МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых» (ВлГУ)

На правах рукописи

Али Аббас Мохсин Али

Исследование структурных превращений нанокластерных элементов радиоустройств и организации технологии их защиты от радиации

05.12.04-Радиотехника, в т.ч. системы и устройства телевидения

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук

> Научный руководитель: доктор технических наук, профессор Никитин Олег Рафаилович

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор Рау Валерий Георгиевич

Владимир - 2016

Введение
Глава I. Состояние области исследований. Способы защиты
радиосистем от действия излучения9
1.1 Способы защиты РС космической аппаратуры9
1.2 Модели радиационной обстановки14
1.3 Оценка радиационной стойкости РС. Радиационные эффекты
в интегральных микросхемах15
1.4 Экспериментальные методы испытания изделий полупроводниковой
электроники на радиационную стойкость
Выводы
Глава II. Модели и методы исследования наносистем29
2.1 Одномерные модели. Комбинаторные методы перечисления
циклических разбиений30
2.2 Компьютерный перебор структур цветных колец на основе групп
подстановок
2.3 Гетерослои в радиосистемах на наноуровне. Компьютерная модель
классификации двумерных разбиений на основе симметрии
2.4 Расчет нанокластерных элементов. Алгоритм построения
нанокластеров43
Выводы51
Глава III. Моделирование радиационных нанокластеров. Радиационные
превращения и организация технологии проектирования
устройства защиты 52
3.1 Радиационные условия и радиационные эффекты
3.2 Схема организации защиты ЭС от радиации
3.3 Моделирование и экспериментальное исследование структуры
основы защитного устройства из молекул Al ₂ O ₃ 69
3.4 Проектирование сборки слоистых гетероструктур. Модель «кремний
на изоляторе» (КНИ)74

3.5 Методика	построения	элементов	гетероструктуры	защитного				
устройства, работающего в условиях радиации								
3.6 Нанокластеры в программе многоцентрового роста								
3.7 База данных по расшифрованным нанокластерам8								
Выводы				95				
Основные результаты и выводы								
Литература				101				
Приложение 1. Расчет нанокластеров на примере α-кристобалита, его								
изоструктурны	х аналогов			109				
Приложение 2. Акты внедрения диссертационной								
работы				123				

Введение

По мере развития радиотехнических устройств, в т.ч. систем микро- и наноэлектроники и средств защиты от радиации, остро встает вопрос о миниатюризации электронных схем путем перехода к наноразмерам и увеличении объемов передаваемой информации. При решении этих задач необходимо учитывать автоматически возрастающую опасность отказов работы систем радиоустройств из-за дефектов, которые проявляются на микроуровне и не носят катастрофического характера, но на наноуровне могут возрастать многократно. Это относится к дефектам, образующимся в условии повышенной радиации. Особенно чувствительными оказались бортовой радиоэлектронной (БРЭА) системы связи аппаратуры на космических аппаратах (КА). Образовавшийся при взрыве искусственный радиационный пояс Земли (ИРПЗ) привел к резкому увеличению потоков электронов на два порядка. При этом уровень радиационной стойкости электронной аппаратуры КА, определенный по результатам испытаний, составлял 0,6–2 Мрад. Этот искусственный радиационный пояс Земли, явился причиной потери семи спутников.

Отечественные научные проблемами школы, занимающиеся проектирования и моделирования компонентов радиосетей на наноуровне, представлены рядом научных коллективов (ФТИ РАН, МИЭТ, НГТУ) и др. Проблемам радиационной устойчивости радиосистем микроэлектроники посвящены работы Катунина Ю. и Стенина В., С. Полесского, В. Жданова (ИППМ РАН) и др. [1]. В то же время, программы конференций и докладов по нанотехнологии, в нашей стране не содержат тематики защиты радиосистем от радиации. В ВлГУ на кафедре радиотехники группой ученых начаты исследования радиационных эффектов, происходящих в элементах радиосистем (сверхрешетках, кольцах, кластерах) при их проектировании на наноуровне. Продолжение исследований В представленной этих диссертационной работе. Применение полупроводниковых изделий

микроэлектроники в качестве компонентной базы космических систем сделало актуальной задачу оценки и прогнозирования устойчивости компонентов И узлов К радиационным воздействиям космического пространства и создания средств защиты. Тем более, что увеличение сроков пребывания в космическом пространстве и переход к наноэлектронике значительно усугубляют проблему. К теме данной работы относятся и нерешенные вопросы создания защиты электронных устройств. Состояние проблемы определяется несколькими причинами. Основными из них являются: сложность постановки реальных экспериментов; отсутствие теории для моделирования (и проектирования) электронных систем на наноуровне; отсутствие базы данных по нанокластерам; существование дефицита компьютерных программ расчета моделей нанокластеров, используемых В радиотехнике; почти полное отсутствие реального проектирования радиосистем на наноуровне, за исключением фиксации необходимых свойств материалов, которые исследуются в нанотехнологии; не изучены радиационные превращения нанокластеров и не разработаны методы защиты.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является исследование структурных превращений модельных нанокластерных элементов радиоустройств и создания организационной структуры технологии защиты в условиях радиации.

Основными задачами исследования являются:

- 1. Анализ проблем, возникающих при переходе радиоэлектронных устройств (РЭУ) на наноуровень.
- Создание основы той части теоретической радиотехники, которая применима для моделирования (и проектирования) РЭУ на наноуровне.
 Для чего необходимо исследовать вопросы комбинаторики и симметрии

нульмерных нанокластеров, одномерных замкнутых циклов, двумерных (слоистых) и 3D - гетероструктур, как связанных элементов радиосхем.

- Проведение серии компьютерных экспериментов по расчету модельных нанокластеров с использованием программы «Компьютерный наноскоп» для отработки методики проектирования сборки элементов радиотехнических устройств.
- 4. Исследование на моделях нанокластеров радиационных эффектов, приводящих к перестройке их структуры, для чего создать необходимую базу данных по нанокластерам веществ, применяемых в радиотехнике, которые связанны с возможными радиационными превращениями.
- 5. Разработка методики компьютерного расчета реальных и модельных нанокластеров для проектирования устройства защиты радиосистем на наноуровне, используя программу многоцентровой задачи роста структур.
- Разработка организационной структуры технологии сборки общей системы защиты радиотехнических устройств на наноуровне.

Методы исследования

Используемые работе базируются В методы И подходы на математической теории разбиений пространства, теории групп симметрии, комбинаторике, радиоэлектроники, наноэлектроники теории И кристаллографии. В работе используется расширенный подпрограммой многоцентрового роста нанокластеров комплекс программ «Компьютерный наноскоп», разработанный в ВлГУ.

Достоверность результатов исследования основывается на фундаментальных принципах радиофизики и наноэлектроники. Результаты расчетов коррелируют с известной научной информацией наблюдений структур нанообъектов в электронной микроскопии.

Объектом исследований является система защиты устройств микро- и наноэлектроники, работающих в условиях повышенной радиации. В качестве предмета исследования выбраны методы компьютерного

моделирования нанокластеров и гетероструктур для наноэлектроники, их радиационные превращения и методика использования программ компьютерной сборки устройства радиационной защиты радиотехнической аппаратуры на наноуровне.

Научная новизна исследования

- Разработана методика проектирования гетероструктуры защитного слоя наноэлементов радиоустройств методом согласования слоев, выполняющих различные функции.
- Создана база данных по нанокластерам, используемым в радиотехнических устройствах наноэлектроники.
- 3. Предложена классификация одномерных (колец) и двумерных (слоев) гетероструктур на основе теории групп симметрии.
- Введено понятие и произведен расчет нанополикластерной системы элементов радиотехнических устройств.

Практическая значимость исследования

1. Проведенные исследования составляют методологическую основу проектирования радиотехнических средств защиты микро-и наноэлектронных устройств, работающих в условиях радиационного излучения.

2. Методика моделирования гетероструктур позволяет предложить методику прогнозирования их свойств на основе теории групп симметрии путем расчета большого числа вариантов сборки реальных систем, что сокращает время расчета в 5-6 раз.

3. База данных по моделям нанокластеров может быть использована на этапе проектирования и сборки наноустройств с широким спектром применения.

4. Весогабаритные параметры защитной системы уменьшаются по сравнению с обычным вариантом в 9-10 раз, кроме того предлагаемый вариант более технологичен.

Результаты исследования внедрены и реализованы

- 1. В учебный процесс по направлению «Радиотехника» на кафедре радиотехники и радиосистем ВлГУ;
- В учебное пособие для студентов Вузов, обучающихся по направлению «радиотехника».
- 3. В перспективный план работ ОАО ВКБР.

Апробация работы проведена на всероссийской научно-практической конференции «XI Столетовские чтения», Владимир, 2014. По теме исследования опубликовано 7 работ, в том числе 3 в издания, рекомендованных ВАК, издано 1 учебное пособие.

Личный вклад автора. Положения, выносимые на защиту, разработаны автором самостоятельно в ходе выполнения научно-исследовательских работ на кафедрах основ нанотехнологии и теоретической физики (до 2013г.) и «Радиотехники и радиосистем» Владимирского государственного университета им. А.Г. и Н.Г. Столетовых.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа изложена на 125 страницах машинописного текста, иллюстрирована 70 рисунками, содержит 8 таблиц. В списке литературы содержится 72 наименований.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

- 1. Методика перечисления и классификации циклических и слоистых наноструктур, используемых в радиотехнике, на основе теории конечных групп симметрии.
- 2. Методика расчета и проведения компьютерных экспериментов по созданию циклических и слоистых гетероструктур для радиоэлектроники.
- 3. Методика расчета радиоактивных превращений вещества нанокластеров, используемых в радиоэлектронике.
- 4. Проект технологии создания гетероструктуры защитного слоя для радиоэлектроники, работающей в условиях радиации.
- 5. Расчет нанополикластерной системы в программе многоцентрового роста

Глава 1. Состояние области исследований. Способы защиты радиосистем от действия излучения

1.1. Способы защиты РС космической аппаратуры

Известно, что первые космические аппараты функционировали всего в течение одного года. В настоящее же время необходимо длительное увеличение сроков активного существования КА, так как космические технологии широко используются для мониторинга окружающей среды, развитие телекоммуникаций и телевидения, прогноза погоды, разведки полезных ископаемых СВЧ-методами зондирования, а так же обеспечения обороноспособности. На работу бортовой радиоэлектронной аппаратуры (БРЭА) влияют многочисленные факторы. Основное значение имеет воздействие полей ионизирующих излучений космического пространства (КП). Использование микроэлектроники в качестве компонентной базы космических устройств актуальной И систем сделало задачу прогнозирования устойчивости компонентов и узлов к радиационным воздействиям космического пространства. Наиболее полно, на наш взгляд, эта проблема отображена в работе обзорного типа [1], материал которой будем использовать ниже, как известные факты, начиная с таблицы 1.1.

Вид излучения	Состав	Энергия частиц (МэВ)	Плотность потока (м ⁻² с ⁻¹)	
ГКЛ	протоны,		$1,5*10^4$	
	альфа-частицы,	$10^2 - 10^{15}$	$1,0*10^3$	
	тяжелые ионы		$1,2^*10^1$	
СКЛ	протоны,	$1 - 10^4$	$10^7 - 10^8$	
	тяжелые ионы	$1 - 10^{6}$	10^{6}	
ЕРПЗ	протоны	1-30	3*10 ¹¹	
		>30	$2*10^{8}$	

Таблица 1.1 Радиационные условия космического пространства

В последнее время наметилась тенденция применения коммерческих изделий микроэлектроники в БРЭА КА. Это дает ряд преимуществ по

сравнению с радиационно. Тем не менее, использование коммерческих ИС в БРЭА КА влечет некоторый риск. Связано это с тем, что некоторые коммерческие ИС неприменимы для условий эксплуатации в космосе, большинство имеет уровень функциональных отказов порядка 10 крад по суммарной накопленной дозе (то есть довольно низкий), стойкость не контролируется от партии к партии, а надежность в экстремальных условиях эксплуатации не определена. Поэтому для коммерческих ИС приходится разрабатывать и проводить специальные процедуры входного и выходного контроля, а также, В ряде случаев, проводить дополнительные сертификационные испытания [1].

Известно, что в настоящее время, уровень разрешения технологии составляет около 0,045 мкм. При этом, возрастает чувствительности ИС к воздействию радиации, так как уменьшение размеров увеличивает вклад периферийных областей и снижает величину зарядов переключения. Происходит также уменьшение эффективной длины собирания заряда, что дает некоторую компенсацию эффекта уменьшения стойкости. Увеличение быстродействия приводит к тому, что при том же значении тока уменьшается Использование заряд переключения. пониженного напряжения ИЛИ мощности потребления означает, что требуется меньший заряд, необходимый запоминания информации, и более низкие изменения пороговых ДЛЯ напряжений, приводящих к параметрическим отказам. Имеет место и положительная тенденция в связи с применением новых технологических операций (за счет уменьшения толщины структур, снижения уровня дефектности исходных материалов, повышения уровней легирования и т. д.), вследствие происходит некоторое снижение чувствительности чего характеристик ИС к радиационным эффектам, Кроме этого, сокращение размеров приводит к заметному снижению зарядов переключений. Так, заряд переключений для элементов современных динамических ОЗУ можно оценить в диапазоне 0,2–0,5 пКл для статических ИС [1].

В пространстве КА подвергаются космическом межпланетном воздействию потока первичных заряженных частиц (электроны, протоны и тяжелые заряженные частицы), а также вторичных частиц — продуктов ядерных превращений, связанных с первичными частицами. Основные эффекты воздействия ИИ на БРЭА обусловлены ионизационными и ядерными потерями энергии первичных И вторичных частиц В чувствительных объемах элементов ИС. Эти эффекты проявляются через:

- параметрические отказы бортовой радиоэлектронной аппаратуры вследствие деградации характеристик ИС по мере накопления дозы ИИ;
- сбои и отказы ИС от воздействия отдельных высокоэнергетичных ядерных и элементарных частиц.

Роль тех или иных отказов в большой степени зависит от орбиты КА. В то же время вероятность возникновения эффектов при воздействии отдельных элементарных частиц и ядер атомов значительно увеличивается при нахождении КА в зоне южноатлантической аномалии или при возникновении мощных солнечных вспышек.

Известным примером потери КА из-за воздействия проникающей радиации является космический аппарат «Telestar», который был запущен 10 июля 1962 г. сразу же после проведения испытания ядерного оружия. Образовавшийся искусственный радиационный пояс Земли (ИРПЗ) привел к существенному увеличению потоков электронов — почти на два порядка. Уже 24 ноября часть БРЭА КА начала функционировать неверно. Окончательно спутник потерял свою работоспособность в феврале 1963 г. При этом уровень радиационной стойкости электронной аппаратуры, определенный по результатам испытаний, составлял 0,6–2 Мрад. Этот образовавшийся искусственный радиационный пояс Земли явился причиной потери семи КА.

Резкое увеличение потоков ядерных частиц в момент мощной солнечной вспышки также может приводить к отказам и сбоям в БРЭА КА. Так, в момент солнечной вспышки, имевшей место 20 января 1994 г., произошли функциональные отказы электронной системы стабилизации канадского спутника связи Anik E-1 а при солнечной вспышке в октябре 2003 г. отказал японский спутник ADEOS-II.

Но даже при относительно спокойной радиационной обстановке, как это отмечается в работе [1], «возникают сбои и отказы. Примером является схема КМОП оперативного запоминающего устройства NEC 64 K, которая широко использовалась в электронных узлах КА. В этой схеме наблюдалось в среднем 2,4 одиночного сбоя и 0,76 эффекта защелкивания за неделю». Представленные примеры свидетельствуют о важности учета радиационных эффектов при разработке БРЭА, функционирующей в условиях воздействия факторов космического пространства.

1.2. Модели радиационной обстановки

С начала освоения космоса значительное внимание уделяется оценке радиационной обстановки в околоземном пространстве. Существующие модели [1] построены на базе наборов данных, полученных с нескольких десятков спутников, тем самым обеспечивается широкий пространственновременной охват. Ни одна из существующих моделей не является полностью всеохватывающей вследствие того, что все области радиационного окружения непрерывно изменяются. Модели, как правило, строятся при следующих предположениях (по работе [1]):

- Потоки частиц представляются как всенаправленные (изотропные).
- Орбитальная интеграция представляется для различных высот и углов наклонения.
- Данные по пространственному распределению заряженных частиц представляются обычно в координатах L и B (L — высота орбиты, нормированная на радиус Земли, В — напряженность магнитного поля).

- Интегральный поток Φ(>E) представляет собой общий поток, см⁻²·c⁻¹, при всех энергиях выше указанной пороговой энергии.
- Дифференциальный поток j(E) представляет собой скорость изменения потока от энергии для определенного уровня энергии, см⁻²·c⁻¹·MэB⁻¹.
- Модели соответствуют конкретным промежуткам времени и поэтому относятся конкретно к условиям солнечного минимума или солнечного максимума.
- Основными источниками ИИ в космическом пространстве являются:
- а. электроны и протоны радиационных поясов Земли (ЕРПЗ);
- b. солнечные космические лучи (СКЛ);
- с. галактические космические лучи (ГКЛ).

