 8. Зависимости ошибки $E(U_{gs}, U_{ds})$ в диапазоне частот от 0.1 до 50 ГГц: (а) линейная модель; (б) нелинейная модель.

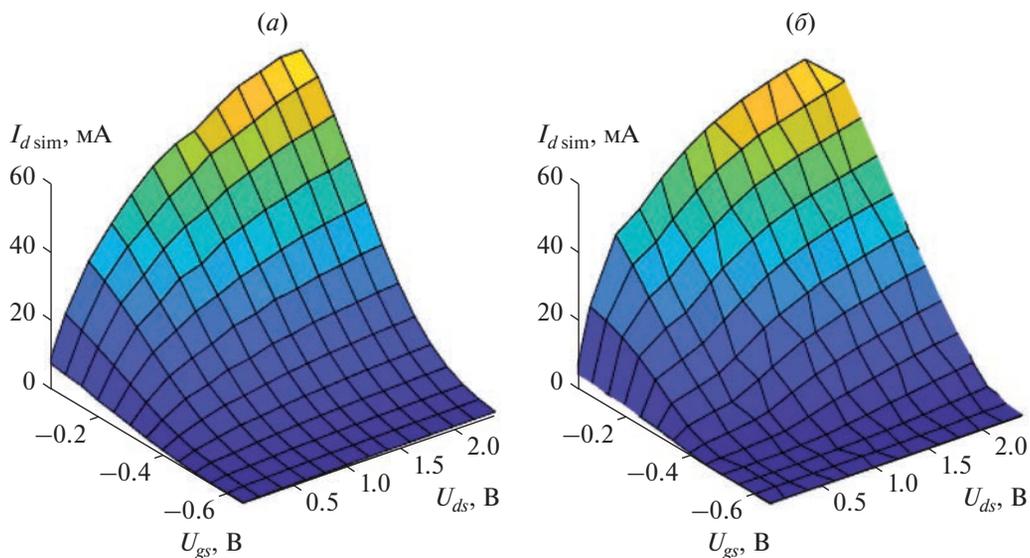


Рис. 9. Зависимости тока стока I_d от прикладываемого напряжения питания U_{ds} при различных напряжениях смещения U_{gs} : (а) смоделированные значения; (б) измеренные значения.

от значений внутренних параметров транзистора в частотном диапазоне от 0.1 до 50 ГГц (рис. 10). Цветным градиентом обозначено значение $E(\%)$, синий цвет соответствует минимальному значению, а оранжевый – максимальному. Под поверхностью построены контуры проекции минимальной ошибки моделирования.

Из результатов проведенных исследований следует, что подход построения нелинейной модели транзистора дает точное соответствие измеренных и смоделированных S -параметров и ВАХ. Полученные значения внутренних параметров

советуют минимальной ошибке моделирования. Изменение значений сопротивлений R_{gs} и R_{gd} не оказывают влияния на точность моделирования. Из рис. 9 также следует, что повышение точности возможно достичь путем решения задачи оптимизации в более узком диапазоне значений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование транзистора на основе метаморфной гетероструктуры InAlAs/InGaAs. Была предложена гибридная методика экстракции параметров эквивалентной

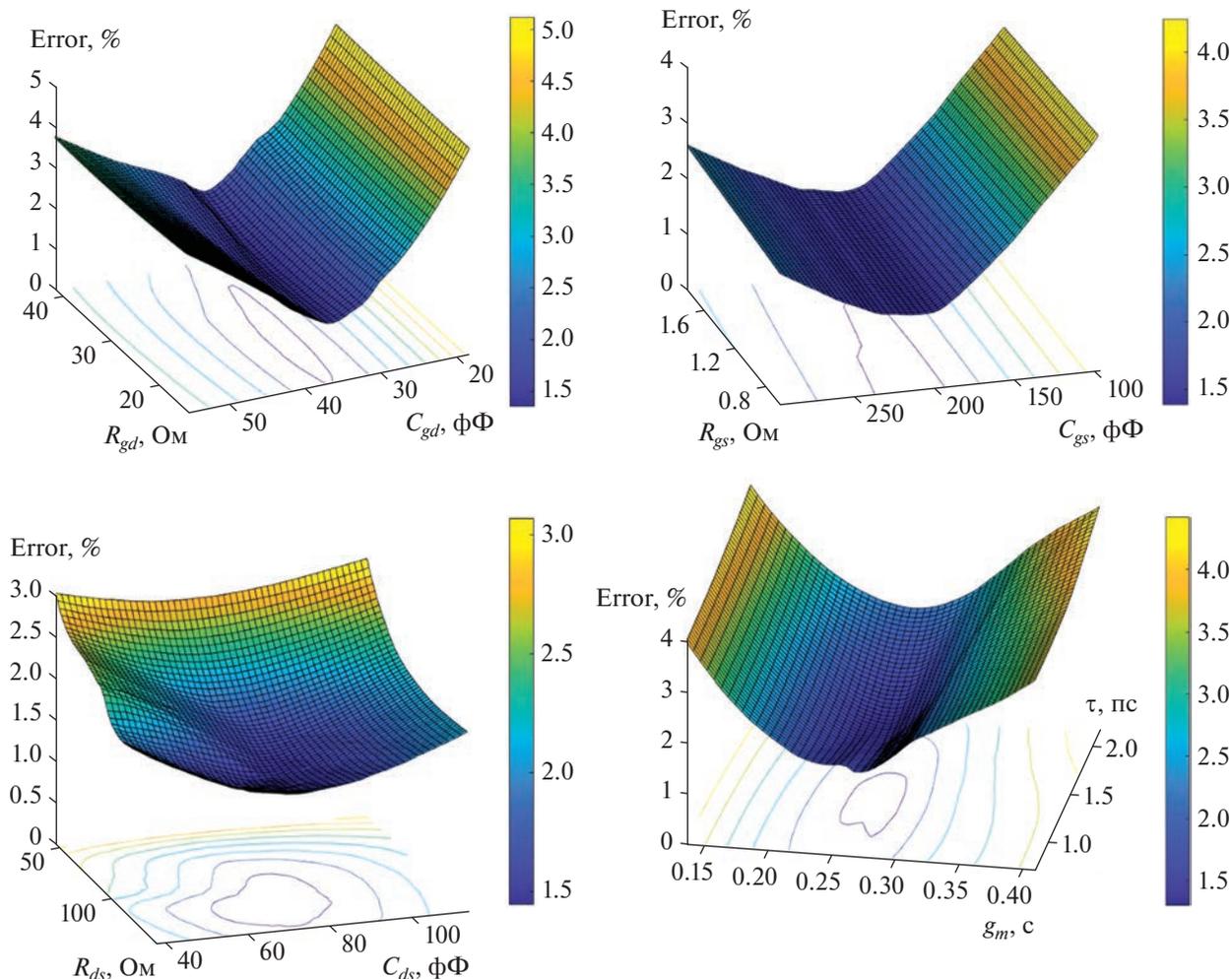


Рис. 10. Зависимости ошибки моделирования от значений внутренних параметров транзистора.

схемы транзистора с учетом нелинейных зависимостей внутренних параметров. Установлено, что расхождение экспериментальных и теоретически рассчитанных S -параметров не превышает 1.5% в диапазоне частот от 0.1 до 50 ГГц. Разработанная методика характеризуется высокой скоростью и точностью расчета значений параметров НЕМТ транзистора. Описанный подход применим для других типов полевых транзисторов, которых можно описать эквивалентной схемой, представленной на рис. 1. Полученные результаты могут быть использованы для построения многокаскадных усилителей диапазона частот до 50 ГГц.

Работа выполнена в рамках стратегического проекта СП4 НИЯУ МИФИ “Радиофотоника и квантовая сенсорика”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Dambrine G. et al.* A new method for determining the FET small-signal equivalent circuit // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1988. V. 36. № 7. P. 1151–1159.
2. *Yanagawa S., Ishihara H., Ohtomo M.* Analytical method for determining equivalent circuit parameters of GaAs FETs // IEEE Transactions on microwave theory and techniques. 1996. V. 44. № 10. P. 1637–1641.
3. *Anholt R., Swirhun S.* Equivalent-circuit parameter extraction for cold GaAs MESFET's // IEEE transactions on microwave theory and techniques. 1991. V. 39. № 7. P. 1243–1247.
4. *Manohar S., Pham A., Evers N.* Direct determination of the bias-dependent series parasitic elements in SiC MESFETs // IEEE transactions on microwave theory and techniques. 2003. V. 51. № 2. P. 597–600.
5. *Ooi B.L., Zhong Z., Leong M.S.* Analytical extraction of extrinsic and intrinsic FET parameters // IEEE transactions on microwave theory and techniques. 2009. V. 57. № 2. P. 254–261.
6. *Jarndal A., Kompa G.* A new small-signal modeling approach applied to GaN devices // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 2005. V. 53. № 11. P. 3440–3448.

7. *Brady R.G., Oxley C.H., Brazil T.J.* An improved small-signal parameter-extraction algorithm for GaN HEMT devices // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 2008. V. 56. № 7. P. 1535–1544.
8. *Berroth M., Bosch R.* High-frequency equivalent circuit of GaAs FETs for large-signal applications // IEEE transactions on Microwave Theory and Techniques. 1991. V. 39. № 2. P. 224–229.
9. *Chigaeva E. et al.* Determination of small-signal parameters of GaN-based HEMTs // Proceedings 2000 IEEE/Cornell Conference on High Performance Devices (Cat. No. 00CH37122). IEEE, 2000. P. 115–122.
10. *Angelov I., Zirath H., Rosman N.* A new empirical non-linear model for HEMT and MESFET devices // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1992. V. 40. № 12. P. 2258–2266.
11. *Fukui H.* Design of microwave GaAs MESFET's for broad-band low-noise amplifiers // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1979. V. 27. № 7. P. 643–650.
12. *Gorelov A.A. et al.* Parametrization of a Microwave and the Noise Model of a Metamorphic 0.15 μm MHET In-AlAs/InGaAs Transistor // Russian Microelectronics. 2021. V. 50. № 3. P. 170–177.

УДК 621.383.5

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОПРИЕМНИКОВ С БАРЬЕРАМИ ШОТТКИ НА ОСНОВЕ КОНТАКТА IRSI–SI

© 2023 г. Э. А. Керимов*

*Государственный технический университет, пр. Г. Джавида, 25, Баку, AZ 1073 Азербайджан***E-mail: E_Kerimov.fizik@mail.ru*

Поступила в редакцию 21.11.2021 г.

После доработки 10.01.2022 г.

Принята к публикации 11.01.2022 г.

Существенное увеличение коэффициента заполнения Шоттки-матриц достигается считыванием заряда, накопленного в Шоттки-диоде, не с помощью ПЗС (приборы с зарядовой связью) – регистров, а путем его инъекции в сигнальную шину, аналогично ПЗИ (приборы с зарядовой инъекцией) – структурам на узкозонных полупроводниках. В этом случае многоэлементная матрица содержит горизонтальные шины для опроса элементов выбранной строки, вертикальные сигнальные шины, МОП (металл–оксид–полупроводник) – ключ для подключения опрашиваемого столбца и матрицы фоточувствительных элементов, каждый из которых состоит из фоточувствительного Шоттки диода и МОП-ключа.