Уровень радиационных воздействий в каждой зоне зависит от толщины конструкционной защиты и параметров орбиты. Классификация БРЭА по ее размещению внутри КА рассматриваются в соответствии с ГОСТ РВ 20.39.305 (ГОСТ РВ 20.39.305-97, требования по стойкости к воздействию СФ; ГОСТ РВ 20.57.308-97, методы оценки стойкости к воздействию СФ).

Излучение космического пространства при воздействии на электронные компоненты (ЭК) вызывает дозовые эффекты как результат воздействия электронов и протонов (частицы низких энергий до 1 МэВ) и одиночные события радиационных эффектов как результат воздействия ГКЛ и СКЛ — тяжелых заряженных частиц (ТЗЧ) и протонов (частицы относительно высоких энергий свыше 1 МэВ).

Влияние ИИ на БРЭА сводится к двум составляющим [1-3]:

• к суммарной накопленной дозе радиации;

• к воздействию заряженных частиц, вызывающих одиночные сбои.

Мерой энергии, поглощенной в материалах электронных компонентов, является поглощенная доза, измеряющаяся в радах. Поглощенная доза, при которой наступает отказ ЭК, называется предельной накопленной дозой (ПНД) — это основная характеристика радиационной стойкости. Накопление

дозы вызывает деградацию параметров ЭК и полное прекращение функционирования.

В настоящее время эффекты, вызываемые в изделиях электронной техники одиночными заряженными частицами космического пространства. являются одной из главных причин, ограничивающих стойкость радиоэлектронной аппаратуры на борту космического аппарата. В первом приближении [1], все эффекты одиночных сбоев разделяют на 2 класса. К первому относятся:

- Обратимые (мягкие) сбои (Soft Errors), в том числе SEU (Single Event Upset): имеется возможность исправления этой ошибки программными методами без отключения питания аппаратуры.
 - Переходные сбои в работе аналоговых и аналогово-цифровых ИС, обусловленные импульсом тока от попадания ТЗЧ или протона в какойлибо активный p-n-переход ИС. Параметры сбоев приведены в таблице 1.2 (по [1]).

Источник данных	Группа ЭК	Типономинал ЭК	Количество задействованных битов	Сечение насыщения сбоев на бит (ТЗЧ), см ² /бит		Сечение Сечение насыщения насыщения сбоев на бит сбоев на (ТЗЧ), см ² /бит микросхему (ТЗЧ), см ²		Пороговая ЛПЭ сбоев, МэВ (мг/см ²⁾	
			27	min	max	min	max	min	max
Данные	Электри	28LV011RP4FI-	1024000	3*10 ⁻⁶ (чтение)		3,072		37	
производит	чески	20		5*	[•] 10 ⁻³			(чте	ние)
еля	перепро			(запись)		5120		11,4 (з	апись)
	граммир								
	уемое								
	ПЗУ								
Типовые	Электри	28LV011RP4FI-	1024000	10-11	10-9	1,024*	1,024*	5	20
параметры	чески	20				10-5	10-3		
	перепро								
	граммир								
	уемое								
	ПЗУ								

Таблица 1.2 Параметры сбоев ЭК от воздействия тяжелых частиц

Группа ЭК	Типоно минал ЭК	Частот от ТЗЧ	а сбоев ГКЛ, с ⁻¹	Частота сбоев от максимально й плотности потока ТЗЧ СКЛ, с ⁻¹		Частота сбоев от средней плотности потока ТЗЧ СКЛ, с ⁻¹		Суммарная частота сбоев, с ⁻¹	
		min	max	min	max	min	max	min	max
Электричес	28LV01	4,49*10 ⁻¹⁰ (чт.)		3,23*10 ⁻⁶ (чт.)		4,06*10 ⁻⁸ (чт.)		3,23*10 ⁻⁶ (чт.)	
ки	1RP4FI-	5,79*10) ⁻³ (зап.)	1,11*10 ⁻³ (зап.)		1,37*10 ⁻² (зап.)		1,11*10 ⁻³ (зап.)	
перепрогра	20								
ммируемое									
ПЗУ									
Электричес	28LV01	1,19*	2,53*	2,46*	4,99*	2,86*	6,27*	$2,46*10^{-10}$	$4,99*10^{-6}$
ки	1RP4FI-	10^{-10}	10^{-10}	10-6	10-6	10^{-10}	10^{-10}		
перепрогра	20								
ммируемое									
ПЗУ									

1.3. Оценка радиационной стойкости РС. Радиационные эффекты в интегральных микросхемах

В приведенной выше работе рассмотрены так же вопросы повышения достоверности и точности оценки радиационной стойкости, существующей на рынке радиоэлектронной аппаратуры космических аппаратов, расчетными методами и проблемы оценки стойкости, связанные с применением в аппаратуре электронных компонентов иностранного производства, а также приводятся некоторые пути решения этих проблем.

Рассмотрим состояние реального моделирования радиационных эффектов в радиоэлектронике. (по литературным источникам, см., например, список литературы после обзора [4,5]).

Само описание радиационных эффектов в интегральных микросхемах (ИМС) представляет сложную проблему в виду очень большого разнообразия применяемых интегральных схем, как по функциональному назначению, так и по схемотехнической организации, структурному построению и технологическим приемам реализации топологии схемы. Определяющим фактором на некоторые виды радиационных воздействий, является тип изоляции элементов в интегральных схемах и вид подложки, на которой

формируется структура интегральной схемы, а также степень интеграции, т.е. плотность распределения элементов в структуре ИС.

В условиях воздействия отдельных радиационных факторов может оказывать влияние конструктивное исполнение интегральной схемы (тип корпуса, бескорпусная модификация).

Основные эффекты схемах ИМС, естественно, В связаны С радиационными эффектами в активных элементах, входящих в состав ИМС. Поэтому, как и в полупроводниковых приборах, в интегральных схемах должны наблюдаться остаточные изменения их параметров, радиационные переходные процессы и катастрофические отказы, которые связаны с ИМС. В разрушением конструкции отличие ОТ дискретных полупроводниковых приборов, в интегральных схемах с большой степенью интеграции могут происходить специфические процессы, связанные с локальным неравновесным энерговыделением за счет прохождения через элементы схемы высокоэнергетичных тяжелых заряженных частиц.

Речь пойдет, в первую очередь, о кремниевых биполярных транзисторах, МОП-транзисторах и о арсенид-галлиевых полевых транзисторов с барьером Шоттки, которые составляют элементную вазу ИМС (в частности, ТТЛШ).

Радиационные эффекты в ИМС происходят прежде всего при воздействии гамма-нейтронного излучения ядерных взрывов и ядерных установок, а также электронов и протонов космического пространства. При этом, каждый вид интегральных схем имеет свою систему параметров и среди этих параметров можно выделить один или несколько, изменения которых и будут определять стойкость ИМС к различным видам радиации по остаточным радиационным эффектам.

Например, для биполярных логических схем ТТЛ-типа с положительной логикой при воздействии нейтронного излучения основным параметромкритерием стойкости является выходное напряжение низкого уровня которое

определяется напряжением насыщения между коллектором и эмиттером выходного биполярного транзистора.

Известно, что когда на всех входах элемента ТТЛ устанавливается высокий потенциал, запирающий эмиттерные переходы входного многоэмиттерного транзистора Т₁, то этот транзистор работает в режиме инверсного включения. При этом ток, отбираемый от источника через коллекторный переход транзистора T₁ поступает в базу транзистора T₂, выполняющего функции инвертирующего усилителя. Инвертор насыщается и на выходе ТТЛ-элемента устанавливается низкий потенциал U_{овых}, равный U_{кэ нас}. транзистора Т₂. При нейтронном облучении величина U_{кэ нас}. возрастает в основном из-за уменьшения статического коэффициента передачи тока транзистора T₂ и времени жизни носителей заряда в его коллекторной области. Резкое увеличение U_{овых}. происходит, когда выходной транзистор уже не может войти в режим насыщения. Это приводит к невозможности выполнять основные логические функции, т.е. к потере функционирования схемы. В качестве критерия радиационной стойкости логических элементов ТТЛ-типа к воздействию излучений, которые приводят дефектообразованию объеме полупроводникового материала, К В использовать условие, исключающее следует выход транзистора Т₂ ИЗ насыщения, при ЭТОМ С некоторым запасом, определяемым помехоустойчивостью элемента для низкого уровня U_{on}.

Аналогичный подход может быть использован и для логических схем ТТЛШ. Однако следует отметить, что использование диодов Шоттки, шунтирующих переход коллектор-база насыщенного транзистора, исключает накопление неравновесных носителей в коллекторной области выходного транзистора, т.е. деградация времени жизни носителей заряда в коллекторе при облучении не сказывается на увеличении U_{овых} и все UOBBIX изменения определяются другими уменьшением статического коэффициента передачи тока.

Гамма-излучение, электроны и протоны космического пространства), приводящее, в основном, к поверхностным изменениям В биполярных структурах современных ТТЛ-схем с достаточно тонкой базой, также деградации статического коэффициента передачи тока сказывается на (СКПТ), однако, пока не возникает инверсионных слоев на поверхности базы р-типа вблизи эмиттера, спад СКПТ, как правило, не приводит к выходу транзисторов из насыщения в схемах ТТЛ и ТТЛШ. Поэтому возрастание U_овых. при облучении будет незначительным. Тогда в качестве параметракритерия радиационной стойкости может выступить выходное напряжение высокого уровня U 'вых, которое уменьшается из-за увеличения напряжения на сопротивлении нагрузки Rк закрытого выходного падения транзистора за счет увеличения его токов утечки. Такой эффект, особенно явно, может проявиться в интегральных схемах с диэлектрической изоляцией элементов, которая применяется в планарной технологии, т.к. в протяженных и глубоких областях SiO₂, используемых для такой изоляции и ограничивающих базовую область транзистора с боковых сторон, очень велика вероятность образования инверсионного слоя на поверхности базы ртипа за счет встраивания положительного заряда в SiO₂ при облучении.

Схемы интегральной инжекционной логики (ИЛ) по сравнению с ТТЛ или ТТЛШ схемами имеют большую плотность элементов на кристалле и меньшую рассеиваемую мощность, т.к. в них отсутствуют резисторы и они могут эффективно работать при достаточно малых токах. При облучении изза падения коэффициента передачи тока эмиттера горизонтального транзистора и коэффициента передачи тока базы вертикального транзистора растет U₀вых, т.к. уменьшается степень насыщения транзистора T₂. Более того, при определенном значении СКПТ, этот транзистор более не может войти в насыщение, т.е. нарушается функционирование схемы.

Устранение каналов утечки, возникающих во входных каскадах ТТЛШ БИС при их облучении в активном режиме работы, обеспечивается

техническими решениями, защищенными авторскими свидетельствами СССР 1589957 и 1554688. [4]).

Сущность технического решения заключается в том, что эмиттер входного транзистора ТТЛШ БИС выполнен в форме кольца, причем nобласть эмиттера окружает коллекторную область входного транзистора, а база этого транзистора также выполнена в форме кольца, расположенного эмиттерной и коллекторной областями n-скрытых между слоев ПОД окислом области изоляции. Такое оригинальное решение исключает условия образования паразитного транзистора (эмиттер-область n-скрытого слоя, база-подложка, а коллектор - скрытый слой других -элементов БИС, в том числе резисторов). Предложенная кольцевая конструкция входного транзистора БИС обеспечивает также дополнительный положительный эффект - объемную реализацию резистора, тело которого включено между базой и эмиттером. При входе транзистора в режим лавинного пробоя обеспечивает отпирание падение напряжения на нем входного транзистора и уменьшение (ограничение) рассеиваемой на нем мощности, БИС разряде вероятность отказа при что уменьшает статического электричества.

Следует отметить, что в схеме из-за сильнолегированных коллекторных областей транзистора Т₂ в величине Uкэнас. отсутствует составляющая падения напряжения на теле коллектора, что в общем приводит к меньшим значениям Uкэ нас. транзистора. Величина Uвых. при облучении снижается в основном из-за уменьшения с облучением падения напряжения на прямосмещенном эмиттерном переходе транзистора Т₂, связанного со снижением времени жизни носителей заряда В базовых областях транзисторов T₁ и T₂. Отметим, что схемы ИЛ значительно более чувствительны к дозовым эффектам ионизирующих излучений, чем схемы ТТЛ. Это происходит потому, что радиационные поверхностные изменения коэффициентов передачи токи транзисторов в схемах ИЛ более

значительны, чем в схемах ТТЛ, так как для горизонтального транзистора pn- p типа вклад поверхностной рекомбинации весьма существенен, т.к. инжекция носителей из эмиттера идет через боковую поверхность вблизи поверхности кристалла, а для вертикального транзистора *n-p-n* типа инжекция идет с большой площади эмиттера, а сбор носителей осуществляется участками коллектора значительно меньшей площади.

Таким образом, существенная доля инжектированных носителей имеет возможность рекомбинировать на поверхности кристалла. Кроме того, общие радиационные изменения коэффициента передачи тока вертикального транзистора, которые ответственны за потерю функционирования ИЛ схемы, значительно выше, чем у выходного транзистора ТТЛ-схемы, т.к. в базе первого для инжектированных носителей поле тормозящее, а в базе второго – ускоряющее, и доля носителей, достигающих коллектора, у первого меньше, чем у второго из- за большого вклада рекомбинации в пассивной базе.

Следовательно, в целом, радиационная стойкость по остаточным эффектам ИЛ-схем оказывается ниже, чем ТТЛ-схем.

Чем происходит больше медленнее набор дозы, тем шансов положительному заряду отжечься, хотя бы частично. При очень малых мощностях дозы, т.е. при длительных временах набора одной и той же дозы положительный заряд отжигается и основную роль в деградации начинает поверхностных состояний, который играть отрицательный заряд увеличивает пороговое напряжение *n*-канальных транзисторов. Это означает, управляющих сигналах на входе уже не удается создать что при индуцированный канал n-типа и происходит функциональный отказ схемы.

Схемы КМОП на сапфировой подложке (КМОП/КНС) по стойкости к дозовым эффектам несколько уступают схемам КМОП на кремнии, т.к. в КМОП/КНС ИС имеется еще одна *граница* с диэлектриком –

граница кремний - сапфир, на которой также может возникать встроенный заряд, влияющий на прохождение тока по каналу между истоком и стоком.

Среди радиационных переходных ионизационных эффектов в ИМС можно условно выделить первичные эффекты, приводящие в общем случае, к временной потере работоспособности ИМС, И вторичные эффекты. обусловленные специфической реакцией ИМС на протекание больших ионизационных токов и проявляющиеся в таких явлениях, как радиационноперегорание индуцированный пробой, металлизации токоведущих паразитных четырехслойных дорожек, радиационное защелкивание структур и т.д., т.е. способные вызвать катострофический отказ ИМС.

Кардинальным методом избавления от радиационного защелкивания является использование структур *кремний на изоляторе (КНИ)*, в частности структур кремний на сапфире (КНС).

Сбои цифровых ИМС под действием одиночных заряженных частиц удобнее оценивать с помощью величин собираемых зарядов, т.к. процесс ложного срабатывания схемы при времени выделения энергии, значительно меньшем времени жизни носителей заряда, характеризуется величиной критического заряда $Q_{\kappa p}$, выделенного в чувствительном элементе ИМС. При этом, $Q_{\kappa p} = \Delta V \mod C$ эфф, где $\Delta V \mod -$ помехоустойчивость ячейки, т.е. минимальная величина напряжения помехи, способная перевести схему в другое логическое состояние; Сэфф - эффективная величина емкости элемента ИМС.

Таким образом, сравнивая Qкр с величиной собираемого элементом схемы заряда Qc, можно делать выводы о возможности ложного срабатывания схемы. При Qc ≥ Qкр происходит одиночный сбой. Следовательно, необходимо определять величину собираемого заряда, обусловленного прохождением заряженной частицы через ИМС.

Кроме нейтронного и *γ*-излучения при ядерном взрыве существует рентгеновское излучение, которое может действовать на изделия

электронной техники при высотных ядерных взрывах.

Как правило, разрушение конструкции происходит за счет возникновения отраженной волны упругой деформации, т.к. предел прочности на растяжение существенно меньше предела прочности на сжатие, а первично возникшая волна сжатия может отразиться от поверхности и Такой перейти В волну растяжения. механизм часто приводит К катастрофическим отказам изделий полупроводниковой электроники при воздействии импульсного рентгеновского излучения.

Для того, чтобы не возникало большого перегрева в отдельных элементах конструкции ИЭТ, ее надо создавать из материалов с малым коэффициентом поглощения рентгеновского излучения, т.е. реализовывать так называемые «прозрачные» конструкции. Для этого надо использовать конструкционные материалы с малой плотностью. В качестве материала активных структур лучше использовать кремний, как самый легкий всего ИЗ В полупроводниковых материалов. качестве металлизации наиболее подходящим материалом является алюминий. В конструкциях приборов и ИМС бывает много диэлектрических элементов. Лучше всего использовать легкую керамику без тяжелых наполнителей, например, бериллиевую керамику (BeO), алюмооксидную керамику (Al_2O_3).

Основной вариант радиационно - стойкого прибора – создание защитной конструкции – «зонтика».

массивный металлический теплоотвод, в Если принципиально есть котором происходит основное поглощение у- квантов, то он не расплавится, но будет источником волны деформации. В этом случае надо предусмотреть акустическую развязку, т.е. создать слои, отражающие волну, чтобы она не дошла до активного кристалла. Для этого можно создать прослойки с существенно отличающейся плотностью. Легкие промежуточные слои легкой теплопроводящей керамики или могут состоять, например, ИЗ оксида алюминия.

Если волна попадет в кристалл, то надо делать легкое внешнее покрытие с большим коэффициентом поглощения ультразвука, чтобы волна не отразилась от поверхности кремния, а прошла в покрытие и там поглотилась.

1.4. Экспериментальные методы испытания изделий полупроводниковой электроники на радиационную стойкость

Радиационные испытания изделий полупроводниковой электроники (ИПЭ) можно делить на аттестационные, предназначенные для установления или подтверждения требований по радиационной стойкости на вновь или серийно выпускаемые изделия, и определительные, разрабатываемые связанные с получением справочных данных по радиационной стойкости изделий. Указанные испытания, как правило, проводятся на моделирующих установках, представляющих источники радиационных воздействий, имеющих единую или близкую физическую природу и характеристики с радиационными факторами, воздействующими В реальных условиях эксплуатации изделий (по работам [1,2,3]).

В отдельных случаях при испытаниях используются имитирующие установки или имитаторы, т.е. источники воздействий различной физической природы, обеспечивающие адекватное проявление и моделирование в изделиях доминирующих эффектов, вызываемых воздействием радиационных факторов в реальных условиях эксплуатации изделий.

когда Имитационные испытания следует проводить, отсутствуют соответствующие моделирующие установки, а также при отработке методик аттестационных испытаний в части выбора параметров-критериев стойкости, режимов и условий испытаний, при проверке применяемых технологических, конструктивно-топологических, схемотехнических функциональных И решений, направленных на снижение радиационной чувствительности изделий в процессе их разработки, при проведении периодических испытаний в условиях неритмичного производства и изготовления изделий малыми партиями.

Ниже представим перечень реальных моделирующих установок, которые используются при различных источниках воздействия на электронику.

1. Моделирование воздействия короткого гамма-импульса ядерного взрыва осуществляется с помощью импульсных рентгеновских установок и линейных сильноточных ускорителей электронов, работающих в режиме генерации одиночных импульсов с торможением электронов на мишени для рентгеновского Указанные создания тормозного излучения. моделирующие установки обеспечивают длительности импульсов рентгеновского излучения, соответствующие почти мгновенной гамма- составляющей ядерного взрыва (10÷40 нс по полувысоте) и максимальные мощности дозы излучения до 1012 Р/с вблизи мишени, что также соответствует реальным условиям, в которых может функционировать радиоэлектронная аппаратура, содержащая ИПЭ.

2. Моделирование воздействия вторичного и осколочного гамма- излучения ядерного взрыва (ЯВ) проводится, как правило, на гамма-установках с закрытыми радионуклидными источниками, в качестве которых обычно используются изотопы кобальт-60 или цезий-137. Энергия гамма-квантов изотопа кобальт-60 (1.17 МэВ и 1.33 МэВ) в большей степени соответствует энергетическому составу гамма-излучения ЯВ, чем у цезия-137 (0.661МэВ). Однако, если на модельной установке обеспечивается та же самая экспозиционная доза, что и при ядерном взрыве, то различие в энергии не сказывается на результатах испытаний. Некоторое различие в результатах можно ожидать из-за того, что при ядерном взрыве эта доза набирается за существенно более короткое время, чем на МУ. Для отдельных классов изделий, в частности, основанных на использовании МДП-структур, эта разница весьма заметна, что должно учитываться в методиках испытаний.

3. Моделирование воздействия *импульса нейтронов ЯВ* осуществляется на импульсных ядерных реакторах на быстрых нейтронах, которые обеспечивают длительности импульсов нейтронного излучения от 50 мкс до

3 мс с максимальной величиной флюенса за одинимпульс, приближающейся к 1015 н/см2 в центральном канале такогореактора. Средние энергии нейтронов реактора могут достигать значений 1.4÷1.5 МэВ.

воздействия Моделирование излучений ядерных установок легко осуществить на обычных реакторах, работающих в стационарных режимах. Однако большинство таких реакторов являются реакторами на тепловых нейтронах, большой наведенной радиоактивности, ЧТО приводит К что затрудняет работу с ними после испытаний. Поэтому обычно для испытаний используют те же реакторы, что и при моделировании излучений ЯВ, и гамма-установки с радионуклидными закрытыми источниками излучения, а разницу в спектрально- энергетических характеристиках реакторов учитывают в методиках испытаний.

4. Воздействие электронной составляющей излучения космического пространства на ИПЭ моделируют с помощью ускорителей электронов или бета-установок с закрытыми радионуклидными источниками, среди которых наиболее подходящими для моделирования являются источники на основе изотопа стронций-90 -иттрий-90 со средней энергией в диапазоне 0.7÷1.1 МэВ в зависимости от конструкции источника и максимальной энергией до 2 МэВ. Конечно, энергетический спектр электронного излучения космического пространства отличается 0T спектра радионуклидного источника и не соответствует энергии электронного ускорителя. Однако эти могут быть учтены в методиках испытаний с помощью различия соответствующих коэффициентов эквивалентности воздействия указанных Кроме того, большинство ускорителей электронов работают в излучений. импульсном режиме с определенной частотой повторения импульсов, т.е. при плотностях потоков электронов в импульсе, на несколько порядков превышающих плотности потоков электронов в космическом пространстве, что может сказаться на результатах испытаний для некоторых классов изделий.

5. Воздействие протонной составляющей излучения космического пространства на ИПЭ моделируют с помощью ускорителей протонов. При этом, следует учитывать отличие энергетических спектров протонов космического пространства от моноэнергии ускорителей протонов и большую разницу в плотностях потоков излучения, так как ускорители протонов, как и электронов, работают в импульсном режиме.

6. Воздействие *тяжелых заряженных частиц* космического пространства моделируют с помощью ускорителей тяжелых ионов или облучением осколками деления калифорния-252, которые имеют средние массы в 106 и 142 атомных единиц массы и, соответственно, средние энергии 103 МэВ и 79 МэВ. Величины линейной передачи энергии (ЛПЭ) для них лежат в пределах от 40 до 45 МэВ, а пробеги в кремнии составляют ~ 15 мкм.

Как отмечается в обзорных работах [3,4], испытания на моделирующих установках, как правило, являются дорогостоящими ввиду сложности и большой стоимости, также необходимости a привлечения ДЛЯ ИХ обслуживания большого количества квалифицированного персонала. Поэтому в ряде случаев, о которых упоминалось ранее, целесообразно использовать имитационные испытания, которые проводятся более на простом в обслуживании оборудовании.

Так, с помощью импульсного лазерного облучения можно добиться эффектов, аналогичных по своим проявлениям и последствиям для изделия эффектам при воздействии короткого импульса гамма-излучения. Для этой цели при испытаниях кремниевых систем используются лазеры с длиной волны от 1.06 до 1.08 мкм, чтобы создавать заметную ионизацию в кремнии и в то же время давать возможность излучению проникать в объем схемы.

Норма испытаний представляет собой уровень воздействия радиационного фактора моделирующей установки, обеспечивающий аналогичные реальным условиям изменения параметров изделий и определенный с учетом различий амплитудно-временных и спектрально- энергетических характеристик

моделирующей установки и реальных условий, а также погрешности дозиметрии на установку. В нормы испытаний, кроме учета относительной эффективности, связанной с различной энергией излучений и реального спектра излучений в космическом пространстве, должны быть учтены эффекты ослабление потоков электронов и протонов элементами конструкции корпуса изделия.

Для каждого вида испытаний, при их проведении, выделяется отдельная партия изделий. Так, одна партия проходит испытания на всех воздействующих факторах ЯВ – сначала на моделирующую установку с коротким импульсом ионизирующего излучения, где определяется уровень бессбойной работы (УБР) и время потери работоспособности (ВПР) при максимальном значении фактора, затем на стационарной гамма установке и в самом конце на импульсном реакторе, после чего изделия еще подвергают испытаниям на одиночный удар и смену температур среды. Испытания отдельной партии на воздействие излучений ядерных установок проводят лишь в том случае, если требования по экспозиционной дозе на ядерной установке превосходят аналогичные требования при ядерном взрыве

Выводы

Актуальность и практическая значимость выбранной темы исследований может быть определена перечнем нерешенных проблем:

1. Сложностью постановки экспериментов.

2. Необходимостью миниатюризации ЭС, то есть переход на наноуровень.

Отсутствием теории для моделирования (и проектирования) 3. электронных систем наноуровне. В частности, на не исследованы теоретические вопросы перечисления элементарных одномерных И двумерных сверхрешеток в нанотехнологии.

4. Не отработана технология сборки наноустройств из нульмерных (квантовых точек), одномерных (в том числе, колец) и двумерных гетероструктурных элементов.

 Дефицит компьютерных программ расчета моделей нанокластеров, используемых в радиотехнике и проектирования радиосистем на наноуровне.
 Отсутствие базы данных по нанокластерам.

6. Не исследованы радиационные эффекты с нанокластерами.

Поэтому целями исследований из перечисленных выше проблем выбраны взаимосвязанные вопросы:

1. Провести анализ литературных источников, содержащих описание реальных и модельных экспериментов по определению надежности ЭС.

2. Изучить проблемы, возникающие при переходе радиоэлектронных систем (РЭС) на наноуровень.

3. Рассмотреть теоретические вопросы, необходимые для моделирования (и проектирования) радиоэлектронных систем на наноуровне. Исследовать вопросы симметрии и проектирования замкнутых циклов и слоистых гетероструктур, как связанных элементов радиосхем для наноэлектроники.

 Создать необходимую базу данных по нанокластерам веществ, применяемых в радиотехнике, которые связанны с возможными радиационными превращениями.

5. Применить методику компьютерного расчета реальных и модельных нанокластеров для проектирования защиты радиосистем на наноуровне.

6. Исследовать на моделях нанокластеров радиационные эффекты, приводящие к перестройке структуры нанокластера.

7. Рассмотреть проект и принципы сборки общей радиационной системы защиты радиотехнических устройств на наноуровне.

В работе получены следующие результаты.

1. Рассмотрена математическая модель разложения электрических цепей (элементов радиосхем) на «цветные» кольца и предложена классификация

одномерных цветных колец, а также двумерных гетерослоев на принципах групп симметрии подстановок.

2. Рассмотрена модельная сборка кольца в программе «компьютерный наноскоп».

3. Рассчитаны элементы цепей - нанокластеры веществ, используемых в радиотехнике.

4. Исследованы ядерные реакции и радиационные превращения некоторых нанокластеров.

5. Предложены проекты наносистем для радиационного исследования и защиты электронных средств.

Глава. 2. Модели и методы исследования наносистем

2.1. Одномерные модели. Комбинаторные методы перечисления циклических разбиений. Циклические разбиения как элементы радиосхем

В ряде работ [8] отмечено, что методы классического расчета радиосхем не применимы к радиоустройствам на наноуровне, для которых понятие цепи, проводимости, «узла», емкости и других элементов резко меняют свое содержание. В частности, при переходе в радиосхемах с макро- на микро-, а затем на наноуровень новое содержание и важное значение приобретает классическая модель кольца (одномерного цикла), как это отмечено выше [4].

Сразу отметим, что уже на макроуровне любую электрическую цепь со времен Кирхгоффа (пример на рисунке 2.1) и простую радиосхему, для необходимых расчетов, принято заменять модельной системой сопряженных замкнутых цепей, циклов (колец) и исследовать или реально собирать циклы в отдельности (Рисунок 2.2) [4]. Теоретически, каждая фиксированная «цветная» точка кольца может определять функцию элемента кольца (резистора, конденсатора, источника, выпрямителя, транзистора и др.) или соответствовать выбранному веществу (проводнику, диэлектрику и прочее), то есть несет определенную «нагрузку».



Рисунок 2.1 Пример элементарной электрической цепи



Рисунок 2.2 Топологический эквивалент схемы рисунок 1 в циклах (a); выделено одно кольцо (б).

Квантовомеханический уровень исследования колец.

На микроуровне, электронному транспорту в квантовых кольцах при наличии точечных рассеивающих центров, в качестве которых могут выступать одиночные примеси или наноразмерные «квантовые точки», посвящено много работ (см. ссылки в работе [9]). Так, например, в работе [9] рассмотрена система, состоящая из кольца Ааронова-Бома радиуса ρ с прикрепленными к нему одномерными проводниками W₁ и W₂ (рисунок 3).



Рисунок 2.3 Кольцо Ааронова – Бома с двумя присоединенными проводниками и примесями на кольце (A_j –точки соединения проводников с кольцом, P_i – точки нахождения примесей W_i проводники (по [10]).

Точки контактов между проводниками и кольцом обозначены A₁ и A₂. Рассмотрен случай, когда на кольце имеется N короткодействующих

рассеивающих центров. Проводники моделируются положительными полуосями х ≥ 0.

Кольцо помещено в магнитное поле B, перпендикулярное плоскости кольца. Поток магнитного поля $\Phi = \pi \rho^2 B$. В системе реализуется одномодовый режим электронного транспорта и все транспортные системы определяются единственным коэффициентом характеристики прохождения электрона (кондактансом). С помощью потенциалов нулевого радиуса, представляющих собой функции Дирака и имеющих вид бесконечно глубоких потенциальных ям, в работе получены аналитические для коэффициента прохождения и исследована зависимость выражения электронного транспорта от энергии электронов, от величины внешнего магнитного поля и от положения примесей. Показано, что зависимость коэффициента проводимости от энергии электронов носит осцилляционный характер, связанный с интерференцией электронных волн, многократно рассеянных на примесях и контактах.

В частности, при диаметрально противоположном положении контактов и полуцелом значении магнитного потока через кольцо система без примесей ведет себя как идеальное электронное зеркало. Наличие примесей приводит к появлению ненулевой вероятности прохождения. Таким образом, наличие примесей приводит не только к уменьшению кондактанса, но и его к его увеличению вследствие разрушения деструктивной интерференции. Зависимость коэффициента прохождения от энергии содержит вблизи дискретных энергетических уровней квантового кольца резонансы Фано. Необходимым условием существования резонансов является частичное нарушение симметрии системы либо С помощью несимметричного расположения контактов, либо с помощью примесей, либо с помощью магнитного поля. Этот пример показывает, что мы имеем дело с частным случаем цветного кольца, у которого структура и свойства определены симметрией «нагруженных» точек и ее нарушениями (преобразованиями).

Комбинаторный способ перечисления колец. Исторически сложилось, исследуя методами рентгеновского структурного анализа (РСА) что структуры минерала биксбиита, Л. Полинг и М. Шепелл, случайно обнаружили тот факт, что несколько различных структур могут иметь один и тот же набор дифрагированных рентгеновских интенсивностей. Конкретно, в пространственной группе $I 2_1/a3$ (позиции: 24 d) положение базисного атома с координатами (x, 0, $\frac{1}{4}$) или (- x, 0, $\frac{1}{4}$) определило две различные структуры, которые имели при этом, одинаковые дифракционные интенсивности. Это явление в РСА было названо гомометрией (как частный случай гомоморфизма). Для исследования явления Паттерсон (см.литературу в работе [10]) впервые ввел в теорию гомометрии дискретное периодическое разбиение на кольце (циклотомический набор точек) и рассмотрел структуры некоторых разбиений.

На первом этапе исследований колец, возникла задача перечисления циклических разбиений с заданным количеством точек двух сортов: занятых и не занятых атомами позиций в структуре цикла. Исследования, проведенные Хоземаном и Бахчи, Бюргером и др. (см. литературу в работе [11]) завершились работой Рау (с соавторами) перечислением таких «двухцветных» целочисленных циклических разбиений [11]. Полученные результаты можно кратко представить следующим образом.