Ключевые слова: барьер Шоттки, силицид иридия, геометрический шум, фоточувствительность, Шоттки-матрицы, отжиг, диодные структуры

DOI: 10.31857/S0544126922030048, **EDN:** CXXNWH

1. ВВЕДЕНИЕ

Чувствительность приемных устройств, использующих многоэлементные матрицы Шоттки-диодов, как и других многоэлементных приемников, зависит от отношения площади, занимаемой непосредственно фоточувствительной поверхностью ко всей площади приемника, включая и считывающую структуру. При использовании в качестве считывающей системы ПЗС-регистров, в состав многоэлементного приемника должны входить электроды передачи зарядов и сигнальные шины сдвигового регистра, стоп – канальные области, электроды считывающих затворов и т.д. По этой причине, относительная доля фоточувствительной площади в многоэлементных Шоттки-матрицах (иногда ее называют коэффициентом заполнения), мала. Например, в одной из первых двухкоординатных матриц Шоттки диодов, она составляла лишь 16.4%. Путем уменьшения размеров элементов считывающей структуры, стоп – каналов и других нефоточувствительных областей, удалось повысить коэффициент заполнения, при сохранении достаточно большого динамического диапазона считывающей структуры. Так, в одной из последних разработок фирмы RCA, в матрице IrSi Шоттки-диодов, состоящих из 160×244 элементов, коэффициент заполнения составил 39%. Предполагается дальнейшее уменьшение размеров нефоточувствительных областей матрицы, что со-

гласно предположениям, должно увеличить коэффициент заполнения до максимальной величины, равной 83%.

Для увеличения коэффициента заполнения матрицы, можно также использовать оптическую преломляющую пластинку из прозрачного в ИК-области материала (кремния, германия), которую устанавливают в непосредственном контакте с той поверхностью матрицы, через которую происходит освещение приемных элементов. Эта пластинка должна изменять ход лучей таким образом, чтобы излучение фокусировалось только на фоточувствительные участки матрицы.

В последние годы разработан ряд новых фотоприемников: диодов Шоттки, МОП (металл–оксид–полупроводник) и МДП (металл–диэлектрик–полупроводник) структуры. Основными недостатками известных фотоприемников являются их низкая фоточувствительность и узкая область спектральной чувствительности. По сравнению с ДШ (диод Шоттки) и МДП-структур, фототранзистор одновременно выполняет роль предусилительного каскада.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Изготовлен фототранзистор (ПТШ – полевой транзистор Шоттки) с барьером Шоттки на основе контакта IrSi–Si индуцированного и *p*-канал-

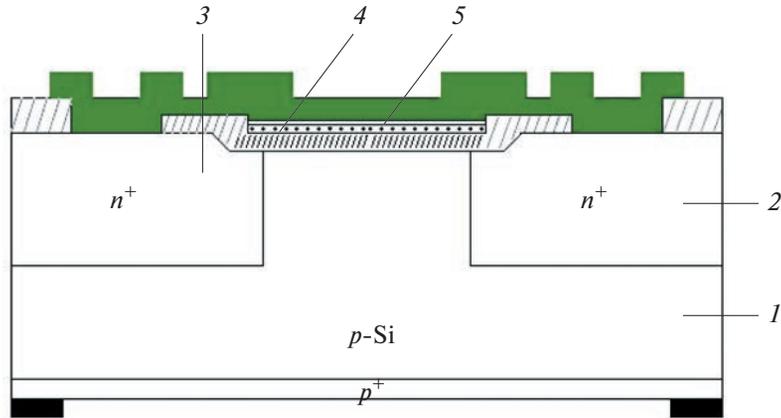


Рис. 1. Структура полевого транзистора с барьером Шоттки.

ный встроенного типа (рис. 1). Канал был сформирован внедрением ионов бора с энергией 50 кэВ и дозой $2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Истоки и стоки полевых транзисторов сформированы диффузией фосфора с поверхностным сопротивлением $8 \text{ Ом}/\square$ и диффузией бора $6 \text{ Ом}/\square$ на глубину 1.5 мкм. Затвор из IrSi получен ранее описанным методом. При работе ПТШ (полевой транзистор Шоттки) подложка 1 и исток 2 заземляются, а сток 3 соединяется через нагрузочное сопротивление с положительным полюсом источника. Таким образом, контакт Шоттки образованный методу пленками IrSi и кремнием 5, становится обратносмещенным. Поэтому пленка IrSi удерживает положительный заряд так, что полевой транзистор находится в откры-

том состоянии. При этом течет каналный ток, величина которого определяется нагрузочным сопротивлением и сопротивлением канала.

Исследованы вольт-амперные характеристики затвора полевого транзистора, управляемого барьером Шоттки, на основе контакта IrSi–Si. Зависимость токов затвора от напряжения показаны на рис. 2.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При увеличении напряжения ток затвора увеличивается, что, объясняется действием сил зеркального изображения темновой ток барьера Шоттки, описывается формулой:

$$I = SAT^2 \exp\left[-\frac{(\Phi_B - \Delta\Phi_B)}{kT}\right], \quad (1)$$

где S – площадь, A – эффективная постоянная Ричардсона, T – температура, Φ_B – высота потенциального барьера.

Согласно [1, 2] в режиме насыщения тока стока напряженность электрического поля в стоковой части канала на границе металл (IrSi)–полупроводник пропорциональна напряжению затвор–сток, поэтому изменение барьера равно:

$$\Delta\Phi_B = \alpha\sqrt{U_{зс}} = \sqrt{\frac{qE}{\epsilon}}, \quad (2)$$

а ток обратносмещенного барьера

$$I = SAT^2 \frac{\exp(\alpha\sqrt{U_{зс}} + \alpha_B)}{kT}, \quad (3)$$

или

$$\ln \tau = \ln(SAT^2) - \frac{\Phi_B}{kT} + \frac{2\sqrt{U_{зс}}}{kT}. \quad (4)$$

Зависимость тока затвора ПТШ с индуцированным каналом показывает, что напряжения ИК-из-

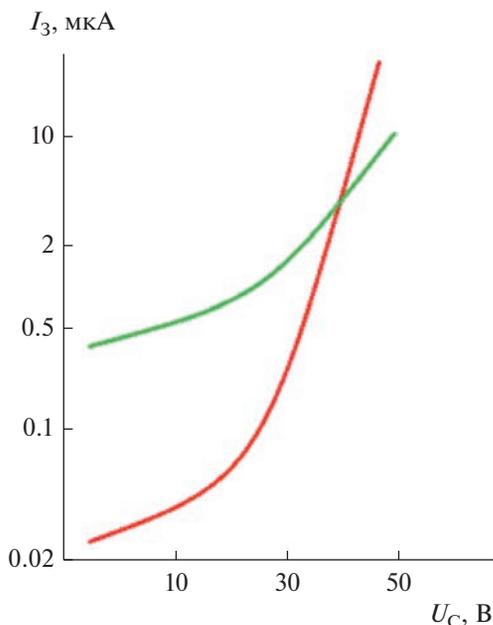


Рис. 2. Зависимость токов затвора от напряжения на стоке: 1 – при 80 К, 2 – при 300 К.

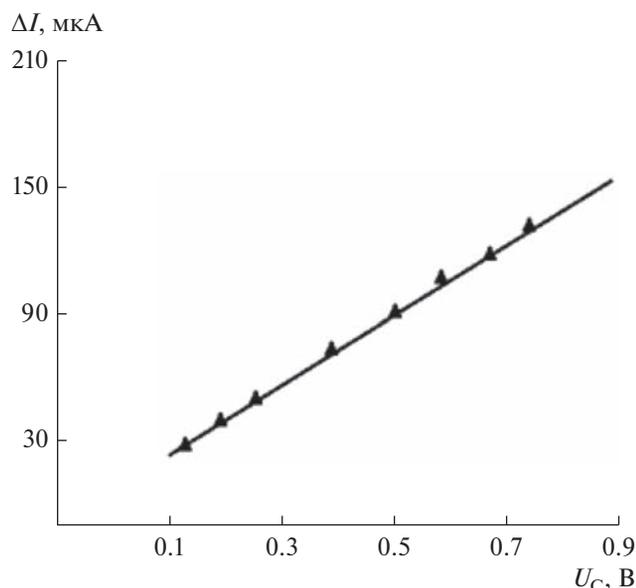


Рис. 3. Зависимость фототока от напряжения смещения.

лучением транзисторной структуры, положительный заряд, удерживаемый в пленке IrSi, разряжается в кремниевую пленку, образуя фототок в цепи затвора. Поэтому наблюдается падение напряжения на затворе в виде [3, 4]:

$$\Delta V_3 = I_{\Phi} R_{\text{ИЗ}}, \quad (5)$$

где I_{Φ} – фототок, $R_{\text{ИЗ}}$ – сопротивление канала исток – затвор.

Изменение напряжения на затворе:

$$g = -\frac{dI_C}{dV_3} \quad (6)$$

(где g – крутизна, I_C – ток проходящая через канал) вызывает изменение тока через канал на

$$\Delta I_C = g \Delta V_3 = g R_{\text{ИЗ}} I_{\Phi}. \quad (7)$$

Чувствительность к излучению фототранзистора определяется:

$$\frac{\Delta I_C}{\Phi} = \frac{g R_{\text{ИЗ}} I}{\Phi}, \quad (8)$$

где Φ – мощность ИК-излучению.

На рис. 3 приведена зависимость фототока в области насыщения от напряжения на полевом электроде.

Разработанный фотоприемник имеет следующие параметры:

– область спектральной чувствительности: 7.5–14.1 мкм;

– абсолютная токовая чувствительность при $\lambda = 9$ мкм; $S_{\lambda} = 6 \text{ mA/Vm}$;

– рабочая температура: 50–55 К;

– обнаружительная способность: $D = 10^{11} \text{ см Гц}^{-1/2} \cdot \text{Вт}^{-1}$;

– инерционность: $\tau \leq 5 \times 10^{-9} \text{ с}$.

Рассмотренный ИК-детектор может быть совмещен с элементами интегральных схем, что открывает широкие перспективы для его использования в многоэлементных инфракрасных фотоприемниках большой степени интеграции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выявлено что, зависимость тока затвора ПТШ с индуцированным каналом показывает, что напряжения с ИК-излучением транзисторной структуры, положительный заряд, удерживаемый в пленке IrSi, разряжается в кремниевую пленку, образуя фототок в цепи затвора. Поэтому наблюдается падение напряжения на затворе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курбатов *Ж.Н.* Оптоэлектроника видимого и инфракрасного диапазонов спектра // М.: изд. МФТИ, 1999. 320 с.
2. Справочник по инфракрасной технике (ред. Волф У., Цисис Г., перевод с англ. под ред. Мирошникова М.М., Васильченко Н.В.). М.: “Мир”, 1999. 472 с.
3. Иванов *В.Г.*, Иванов *Г.В.*, Каменев *А.А.* Многоэлементные ИК-приемники на основе барьеров Шоттки, чувствительные к излучению с энергией квантов меньше высоты потенциального барьера // Оптический журн. 2008. № 8. С. 53–59.
4. Иванов *В.Г.*, Иванов *Г.В.*, Каменев *А.А.* Способ увеличения граничной длины волны ИК-детектора с барьером Шоттки, ИК-детектор и фотоприемная матрица, чувствительная к ИК-излучению: Пат. 2335823 Российской Федерации от 23.10.2006.

КОНТАКТНО-ТРАНСПОРТНЫЕ И АВТОЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ 2D УГЛЕРОДНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

© 2023 г. Р. К. Яфаров^{1, *}, Н. О. Шабунин²

¹Саратовский филиал Института радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН, Саратов, Россия

²Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

*E-mail: pirpc@yandex.ru

Поступила в редакцию 18.05.2022 г.

После доработки 12.07.2022 г.

Принята к публикации 12.07.2022 г.

Приведены результаты электрических при комнатной температуре и автоэмиссионных измерений низкоразмерных 2D углеродных гетероструктур с различным электронным обогащением слоев. Установлено, что с уменьшением толщины обедненного электронами углеродного слоя до величины сравнимой с длиной волны де Бройля за счет размерного квантования увеличивается прозрачность потенциальных барьеров, которые приводят к усилению выпрямляющих свойств низкоразмерных углеродных гетероструктур и, более чем на порядок увеличивают максимальные полевые токи катодных матриц на их основе.

Ключевые слова: углеродные гетероструктуры, размерное квантование, контактно-транспортные процессы, прозрачность потенциальных барьеров, полевая эмиссия электронов

DOI: 10.31857/S0544126922700168, EDN: CXVITG

1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальной проблемой современной вакуумной эмиссионной электроники является создание сильноточных долговечных и стабильных автоэмиссионных катодов (АЭК), которые могли бы быть использованы взамен термокатодов в мощных СВЧ ЭВП, имеющих различные области применения, как в гражданских, так и в военных целях. На пути их создания имеется ряд принципиальных трудностей. Они связаны с тем, что управление прозрачностью потенциальных барьеров, определяющих плотности токов автоэмиссии электронов из твердого тела в вакуум, осуществляется в настоящее время, в основном, за счет высоких напряженностей внешних электрических полей ($\sim 10^{6-7}$ В/см). Такие напряженности близки к значениям электрической прочности большинства известных в природе материалов (напряженность поля лавинного пробоя кристаллического кремния составляет, например, 3×10^5 В/см). С учетом статистической неоднородности рельефа поверхности это приводит к неоднородности автоэмиссии по поверхности катодов, которая вызывает локальные перегревы эмиссионных центров и, как следствие, деструкцию поверхности, ухудшение стабильности тока автоэмиссии и долговечности катодов. В связи с этим, научной проблемой, на решение которой направлены усилия

ученых многих стран мира, является поиск и разработка альтернативных путей повышения прозрачности потенциальных барьеров при сравнительно низком уровне напряженности внешнего электрического поля. Успешное ее решение позволит создать новое поколение высокостабильных АЭК для современных ЭВП генераторов и усилителей мощности сантиметрового и миллиметрового диапазонов длин волн с микро и наносекундным временем готовности и долговечностью, не уступающей долговечности приборов с традиционными металлопористыми термокатадами. Применение полевых катодов в клистронах и ЛБВ приведет к качественному улучшению технических характеристик систем радиолокации, радиопротиводействия и бортовых радиосистем космических аппаратов.

Перспективным материалом для создания сильноточных полевых источников электронов для вакуумно-плазменных устройств средней и большой мощности являются нанокompозитные алмазографитовые пленочные структуры [1–3]. Они имеют более низкую, чем обычные углеродные пленки, работу выхода электронов. Это уменьшает электрофизическую нагрузку на материал автокатодов и позволяет получать источники электронов с высокой плотностью полевого тока и более продолжительным ресурсом эксплуатации. В

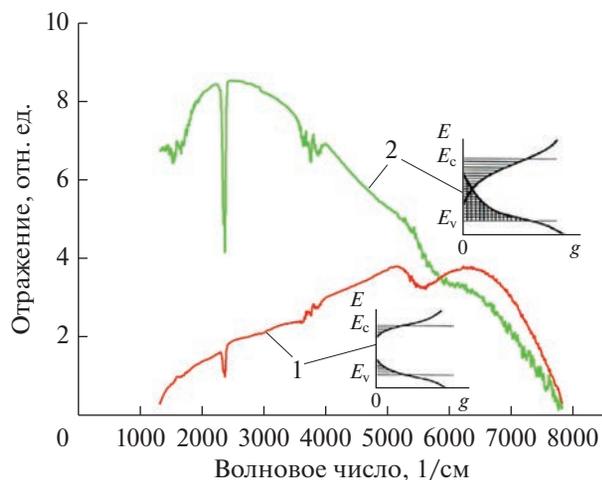


Рис. 1. Зависимости коэффициентов отражения от волнового числа для обедненных (1) и обогащенных (2) электронами углеродных пленочных структур (на вставках приведены расплывания зон локализованных состояний для соответствующих углеродных структур).

работе [4] исследовано влияние электропроводности алмазографитовых пленочных структур и схемы полевого токоотбора на параметры эмиссии источников электронов в сильных импульсных электрических полях микросекундной длительности. Установлено, что использование дополнительных управляющих электродов позволяет уменьшить пороги начала полевой эмиссии и, одновременно, увеличить максимальные плотности автоэмиссионных токов. Однако использование дополнительных электродов усложняет конструкцию автокатодов и, в целом, может уменьшать их надежность. Кроме того, большие внешние электрические поля, характерные для полевой эмиссии электронов, формируют в приповерхностном слое углеродной структуры области пространственного заряда, напряженность поля в которых может приводить к переходу сильноточной полевой эмиссии к взрывной эмиссии и гибели полевого катода [1, 5]. В связи с этим представляют большой практический интерес и важное фундаментальное значение разработка новых способов повышения плотностей полевых токов за счет формирования в автокатадах, по аналогии с [6], областей с неоднородными электрофизическими свойствами.

Цель работы – получение и исследование влияния неоднородности электрофизических свойств по координате на электронный транспорт и автоэмиссионные свойства в некристаллических 2D углеродных гетероструктурах.

2. МЕТОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Углеродные гетероструктуры с различным электронным обогащением слоев получали в одном тех-

нологическом цикле с использованием микроволновой плазмы паров этанола низкого давления по методике, изложенной в [2, 3]. В качестве нижнего слоя гетероструктур использовалась обогащенная электронами углеродная пленка толщиной около 200 нм с удельным поверхностным сопротивлением 150 кОм/□. Верхний слой обедненной электронами углеродной пленки имел различную толщину. Подключение углеродных гетероструктур к источнику питания для измерения ВАХ поперечного транспорта носителей заряда осуществлялось через никелевые контактные площадки, осажденные на каждом слое термическим испарением в вакууме.

Для характеристики степени электронного обогащения углеродных пленок использованы спектральные зависимости коэффициентов отражения электромагнитного излучения, полученные в инфракрасной области с помощью спектрофотометра IRAffinity с преобразованием Фурье фирмы Shimadzu (рис. 1). Коэффициенты отражения определяли по отношению к коэффициенту отражения эталонного зеркала, который известен в заданном спектральном диапазоне, с помощью оптической приставки для измерения относительного коэффициента отражения при нормальном падении. Из рис. 1 можно видеть, что обедненные электронами углеродные пленки наибольшие значения коэффициентов отражения имеют в коротковолновой части спектрального диапазона при сравнительно низких их значениях. Коэффициенты отражения обогащенных углеродных пленочных структур, свидетельствующие о величине и энергетическом диапазоне возбуждения электронного газа, увеличиваются по отношению к обедненным структурам более, чем в два раза, а их максимум реализуется в длинноволновой (низкоэнергетичной) части спектра.

Исследования автоэмиссионных свойств углеродных гетероструктур проводились в условиях высокого вакуума (10^{-6} Па) на диодной структуре, способной изменять расстояние между электродами с точностью до 1 мкм по методикам изложенных в работах [7, 8]. Расстояние между анодом и катодной структурой составляло 40 мкм. Диаметр рабочей поверхности анода, изготовленного из углеродного материала МПГ-6, составлял 3 мм. Пороги начала автоэмиссии определяли по напряженности электрического поля, при которой полевые токи составляли 5 мкА. Автоэмиссионными измерениями в сильных импульсных электрических полях микросекундной длительности по методике, изложенной в [2], установлено, что в обогащенных углеродных пленках работа выхода электронов составляет 4.8, а в обедненных 4.6 эВ. Работа выхода электронов у никеля составляет 5.1 эВ.

С использованием высокотемпературных измерений показано, что обогащенные углеродные пленки обладают, по сравнению с обедненными,

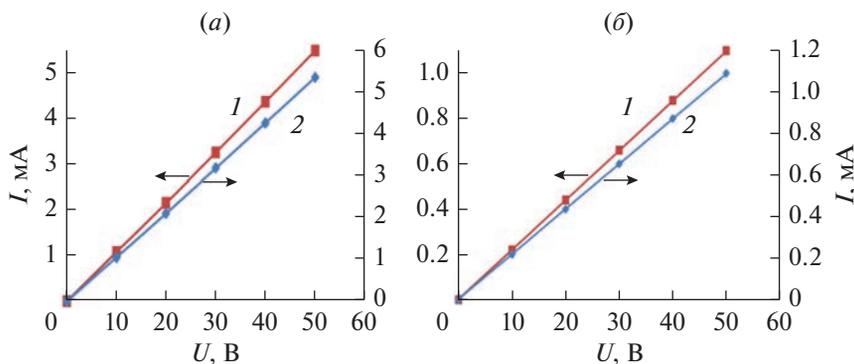


Рис. 2. ВАХ углеродных гетероструктур с различными толщинами обедненного слоя при прямом (1) и обратном (2) включениях источника питания: (а) 5 нм; (б) 100 нм.

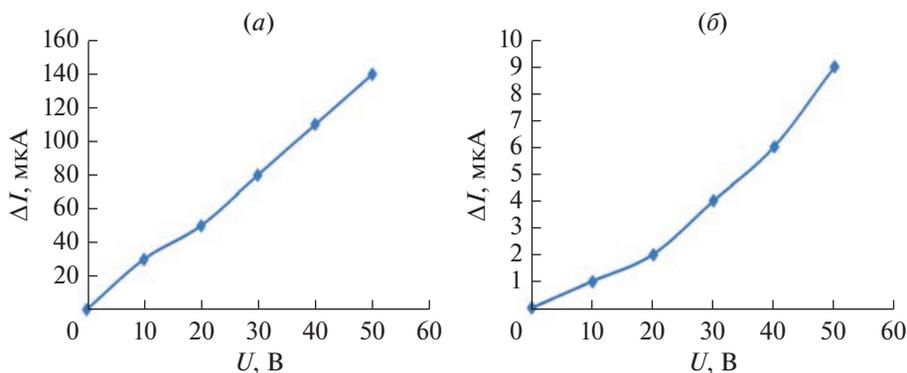


Рис. 3. Зависимости от стационарных напряжений разностей токов при прямом и обратном включениях углеродных гетероструктур с различными длительностями осаждения обедненного слоя: (а) 5 нм, (б) 100 нм.

более сильными полупроводниковыми свойствами. Это выражается в ускоренном увеличении тока за счет джоулева тепловыделения при пропускании тока через углеродные пленки различной степени обогащения и одинаковой при комнатной температуре электропроводности с увеличением напряжения между контактами, расположенными на их поверхности. Для обедненных носителями пленок отклонение от закона Ома выражено значительно слабее и наступает при больших напряжениях. Вследствие этого при напряжении 250 В ток в обогащенных пленках превышал ток в обедненных пленках более, чем в два раза.