Для перечисления разбиений N_v^k заданного периода v, содержащего k – занятых позиций точек, использовались комбинаторные методы теории чисел [4 Холл]. Было показано (теорема 1 в [12]), что каждой блок-схеме с автоморфизмом α : $a_{ij} + 1 \rightarrow a_{i+1,j}$; $B_{i,k} \rightarrow B_{i+1,k}$, переставляющим как элементы a_{ij} , так и блоки $B_{i,k}$ блок-схемы по циклу длины v, соответствует один и только один циклотомический набор, а поэтому число блок-схем из множества $E=\{0,1,...,v - 1\}$ с |E|=v равно количеству циклических разбиений N_v^k . Если начинать каждую блок-схему с блоков, содержащих фиксированный элемент a_{ij} , то, как показано в [12] блоков с этим элементом

во всех блок-схемах содержится C_{v-1}^{k-1} , а с другой стороны, в блок-схеме с периодом T = v/d, общее количество которых обозначено m(d), содержится k/d блоков с a_{ij} и общее число блоков, содержащих фиксированный элемент будет равно m(d)·k/d. Суммируя по всем делителям d числа n = (k,v) (HOД чисел k и v), имеем: $C_{v-1}^{k-1} = k \sum_{d \mid n} m(d)/d$. Далее, используя рецепты [12],

вычислено количество m(d), а затем N_v^k , через известную в комбинаторике

функцию Мёбиуса: $\sum_{q \setminus q} \mu(q') = \begin{cases} 1, npuq' = 1 \\ 0, npuq' > 1 \end{cases}$. В этом случае,

$$N_{v}^{k} = 1/k \sum_{d \mid n} C_{\frac{v}{d}}^{\frac{k}{d}-1} \sum_{d \mid d} \frac{d}{d'} \mu(d'), \text{ но сумма } \sum_{d \mid d} \frac{\mu(d')}{d'} = \varphi(d) - \text{ есть функция}$$

Эйлера, определяющая количество чисел взаимно простых с d, поэтому окончательно имеем: $N_v^k = \frac{1}{k} \sum_{d \mid n} \varphi(d) C_{\frac{v}{d} - 1}^{\frac{k}{d} - 1}$.

Во всех этих работах конкретные структуры колец были рассмотрены не достаточно полно. Не рассматривались и более сложные «многоцветные» кольца, в которых каждый элемент кольца имеет свою «нагрузку», абстрактно, свой «цвет».

2.2. Компьютерный перебор структур цветных колец на основе групп подстановок

В представленной работе [10], на начальном этапе исследований цветных колец, как и в случае с одномерными двухцветными циклическими наборами точек, предлагается способ расчета структур многоцветных (в том числе и двухцветных) циклических разбиений и их классификацию на основе симметрии групп подстановок, как это продемонстрировано ниже. Из теории групп известно (см.,например, [12]), что N! перестановок N чисел составляет их наибольшее количество и принадлежит полной группе симметрии перестановок чисел. Полная группа разбивается на подгруппы

порядка р. Элемент подгруппы (перестановка) будет соответствовать определенной структуре кольца, если каждому числу на кольце однозначно поставить в соответствие число в перестановке. В то же время, каждой перестановке соответствует один элемент подгруппы, который можно представить в виде произведения подциклов. Считая точки, принадлежащие одному подциклу идентичными, то есть имеющими один и тот же цвет, получаем разбиение перестановки на цветные подциклы. Каждая подгруппа, содержащая р – элементов (порядок группы) определит количество структур колец с общей симметрией. Таким образом, получаем возможность для классификации структур колец по их принадлежности к одной подгруппе, а цветные подциклы в подстановке определят структуру цветного кольца.

Для вывода преобразований симметрии подгруппы подстановок и построения групповой таблицы Кэли нами была составлена программа перемножения элементов группы, возможности которой представлены на рисунок 2.4. Произведение матриц перестановок в программе производится по правилу («левая» подстановка умножается на «правую»), которое представлено в окне программы (рисунок 1) примером с числом элементов N = 8 следующим образом:

Злемент I-й строки 3лемент 2-й строки 45671032	
Х <u> </u>	🔲 tabl_k.txt — Блокнот
рознавно = Эленент 2-й строки 23102645	Файл Правка Формат Вид Справка [g0]=(0 1 2 3 4 5 6 7); g0] g[1] g[2] g[3] g[4] g[5] g[6] g[7] ^
сброс Поиск подгрупп [перенножити]	g[1]=(5 4 7 6 0 1 2 3); g[1] g[2] g[3] g[0] g[5] g[6] g[7] g[4]
Полная таблица Кэли Количество эленентов Построить Т.К. Г. 🛨 Матрицани Матрица	g[2]=(1 0 3 2 5 4 7 6); g[2] g[3] g[0] g[1] g[6] g[7] g[4] g[5] g[2]=(4 5 6 7 4 0 2 2); g[2] g[0] g[4] g[5] g[4] g[5] g[4] g[5]
Поиск циклов Циклы Максимальный элемент	g(4)=(67542310); g(4) g(7) g(6) g(5) g(2) g(1) g(0) g(3)
Результат поиска Поиск Расширенный поиск Расчет	g[5]=(3 2 0 1 6 7 5 4); g[5] g[4] g[7] g[6] g[3] g[2] g[1] g[0]
	g[6]=(7 6 4 5 3 2 0 1); g[6] g[5] g[4] g[7] g[0] g[3] g[2] g[1]
Масштаб Масштаб Поиск нотивов ностроение	g[7]=(2 3 1 0 7 6 4 5); g[7] g[6] g[5] g[4] g[1] g[0] g[3] g[2]

Рисунок 2.4 Окно программы расчета групп подстановок (слева) и результат вычислений, сформированный в виде таблицы Кэли (справа).

Разбиение любой подстановки на подциклы легко понять на основе записи «в подциклах» для левой матрицы в представленном выше равенстве: $0 \rightarrow 5 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \rightarrow 0$, и $2 \rightarrow 7 \rightarrow 3 \rightarrow 6 \rightarrow 2$. Образуется два подцикла и подстановка, в которой при краткой записи остается только нижняя строка, дает следующий результат: (54760123) = (0514)(2736).



Рисунок 2.5 Элементы подгруппы подстановок кольца (выделены трансляционно-не эквивалентные цветные кольца - «ожерелья» из таблицы Кэли по рисунку): (а) 01234567=(0)(1)(2)(3)(4)(5)(6)(7) - восьмицветное преобразование; (б) 54760123 = (0514)(2736) – двухцветное преобразование; (в) 76453201 = (0716)(2435) – двухцветное преобразование; (г) 10325476 = (01)(23)(45)(67) – четырехцветное преобразование.

Подстановка разбилась на два подцикла, то есть она двухцветная. Поэтому, для расчетов, в компьютерную программу вводятся только вторые (нижние) строки матриц подстановок, так как верхние строки у всех матриц одинаковые. Затем выбираются перестановки, принадлежащие одной
подгруппе, и автоматически составляется соответствующая таблица Кэли. Добавление операции подстановки, не принадлежащей этой подгруппе, приводит к расширению подгруппы и к новой таблице Кэли. «Визуализация» в виде цветного ожерелья из 8 точек приведена на рисунке 2.5.

2.3. Гетерослои в радиосистемах на наноуровне. Компьютерная модель классификации двумерных разбиений на основе симметрии Для увеличения быстродействия (уменьшения времени задержки, определяемой величиной RC – канала) МДПТ и КМОП – структур используются два технологических приема. 1. Формирование структуры кремний на изоляторе (КНИ).

2. Многоуровневое межсоединение элементов интегральных схем. Ключом к достижению высокой плотности низколежащих уровней является планарная Заложена расположения межсоединений технология. идея В последовательных слоях друг над другом. Размеры до 100нм. Планарная технология базируется на согласовании слоев по структурным параметрам сверхрешеток. Формирование структуры КНИ представляет собой с точки зрения теории только частный случай такого согласования структурных параметров слоистой структуры. Для перехода к общему случаю необходимо иметь теоретически рассчитанный набор согласующихся между собой Программа классификации двумерных гетерослоев. таких вариантов гетерослоев так же, как и в предыдущем случае одномерных колец может дать положительный результат. Ниже приведем все варианты разбиений, соответствующие группе симметрии решетки упаковочного пространства PS 4 2₁. Для остальных решеток разбиения приводятся в Приложении. Способ двумерной «визуализации» результатов расчета по данной программе продемонстрируем на группе из 8 элементов. Каждая цифра в разбиении пространства на периодические сверхрешетки напрямую выводит на способ заполнения решеточной структуры различными нанокластерами. В этом случае 8 нанокластеров (8 цифр в строке подстановки) могут располагаться

таким образом, что их последовательность определяет один из вариантов гетероструктуры, представленный в конкретной группе подстановок по рисунку 2.5. Изобразим некоторые варианты плоских сверхрешеток (рисунок 2.6). В программе предусмотрено так же графическое представление («визуализация») структуры каждой подстановки в модели периодического разбиения двумерного пространства [13]. В принципе, по теореме об изоморфизме конечных групп симметрии И групп перестановок «визуализировать» можно любую абстрактную конечную группу, что было ранее продемонстрировано В.Г. Рау с сотрудниками в работе [13] по программе, разработанной на кафедре (рисунок 2.4). Апробация методики и применение в нанотехнологии впервые проводилась в данной работе.

Таблица 2.1 Таблица Кэли для подгруппы симметрии подстановок из 8 элементов



Рисунок 2.6 Три способа представления разбиения: (a) в клеточном варианте, (b) в паркетном варианте, (b) с цифровой идентификацией цвета. PS 4 2₁, двухцветная g[1]=(5 4 7 6 0 1 2 3) и четырехцветная g[2]=(1 0 3 2 5 4 7 6).

Полное множество дискретных деформационных преобразований решеток гетероструктур можно продемонстрировать на разбиении с Z = 31, когда при изменении матриц упаковочных пространств от УП 31_0 к УП 31_{31} происходит постепенная деформация структуры исходного разбиения от «левой» формы областей разбиения к «правой» форме, характеризуя возможный фазовый переход (рисунок 2.7).



Рисунок 2.7 Действие на структуру дискретных деформационных преобразований

Таким образом, МЫ имеем набор проектируемых слоев для проектирования слоистой гетероструктуры. В ЭТОМ случае, нет необходимости подбирать слои по принципу их согласования, так как они имеют общую основу и все «укладываются» на одну и ту же фундаментальную решетку – дискретное целочисленное пространство. Количество решеток, соизмеримых друг с другом, содержащих Z элементов, теоретически определяется по формуле: $N_{PS} = \Sigma_Z d_Z$, что означает сумму делителей числа Z.

При сборке наноструктуры полученная информация позволит создавать на поверхности материала необходимые элементы радиосхем, выбирая в качестве вариантов рассчитанные геометрические параметры сверхрешеток. Очередным этапом исследований кластеров является переход к структурам сложных оксидов типа перовскита и другие вещества, разнообразие которых, позволяет говорить о возможности выбора материалов по принципу «структура-свойство», применение которых актуально для радиотехнических систем (рисунок 2.8).



Рисунок 2.8 Выделены среди сложных оксидов, в соединениях типа ABO₃ перовскитов связанные слоистые структуры.

Тонкое взаимодействие между конкурирующими энергетическими состояниями приводит в различному порядку для спина, заряда и орбитальных степеней свободы. Это придает материалам широкий спектр функциональных свойств. Например, перенос заряда может проявляться в виде колоссального магнетосопротивления, переходы металл-диэлектрик, или диэлектрик-сверхпроводник (для сильно коррелированных соединений). Совместное выравнивание электрических диполей или спинов приводит к сегнетоэлектричеству или ферромагнетизму, соответственно. Деформации решетки и формы октаэдров приводящие к антиферродисторсии (antiferrodistortive (AFD)) структурного упорядочения, могут соединяться с другими видами искажений в системе, что определяет структурные и электронные фазовые переходы. Зеленые, синие и красные сферы, образующие структуру перовскита, показанную в центре, содержат атомы A, B, и O, соответственно.



Рисунок 2.9 Варианты различных конфигураций транзисторов на органических полупроводниках (слева) и пример технологии производства гетероструктуры (справа).

Органические транзисторы могут иметь широкое применение. По сравнению с кремниевыми устройствами они стоят дешевле, многие процессы их изготовления (рисунок 2.9) выполняются при комнатных температурах, а используемая технология постепенно становится все проще.

Большинство органических материалов являются диэлектриками со значением электрической проводимости при комнатной температуре в диапазоне 10⁹–10¹⁴ Ом•см. Это обусловлено двумя основными причинами. Первая заключается в том, что наивысшая занятая молекулярная орбиталь (Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO) большинства молекул полностью заполнена, а низшая незанятая молекулярная орбиталь (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO) отделена от HOMO значительной энергетической щелью. И вторая – твердые состояния обычно представляют

собой молекулярные структуры, то есть, квантово-механические взаимодействия между наивысшими занятыми молекулярными орбиталями смежных молекул являются слабыми (силы Ван-дер Вальса), и зоны валентности, образованные этими взаимо-действиями, очень узки. Подобно этому зона проводимости, возникающая при взаимодействии между LUMO, тоже очень мала, так что энергетическая щель, по существу, такая же, как и у свободных молекул.

Пример устройства тонкопленочной гетероструктуры из органических полупроводников приведен в статье [14].В работе дается подробный анализ этапов исследования композитных донорно-акцепторных систем на основе пентацена с *p*-типом проводимости и производного перилена (DiMe-PTCDI) с*n*-типом. Теоретическую основу исследований составляет энергетическая зонная диаграмма гетероперехода ITO(indiumtinoxide)- пентацен-перилен-Al (рисунок 10), в которой заполненные (HOMO) и не заполненные (LUMO) молекулярные орбитали контактирующих полупроводников «обрамлены» зонами проводников ITO и Al. Для последних уровни Ферми, определяющие основной энергетический уровень начала отсчета энергии, близки друг к другу (пунктирная линия на рисунок 2.10).



Рисунок 2.10 Зонная диаграмма гетероструктуры (а) и (б) – ее эквивалентная схема.

Как это представлено в работе выбор Al и ITO обусловлен требованиями формирования хороших квазиомических контактов с полупроводниками, что, в свою очередь, определяется поверхностными свойствами напыляемых пленок, общей толщиной до 100нм. Эта информация может быть получена и исследована с помощью предложенного нами комплекса программ «компьютерный наноскоп» с решенной задачей многоцентрового роса На основе приведенной информации нами были проведены исследования наноструктур антрацена, пентацена и коронена. Результаты этих исследований представлены ниже.

2.4. Расчет нанокластерных элементов Алгоритм построения нанокластеров

Организация технологии создания защиты радиосхем из элементов наноструктур потребовало разработки не только расчета вариантов гетероциклов и гетерослоев, как основы проектируемых устройств, но и совершенно нового подхода к технологии сборки системы в конкретном материале. Если ранее физическими свойствами этих материалов можно было управлять с помощью включения атомарных дефектов («квантовых точек») в самой решетке твердого тела, то теперь становится необходимым переход к схеме взаимодействия многоатомных нанокластеров. Создание и работу такой схемы невозможно проектировать без понимания механизма межкластерного взаимодействия, которое, в свою очередь, определяется структурой кластера, его симметрией и поверхностными связями. В ВлГУ разработана математическая модель и компьютерная программа роста нанокластеров, основанная на анализе периодического разбиения пространства на отдельные области Дирихле. Основные понятия теории роста кратко рассмотрим вслед за авторами работ [15-20].

• Орграф G является *связным*, если любые его две вершины a_i, a_j из множества вершин V(G) можно соединить цепью последовательных ориентированных ребер из множества ребер E(G).

• Граф G будем считать *периодическим*, если существует трехмерная решетка трансляций Lus \mathbb{R}^3 , сдвиги на векторы которой индуцируют автоморфизмы графа G, то есть биекции на множестве вершин V(G),

сохраняющие связи между ними. Тогда группа автоморфизмов *AutG*периодического графа содержит решетку*L* в качестве подгруппы.

• Фундаментальная область $F = \mathbf{R}^3 / L$ содержит конечное число вершина₁, a_2 , ..., a_Z графа G. Вершины попарно несравнимы по modL, а число ребер, инцидентных вершинам – конечно.

• Цепь, идущая из вершины *x* в вершину *y* и содержащая наименьшее число ребер, называется *геодезической*.

• Количество ребер d(x,y) в геометрической цепи, соединяющей вершины xu уна множестве вершин графа V(G) задает метрику: $d(x, y) \ge 0, d(x, y) = 0 \iff x = y; d(x, y) \le d(x, z) + d(z, y).$

• Расстояние d(x,y) обладает свойством L – инвариантности: $d(x + \mathbf{r}, y + \mathbf{r}) = d(x, y)$ для любого вектора решетки r.

• Геодезические $d(a_i, a_i^{(j)})$, соединяющие каждую вершину a_i с вершинами $a_i^{(j)} \equiv a_i (modL)$, называются **лучами**. Лучи, идущие в направлениях $\langle j \rangle$ образуют вершинную звезду $St(a_i, s_i^{(j)})$, где $S_i^{(j)}$ определяет число ребер в *j*-й цепи. Тогда расстоянию между узлами решетки a_i и $a_i^{(j)}$ будет соответствовать, с одной стороны, вектор решетки $r_i^{(j)}$, а с другой стороны, число ребер в цепи $S_i^{(j)}$. Отношение $\mathbf{v}_i^{(j)} = r_i^{(j)} / S_i^{(j)}$ называется нормированным единичным вектором. Совокупность нормированных единичных векторов, построенных для всех a_i узлов в ячейке и объединенных с общим началом образует когеррентную нормированную звезду, оболочка которой определяет образ многогранника роста.

Таким образом, для каждого луча существует нормированный единичный вектор, который кратен вектору решетки. С другой стороны, все вершины графа, отстоящие от a_i на расстоянии s_i , лежат на одной координационной окружности, номер которой совпадает с s_i . Тогда существует координационная окружность, которую назовем *узловой*, такая

что, вершинная звезда, полученная из когеррентной нормированой звезды увеличением в p раз совпадет с узлами решетки. Номер этой окружности является наименьшим общим кратным (НОК) чисел $s^{(j)}$. Следовательно, для каждого луча существует узловая координационная «окружность» которая является «образом» многогранника роста и вследствие самоподобия растущего графа через *тр* шагов от нее координационная окружность снова станет узловой.