На рис. 2, 3 приведены результаты исследования ВАХ и выпрямительных свойств углеродных гетероструктур в зависимости от толщины обедненной носителями пленки на обогащенной пленке с фиксированной толщиной. Можно видеть, что при включении гетероструктуры в электрическую цепь, когда отрицательный потенциал источника питания соединен с контактной площадкой обогащенной углеродной пленки, ток больше, чем при обратном включении. Разность между токами при прямом и обратном включениях увеличивается с возрастанием разности потенциалов. При напряжении 50 В ток через гетероструктуру с толщиной обедненной пленки 5 нм, по сравнению с

пленкой толщиной 100 нм, увеличился от 1.2 до 5.6 мА, а разность между токами увеличилась от 9 до 140 мкА.

На рис. 4 приведены обобщенные зависимости токов между контактами слоев гетероструктуры и их разностей при прямом и обратном включениях с разностью потенциалов 50 В от толщины обедненной углеродной пленки. Можно видеть, что при толщинах меньше 25–30 нм токи через гетероструктуры и разности токов между токами при различной полярности подключения источника питания увеличиваются практически синхронно.

Из измерений автоэмиссионных ВАХ углеродных гетероструктур в зависимости от толщины обедненной электронами углеродной пленки установлено, что с увеличением толщины в интервале от 5–10 до 20 нм пороги начала эмиссии и полевой ток увеличиваются (рис. 5, 6). Максимальное значение тока реализуется при 20 нм. Он более, чем на порядок превышает ток, полученный в отсутствие обедненного слоя. Крутизна ВАХ при этой толщине, по сравнению с меньшими толщинами, существенно уменьшается. При толщине 5 нм, по сравнению с отсутствием обедненной пленки, при незначительном увеличении порога начала эмиссии, плотность полевого тока увеличивается в 4–5 раз. При увеличении толщи-

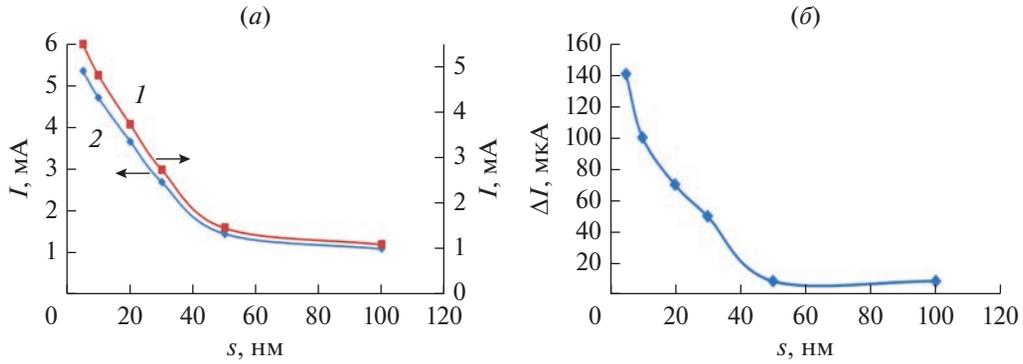


Рис. 4. Зависимость токов в гетероструктурах (а) и разностей токов (б) при прямом (1) и обратном (2) включениях при разности потенциалов между слоями 50 В от толщины обедненного углеродного слоя.

ны больше 20 нм пороги начала эмиссии остаются высокими, а плотности полевых токов и крутизна ВАХ низкими. Такие параметры характерны для одиночных слоев обедненных углеродных пленок.

В контакте между двумя углеродными слоями с различным электронным обогащением, когда работа выхода из обедненного слоя меньше, чем из обогащенного, в результате перемещения носителей возникает электрическое поле E_{cl} , которое препятствует переходу электронов из обедненного слоя в обогащенный. Возникшая в контакте разность потенциалов равна $e\phi_k = \Phi_+ - \Phi_-$, где Φ_+ и Φ_- — термодинамические работы выхода электронов из обогащенного и обедненного электродами углеродных слоев, соответственно [9].

При равенстве объемных зарядов в приконтактных областях слоев разность потенциалов в них пропорциональна толщине областей объемного заряда. В приконтактной области обедненной пленки возникает слой с пониженной удельной проводимостью (запорный слой). В приконтактной области обогащенной пленки проводимость еще больше увеличивается. Размер антизапорного слоя приконтактной области обогащен-

ного слоя значительно меньше, чем толщина запорного слоя в обедненном электронами слое.

В равновесном состоянии в обоих внешних контактах металл — электронный полупроводник

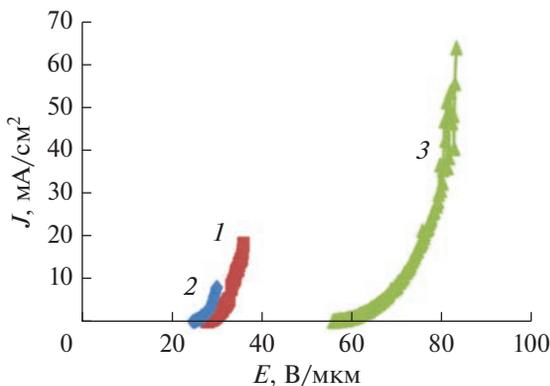


Рис. 5. Автоэмиссионные ВАХ углеродных гетероструктур с различной толщиной обедненного углеродного слоя, нм: 1 — 5; 2 — 10; 3 — 20.

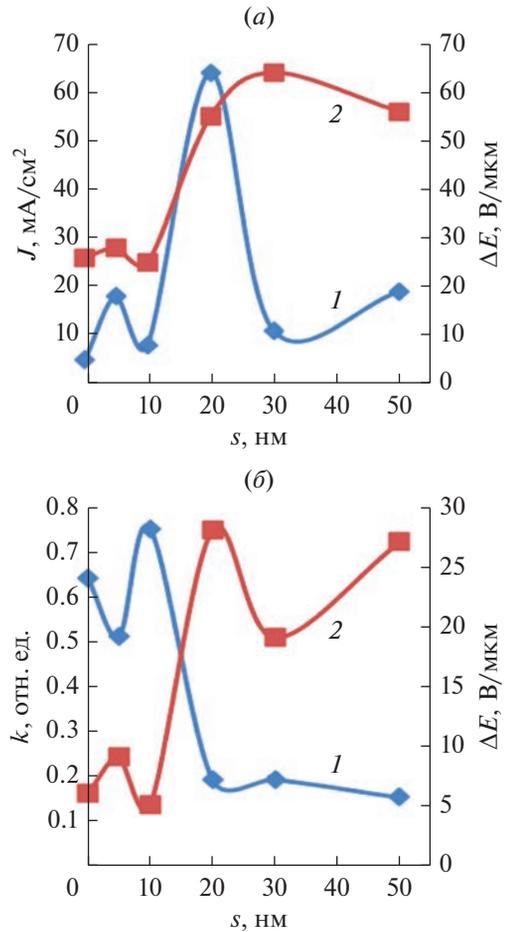


Рис. 6. Зависимости максимальных плотностей автоэмиссионных токов (1) и порогов активации эмиссии (2) (а), а также крутизны ВАХ (1) и диапазонов рабочих напряженностей анодных полей (2) (б) в углеродных гетероструктурах от толщины обедненного слоя.

при $\Phi_m > \Phi_y$ возникают электрические поля E_c , которые препятствуют переходу электронов из углеродных слоев в металл, а в их приконтактных областях возникают запирающие слои. Толщины слоев тем меньше, чем больше степень легирования и меньше разность работ выхода электронов. Таким образом, в контакте металл – обогащенный слой толщина обедненного носителями слоя меньше, чем в контакте металл – обедненный углеродный слой.

При подключении положительного полюса источника питания к контакту металл – обогащенный электронами углеродный слой контактная разность потенциалов уменьшится и станет равной ($\phi_k - V$). Результатом этого является снижение потенциального барьера со стороны обогащенной углеродной структуры и прохождение тока через контакт, равного разности токов термоэлектронной эмиссии, направленного от металла к слою и в обратном направлении при более интенсивном переходе электронов из углеродного слоя в металл, по сравнению с равновесным состоянием. Этот переход электронов обусловит ток термоэлектронной эмиссии, направленный от металла в углеродный слой. При этом во внутреннем контакте потенциальный барьер со стороны обедненного носителями слоя также снижается. Это вызывает более интенсивный переход электронов из обедненного носителями углеродного слоя в обогащенный.

На противоположном контакте гетероструктуры в это время реализуется обратное включение источника, при котором потенциальный барьер со стороны обедненного углеродного слоя увеличится на приложенную разность потенциалов. В этом контакте толщина обедненного носителями слоя, больше, чем на противоположном контакте, что существенно ухудшает проводимость гетероструктуры.

Подключение положительного полюса источника питания к металлическому контакту с обедненным носителями углеродному слою снижает потенциальный барьер с его стороны (в предыдущей полярности подключения он имел наибольшую толщину запирающего слоя). При этом, как во внутреннем контакте двух полупроводников, так и во внешнем контакте металл – обогащенный полупроводник, для которого такое подключение является обратным, потенциальные барьеры увеличиваются. Однако, в виду более высокой концентрации электронов в обогащенном носителями слое общее увеличение удельного сопротивления в контактах не столь велико, как при подключении положительно полюса к контакту с противоположной стороны. Результатом этого является больший ток через гетероструктуру при положительном потенциале в контакте металл – обедненный носителями углеродный слой (рис. 2 и рис. 4а).

При уменьшении толщины обедненного носителями углеродного слоя меньше дебаевской

длины экранирования электрическое поле от прилежащего к нему контакта источника питания проникает в обогащенный носителями углеродный слой и в зависимости от знака, приложенного на контакте потенциала, увеличивает или уменьшает величину потенциального барьера в контакте между слоями. При положительном потенциале на контакте с обедненным носителями слое в приконтактной области между слоями возникает 2D электронный газ [4]. Критерием перехода к размерному квантованию служит уменьшение толщины слоя до величины порядка длины волны де Бройля электрона, которая при комнатной температуре составляет около 25 нм. При уменьшении толщины до этой величины прозрачность потенциально барьера между слоями увеличивается. Это позволяет электронам преодолевать барьер за счет туннельного эффекта.

Выражение для прозрачности произвольного барьера может быть записано в виде [9]:

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{h} \int_0^l \sqrt{2m(U - W)} dx \right], \quad (1)$$

где $h = 6.62 \times 10^{-34}$ Джс – постоянная Планка, m – масса туннелирующей частицы, U – потенциальная энергия, W – энергия электрона, падающего на барьер. Из этого выражения следует, что вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер очень сильно зависит не только от ширины барьера, но и его превышения над уровнем энергии туннелирующего электрона W , то есть от $U - W$ или, в конечном счете, от высоты барьера, определяемой работой выхода.

Оценки показывают, что в нанокристаллических структурах с квантовым ограничением в одном или во всех трех направлениях энергия нулевых колебаний электронов увеличивается от 0.2 до 0.6 эВ. Таким образом, одновременно с уменьшением толщины потенциального барьера в виде обедненного электронами углеродного слоя до размеров сравнимых с длиной волны де Бройля уменьшается превышение высоты потенциального барьера над уровнем энергии туннелирующего электрона. Это увеличивает плотности токов, по сравнению с положительной полярностью источника питания в контакте с обогащенным углеродным слоем. Согласно экспериментальным результатам, приведенным на рис. 4, проявления размернозависимых эффектов происходят при толщинах обедненной углеродной пленки меньше 30 нм.