Такой подход позволяет разработать соответствующие алгоритмы и программы, то есть решить практическую задачу создания комплекса компьютерных программ.

Комплекс программ «Компьютерный наноскоп» содержит:

1. Программу построения моделей структур с использованием Кембриджского банка структурных данных[21].

2. Программу построения разбиений на области Вороного-Дирихле.

3. Программу построения нанометровых кластеров с поверхностными координационными связями.

Из Кембриджского банка структурных данных (рисунок 2.11) получаем 3D-информацию о молекулярной структуре химического соединения, полученного методом рентгеноструктурного анализа или нейтронографии. В общем случае, для немолекулярных структур нами был использован, в частности, международный банк WWW-MINCRIST.



Рисунок 2.11 Окно Кембриджского банка структурных данных.

Исходными данными кристаллической структуры являются: пространственная группа, параметры элементарной ячейки, элементы симметрии и координаты атомов (рисунок 2.12).

Файл	Прав	ка Формат	Вид Справка			
TITL	ANTCE	N14				
CELL	0.710	073 8.5526	6.0158 11.	172 90 124	.596 90	
ZERR	4 0.0	012 0.0011	L 0.0016 0	0.015 0		
LATT	1					
SYMM	1/2->	(,1/2+y,-z				
SFAC	СН	_				
UNIT	28 20)				
FVAR	1.00					
C1	1	0.086700	0.028800	0.364400	1.000000	0.05000
C2	1	0.117800	0.155500	0.279800	1.000000	0.05000
C3	1	0.058900	0.081700	0.138400	1.000000	0.05000
C4	1	0.087500	0.207400	0.047700	1.000000	0.05000
C5	1	-0.030300	-0.131400	0.089600	1.000000	0.05000
C6	1	-0.060100	-0.257700	0.183000	1.000000	0.05000
C7	1	-0.003500	-0.180600	0.315600	1.000000	0.05000
H1	2	0.127000	0.082000	0.459000	1.000000	0.06000
H2	2	0.182000	0.297000	0.313000	1.000000	0.06000
H3	2	0.151000	0.350000	0.082000	1.000000	0.06000
H4	2	-0.123000	-0.405000	0.147000	1.000000	0.06000
H5	2	-0.027000	-0.271000	0.380000	1.000000	0.06000
IEND						

Рисунок 2.12 Рабочий файл КБСД

С целью получения из структурных данных объективной информации об устойчивых связях (графы соседства) используется хорошо зарекомендовавший себя метод построения разбиения кристаллического пространства на области Вороного-Дирихле (рисунок 2.13).



Рисунок 2.13 Молекулярный полиэдр Вороного-Дирихле молекулы антрацена и изоморфного к нему пентацена.

Представлен последовательный послойный рост нанокластера пентацена (от 2,4 нм до 7,2 нм). Таблица расчета связей по разбиению на области Вороного-Дирихле представлена на рисунок 2.14.

Файл Правка Формат Вид Справка									
2 24 8.5526 6.0158 11.172 90 124.596 90 0.0 0.0 0.0 1 0.5 0.5 0.0 2									
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C5 C6 C1 C2 C1 C2 C1 C2 C3 C3B C2B C3B C5B C6B C1 C2 C5 C6 C1 C2 C5B C6B C1B C2B C1A C6A C1 C2 C1B C2B C1A C6A C1A C2AA C1A C2AA C1A C2AA C1A C2AA C1A C2AA C1A C2AA C1A C7AA C1A C7B C1A C7AA	C7 H4 C3 C4 C3 C4 C4 H2 C3B C4B C4B H2B C7B H4B C3 C4 C3 C4 C3 C4B C7B H4B C3B C4B C7A H1A C7A H1A H1B H2B H1AA H2AA C7AA H1A H1A H2AA C7AA H1A H1A H5A H1A H5A H1A H5A H1A H5A	H5 C C5 C C5B C H3B C C5B C H3B C H5B C H1 H H5B C H1B H H5A H5B H5AA	2A C3A 6 C7 5A C6A 5A C6A 5AA C6AA 2AA C3AA 6B C7B 5AA C6AA 12A C3AA 12 H3 14 C2A 12 H3 14 C2A 13 H3B	C4A H2A H1 C1A C1A C2A C7A H4A C1AA C2AA C7AA H4AA C4AA H2AA H1B C1AA C3A C4A C3A C4A C3A C4A C3AA C4A C5AA C6AA	H3A C2A C3A C3A C4A H5A C3AA C4AA H5AA C2AA C3AA H1A H2A C7A H4A H1AA H2AA C7AA H4AA	C4A C5A C5A C6A C5AA C6AA C4AA C5AA H3A H5A H3AA H5AA	СбА (С7А) С7АА) С7АА (С7А Н1А Н1АА С7АА

Рисунок 2.14 Диалоговое окно программы для расчета областей Дирихле для файал ввода графа соседства

На рисунке 2.15 представлен результат расчета третьей «сферы» слоя модельной кольцевой структуры и координационные связи в этой структуре.



Рисунок 2.15 Нанокольцо модельной двухкомпонентной структуры (справа) и координационные связи в структуре слоя (слева) в 3D - пространстве.

Каждая образовавшаяся координационная «сфера» окружения представляет собой наноструктуру, которую можно анализировать отдельно с помощью подходящей для этого программы энергии взаимодействия каждой пары соседей в структуре кластера.

При переходе к реальным материалам, появилась необходимость компьютеризации в многоцентровой задаче роста кластеров в среде.

В диссертации впервые используется этот вариант как самостоятельная подпрограмма. В основе теории многоцентровой задачи были выбраны две модели: (1) случайное «зарождение» во времени и в местоположении центра кластеров (модель Колмогорова) и (2) модель направленного роста кластеров. Третий вариант является модификацией первого варианта, когда используются модели различных по составу кластеров. Окно программы многоцентрового роста и результат ее применения впервые демонстрируется на рисунок 16.



Рисунок 2.16 Окно работы программы многоцентрового роста полинанокластеров (начало процесса)

После определения структуры поверхности граней кристалла и связей, решать задачи совмещения различных структур можно на основе геометрического анализа сочетающихся периодов решеток или изоструктурных «мотивов» с учетом направления их связи, то есть приступить к прогнозированию возможностей получения гетероструктур на наноуровне (задача Алферова [22]) квантовых точек, сверхрешеток и др.).

В третьей главе приведены результаты необходимых расчетов, произведенных по приведенной выше алгоритму действий.

Выводы

работы Внешние причины нарушения электронных устройств достаточно подробно рассмотрены нами ранее в работе [10]. Сюда, в первую очередь, относятся изменения свойств и структуры нанокластеров под влиянием всех видов космического излучения. Исходя ИЗ выводов, сделанных в рассмотренной выше теоретической работе [4], следует добавить к выводам, сделанным в статье [10] негативную возможность воздействия сильных магнитных полей на транспорт электронов В нанокластерных системах колец.

Внешние работы устройств причины нарушения электронных достаточно подробно рассмотрены нами ранее в Главе 1. Сюда, в первую очередь, относятся изменения свойств и структуры нанокластеров под влиянием всех видов космического излучения. Исходя ИЗ выводов, сделанных в рассмотренной выше теоретической работе [7], следует добавить к выводам работы негативную возможность воздействия сильных магнитных полей на транспорт электронов в нанокластерных системах колец. На экспериментальном уровне решается задача использования нанокластеров сложных оксидов (типа перовскита), информация о которых пока отсутствует, несмотря на то, что эти структуры на молекулярном уровне, благодаря рентгеновскому структурному анализу, известны давно. Наконец, слабо представлены теоретические вопросы нарушения симметрии при различных деформациях кристаллической решетки и формы кластеров и слоистых гетероструктур на наноуровне.

Анализ представленных методов современной электроники показывает:

1. Дальнейший прогресс в реальном создании гетероструктур с управляемыми свойствами не может быть достигнут без решения проблемы сопряженности материалов. В свою очередь, эта проблема базируется на знании структурных параметров элементарных нанообъектов, то есть, нанокластеров, информация о которых явно недостаточная.

2. Необходим переход от полупроводников на *Si*- основе к полупроводникам всего класса неорганических соединений типа A_{III}B_V и т.д.

3. Необходимо расширение класса веществ, применяемых в СВЧнанотехнологии за счет органических структур с полупроводниковыми свойствами, использовав для этих целей, предлагаемую нами, методику «быстрых» расчетов нанокластеров, которые производится на основе знания атомно-молекулярных структур из банков структурных данных.

4. Необходима разработка принципов компьютерного проектирования наносистем, выполняющих функции управления, приема и передачи информации классических радиосистем.

Проблемы разработки современных базовых технологий производства систем наноэлектроники и новых материалов в основном упираются в решение задачи миниатюризации, как отдельных модулей, так и систем в целом. При этом переход на наноуровень возможен только при решении, в свою очередь, теоретических задач прогнозирования и практических задач прямого экспериментального исследования различных наноструктур.

Разработанный комплекс компьютерных программ КН позволяет:

- выявить геометрические особенности и сопряжение (согласование параметров) отдельных самозарождающихся элементов, входящих в гетероструктуру;

- решить задачу поиска фундаментальных закономерностей структурообразования и прогнозирования свойств, необходимых для развития технологий.

Теоретические исследования и изучение свойств наноструктур приведут к более широкому развитию технологии. Это, впоследствии, облегчит решение одной из задач современной нанотехнологии: формирование разнотипных гетероструктур, необходимых для развития технологий создания наноэлементов радиосистем.

Глава 3. Моделирование радиационных нанокластеров. Радиационные превращения и организация технологии проектирования устройства защиты

3.1. Радиационные условия и радиационные эффекты

Известно, что после магнитных бурь, как спорадических, связанных с КВМ и вспышками, так и рекуррентных, причиной которых являются квазистационарные высокоскоростные потоки солнечного ветра из корональных дыр, во внешнем радиационном поясе Земли резко возрастают потоки релятивистских электронов.

Поскольку радиационная доза, создаваемая электронами, не столь велика, то на первый план выходят две проблемы.

1. Релятивистские электроны с энергиями выше 1 МэВ во внешнем РПЗ (радиационные пояса Земли), так называемые «электроны-киллеры». Для КА, находящихся на орбитах, пересекающих внешний РПЗ, такие электроны представляют значительную опасность, поскольку частицы высоких энергий могут проникнуть глубоко внутрь электронной микросхемы и привести к единичным сбоям, изменяя электрическое состояние элементов микросхемы, сбивая ячейки памяти и вызывая фальшивые срабатывания.

2. Электризации спутников, Поскольку любой объект, погруженный в плазму, должен находиться с ней в электрическом равновесии, он поглощает некоторое количество электронов, приобретая отрицательный заряд и соответствующий "плавающий" потенциал, примерно равный температуре электронов, выраженной в электронвольтах.

Появляющиеся после магнитных бурь потоки «горячих» (до нескольких сотен кэВ) электронов придают спутникам дополнительный и неравномерно распределенный (рисунок 3.1), из-за различия электрических характеристик элементов поверхности, отрицательный заряд. Разности потенциалов между соседними деталями спутников могут достигать десятков киловольт,

провоцируя спонтанные электрические разряды, выводящие из строя электрооборудование [1-5].

Проблемы		Факт	Геомаг.	Геомаг.		
	ГКЛ	РПЗ	СКЛ	ИЭИ	бури	суббури
Радиационная						
доза						
Электризация КА						
Деградация материалов КА						
Объемный заряд в КА						
Одиночные сбои в электронике						
Нарушение ориентации КА						
Потеря высоты КА						
Нарушение радиосвязи						

Рисунок 3.1 Классификация проблем воздействия радиации («космическая погода»)

Естественно, особую роль различные факторы космической погоды играют при оценке их воздействия на функционирование космических аппаратов. В ранее рассмотренных работах представлены данные о воздействия различных факторов космической погоды (в соответствии с данной в этой работе их классификацией). Черным цветом на рисунке 3.1 отмечены факторы, имеющие прямое воздействие, серым – косвенное).

превращений радиоактивных Ниже рассмотрены примеры (1)нанокластеров В системах, предлагаемых: для защиты радиоизмерительных приборов, и (2) для исследования радиационной стойкости радиосхем внутренним источником с радиации. Наноструктурированные материалы начинают проникать практически во все сферы нашей деятельности, начиная с микро- и наноэлектроники [27-30] до освоения космического пространства, ядерной энергетики [31] и экологии. Для радиосистем, миниатюризация измерительных средств потребовала использования размерных и квантоворазмерных эффектов наночастиц в качестве необходимых свойств конструктивных элементов [32-34].

В связи с этим, особенно важными являются исследования возможности радиационной защиты микро- и наносистем, так как на наноуровне становятся существенными даже минимальные дозы облучения, приводящие к сбою в работе управляющей системы. Потоки солнечных космических лучей (СКЛ) значительно повышают уровень радиационной опасности для космонавтов, а также экипажей и пассажиров высотных самолетов на полярных трассах; приводят к потерям спутников и выходу из строя аппаратуры, которая используется на космических объектах. Большая доза облучения может выводить из строя и электронное оборудование, установленное на космических аппаратах (КА). Солнечные электроны высоких энергий могут вызвать объёмную ионизацию КА, а также выступать качестве «электронов-киллеров» для микросхем, установленных на В космических аппаратах. Как было указано во введении, следствием такого явления стала поломка, во время одной из магнитных бурь 1997 года, TELSTAR, американского спутника оставившая значительную часть территории США без пейджерной связи.

Из-за потоков СКЛ нарушается коротковолновая связь в приполярных районах и возникают сбои в навигационных системах [30]. Принято считать, что наибольший вклад в суммарную дозу вносят солнечные протоны с энергией 20-500 МэВ. Максимальный поток протонов с энергией выше 100 МэВ от мощной вспышки 23 февраля 1956 г. составил 5000 частиц на см⁻²с⁻¹ [32]. На сайте http://sec.noaa.gov/ftpdir/indices/SPE.txt собрана информация о всех солнечных протонных событиях с января 1976 по декабрь 2009 года, космическое существенное воздействие на околоземное оказавших пространство (Solar Proton Events Affecting the Earth Environment). Таковым событие считается, если интегральный поток протонов с энергией выше 10 МэВ по данным ИСЗ GOES превышает 10 частиц на (см²с ср). Приводится список таких событий для 2004 года. Один из наглядных примеров представлен ниже (рисунок 3.2).



Рисунок 3.2 Фотографии Солнца, сделанные прибором EIT (SOHO) до (07:06 UT) и после мощной вспышки на Солнце, произошедшей около 11:00 UT 28/10/2003.

На рисунок 3.2. приведена фотография Солнца до и после мощной вспышки в ОКП, когда потоки протонов с энергиями 40-80 МэВ возросли почти на 4 порядка. По количеству "снега" на правом рисунке видно, насколько регистрирующая матрица прибора повреждена потоками вспышечных частиц. В то же время, накопилось большое количество нерешенных задач в самой теории микро- и наноструктурного анализа, которые пока не позволяют создавать модели, адекватные происходящим процессам.



Рисунок 3.3 Радиосхема смешанного приборно-схематического моделирования [5] нанокластеров

Следовательно, и в области новых технологий, поведение радиосистем в условиях повышенной радиации, становится слабо прогнозируемым. Как при создании новых материалов для ядерной энергетики, так и при разработке входящих в радиосистему электронных приборов, защищенных от радиации, знание структуры становится почти необходимым.

Специфика энергетических проблем (I) заключается в том, чтобы, в основном, использовать в реакторах кластеры ядерных изотопов веществ – поглотителей нейтронов, а в измерительной электронике (II) – использовать протонную и электронную радиоактивность. В частности, в работе [3] (по ссылке в [1]) показано, что в нанометровых (L=65 нм) КМОП схемах памяти длительность всплеска тока вследствие прохождения частицы и момент удара частицы по отношению к времени записи-считывания в ячейке существенно влияют на устойчивость этих схем к сбоям.

Для исследования воздействия ОЯЧ на КМОП ячейки памяти в работе [5] использован метод смешанного приборно-схемотехнического моделирования в TCAD (Technology Computer Aided Design) (рисунок 3.3). Транзистор, в который попадает частица, моделируется в TCAD (в 2-х или 3-х мерном приближении), а остальная часть схемы рассчитывается в программе схемотехнического моделирования SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis).

Результаты смешанного 3D приборно-схемотехнического моделирования воздействия ОЯЧ на структуру КНИ МОП транзисторов в составе ячейки памяти при масштабировании транзисторов от 0,5до 0,1 мкм показало, что при масштабировании КНИ МОПТ от 0,5 до 0,1мкм критический заряд уменьшается в 8 раз, длительность всплеска тока уменьшается в 6 раз, что подтверждает существенное снижение стойкости к ОЯЧ при уменьшении длины канала.