Результаты электрических измерений выпрямляющих свойств углеродных гетероструктур в зависимости от толщины обедненного углеродного слоя коррелируют с измерениями автоэмиссионных ВАХ (рис. 5, 6). При толщинах обедненных слоев 5–10 нм с изначально наиболее высокой, согласно выражению (1), прозрачностью потенциального барьера и низким омическим со-

противлением поперечному транспорту электронов, пороги начала полевой эмиссии электронов остаются на уровне порога однослойной обогащенной углеродной структуры. Собственная (нулевая) энергия энергетического уровня в таких потенциальных ямах (~0.2 эВ) значительно превышает спектральный диапазон энергий электронов в твердом теле при комнатной температуре. При приложении внешнего электрического поля энергетические уровни квантовой ямы снижаются. При их вхождении в спектральный энергетический диапазон электронов в твердом теле крутизна ВАХ резко увеличивается. Высокие скорости увеличения полевого тока приводят к снижению его максимального значения. Это обусловлено уменьшением электрической прочности углеродной структуры в связи с развитием процессов ударной ионизации. Полевые токи в этих случаях близки к максимальным полевым токам обогащенных носителями однослойных углеродных пленочных структур.

С увеличением толщины обедненного слоя пропорционально увеличивается сопротивление поперечному транспорту электронов, результатом чего является увеличение порога начала полевой эмиссии, и, одновременно с этим, обратно пропорционально квадрату толщины уменьшается нулевая энергия. Поэтому, вероятнее всего, при толщине обедненного слоя около 20 нм собственные энергетические уровни располагаются ближе к максимуму распределения электронов по энергиям в твердом теле без приложения внешнего электрического поля. В этом случае увеличение полевого тока согласно теории Фаулера и Нордгейма может осуществляться при меньшей напряженности внешнего электрического поля. Следствием этих факторов является снижение подвижности электронов и выделяемой мощности в приповерхностной области обедненного носителями слоя, которые уменьшают интенсивность потери электрической прочности материала и увеличивают максимальные полевые токи.

При толщинах обедненных слоев больше 20 нм его прозрачность снижается, а электрическое сопротивление поперечному транспорту электронов еще больше увеличивается. Это увеличивает разность потенциалов по обе стороны обедненного поверхностного углеродного слоя и при превышении пробивного напряжения приводит к электротепловому пробую и разрушению эмиссионной пленочной структуры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием микроволновой плазмы паров этанола низкого давления разработана технология получения некристаллических углеродных пленочных структур с различными электронным обогащением и работой выхода электронов. Исследованиями вольт амперных характеристик гете-

роструктур, изготовленных на основе полученных углеродных пленок, впервые показано, что при толщине обедненного слоя сравнимой с длиной волны де Бройля формируется туннельный переход, который в разы увеличивает термоэмиссионный ток и более, чем на порядок, разность токов при прямом и обратном включении гетероструктуры.

Исследованиями влияния ширины потенциального барьера обедненной электронами модификации туннельно тонкого углеродного слоя на обогащенной некристаллической матрице на полевую эмиссию электронов в 2D гетероструктурах показано, что в зависимости от напряженности электрического поля и толщины обедненного носителями углеродного слоя реализуются различные условия для туннелирования электронов. При оптимальной толщине потенциального барьера бездиссипативный транспорт, более чем на порядок, увеличивает максимальные полевые токи из катодных матриц на основе низкоразмерных углеродных гетероструктур с различным электронным обогащением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фурсей Г.Н., Поляков М.А., Кантонистов А.А., Яфясов А.М., Павлов Б.С., Божевольнов В.Б. Автоэлектронная и взрывная эмиссия из графеноподобных структур // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 6. С. 71–77.
2. Усанов Д.А., Яфаров Р.К. Методы получения и исследования самоорганизующихся наноструктур на основе кремния и углерода // Учеб.-метод. пособие для студентов фак. нано- и биомед. технологий. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2011. 124 с.
3. Давидович М.В., Яфаров Р.К. Автоэмиссионная шахматная структура на основе алмазографитовых кластеров // ЖТФ. 2018. Т. 88. Вып. 6. С. 283–293.
4. Яфаров Р.К., Нефедов Д.В. Влияние электропроводности углеродных пленочных наноконструктов на автоэмиссионные характеристики планарно-торцевых источников электронов // Радиотехника. 2019 № 7(10). С. 45–51.
5. Яфаров Р.К., Нефедов Д.В., Сторублев А.В. Вакуумно-плазменные процессы при экстремальной полевой эмиссии в алмазографитовых источниках электронов. // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2021. Т. 20. Вып. 1. С. 69–89.
6. Mori T., Hamaguchi C., Shibatomi A. Hot electron effect in short $n^+ - n - n^+$ GaAs structures // Jap. J. Appl. Phys. 1984. V. 23. № 2. P. 212–215.
7. Яфаров Р.К. Влияние плазмохимической модификации поверхности на электронный транспорт и работу выхода в кремниевых кристаллах // ФТП. 53 (1). 18 (2019).
8. Яфаров Р.К. Автоэмиссия многоострижных катодных матриц на кремнии p -типа в сильных импульсных электрических полях // Письма в ЖТФ. 45 (9). 3 (2019).
9. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977. 672 с.
10. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983. 664 с.

УДК 537.525

ПАРАМЕТРЫ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ И КИНЕТИКА РЕАКТИВНО-ИОННОГО ТРАВЛЕНИЯ SiO_2 В ПЛАЗМЕ $\text{CF}_4/\text{C}_4\text{F}_8/\text{Ar}/\text{He}$

© 2023 г. А. М. Ефремов¹ *, К.-Н. Kwon²¹ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
Шереметевский просп., 7, Иваново, 153000 Россия²Korea University, Sejong, 339-700 South Korea

*E-mail: amefremov@mail.ru

Поступила в редакцию 01.02.2022 г.

После доработки 12.05.2022 г.

Принята к публикации 12.05.2022 г.

Проведено исследование электрофизических параметров плазмы, концентраций атомов фтора и кинетики реактивно-ионных гетерогенных процессов в смеси $\text{CF}_4 + \text{C}_4\text{F}_8 + \text{Ar} + \text{He}$ при варьировании соотношения Ar/He и мощности смещения в условиях индукционного ВЧ 13.56 МГц разряда. Схема исследования включала диагностику плазмы с помощью зондов Лангмюра и оптической эмиссионной спектроскопии, а также измерение скоростей и анализ механизмов травления SiO_2 в приближении эффективной вероятности взаимодействия. Установлено, что замещение аргона на гелий оказывает заметное влияние на кинетику и концентрацию атомов фтора через параметры электронной компоненты плазмы. Напротив, увеличение мощности смещения практически не отражается на составе газовой фазы, но сопровождается пропорциональным изменением энергии ионной бомбардировки. Найдено, что в исследованном диапазоне условий процесс травления SiO_2 характеризуется отсутствием ионно-лимитируемых стадий, при этом поведение его скорости определяется кинетикой гетерогенной реакции $\text{Si} + x\text{F} \rightarrow \text{SiF}_x$. Переменное значение эффективной вероятности данной реакции отслеживает изменение доли свободных активных центров, определяемой скоростями высаживания и деструкции фторуглеродной полимерной пленки.

Ключевые слова: плазма, тетрафторметан, октафторциклобутан, кинетика, механизм, травление, полимеризация

DOI: 10.31857/S0544126922700041, EDN: CXQZWN

1. ВВЕДЕНИЕ

Фторуглеродные газы семейства C_xF_y традиционно используются в технологии интегральной микроэлектроники при проведении процессов реактивно-ионного травления (РИТ) кремния и его соединений в реакторах индуктивно-связанной плазмы [1–3]. Основным достоинством таких процессов является возможность независимого регулирования физической и химической составляющей скорости травления, что обеспечивает широкие возможности оптимизации анизотропии травления и селективности по отношению к материалу маски [3, 4]. Известно также, что выходные характеристики РИТ в значительной степени зависят от отношения y/x , которое предопределяет соотношение концентраций атомов фтора и полимеробразующих радикалов в газовой фазе [4–6]. В частности, плазма тетрафторметана (CF_4 , $y/x = 4$) представляет систему с низкой полимеризационной способно-

стью, в которой газификация атомов обрабатываемого материала доминирует над поверхностной полимеризацией [4, 7, 8]. Такая ситуация способствует достижению высоких скоростей травления и чистоты обрабатываемой поверхности, но формирует изотропный профиль травления и низкую селективность в системе SiO_2/Si [6, 7]. Напротив, плазма октафторциклобутана (C_4F_8 , $y/x = 2$) относится к системам с высокой полимеризационной способностью [4, 5]. Это обуславливает низкие скорости травления, но высокую анизотропию процесса (за счет маскирования полимером боковых стенок формируемого рельефа [4–6]) и селективность в системе SiO_2/Si (за счет меньшей толщины полимерной пленки на кислородсодержащей поверхности [9]).

Одной из тенденций развития современной технологии РИТ является использование многокомпонентных плазмообразующих смесей, комбинирующих один или несколько фторуглеродных компонентов с инертными и/или молекуляр-

ными газами. Очевидно, что начальный состав таких смесей является дополнительным инструментом регулирования концентраций активных частиц и кинетики гетерогенных процессов, определяющих конечный результат обработки. Так, например, соотношение фторуглеродных компонентов с различными параметрами y/x позволяет управлять концентрациями атомов фтора и полимеробразующих радикалов без существенных изменений характеристик ионной и электронной компонент плазмы [10–12]. В то же время, замещение фторуглеродного компонента на аргон сопровождается усилением ионной составляющей процесса травления за счет увеличения плотности потока ионов [13–15]. Очевидно, что выбор оптимального состава смеси для целей конкретного процесса требует понимания сути физико-химических явлений, формирующих электрофизические параметры плазмы и концентрации активных частиц. Сложность ситуации здесь обусловлена тем, что каждый из компонентов является не только индивидуальным активным газом, но изменяет кинетику плазмохимических процессов с участием других компонентов и/или продуктов их диссоциации за счет появления новых каналов химического взаимодействия и изменения параметров электронной компоненты плазмы. Таким образом, исследования физико-химических свойств плазмы в многокомпонентных смесях фторуглеродных газов являются актуальной задачей, обеспечивающей оптимизацию выходных характеристик РИТ и, в конечном итоге, повышение функциональности конечных изделий.