И дело здесь не только в изменении критического заряда или емкостных характеристик, а в конкретных структурных элементах системы, изменяющих свои свойства. Поэтому очевидно, что переход от микро- на наноуровень может значительно повлиять на радиационную стойкость радиосистемы. В этом и состоит одна из особенностей перехода, которая

называется размерным эффектом. Другими словами, необходимо изучать поведение элементов радиосистемы, представителями которых на наноуровне являются нанокластеры.

3.2. Схема организации защиты ЭС от радиации

В работе [1] отмечается также, что экспериментальное исследование процессов воздействия отдельных частиц на полупроводниковые приборы и микросхемы весьма затруднительно. Научный интерес представляет, и пока мало исследованный процесс изменения свойств (в первую очередь, структуры) нанокластера при радиоактивном превращении нуклидов, входящих в его состав. Хорошо известно, например, что токсическое действие углерода ¹⁴С, вошедшего в состав молекул белков (особенно в ДНК и РНК), определяется радиационным воздействием бета частиц (электронов) и ядер отдачи азота, а также радиационным эффектом — изменением химического состава молекулы в результате превращения атома C в атом N: ($^{14}C \rightarrow ^{14}N + e^{2} + \tilde{\nu}_{e}$). Можно оставить этот термин - «трансмутация» - для описания изменений состава и свойств одного нанокластера, переходящего в другой, при превращении одних атомов или молекул нанокластера в другие, которое происходит в результате ядерной реакции.

В данной работе будут предложены варианты подходов к выше перечисленным проблемам (I) и (II) на основе анализа превращений ядер радиоактивных нанокластеров ^ACd и бора в материалах, создающих защиту радиоизмерительных приборов, и в измерительных системах с внутренним источником радиации (²¹Mg,¹³⁰I) для исследования их радиационной стойкости.

I. Аппаратное решение первой проблемы решается относительно легко, созданием защитной «рубашки» из атомных ядер – поглотителей нуклонов и рентгеновских фотонов. Для этой цели можно использовать нанокластеры кадмия, вещества хорошо зарекомендовавшего себя в атомных реакторах

(изотопы Cd –109, Cd - 111, Cd - 114, и др. с реальными временами полураспада: от нескольких минут до нескольких месяцев).

В качестве основы проектируемого устройства предлагается пористая анодированного оксида алюминия Al_2O_3 («алокса»). В структура существует достаточное количество экспериментов, нанотехнологии подтверждающих технологическую возможность заполнения пор алокса различными кластерами, поэтому для выбора конструкции защитного экрана рассмотрим вначале радиационную составляющую процессов, ИХ последовательность, используя табличную информацию, приведенную, например, в работе [32] и рассчитаем структуры нанокластеров. В качестве примера выберем стабильный изотоп кадмия-114 (с распространенностью 28,7%), поглощающий как нейтроны, так и протоны в соответствии с приведенными ниже реакциями.

1. ${}^{114}_{48}Cd + {}^{1}_{0}n \rightarrow {}^{115}_{48}Cd(534) \rightarrow e^{-} + {}^{115}_{49}In(cta6) + v_{e}^{\sim};$

2. ${}^{114}_{48}Cd + {}^{1}_{1}p \rightarrow {}^{115}_{49}In$ (стаб).

3. ${}^{115}_{49}In^* \rightarrow {}^{115}_{49}In + \gamma$.

Очевидно что, как в первой реакции, так и во второй происходит трансмутация кластеров кадмия в кластеры стабильного индия.

При поглощении ядрами кадмия высокоэнергетических нуклонов (протонов или нейтронов) у образовавшегося возбужденного ядра индия (3-я строка реакций) возможно (с 95% вероятностью) испускание γ-фотона через 4,5 часа. Для поглощения промежуточных фотонов, возникающих как побочный продукт реакции, а также электронов с большой энергией (в первой реакции), понадобится дополнительный экран и вся защитная «рубашка» превратиться в многослойную гетероструктуру (рисунок 3.4). ионизации и, следовательно, в пробеге.

Экспериментально известно, что от потока бета – частиц, максимальная энергия которых 2 МэВ, полностью защищает слой алюминия толщиной 3,5 мм. Поэтому, для поглощения электронов при технологии изготовления

пленок пористого оксида алюминия нет необходимости освобождаться от атомов алюминия. Этот элемент будет выполнять функцию второго слояпоглотителя электронов.



Рисунок 3.4 Структура слоев «защитного экрана» для радиосхем (рис.2 по [3], в частности), работающих в условиях радиации.

Основная техническая задача при проектировании защитного экрана заключается в подборе элементов, превращающих потоки высокоэнергетических ядерных частиц: электронов, протонов, и нейтронов, в возбужденные ядра нанокластерного слоя, испускающие фотоны высоких энергий и, которые, в свою очередь, будут поглощены микро-, нанослоем однородного вещества поглотителя. Тем самым, радиосхема окажется защищенной.

При классическом способе создания в электронике гетероструктуры методами эпитаксии, литографии, напыления и т.п. сложно решаются вопросы согласования геометрических параметров взаимодействующих слоев, особенно, если при этом происходит перестройка кристаллических структур. Набор вариантов ограничен. Именно поэтому в проекте для получения слоев предлагается использовать пористый оксид алюминия: для него существуют методы регулирования размеров пор, под которые «подстраиваются» геометрические параметры кластеров. Но и в этом случае необходимо провести серию сложных экспериментов, начиная С компьютерного моделирования кластеров основе на данных

рентгенодифракционного анализа и/или квантовомеханических расчетов, и экспериментами заканчивая ПО масс-спектроскопии, доказывающими образование устойчивых наноразмерных кластеров с «магическими числами» так, как это сделано, например, для нанокластеров магния (рисунок 3.5) [33]. Там. необходимо, где ЭТО следует использовать все возможности электронной микроскопии. Ранее, в работе [24] нами были представлены результаты проведения электронной РЭМ и АСМ- микроскопии поверхности анодированного оксида алюминия (AOA) и наноструктурного исследования корунда Al₂O₃ в многоцентровой модели послойного поликристалла [16] В то же время, дифрактограмма кристаллического роста . рентгеновского фазового анализа образцов пористой поверхности Al₂O₃ (дифрактометр D8 ADVANCE фирмы «Bruker») показала, что мы имеем дело с твердой гелевой или аморфной структурой АОА. Этот факт явился еще одним подтверждением в правильности выбора материала для радиационной защиты, так как при ядерных процессах в кристаллах могут возникать резонансные фотон-фононные взаимодействия, разрушающие материалы. В квантовой теории, процессы взаимодействия различных кластеров В пористой сверхрешетке АОА также еще мало изучены. Более оправдано предположение, что фононный спектр в гелевой структуре широкополосный и будет носить характер «шума».



Рисунок 3.5 Масс-спектр кластеров магния, образующихся при фотоионизации пучка кластеров магния.

Теперь рассмотрим процесс компьютерного моделирования нанокластеров на основе данных рентгенодифракционного анализа (РДА), проведенного по методике послойного роста структур, представленной ранее в работах [26,27].

Кластеры исходного продукта кадмия строятся по связям (ближайшим «контактам») в твердотельной структуре. Исходная информация (международный банк минералов «WWW-MINCRYST»): координаты атомов в ячейке с симметрией федоровской группы и межатомные (межядерные) расстояния в первой координационной сфере каждого атома приводятся ниже (таблица 3.1).

Таблица 3.1 Кристаллоструктурные данные кадмия.

CADMIUM 1	, g-zinc, Cd		Hexagonal: P6(3)/mmc Z=2						
18.6.1992Ref.	Str.: Wyckoff R.W.	G. (1963)							
Lattice parame	eters		Co-ordi	inates for all atomic positions					
(cub.angs.deg	r)								
a = 2.9789	Alpha = 90.0	N_0	N ₀ P	x/a	y/b	z/c			
b = 2.9789	Beta = 90.0	1	1	0.3333	0.6667	0.25			
c = 5.6177	Gamma = 120.0	2	1	0.6667	0.3333	0.75			
Selected interatomic distances (cation-anion):									
N_0P	N ₀ P Atom Rad.sph.(angs.) C.N. Distance (angs.)								
1 Cd 3.744			12	: 6x 2.9789; 6x	3.2935				

В случае выбора кристаллической структуры и кластера магния, который

был расшифрован нами раньше кадмия и с которой мы будем иметь дело при

решении второй проблемы, имеем для сравнения таблицу 3.2

Таблица 3.2 Кристаллоструктурные данные магния.

MAGNESIUN	/I 1, Mg		Hexagonal: P6(3)/mmc Z=2						
Ref.Str.: L: Swanson and Tatge (1951)									
Lattice parame	eters		Co-ordinates for all atomic positions						
(cub.angs.deg	r)								
a = 3.2095	Alpha = 90.0	N_0	N ₀ P	x/a	y/b	z/c			
b = 3.2095	Beta = 90.0	1	1	0.3333	0.6667	0.25			
c = 5.2104	Gamma = 120.0	2	1	0.6667	0.3333	0.75			
Selected interatomic distances (cation-anion):									
N ₀ P Atom			Rad.sph.(angs.) C.N. Distance (angs.)						
1 Mg 3.84		12: 6x 3.2095; 6x 3.1969							





МЧ: 12, 44, 96, 170, 264, 380, ...

Рисунок 3.6. Нанокластеры магния, цинка и кадмия с одинаковым набором магических чисел.

Налицо изоструктурность ячеек магния, цинка и кадмия. Поэтому расчет многогранников роста структур дает один и тот же вариант кластеров с одним и тем же набором магических чисел заполнения атомами поверхностей полиэдров.

Если обратить внимание на результаты масс-спектроскопии магния (рисунок 3.5), то количество атомов на k-й «оболочке» поверхности многогранника «экспериментального» кластера соответствуют закону последовательности чисел 10k²+2, а при расчете нанокластера магния, основанном на результатах РДА, в каждом слое появляются дополнительные числа, что указывает на различие этих типов структур. В литературе, для объяснения результатов масс-спектроскопического эксперимента, обсуждаются только 2 варианта нанокластеров: в формах икосаэдра или кубического кубооктаэдра. В то же время, легко найти преобразование проходящая симметрии (ось поворота, через центры параллельных треугольных граней), которая переводит один многогранник в другой. Но симметрия кристаллического магния не удовлетворяет ни одному из этих вариантов. Возможно существование гексагональной формы «кубооктаэдра» с тем же набором магических чисел, который также может быть получен той

же операцией вращения, производимой до тех пор, пока параллельные плоскости кубооктаэдра не будут связаны плоскостью симметрии. Не вникая в подробности такого несогласия моделей (это соответствует по объему материала еще одной полной статье), можно остановиться на варианте икосаэдрической симметрии (рисунок 3.7, слева) до тех пор, пока не будут проведены дополнительные исследования. Для процессов, которые рассматриваются в этой статье, вопрос не является принципиальным, до момента сборки наносистемы в реальности.



Рисунок 3.7 Атомы на поверхностях икосаэдра с k = 1 (первая оболочка, слева) и с k = 2 (вторая оболочка, справа).

Превращение кадмия в индий (таблица 3.3) кардинально меняет симметрию кластера. Тем не менее после проведения соответствующего наноструктурного исследования оказалось, что с точки зрения координационного подхода, а следовательно, и магических чисел, индий (при k = 1) является кластерным топологическим изомером кубооктаэдра, как это хорошо видно на следующем рисунке (рисунок 3.8).

Таблица 3.3 Кристаллоструктурные данные индия.

INDIUM 1, I	n, Tetragonal			P4(2)/nnm	Z=2	P4(2)/nnm		
Ref.Str.: Wyckoff R.W.G. (1963)								
Lattice paran	neters	Co-ordinates for all atomic positions						
(cub.angs.deg	gr)							
a = 3.244	Alpha = 90.0	N_0	N ₀ P	x/a	y/b	z/c		
b = 3.244	Beta = 90.0	1	1	0.0	0.0	0.0		
c = 4.938	Gamma =	2	1	0.5	0.5	0.5		
	90.0							
N ₀ P Atom		Rad.sph.(angs.) C.N. Distance (angs.)						
1 In 3.984		12: 4x 3,244; 8x 3,3701						



Рисунок 3.8 Нанокластер индия (k = 1). Слегка вытянутый кубооктаэдр После проведения наноструктурных исследований можно начинать «экспериментальную» часть работы по сборке системы защитного экрана.

II. При решении второй проблемы: создания установки для исследования радиационной стойкости радиосхемы предлагается нижнюю часть в структуре слоев защитного экрана (рисунок 3.4.) в качестве кластеров, размещенных в порах алюмооксида, ввести кластеры, содержащие радиоактивные элементы с заранее известным типом распада.



Рисунок 3.9. Энергетическая диаграмма процесса.

В качестве конкретных нуклидов выберем такие, которые создают каскады γ -фотонов с различным набором энергий, например, это ядра кластера йода, при распаде превращающегося в ксенон. Происходит трансмутация $I_n \to Xe_n$,

где *n* - магическое число исходного кластера: ${}^{130}_{53}I \rightarrow {}^{130}_{54}Xe + e^- + v_e^{\sim} + k\gamma$, а *k* - количество «каскадных» фотонов, рождающихся по схеме (рисунок3.9).

Ядро ₅₄Xe-130, оказавшись в результате β⁻ - распада ядра ₅₃I -130 в состоянии с энергией 1.95 МэВ, может перейти в основное состояние большим числом способов, как в результате непосредственного перехода с испусканием у-кванта (показан пунктиром), так и в результате различных каскадов, например, каскада типа $5 \rightarrow 2 \rightarrow 0$ +в котором первый переход имеет мультипольность M3, а второй – Е2. Переход 5→+ 4+может происходить в результате испускания E2 и M1 у -квантов. Нанокластерный анализ, проведенный на первом этапе создания системы, показывает, что трансмутация кластера йода в ксенон сопровождается перестройкой структуры: от вытянутого кубооктаэдра (рисунок 3.10) до правильного кубооктаэдра, характеризующего рост кластера ксенона (рисунок 3.11). Необходимо учесть в технологическом процессе, что ксенон как твердое тело существует при низких температурах (порядка 58К), температура кипения при нормальных условиях равна - 108,1°C, поэтому в результате эксперимента необходимо либо понижение температуры, либо делать отводящие каналы для выхода газа из системы. При наноразмерных порах алюмооксида возможно удержание молекулярного ксенона в порах силами ван-дер-Ваальса.



Рисунок 3.10 Кристаллическая ячейка молекулярной структуры йода (а) и нанокластер йода (б). Каждый элемент кластера - «эллипсоид» заменяет молекулу I₂



Рисунок 3.11 Нанокластер ксенона и в программе расчета кластеров

Нанокластер неона (пространственная группа симметрии.. F m3m) является топологическим изомером ксенона, поэтому его структура при расчете оказалась с точностью до размеров ячейки идентичной структуре кластера ксенона, который показан на рисунок 3.11.

Название:	К	сенон (XENON)					
Спецификация:	[1], стр	[1], структурный тип - соррег , at 58°К					
Формула:		Xe					
Сингония:	кубическая						
Пространственная группа:	F m3m						
Параметры ячейки:		а = 6.1970 (0,62нм)					
Кол-во формульных единиц:	Z = 4	O бъем ячейки, $Å^3$:	$V_{c} = 237.98$				
Кол-во атомных позиций на полную ячейку:	P/U = 4	Мольный объем, см ³ /моль:	V _m = 35.84				
Кол-во рефлексов для определения структуры:	-	Расчетная плотность, г/см ³ :	p = 3.66				
R-фактор:	-	Линейный коэффициент поглощения, 1/см:	μ = 1121.011				
Длина волны для расчетных поликристалл- рентгенограмм:	Cu=1.54056	Массовый коэффициент поглощения, см ² /г:	μ/p = 306.000				
Тэта-интервал для CPDP:	T/I = 1-45						

Таблица 3.4 Кристаллоструктурные данные ксенона.

Каскад протонов, рождающихся в кластере радиоактивного изотопа магния представим на рисунок 3.12.



Рисунок 3.12 Диаграмма превращений изотопа магния. Испускание запаздывающих протонов ядром Mg-21.

Ядро Mg-21 нестабильно и в результате β⁺- распада превращается в изотоп Na- 21 (кластер на рис. 3.13):

$$_{12}Mg-21 \rightarrow _{11}Na-21 + e^+ + v_e$$
 (t_{1/2} = 0.12 c).

 ${}^{21}_{12}\text{Mg} \rightarrow {}^{21}_{11}\text{Na} + e^+ + v_e \ (t_{1/2} = 0.12 \ c).$

В том случае, когда ядро Na-21 образуется в состояниях с энергией меньше 2.5 МэВ, в нем происходят γ- переходы в основное состояние.

Однако, если энергия возбуждения ядра Na-21 превышает 2.5 МэВ, открывается новая возможность: ядро Na-21 может, испустив протон, превратиться в устойчивый изотоп Ne-20: Na-21 → Ne-20 + p.

Испускание протона происходит практически мгновенно, после β^+ - распада ядра Mg - 21 ($t_{1/2}$ около 10^{-17} с), т. е. наблюдается практически одновременное появление протона и позитрона.



Рисунок 3.13 Наноструктурное исследование натрия. (симметрия ячейки при t = 20'C: Cubic I m3m, Z = 2)

3.3. Моделирование и экспериментальное исследование структуры основы защитного устройства из молекул Al₂O₃

Анодные оксидные пленки давно нашли широкое применение в различных областях науки и техники. Комбинация уникальной пористой структуры высокой температурной, механической И химической С стабильностью пленки анодированного алюминия лелает оксида привлекательным материалом для различных применений в области, хранения информации, в сенсорике и для синтеза одномерных наноструктур. В последние годы изучению пористого оксида алюминия был придан новый импульс в связи с его широким применением в качестве исходного материала для получения наноматериалов[34,35].

Методами электронной микроскопии, рентгенофлуоресцентной спектроскопии и рентгенодифракционного анализа проведено исследование АОА, получаемого, в частности, при производстве подложек для светодиодов по технологии «ALOX» [24].

Исследуемая нами алюмооксидная подложка обеспечивает хорошие тепловые качества, основанные на интегрированной технологии, металл, диэлектрик и диэлектрик-металл в прямом соединении, без использования третьего клейкого материала (полимера). Теплопроводность диэлектрика ALOX составляет величину 10 Вт/м·К; изготавливается без операций склеивания и сверления. Использование различных электролитов, напряжений и времен анодирования позволяет варьировать диаметр пор, расстояние между порами и толщину пленки в широких пределах.

Как известно, механизм пористого оксидирования, знание которого могли бы быть положены в основу управляемых технологических процессов, до настоящего времени точно не установлен. Химической основой образования как пористого, так и беспористого оксидированного алюминия является реакция взаимодействия алюминия с водой:

 $2Al+3H_2O-6e^-=Al_2O_3+6H^+$,

протекающая в сильных полях. Детали процесса анодирования изложены в справочнике. Образование ячеек начинается с формирования барьерного слоя, который переходит со временем в пористый, а под его ячейками продолжается рост барьерного слоя.

Исторически, представления о формировании пористого AOA развивались в двух направлениях, базирующихся на физико-геометрической и коллоидно-электрохимической концепциях [24,].

Основные положения физико-геометрической концепции состоят в следующем: пористая структура АОА представляет собой плотноупакованные оксидные ячейки, имеющие форму пористых почти правильных гексагональных призм, соединенных между собой по боковым граням. Размер ячеек зависят от напряжения анодирования, диаметр пор определяется природой электролита и составом анодируемого оксида (рисунок 3.14).



Рисунок 3.14 Схема строения(а) и РЭМ изображения образцованодированного алюмооксида (ALOXTM), полученных при разном напряжении (б,в).

По коллоидно- электрохимической теории анодный оксид представляет собой ориентированный электрическим полем гель оксида металла. Поры микроструктуры располагаются между волокнистыми частицами оксида и заполнены электролитом. Степень «оводненности» частиц геля и количество анионов в нем зависят от условий опыта. Но во всех случаях происходит саморегуляция пористой структуры, в которой присутствуют дефекты в большей или меньшей степени. Механизм же такой саморегуляции в настоящее время остается самым неясным моментом в теории формирования пористых пленок на алюминии. Математическое моделирование процесса образования пор, представленное в работах, пока не убедительно, так как дифференциальных уравнений использует при поиске решения периодическую функцию, которую затем и получает в качестве решения. Это позволяет утверждать, что теория формирования пористых пленок далека от завершения. Судя многочисленной литературе, четкого представления о механизме образовании структур оксидов алюминия пока нет.

С целью сбора информации, для последующего компьютерного моделирования поверхности, на первом этапе нами была проведена серия экспериментов по определению химического состава образца поверхности материала ALOX (рисунок 3.15). Результаты, однозначно указывают, что

основной состав принадлежит оксиду алюминия Al₂O₃. При этом, если мы имеем дело с поликристаллическим состоянием вещества, то основная фаза должна принадлежать либо кристаллам Al₂O₃, либо кристаллическим зародышам (нанокластерам) того же состава.

VLADIMIR STATE UNIVERSITY - RU

```
C:\UQ5\USER\ARL\JOB\JOB.019 2012-01-20
AlOx
                                                           52
ARL ADXP-2399 Rh 60kV LiF200 PET AX03 LiF220
                                                                                                                                                                                                                             Method : X UQ ElMa
C:\UQ5\USER\ARL\Appl\AnySample.kap 2011-07-14
Calculated as : Oxides Matrix (Shape & ImpFc) : 1|Teflon
X-ray path = Vacuum Film type = No supporting film
Case number = 0 All known
\begin{array}{rcl} \text{Case} & & & \\ \text{Eff.Diam.} & = 14.0 & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & &
                                                         = 14.0 mm Eff.Area = 153.9 mm2
                                                         = 0 %
                                                                                                                                                                                          Viewed Mass = 5644.800 mg
Rest
Dil/Sample = 0
                                                                                                                                                                                           Sample Height = 25.0 mm
                                           Compound m/m% StdErr | El
                                                                                                                                                                                Weight% StdErr
                                            ----- | --
                                                                                                                                                                                      _____ ___
                                          Al2O3 99.76 0.04 | Al
MgO 0.0998 0.0050 | Mg
                                                                                                                                                                                      52.76 0.02
                                                                                                                                                                                      0.0602 0.0030
                                           SO3
                                                                               0.0422 0.0021 | Sx
                                                                                                                                                                                             0.0169 0.0008
                                          Cu00.04150.0021 | Cu0.03320.0017Ti020.02840.0014 | Ti0.01700.0009Fe2030.02390.0012 | Fe0.01670.0008
                                                                                                                                   REST= 0
KnownConc= 0
                                                                                                                                                                                                                                             D/S=0
 Sum Conc's before normalisation to 100% : 83.9 %
Total % stripped Oxygen: 47.040
```

Рисунок 3.15 Результат рентгенофлуоресцентной спектрометрии алюмооксида.

Для определения степени кристалличности нами было проведено рентгенодифракционное исследование материала алюмооксида. Результаты эксперимента, приведенные на рисунок 3.16, показали, что в малых углах рассеяния хорошо фиксируется аморфная фаза (либо гелевое состояние) с присутствием небольших пиков, характеризующих кристаллическую фазу. В больших углах положение интенсивных дифракционных максимумов соответствует только кристаллической фазе алюминиевой подложки.


Рисунок 3.16 Дифрактограмма исследуемого образца алюмооксидаALOX.

Таким образом, привели основным выводом, К которому ЭТИ эксперименты, является утверждение об отсутствии кристаллической алюмооксидной фазы и наличии на поверхности алюминиевой подложки либо аморфного состояния из молекул Al₂O₃, либо структурированного состоянии в виде алюмогеля, собранного из нанокластеров (Al₂O₃)n. Учитывая эти результаты, структурное моделирование нанокластеров, образующих поры на анодированной поверхности алюминия, было проведено на основе молекулярной структуры с геометрией «корундовой» собой тригональную молекулы, которая представляет бипирамиду. Устойчивость такой молекулы в свободном состоянии была доказана квантовомеханическими расчетами по стандартным программам. По нашим расчетам в свободном состоянии энергетически более устойчивой является только линейная молекула окиси алюминия.

Использование комплекса программ «Компьютерный наноскоп», по методике изложенной выше, показало, что модельные нанокластеры алюмооксида должны иметь псевдогексагональную структуру (рис. 3.17 а,б). Показаны направления внешних координационных связей. При направленном росте поверхностные связи между кластерами образуют пористую гексагональную микроструктуру алюмооксида (рисунок 3.17 в).

Так как, размеры нанокластеров при различных условиях роста различны, то и стенки растущих пор алюмооксида также могут оказаться разными по толщине.



Рисунок 3.17 Односферная (а), двухсферная (б) модели нанокластеров с псевдогексагональной симметрией и модель пористой наноповерхности(в) алюмооксида. Каждая точка составлена из группы атомов молекулярной структуры Al₂O₃.

3.4. Проектирование сборки слоистых гетероструктур. Модель «кремний на изоляторе» (КНИ)

На следующем этапе исследований проверено согласование кластерных связей, а так же симметрии пор алюмооксида и кластеров пентацена и меди. В результате, предложена возможность сборки МОП-структуры, в которой нанокластеры полупроводника пентацена могут быть помещены в поры АОА, с целью создания МДП-транзистора на наноуровне (рисунок 3.18).



Рисунок 3.18 На кристалле меди собран пористый алюмооксид, в пору которого помещен пентацен

Для увеличения быстродействия (уменьшения времени задержки, определяемой величиной RC – канала) МДПТ и КМОП – структур используются два технологических приема:

1. Формирование структуры кремний на изоляторе (КНИ).

2. Многоуровневое межсоединение элементов интегральных схем.

Ключом к достижению высокой плотности низколежащих уровней является планарная технология. Заложена идея расположения межсоединений в последовательных слоях друг над другом. Размеры до 100нм.



Рисунок 3.19 Эквивалентная схема транзистора. Справа часть схемы и ее топологический аналог в виде «цветного» кольца, выделенного для «сборки» и расчета характеристик.

Использование КНИ-структур резко уменьшает RC –элементов (C $_{gh}$, C $_{sd}$, C $_{db}$ и др.), а следовательно и время задержки.

Рассмотрим подробнее технологию сборки МДПТ и КМОП структур, предложенную при переходе к наноэлектронике (к рисунку 3.19). В 1997 году фирма IBM опубликовала результаты исследований по созданию транзистора с длиной канала 70 нм со временем задержки 7,9 пс при комнатной температуре. Опытная эквивалентная схема полевого транзистора приведена на рисунке 3.19



Рисунок 3.20 Эквивалентная схема полевого транзистора

Из видно, что сопротивления и емкости определяются размерами и расположением отдельных элементов транзистора и, особенно, теми материалами, из которых они изготовлены. В эти элементы входят: канал, металлическая разводка, затвор, p-n – переходы истока и стока, затвор и подзатворный диэлектрик (рисунок 3.20).

Для n-канала используют металлы титан Ti, цирконий Zr, гафний Hf, таллий Ta(с работой выхода около 4эВ), для p-канала нитриды таллия TaN, вольфрама WN и метллы никель Ni, платина Pt (работа выхода около 5,2 эВ).

Для ослабления нежелательных туннельных токов через диэлектрик конденсатора, обычно используется диэлектрик с большой диэлектрической проницаемостью є. Но при этом такие диэлектрики вступают в реакцию с кремнием, что приводит к деградации границы раздела диэлектрикполупроводник. В этом случае первый слой, контакта с кремнием был либо оксидом кремния SiO₂, либо нитридом окиси кремния SiO_xN_y. Кроме этого, при работе устройства и повышении температуры многие диэлектрики из поликристаллического (поликластерного хаотического) состояния переходят в кристаллическое (монокластерное направленное) состояние. Каким образом, и с какими веществами происходят фазовые переходы, требует длительных экспериментальных исследований.

Наш подход к проблемам заключается в том, чтобы на стадии проектирования радиосхемы заменить реальный эксперимент на программы компьютерный. То есть создать многоцентрового роста веществ вариант(1) нанокластеров различных В двух вариантах: направленного роста и вариант (2) ненаправленного роста.

Методика содержит последовательность действий и методологию сборки гетероструктуры. Первый этап – подготовительный, в рамках которого рассматривается первичная схема защиты И необходимая информация по структуре нанокластеров до и после радиационного превращения. В качестве основы проектируемого защитного устройства нами выбрана пористая структура анодированного оксида алюминия Al₂O₃ («алокса»). Предварительные исследования структуры поверхности пористого оксида алюминия и его кластерная модель были проведены при участии автора в экспериментальной лаборатории ВлГУ. Как показано выше, дифрактограмма рентгеновского фазового анализа образцов пористой поверхности Al_2O_3 (дифрактометр D8 ADVANCE фирмы «Bruker») показала, имеем дело с твердой гелевой или аморфной структурой что мы анодированного оксида алюминия (AOA). Этот факт явился еще одним подтверждением в правильности выбора материала для радиационной защиты, так как при ядерных процессах в кристаллах могут возникать резонансные фотон-фононные взаимодействия, разрушающие материалы. В квантовой теории, процессы взаимодействия различных кластеров в пористой сверхрешетке АОА также еще мало изучены. Более оправдано предположение, что фононный спектр в гелевой структуре широкополосный и будет носить характер «белого шума». Существенная выгода при использовании относительно «легкой» основы по сравнению со свинцовой защитой очевидна. Защита всего блока электроники («зонтик»), а не отдельных его частей, так же может дать существенную конструкционную выгоду применении слоистой гетероструктуры. Наконец, В можно

специально подобрать такие энергетические барьеры поглощения ядрами защиты протонов, которые в условиях космического пространства будут оптимальными.

Организация технологии сборки защитного устройста.

Проектирование радиационной защиты должно базироваться на проектах решеток для сборки гетерослоев и базе данных по нанокластерам, рассмотреной выше. Варианты решеток с различными заполнителями предлагается классифицировать по группам симметрии в одном и том же упаковочном пространстве, в котором по построению периоды решетки одинаковы, но изменяется их «содержимое».

Проект устройства для защиты и исследования радиационной стойкости радиосистем, представленный в данной работе, может быть изменен в деталях, но принципы сборки устройства допускают как модельное исследование, так и его экспериментальную реализацию.

При проектировании защитного экрана основные требования к сборке можно представить следующим образом:

- Защитный экран представляет собой результат «сборки» слоев, каждый из которых выполняет определенную функцию поглотителя отдельного типа излучения. Ядра атомов-поглотителей после поглощения должны излучать гамма-фотоны.
- 2. Предпоследний слой поглощает вторичные и первичные электроны.
- Последний слой поглощает только гамма-излучение и его материал должен обладать хорошими тепловыми характеристиками (теплоотдачей).
- 4. Основу слоистой наногетероструктуры (первый слой) составляет пористая структура типа оксида алюминия (АОП). Двумерные сверхрешетки АОП под различными углами определяют целый набор периодов, согласующихся с верхним слоем нанокластеров-поглотителей частиц радиационного излучения.

- 5. Альтернативу оксиду алюминия с «жесткой» структурой сверхрешеток может составить нанопорошковая аморфная структура из углеродных нанотрубок, хаотическое расположение которых согласовано с любыми периодами верхнего слоя. Аморфную структуру можно применять и как «промежуточный» слой между слоями-поглотителями для «склеивания» слоев.
- Требования к сборке могут быть удовлетворены только в том случае, когда известны структуры нанокластеров – поглотителей, то есть, создана база данных нанокластеров.
- 7. Время «жизни» защитного слоя зависит от условий, в которых находится защищаемая электроника или фотоника.
- Следующим этапом исследования может стать разработка компьютерной модели приборно-технологического процесса «сборки» экранов, который только начинает создаваться.

3.5. Методика построения элементов гетероструктуры защитного устройства, работающего в условиях радиации

Основная техническая задача первого этапа при проектировании защитного экрана заключается в подборе элементов, превращающих потоки высокоэнергетических ядерных частиц: электронов, протонов, и нейтронов, в возбужденные ядра нанокластерного слоя, испускающие фотоны высоких энергий и, которые, в свою очередь, будут поглощены микро-, нанослоем однородного вещества поглотителя. Тем самым, радиосхема окажется защищенной. Второй этап – расчетный, содержит, в свою очередь, последовательность шагов по расчету структур нанокластеров: (1)твердотельного состояния вещества проводится анализ ПО данным (PCA); (2)рентгеновского структурного анализа определяются координационные связи атомов (молекул) в кристалле; (3) строится модель послойного роста кластера в программе «Orgraf-3D» (16); проводиться анализ размеров и поверхностных связей структуры кластера для проведения

«сборки» гетероструктуры. Третий этап – экспериментальный, который содержит ту же последовательность операций второго этапа с анализом структуры нанокластера, образовавшегося после радиационного превращения и его поверхностных связей, а так же модельные компьютерные эксперименты по сборке отдельных нанокластеров, их верификации, сборке колец и гетерослоев методом «многоцентровой задачи» роста.

Четвертый этап – заключительный, этап «сборки» гетерослоев (по схеме). В работе рассмотрены несколько вариантов радиационных превращений.

При проектировании защитного экрана основные требования к сборке можно представить следующим образом:

- Защитный экран представляет собой результат «сборки» слоев, каждый из которых выполняет определенную функцию поглотителя отдельного типа излучения. Ядра атомов-поглотителей после поглощения должны излучать гамма-фотоны.
- 2. Предпоследний слой поглощает вторичные и первичные электроны.
- Последний слой поглощает только гамма-излучение и его материал должен обладать хорошими тепловыми характеристиками (теплоотдачей).
- 4. Основу слоистой наногетероструктуры (первый слой) составляет пористая структура типа оксида алюминия (АОП). Двумерные сверхрешетки АОП под различными углами определяют целый набор периодов, согласующихся с верхним слоем нанокластеров-поглотителей частиц радиационного излучения.
- 5. Альтернативу оксиду алюминия с «жесткой» структурой сверхрешеток может составить нанопорошковая аморфная структура из углеродных нанотрубок, хаотическое расположение которых согласовано с любыми периодами верхнего слоя. Аморфную структуру можно применять и как «промежуточный» слой между слоями-поглотителями для «склеивания» слоев.