Целью данной работы являлось а) исследование электрофизических параметров и состава плазмы индукционного ВЧ (13.56 МГц) разряда в смеси $\text{CF}_4 + \text{C}_4\text{F}_8 + \text{Ar} + \text{He}$ при варьировании соотношения Ar/He и мощности смещения; и б) анализ кинетики и механизмов РИТ SiO_2 в приближении эффективной вероятности взаимодействия. Ранее в наших работах [16, 17] было показано, что характер изменения данного параметра при постоянной температуре обрабатываемой поверхности позволяет достаточно надежно идентифицировать сторонние (за исключением концентрации реагирующих частиц) факторы, влияющие на эффективность гетерогенной химической реакции. Выбор варьлируемых параметров продиктован тем, что оба их них представляют “физический” механизм воздействия на кинетику РИТ, реализуемый либо через параметры газовой фазы, либо напрямую, через изменение энергии бомбардирующих ионов. Поэтому представляет интерес сравнение масштабов достигаемых эффектов и возможностей их регулирования в реальном технологическом процессе.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Оборудование и условия эксперимента

Эксперименты проводились при возбуждении индукционного ВЧ (13.56 МГц) разряда в реакторе планарного типа с цилиндрической ($r = 13$ см, $l = 16$ см) рабочей камерой из анодированного алюминия [15–17]. Набор постоянных параметров включал общий расход плазмообразующего газа ($q = 114$ станд. $\text{см}^3/\text{мин}$), его рабочее давление ($p = 10$ мтор) и вкладываемую мощность ($W = 50$ Вт), что соответствовало удельной мощности ~ 0.05 Вт/ см^3 . В качестве варьируемых величин выступали мощность смещения ($W_{dc} = 200\text{--}500$ Вт) и начальный состав плазмообразующей смеси. Последний задавался парциальными расходами аргона и гелия (суммарно 100 станд. $\text{см}^3/\text{мин}$) при постоянных значениях $q_{\text{CF}_4} = 3$ станд. $\text{см}^3/\text{мин}$ и $q_{\text{C}_4\text{F}_8} = 11$ станд. $\text{см}^3/\text{мин}$. Соответственно, варьирование параметра q_{He} в диапазоне 0–97 станд. $\text{см}^3/\text{мин}$ обеспечивало увеличение доли этого газа $y_{\text{He}} = q_{\text{He}}/q$ до 85% за счет пропорционального снижения содержания аргона.

Подвергаемые травлению образцы представляли собой фрагменты термически окисленных пластин Si(100) размером $\sim 2 \times 2$ см, размещаемые в центральной части нижнего электрода. Для стабилизации температуры электрода после зажигания плазмы использовалась встроенная система водяного охлаждения с автоматическим регулированием потока хладагента. Поверхность образцов была частично маскирована фоторезистом AZ1512 с толщиной слоя ~ 1.5 мкм. Высоту ступеньки травления на границе маскированной и немаскированной областей Δh измеряли профилометром Alpha-step D-500 (KLA-Tencor, USA). Значение времени травления τ выбиралось в пределах квазилинейного участка кинетической зависимости $\Delta h = f(\tau)$, соответствующего стационарному процессу. Наличие стационарной области в пределах $\tau < 5$ мин обеспечивается, по нашему мнению, постоянством температуры образца и отсутствием эффекта лимитирования скорости травления диффузией атомов фтора в слое фторуглеродного полимера. Согласно данным работ [8, 9], последнее условие допускает существование тонкой сплошной (менее 1 нм) или дискретной полимерной пленки, не приводящей к заметному снижению плотности потока атомов фтора на границе полимер/SiO₂ по сравнению со значением данного параметра на границе плазма/полимер. Эксперименты показали также, что увеличение площади обрабатываемой поверхности (числа одновременно загружаемых образцов) не приводит к снижению скорости травления $R = \Delta h/\tau$ и не сопровождается заметными возмущениями электрофизических параметров плазмы, определяе-

мых по результатам зондовых измерений. Это позволяет заключить, что процесс травления протекает в кинетическом режиме и характеризуется пренебрежимо малым влиянием продуктов травления на характеристики газовой фазы.

2.2. Зондовая диагностика плазмы

Для получения информации по электрофизическим параметрам плазмы использовался двойной зонд Лангмюра DLP2000 (Plasmat Inc., Korea). Зондовая головка вводилась в реактор через вакуум-плотный порт на боковой стенке рабочей камеры и была отцентрирована в радиальном направлении. Обработка измеренных вольт-амперных характеристик (ВАХ) проводилась на основе известных положений зондовой теории для рядов низкого давления [4, 18]. Результатами обработки являлись данные по температуре электронов (T_e) и плотности ионного тока (J_+). Для минимизации искажений зондовых ВАХ из-за полимеробразования на зондах была задействована система импульсной очистки рабочей поверхности зондов ионной бомбардировкой. Кроме этого, перед каждым измерением зонды дополнительно обрабатывались в плазме 50% Ar + 50% O₂ в течение ~2 мин. Эффективность процедуры очистки подтверждалась отсутствием принципиальных различий зондовых ВАХ, измеряемых последовательно в течение 5 мин после зажигания плазмы. Величину отрицательного смещения на нижнем электроде $-U_{dc}$ контролировали высоковольтным зондом AMN-CTR (Youngsin Eng, Korea).

2.3. Оптико-спектральная диагностика плазмы

Для получения информации по стационарным концентрациям атомов F использовалась оптическая эмиссионная спектроскопия в варианте внутренней актинометрии. Идея данного подхода заключается в том, что присутствие в смеси аргона, как основного компонента с заведомо известной концентрацией, позволяет отказаться от использования дополнительного газа-актинометра. В экспериментах использовалась аналитическая пара F 703.8 нм–Ar 750.4 нм, эмиссионные линии которой характеризуются а) заселением соответствующих излучающих состояний в процессах электронного удара; и б) низкими временами жизни возбужденных состояний (высокими вероятностями оптических переходов), что позволяет пренебречь процессами не излучательной релаксации [19]. Расчеты концентраций атомов фтора n_F проводили по соотношению

$$\frac{n_F}{n_{Ar}} = C_{Ar}^F \frac{I_F}{I_{Ar}},$$

где I – интенсивности излучения, измеренные с помощью спектрометра AvaSpec-3648 (JinYoung Tech, Korea), а n_{Ar} – концентрация аргона, определяемая его содержанием в плазмообразующей смеси. Актинометрический коэффициент C_{Ar}^F находили как отношение констант возбуждения и вероятностей соответствующих оптических переходов, которые хорошо известны по литературным данным [19, 20]. В работе [19] было показано, что $C_{Ar}^F \approx \text{const}$ в диапазоне $T_e = 3\text{--}4$ эВ, при этом результаты оптико-спектрального определения концентраций атомов фтора хорошо согласуются с результатами масс-спектральных измерений.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведены экспериментальные и расчетные данные по электрофизическим параметрам плазмы CF₄ + C₄F₈ + Ar + He. Анализ этих результатов позволяет выделить ряд значимых свойств исследуемой системы, имеющих принципиальное значение для понимания путей оптимизации процессов РИТ:

– Замещение Ar на He сопровождается заметным снижением температуры электронов (рис. 1а) и концентраций заряженных частиц. Последний вывод однозначно следует из резкого снижения плотности ионного тока $J_+ \approx 0.61n_+v_B$ [4, 13–15] (в ~2 раза при 0–85% He, см. рис. 1б) на фоне малых изменений $v_B = \sqrt{eT_e/m_i}$ (скорости ионов на границе двойного электрического слоя у поверхности зонда [4, 18]) из-за симбатного поведения T_e и эффективной массы ионов m_i . Физической причиной снижения n_+ (а, следовательно, и концентрации электронов n_e в предположении $n_e \approx n_+$) является низкая эффективность ионизации гелия, обусловленная высокой пороговой энергией процесса (~24.6 эВ, по сравнению с ~15.8 эВ для аргона [21, 22]). В результате, константа скорости R1: Ar + e → Ar⁺ + 2e (~2.5 × 10⁻¹⁰ см³/с при $T_e = 3$ эВ) на два порядка величины превышает аналогичное значение для R2: He + e → He⁺ + 2e (~1.2 × 10⁻¹² см³/с при $T_e = 3$ эВ). Спадающий характер зависимости $T_e = f(y_{He})$, отмеченный на рис. 1а, связан, по-видимому, с уменьшением скоростей процессов вида R3: CF_x + e → CF_{x-1} + F + e из-за изменения концентрации электронов. Это обогащает газовую фазу более насыщенными и крупными фторуглеродными радикалами, что приводит к росту потерь энергии электронов в процессах колебательного и электронного возбуждения. Незначительный рост величины $-U_{dc}$ в условиях $W_{dc} = \text{const}$ (рис. 1в) обусловлен изменением плотности потока ионов $\Gamma_+ \approx J_+/e$, который частично компенсирует наведенный отрицательный заряд.

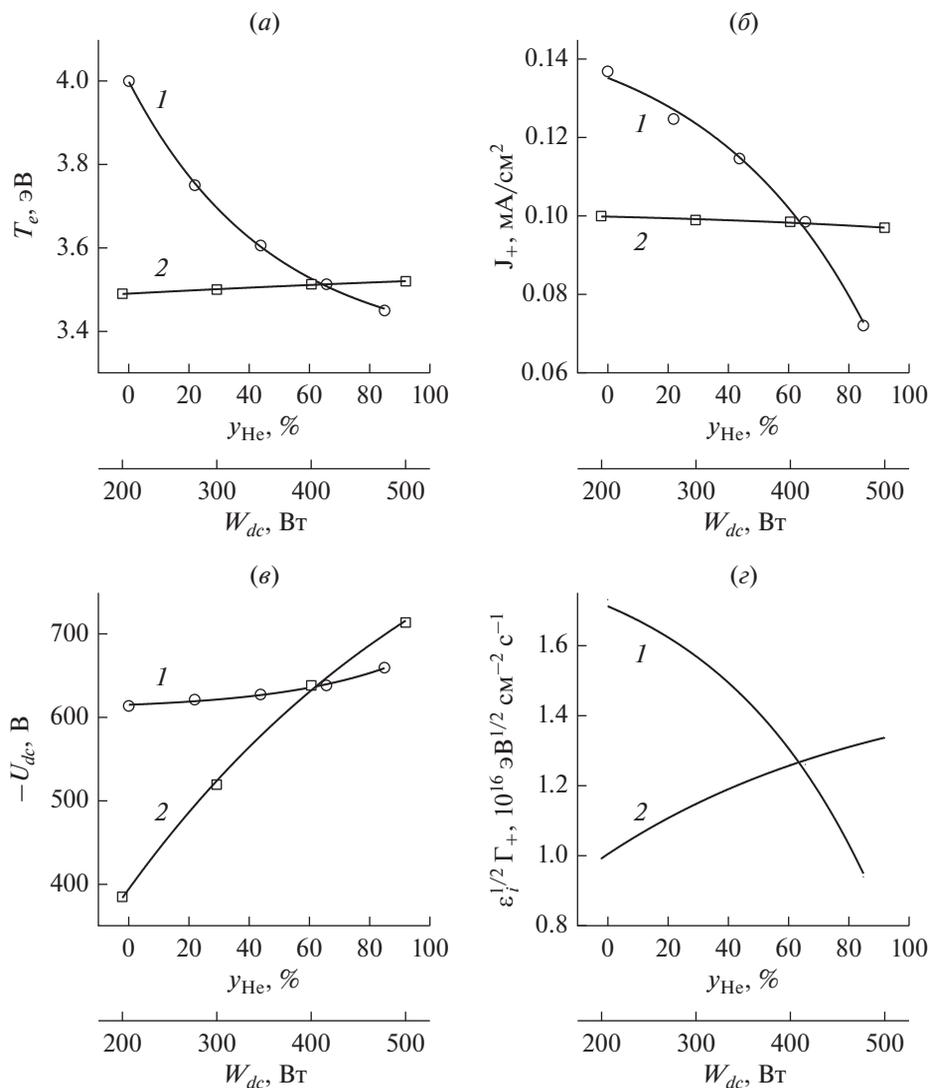


Рис. 1. Параметры электронной и ионной компонент плазмы при варьировании содержания He (1) и мощности смещения (2): (а) температура электронов; (б) плотность ионного тока; (в) потенциал смещения; и (г) расчетный параметр $\sqrt{\epsilon_i} \Gamma_+$, характеризующий интенсивность ионной бомбардировки обрабатываемой поверхности.

Однако соответствующий этому рост энергии бомбардирующих ионов ($\epsilon_i \approx 640\text{--}680$ эВ при 0–85% He) полностью перекрывается противоположной тенденцией Γ_+ . Это приводит к монотонному снижению параметра $\sqrt{\epsilon_i} \Gamma_+$, отслеживающему интенсивность ионной бомбардировки обрабатываемой поверхности (рис. 1г). Таким образом, увеличение доли гелия в плазмообразующей смеси снижает эффективность гетерогенных процессов, инициируемых ионами.

– Увеличение мощности смещения практически не возмущает параметры электронной компоненты плазмы (рис. 1а) и, таким образом, не оказывает влияния на кинетику процессов при

электронном ударе. Такая ситуация обеспечивает постоянство суммарной скорости ионизации, концентраций заряженных частиц и плотности ионного тока, как показано на рис. 1б. В то же время пропорциональное изменение величины $-U_{dc}$ (рис. 1в) приводит к росту как энергии ионной бомбардировки ($\epsilon_i \approx 406\text{--}736$ эВ при 200–500 Вт), так и параметра $\sqrt{\epsilon_i} \Gamma_+$ (рис. 1г), определяющего ее интенсивность. Фактически это означает, что имеет место активация ионно-стимулированных гетерогенных процессов без изменения характеристик газовой фазы. Отметим, что такая ситуация является характерной для реакторов индуктивно-связанной плазмы, основное достоинство которых заключается в независимой регули-

ровке потока и энергии ионов, бомбардирующих обрабатываемую поверхность [4–6].

При исследовании спектров излучения плазмы было найдено, что интенсивности излучения атомных линий F 703.8 нм и Ag 750.4 нм остаются практически неизменными при варьировании W_{dc} , но заметно снижаются с ростом y_{He} (рис. 2а). Очевидно, что первый эффект является следствием постоянства концентраций соответствующих частиц (в том числе – атомов фтора, по причине неизменности скорости R3) и скоростей их возбуждения. Это подтверждается выполнением условия $I_F/I_{Ag} \approx \text{const}$, которое однозначно указывает на $n_F \approx \text{const}$. Напротив, вид зависимостей $I_F, I_{Ag} = f(y_{He})$ формируется как суперпозиция изменений концентраций частиц и функций их возбуждения $k_{ex}n_e$, где k_{ex} – константа скорости возбуждения (рис. 2б). Реальная концентрация атомов фтора, определенная по результатам актинометрии, монотонно снижается с ростом доли гелия в плазмообразующей смеси (рис. 2в), следуя изменению скорости генерации этих частиц по R3. Таким образом, варьирование соотношения Ag/He не меняет схемы плазмохимических процессов, но влияет на концентрации нейтральных частиц через электрофизические параметры плазмы и кинетику реакций под действием электронного удара. Анализ литературных данных [3–5] позволяет заключить, что характер этого влияния аналогичен эффекту вкладываемой мощности. Отметим также, что оба варьируемых параметра оказывают качественно одинаковое влияние на отношение $\Gamma_F/\sqrt{\epsilon_i}\Gamma_+$, где $\Gamma_F \approx 0.25n_F\sqrt{8RT_{\text{gas}}/\pi M_F}$ – плотность потока атомов фтора (рис. 2г). Из литературы [4–6] известно, что минимизация этого отношения улучшает анизотропию травления за счет снижения вклада “хаотической” составляющей, обусловленной действием нейтральных частиц. Следовательно, изменение соотношения Ag/He обеспечивает больший диапазон регулирования анизотропии травления по сравнению с мощностью смещения, которая традиционно используется для этих целей в технологии РИТ.

В экспериментах по травлению SiO_2 было найдено, что скорость травления монотонно возрастает с увеличением как мощности смещения, так и доли гелия в плазмообразующей смеси (рис. 3а). Оценка скоростей распыления $R_{\text{phys}} = Y_S\Gamma_+$ с использованием литературных данных по зависимости коэффициента распыления Y_S от энергии ионов (~ 0.4 атом/ион при $y_{He} = 0–85\%$ и $0.3–0.45$ атом/ион при $W_{dc} = 200–500$ Вт [23]) показала, что основной вклад в общую скорость взаимодействия вносит химическая составляющая. Так, из рис. 3б можно видеть, что в исследован-

ном диапазоне условий отношение R_{chem}/R , где $R_{\text{chem}} = R - R_{\text{phys}}$, а R – измеренная скорость травления, не опускается ниже 50% и достигает 90% при предельных значениях варьируемых параметров. Из анализа литературных данных следует [4–6, 24], что величина R_{chem} (17–37 нм/мин при $y_{He} = 4–35\%$ нм/мин при $W_{dc} = 200–500$ Вт) представляет собой скорость ионно-стимулированной химической реакции, в которой роль ионов включает образование центров адсорбции для атомов фтора R4: $\text{SiO}_x(\text{s.}) \rightarrow \text{Si}(\text{s.}) + x\text{O}$. В то же время, отсутствие корреляции между параметрами R_{chem} и $\sqrt{\epsilon_i}\Gamma_+$ при варьировании соотношения Ag/He позволяет заключить, что образование центров адсорбции по R4 не лимитирует скорость химической реакции R5: $\text{Si}(\text{s.}) + x\text{F} \rightarrow \text{SiF}_x$. По нашему мнению, такой ситуации способствуют высокая интенсивность ионной бомбардировки и низкие концентрации фторуглеродных компонентов в исходном газе, что обеспечивает протекание R5 в условиях дефицита атомов фтора. Еще одним принципиальным эффектом является то, что увеличение R_{chem} от доли гелия в плазмообразующей смеси происходит на фоне снижения Γ_F , что означает увеличение эффективной вероятности взаимодействия $\gamma_R = R_{\text{chem}}/\Gamma_F$ (рис. 3в). Результаты предшествующих исследований и модельного анализа кинетики реактивно-ионных процессов в плазме фторуглеродных газов [10–12, 24] позволяют заключить, что а) величина γ_R в условиях термостатирования обрабатываемой поверхности отслеживает долю свободных активных центров, способных адсорбировать атомы фтора из газовой фазы; б) величина этой доли определяется соотношением скоростей процессов заполнения поверхности нереагирующими частицами (в том числе – фторуглеродным полимером) и ее очистки ионной бомбардировкой. Принимая во внимание снижение интенсивности ионной бомбардировки с ростом y_{He} (рис. 1г), мы полагаем, что основной причиной роста доли свободных центров адсорбции для атомов фтора и величины γ_R является снижение скорости высаживания фторуглеродного полимера из-за снижения плотности потока полимеробразующих частиц. Действительно, в рамках общепринятого радикального механизма полимеризации считается, что в формировании полимерной пленки участвуют радикалы CF_x с $x \leq 2$ [7–9]. Поэтому снижением скоростей образования этих частиц по R3 закономерно приводит к снижению их концентрации в газовой фазе. Очевидно также, что увеличение γ_R с ростом мощности смещения (рис. 3в) происходит на фоне постоянства плазмы и плотности потока полимеробразующих частиц. В то же время, имеет место рост интенсивности ионной бомбар-

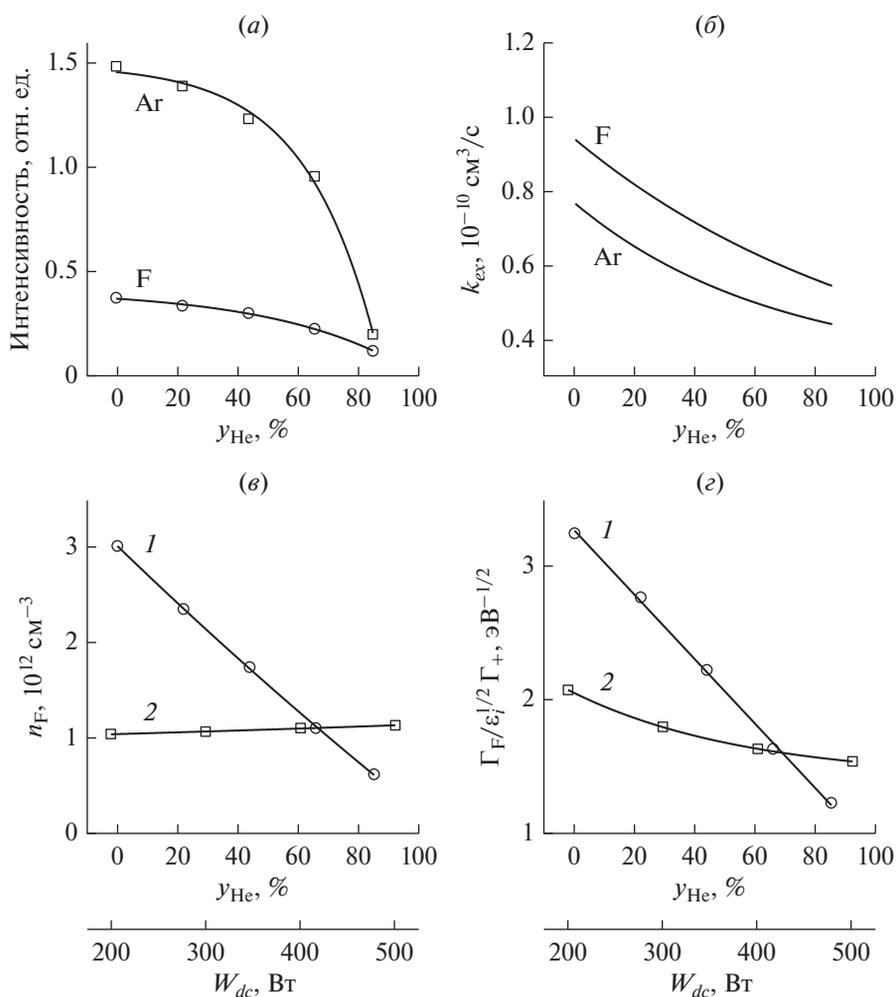


Рис. 2. Интенсивность излучения и концентрация атомов фтора при варьировании содержания He (1) и мощности смещения (2): (а) измеренные интенсивности излучения линий F 703.4 нм и Ag 750.4 нм; (б) константы скоростей возбуждения соответствующих излучающих состояний; (в) концентрация атомов фтора; и (г) параметр $\Gamma_F/\sqrt{\epsilon_i} \Gamma_{+}$, характеризующий анизотропию травления.

дировки обрабатываемой поверхности (рис. 1г), что обуславливает аналогичное изменение доли свободных центров адсорбции за счет увеличения скорости их очистки. Таким образом, оба эффекта, отмеченных на рис. 3в, находят логичное объяснение в рамках единой модели процесса.

В заключение отметим, что существует и альтернативный подход к анализу механизма РИТ, который рассматривает данный процесс как химически-стимулированное распыление. Основной кинетической характеристикой гетерогенных стадий такого процесса является выход травления Y_R , определяемый как отношение измеренной скорости травления к плотности потока ионов [4, 9]. Из рис. 3г можно видеть, что абсолютные значения Y_R значительно выше классических коэффици-

ентов распыления в химически не реагирующих системах, при этом диапазон изменения Y_R превышает аналогичную тенденцию параметра $\sqrt{\epsilon_i}$. Это позволяет заключить, что а) основным объектом распыления является не чистая поверхность SiO_2 , а частично фторированные атомы кремния с ослабленными поверхностными связями (фактически — с низким порогом распыления); и б) эффективность распыления увеличивает с ростом эффективности фторирования поверхности. Это явно следует из симбатного характера изменений параметров Y_R и γ_R . Таким образом, оба рассмотренных подхода формируют, по сути, единое представление об особенностях протекания гетерогенных стадий травления SiO_2 в исследованном диапазоне условий.

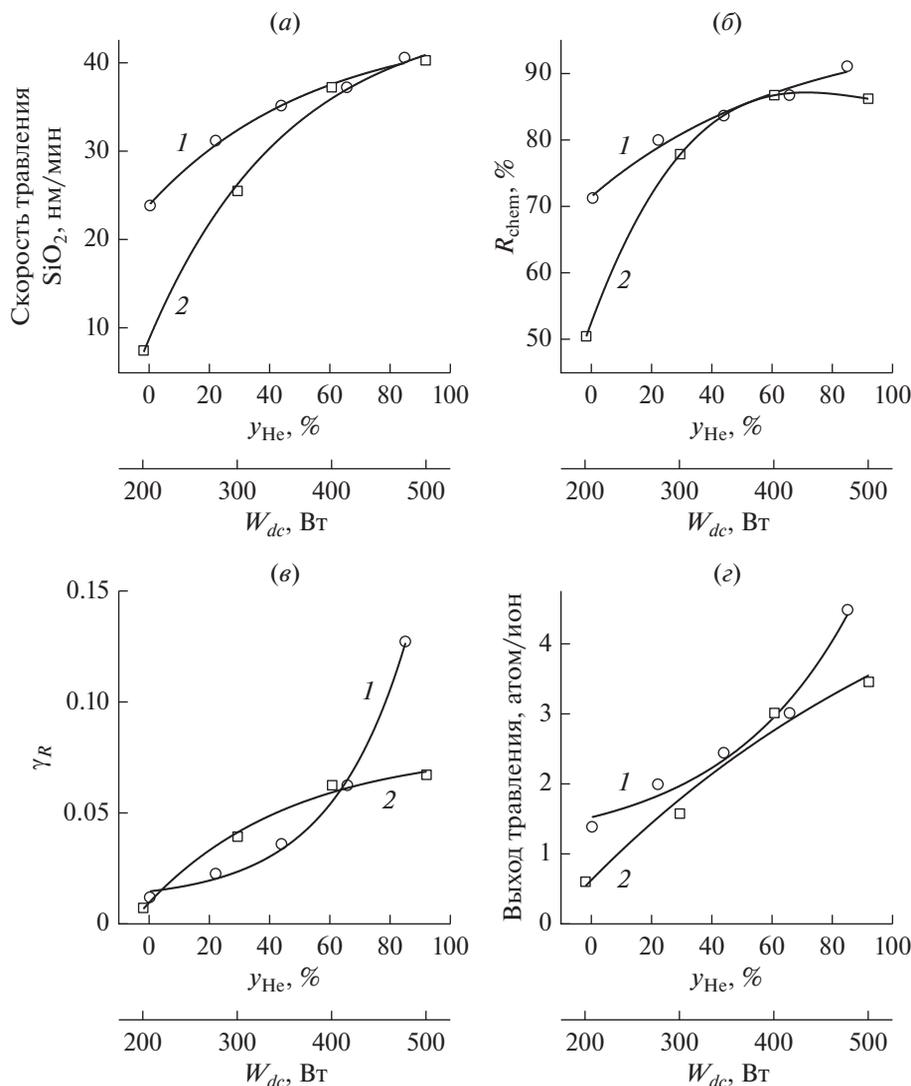


Рис. 3. Кинетика реактивно-ионного травления диоксида кремния при варьировании содержания He (1) и мощности смещения (2): (а) измеренные скорости травления; (б) относительный вклад химической составляющей в общую скорость травления; (в) эффективная вероятность ионно-стимулированной реакции $\text{Si} + x\text{F} \rightarrow \text{SiF}_x$; (г) выход травления.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучены взаимосвязи электрофизических параметров плазмы, концентраций атомов фтора и кинетики реактивно-ионного травления SiO_2 в плазме $\text{CF}_4 + \text{C}_4\text{F}_8 + \text{Ar} + \text{He}$. В качестве варьируемых условий процесса выступали соотношение Ar/He в исходной смеси и мощность смещения. При исследовании характеристик газовой фазы методами зондов Лангмюра и оптической эмиссионной спектроскопии показано, что замещение аргона на гелий оказывает заметное влияние на кинетику активных частиц через параметры электронной компоненты плазмы. Наиболее значимыми эффектами здесь являются снижение плотностей потоков атомов фтора, фторуглеродных радикалов и положительных ионов на фоне слабых

изменений энергии ионной бомбардировки. Напротив, увеличение мощности смещения характеризуется пропорциональным изменением энергии бомбардирующих ионов при малых возмущениях состава плазмы, что советует активации только гетерогенных стадий процесса травления. Установлено, что в исследованном диапазоне условий основной вклад в скорость травления вносит химическая составляющая, при этом ионно-индуцированный процесс $\text{SiO}_x(\text{s.}) \rightarrow \text{Si}(\text{s.}) + x\text{O}$ образования центров адсорбции для атомов фтора не лимитирует скорость химической реакции $\text{Si}(\text{s.}) + x\text{F} \rightarrow \text{SiF}_x$. Найдено, что эффективная вероятность взаимодействия не является постоянной величиной даже в условиях термостатирования обрабатываемой поверхности. По нашему мнению, это связано с изменением доли свобод-

ных центров адсорбции, которая формируется балансом процессов высаживания и ионного травления фторуглеродной полимерной пленки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00216, <https://rscf.ru/project/22-29-00216/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Nojiri K.* Dry etching technology for semiconductors, Tokyo: Springer International Publishing, 2015.
2. *Wolf S., Tauber R.N.* Silicon Processing for the VLSI Era. Volume 1. Process Technology, New York: Lattice Press, 2000.
3. *Roosmalen J., Baggerman J.A.G., Brader S.J.* Dry etching for VLSI, New-York: Plenum Press, 1991.
4. *Lieberman M.A., Lichtenberg A.J.* Principles of plasma discharges and materials processing, New York: John Wiley & Sons Inc., 1994.
5. *Coburn J.W.* Plasma etching and reactive ion etching, New York: AVS Monograph Series, 1982.
6. *Rooth J.R.* Industrial plasma engineering. Volume 2: Applications to Nonthermal Plasma Processin, Bristol: IOP Publishing Ltd., 2001.
7. *Kay E., Coburn J., Dilks A.* Plasma chemistry of fluorocarbons as related to plasma etching and plasma polymerization. In: Veprek S., Venugopalan M. (eds) Plasma Chemistry III. Topics in Current Chemistry. V. 94. Berlin, Heidelberg: Springer, 1980.
8. *Stoffels W.W., Stoffels E., Tachibana K.* Polymerization of fluorocarbons in reactive ion etching plasmas // J. Vac. Sci. Tech. A. 1998. V. 16. pp. 87–95.
9. *Standaert T.E.F.M., Hedlund C., Joseph E.A., Oehrlein G.S., Dalton T.J.* Role of fluorocarbon film formation in the etching of silicon, silicon dioxide, silicon nitride, and amorphous hydrogenated silicon carbide // J. Vac. Sci. Technol. A. 2004. V. 22. pp. 53–60.
10. *Lee J., Kwon K.-H., Efremov A.* On the Relationships Between Plasma Chemistry, Etching Kinetics and Etching Residues in $CF_4 + C_4F_8 + Ar$ and $CF_4 + CH_2F_2 + Ar$ Plasmas with Various CF_4/C_4F_8 and CF_4/CH_2F_2 Mixing Ratios // Vacuum / 2018. V. 148. pp. 214–223.
11. *Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.H.* Plasma parameters and active species kinetics in $CF_4 + C_4F_8 + Ar$ gas mixture // Chem. Chem. Tech. 2018. V. 61. № 4–5. pp. 31–36.
12. *Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.-H.* On the effect of the ratio of concentrations of fluorocarbon components in a $CF_4 + C_4F_8 + Ar$ mixture on the parameters of plasma and SiO_2/Si etching selectivity // Russian Microelectronics. 2018. V. 47. № 4. pp. 239–246.
13. *Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.-H.* Concerning the Effect of Type of Fluorocarbon Gas on the Output Characteristics of the Reactive-Ion Etching Process // Russian Microelectronics. 2020. V. 49. № 3. pp. 157–165.
14. *Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.-H.* Features of the Kinetics of Bulk and Heterogeneous Processes in $CHF_3 + Ar$ and $C_4F_8 + Ar$ Plasma Mixtures // Russian Microelectronics. 2019. V. 48. №. 2. pp. 119–127.
15. *Efremov A., Lee J., Kwon K.-H.* A comparative study of CF_4 , Cl_2 and $HBr + Ar$ Inductively Coupled Plasmas for Dry Etching Applications // Thin Solid Films. 2017. V. 629. pp. 39–48.
16. *Lee B.J., Efremov A., Nam Y., Kwon K.-H.* Plasma parameters and silicon etching kinetics in $C_4F_8 + O_2 + Ar$ gas mixture: Effect of component mixing ratios // Plasma Chem. Plasma Process. 2020. V. 40. pp. 1365–1380.
17. *Efremov A., Lee B.J., Kwon K.-H.* On relationships between gas-phase chemistry and reactive-ion etching kinetics for silicon-based thin films (SiC , SiO_2 and Si_xN_y) in multi-component fluorocarbon gas mixtures // Materials. 2021. V. 14. pp. 1432(1–27).
18. *Shun'ko E.V.* Langmuir Probe in Theory and Practice, Boca Raton: Universal Publishers, 2008.
19. *Lopaev D.V., Volynets A.V., Zyryanov S.M., Zotovich A.I., Rakhimov A.T.* Actinometry of O, N and F atoms // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. pp 075202(1–17).
20. Handbook of chemistry and physics, Boca Raton: CRC press, 1998.
21. *Christophorou L.G., Olthoff J.K.* Fundamental electron interactions with plasma processing gases, New York: Springer Science + Business Media LLC, 2004.
22. *Raju G.G.* Gaseous electronics. Tables, atoms and molecules, Boca Raton: CRC Press, 2012.
23. *Seah M.P., Nunney T.S.* Sputtering yields of compounds using argon ions // J. Phys. D: Appl. Phys. 2010. V. 43. № 25. pp. 253001(1–24).
24. *Gray D.C., Tepermeister I., Sawin H.H.* Phenomenological modeling of ion-enhanced surface kinetics in fluorine-based plasma-etching // J. Vac. Sci. Technol. B. 1993. V. 11. pp. 1243–1257.