- Требования к сборке могут быть удовлетворены только в том случае, когда известны структуры нанокластеров – поглотителей, то есть, создана база данных нанокластеров.
- 7. Время «жизни» защитного слоя зависит от условий, в которых находится защищаемая электроника или фотоника.
- Следующим этапом исследования может стать разработка компьютерной модели приборно-технологического процесса «сборки» экранов, который только начинает создаваться.

Для наших исследований важно, что нарушения транспорта электронов могут существенно сказываться на работе электронных устройств, собранных на наноуровне. Причины, приводящие к нарушению стабильности работы устройств можно в этом случае классифицировать на «внешние» и «внутренние».

Внутренние причины связаны, в первую очередь, с возможностью получения бездефектных проводников и квантовых точек (нанокластеров), а затем, с технологией сборки в местах контактов, то есть с такой же проблемой, С которой столкнулась В начале своего развития (см. нобелевскую Ж.И. микроэлектроника лекцию Алферова [21]). Действительно, и квантовая точка и проводник на наноуровне представляют собой наноструктуры, и каким образом кластер будет контактировать с мифической полуплоскостью проводника, с точки зрения технологии, не совсем понятно. И квантовая точка и проводник в этом случае представляют собой наноразмерные кластеры, а их геометрия (расположение И координации атомов в различных плоскостях) будет существенно влиять на транспортные свойства электронов. Очевидно, например, ЧТО роль проводника должны играть либо специальным образом ориентированные монокристаллические зародыши, либо «вырезанные каким либо образом» нанополоски из монокристалла реальных размеров. На сегодняшний день из известных материалов, [36-41]. для этих целей, по видимому, подходят

однослойные или многослойные графеновые структуры, или УНТ. В любом случае, необходим априорный компьютерный эксперимент, определяющий – хотя бы на уровне геометрии, но близкий к реальным условиям – результат взаимодействия наноструктур при их контакте.

3.6. Нанокластеры в программе многоцентрового роста

С этой целью проведения компьютерного эксперимента ПО моделированию роста массива нанополикластеров в определенной среде, на основе расширения разработанной ранее авторами [16] 3D - компьютерной программы, создана новая подпрограмма, имитирующая процесс сборки модельных) нанокластеров определенного реальных (или моно-ИЛИ гетеросостава в рамках многоцентровой задачи зарождения структур (рисунок 3.21, рисунок 3.22, рисунок 3.23, рисунок 3.24). В первом варианте (один центр) «вырастает» наноразмерный зародыш монокристалла, а во втором варианте (многоцентровая задача) появляется система наноструктур поликристаллическая (НП). В многоцентровой задаче предусмотрено три варианта расчета: первый: НП - однокомпонентный со случайной ориентацией центров зарождения в случайные моменты времени начала роста, второй: НП - однокомпонентный с фиксированной ориентацией центров зарождения и третий: НП - многокомпонентный (гетерофазный) со случайной ориентацией центров зарождения в случайные моменты времени. На рисунке 3.25 показаны примеры сборки гипотетического нанокластера в форме однофазным квантового кольца, а с нанополикристаллом комплексного соединения на рисунке 3.22.



Рисунок 3.21 Модель многофазной нанополикластерной «проволоки»



Рисунок 3.22 Икосаэдрический металлический кластер в контакте с однофазным поликристаллом.



Рисунок 3.23 Икосаэдрический металлический кластер в контакте с нанополикластерной проволокой

Сложность проектирования конкретных схем и их сборки на технологическом уровне связана с отсутствием сколько-нибудь полного банка структур не только реальных, но и модельных нанокластеров. Действительно, для расчета наноструктуры из 1000 атомов прямым перебором 1000! Вариантов расположения атомов в модели трудно найти реальные кластеры. Комплексным подходом к расчетам структур нанокластеров, основанном на совместном использовании теоретических

методов квантовой механики и на анализе реальных данных о координации связей между атомами и молекулами, полученных из рентгеновского структурного анализа (PCA), количество вариантов можно уменьшить. Результаты применения нами методики моделирования отдельных нанокластеров на основе информации баз данных PCA, представлены в таблице 3.5.

Таблица 3.5 Нанокластеры, рассчитанные на основе информации баз

данных РСА

N⁰	Химсостав	Кластерная	Последовательно	Публи
п/	(формульные	геометрическая	сть чисел	кация
п	единицы);	модель	заполнения	
	пространственная		k-й поверхности	
	группа симметрии		кластера	
			«магические	
			числа»)	
1.	Галлит (поваренная		Куб (гексаэдр)	[6]
	соль) 1. (NaCl) ₂ –		$6k^2+2;$	
	димер,	1 2	Октаэдр	
	2. (NaCl) – диполь		4k ² +2 (PCA)	
	пр. гр. Fm3m			
3.	Теллурид свинца		Куб (гексаэдр)	[7]
	РвТе,		6k ² +2,или	
	(PBTe) ₂		кубоокта -	
	Пр. гр. Fm3m		эдр10k ² +2	
			(PCA.ЭM)	
	1. Металлическая		1. Кубооктаэдр	Не
	медь Си, Ад и др.		$10k^2+2.$	опубл
	пр. гр. Fm3m,	1 2	2. Гексагональная	икова
	2. Магний Мg ₂		призма18k ² +2	но

	пр. гр. Р6(3)ттс		(PCA)	
	Сера молекулярная Se пр гр. Р2/с		«Скошенная» дипирамида (РСА)	[8]
	58 np. p. r 2/0		$14 k^2 - 2$	
	Окись алюминия пр. гр. R3 с		«Скрученная» тригональная призма (РСА) 4k ² +2	[9]
6.	Цинк, магний, кадмий, окись цинка пр.гр. Рб(3)mmc;		«скошенная» гексагональная дипирамида, (икосаэдр либо кубооктаэдр 10k ² +2.	[10]
7.	Антрацен пр.гр. Р2 ₁ /а		Вытянутый кубооктаэдр: 10k ² +2 (PCA)	[11]
9.	Декакарбамид нитрата кобальта пр. гр. Р1.		гексагональная дипирамида 6k ² +2 (PCA)	[12]
10	Тетракарбамид нитрата кобальта пр. гр. Р 2 ₁ /с		$4\kappa^{2}+2:6,38,102,.$ $8k^{2}+2:10,34,74,.$ (PCA)	[12]
	Йод молекулярный I ₂ пр. гр. В mab	-fax	Вытянутый кубооктаэдр 10k ² +2 (PCA)	[10]

12	Индий пр.гр. Р4(2)nnm	Вытянутый кубооктаэдр 10k ² +2 (PCA)	[10]
	Натрий пр.гр. I m3m.	Ромбододекаэдр или октаэдр 12k ² +2 (PCA)	[10]

К сожалению, прямых экспериментальных доказательств существования нанокластеров, модели которых приведены в таблице 6, пока существует мало. В качестве одного из примеров приведем фотографию реального эксперимента по веществу оксида цинка, полученную методами электронной микроскопии (рисунок 3.23а) и модельное изображение нанополикристалла (рисунок 3.23б), полученное по результатам компьютерного эксперимента в программе моделирования многоцентровой задачи зарождения кластеров.



Рисунок 3.23 (а) Нанополикластеры оксида цинка (размерами около 500нм) в электронной микроскопии [Zhong Lin Wang // J. Phys. Condens. Matter. 2004, 16, R829-R858.] и (б) рассчитанные в программе моделирования многоцентровой задачи зарождения кластеров ZnO в среде.

3.7. База данных по расшифрованным нанокластерам

В работе приводятся примеры модельного представления нанокластеров, которые могут быть использованы в качестве элементов радио нано- и мискросхем.

1. Металлы

I. α- Fe – ОЦК-ячейка, пр.гр. Im3m, *a* = 2,86 Å (0,286нм).



Рисунок 3.24 Молекулярный кластер из 14- атомов железа. Магические числа: $N_k = 14k^2 + 2$

К тому же структурному классу с тем же законом магических чисел роста относятся кластеры Na (a = 4,28 Å), K (a = 5,33 Å), Ba (a = 5,01 Å), Ti (a = 3,32 Å) только с изменением межатомных расстояний из-за различия в периодах решетки.

II. Медь (Си). ГЦК-ячейка, пр.гр. Fm3m, a = 3,61Å (0,361нм) (Р6₃/mmc Im3m).

📃 ГЦК медь.dat — Блок 📃 💷 🗾	🦉 FrmGL	X J Form1 X
Файл Правка Формат Вид Справка	Добавить сферу Масштаб Цвет Размер шариков Закончить работу Рассчитать мн	огогранник Прочитать данные в файле
4 24 3.61 3.61 3.61 90.0 90.0 90.0		
000		Номер сферы
0.5 0.5 0		10
0.5 0 0.5		
0 0.5 0.5		Число точек
12 000		1002
12 -100		
12 0-10		
12 -1-10		Нач. точка 1
13 000		
13 -100		Число связей
13 00-1		24
13 -10-1		
14 000		
14 0-10		Масштаб
14 00-1		3,0
14 0-1-1		
23 000		
23 010		💌 Изображать связи
23 00-1		С Все связи
23 01-1		
24 000		💿 Только внешние связи
24 100		
24 00-1		
24 10-1		
34 000		🔲 🗌 Черно-белый рисунок
34 100		
34 0-10		
34 1-10 -		🗌 🗌 Ориентированный граф



Рисунок 3.25 Молекулярный кластер из 12- атомов меди. Магические числа: $N_k = 12k^2 + 2$

К тому же структурному классу с тем же законом магических чисел роста относятся кластеры Au (a = 4,07 Å), Ag (a = 4,08 Å),

Al (a = 4,04 Å), Pt (a = 3,92 Å) с изменением межатомных расстояний из-за различия в периодах решетки.

Алмаз (a = 3,57 Å), кремний (a = 5,43 Å) и германий (a = 5,66 Å) так же кластеризуются по связям кубической ячейки. Кремний и германий выделены, как наиболее распространенные элементы в электронике. ($N_k = 4k^2+2$).



Рисунок 3.26 Магические числа роста октаэдра $(N_k = 4k^2 + 2)$.

III. Магний (Mg). ГПУ- упаковка, пр. гр. Р6₃/mmc; *a* = 3,21 Å, c = 5,21 Å





Рисунок 3.27 Молекулярный кластер из 12 атомов магния. Магические числа: $N_k = 10k^2 + 2 + \delta$.

К тому же структурному классу с тем же законом магических чисел роста относятся кластеры Be (a = 2,24 Å), Ti (a = 2,95 Å), Co (a = 2,51 Å), Zn (a = 2,66 Å), Cd (a = 2,98 Å) с изменением межатомных расстояний из-за различия в периодах решетки. Tb (a = 3,60 Å, c = 5,69 Å).

2. Окислы.

I. α- Al₂O₃. Оксид алюминия, пр.гр. **R 3**с ; a = 4,75 Å, c = 12,99 Å (a=5,64Å) Магические числа: N_k = 4k²+2.





Рисунок 3.28. а) - Молекула Al₂O₃ кластер (квантовомеханический расчет). б) - Кластер из 6 молекул Al₂O₃

II. ZnO - Окись цинка , пр. гр. P6₃mc ; a = 3,25 Å, c = 5,20 Å Магические числа: N_k = $10k^2+2+\delta$.

📃 окись Zn .dat — Блокнот 📃 💻 💌	💋 Emili	🎽 Form1 💷 🛛 💥
Файл Правка Формат Вид Справка	Добавить сферу Масштаб. Цвет. Размер шариков. Закончить работу. Рассчитать многогранник	Прочитать данные в файле
2 12 3.25 3.25 5.20 90.0 90.0 120.0		Номер сферы
0.333 0.667 0.25 1		10
0.667 0.333 0.75 2	مانند.	число точек
		1052
		Hau Tours 1
		The ready
110-10		40.00 CB/000
11 110		110
11 -1 -10		historya
12 0 0 0		10
12-100		
12 010		🔽 Изобреже в эксои
12 -10 -1		C Breidessa
1201-1		Полько внешние связи
1		
1		
1	ALL STREET,	П Черно-зе суд ризьнок
	i∎	
		- opioninecommunity op



Рисунок 3.29 а) - Молекулярный кластер из 12 молекул **ZnO**. б) - Вариант направленной кластеризации **ZnO** в модели «компьютерного электронного микроскопа».

3. Органические полупроводники. Молекулярные кристаллы.

I. Αнтрацен C₁₄H₁₀ a = 8.56 Å, e = 6.04 Å, c = 11.18 Å, $α = 90^{\circ}$, $β = 124.70^{\circ}$, $γ = 90^{\circ}$ пр. гр. P2₁/c (рисунок 3.30)



Рисунок 3.30



Рисунок 3.31. Молекулярный кластер из 12 молекул антрацена С₁₄Н₁₀

II. Пентацен С₂₂Н₁₄ (рисунок 3.32)



Рисунок 3.32

III. Коронен С₂₄H₁₂ (рисунок 3.33)



Рисунок 3.33

IV. Сера S₈ - моноклинная (3.34)



Рисунок 3.34

4. Ионные кристаллы.

I. Галлит-NaCl ГЦК – ячейка пр.гр. . Fm3m, a = 5,64 Å



Рисунок 3.35. Димер Na^+Cl , Кластер из 8 димеров и кубический кластер роста. Магические числа: $N_k = 6k^2+2$.

Структурный тип NaCl определяет и такие важные для электроники вещества как окислы титана, марганца, железа и никеля, а так же нитриды и карбиды переходных подгрупп титана и ванадия, галоиды серебра, сульфиды и селениды свинца и теллура.

5. Комплексные соединения

Этот класс веществ пока слабо представлен в электронике, но возможности «переключения» в них водородных связей не менее перспективны, чем в структурах ДНК или РНК. В работе впервые рассмотрены кластеры некоторых комплексных соединений Mg, Co, Cr, Mn, Ni, Ti с карбамидом.

I. Дикарбамид Со(ОСN₂H₄)₂(NO₃)₂ 4H₂O, Рī: (рисунок 3.36)



Рисунок 3.36

II. Тетракарбамид Со (ОСN₂H₄)₄(NO₃)₂2H₂O, пр.гр. Рī: (рисунок 3.37)



Рисунок 3.37

III. Гексакарбамид [Cr(OCN₂H₄)₆][Co(N₆O₈C₈H₄)]2H₂O пр.гр. Рī (рисунок 3.38)



Рисунок 3.38

В последнем кластере форма роста представляет собой гексагональную бипирамиду с простым набором магических чисел: N_k =6к²+2.

Выводы

Исследованные выше методы изучения контактов материалов на наноуровне позволили предложить следующие простые радиоустройства.

1. Квантовое нанокольцо, собранное на основе сборки контактов «нанополикластерная проволока» + икосаэдр (рисунок 3.39).



Рисунок 3.39 Икосаэдрический кластер металла никеля в контакте с гетерофазной нанополикластерной проволокой в программе моделирования многоцентровой задачи роста образует квантовое нанокольцо. 2. Устройство «наноконденсатора».

На рисунке 3.40 представлен результат сборки наноструктур из слоев нанокластеров «медь-окись алюмирия-железо» + (медь-железо).



Рисунок 3.40. Результат нанокластерной сборки конденсатора

3. Слой основы защитного устройства.

На рисунке 3.41 представлен результат сборки основы из нанокластеров защитного устройства в программе многоцентрового направленного роста и сборка слоя пористой структуры оксида алюминия.



Рисунок 3.41 Основа защитного устройства из слоя нанокластеров алюмооксида

4. Гетерослоистые структуры защитного устройства

На рисунке 3.42 показан слой пористой структуры алюмооксида с кластерами кадмия, которые после дозы излучения в превращаются в слой основы с кластерами индия.



Рисунок 3.42 Гетерослоистая структура основы и ее превращение.



5. Слой кластеров-поглотителей в основе устройства (рисунок 3.43).

Рисунок 3.43 Гетерослой основы с поглотителями электронов и фотонов

6. Гетерослои радиосистемы металл-диэлектрик- полупроводник (рисунок 3.44).



Рисунок 3.44 МДП-гетероструктура

7. Гетероструктура кремной на изоляторе из алюмооксида (рисунок 3.45).



Рисунок 3.45 Модель КНИ. Слой кластеров кремния (октаэдры) на изоляторе Al_2O_3 (скошенные тригональные призмы).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- На базе отдельных компьютерных программ создан расширенный исследовательский комплекс «Компьютерный наноскоп», с программами многоцентровой задачи роста и расчета групп симметрии подстановок. предназначенных для моделирования и компьютерного проектирования элементов радиоустройств на наноуровне.
- Проведена апробация комплекса для расчета нанокластеров некоторых полупроводников, диэлектриков и металлов, используемых в радиотехнике на наноуровне.
- Методами электронной микроскопии, рентгенофлуоресцентной спектроскопии и рентгенодифракционного анализа проведено экспериментальное исследование поверхности некоторых перспективных материалов для сборки радиосистем на микро- и наноуровне.
- 4. Разработана компьютерная модель сборки слоев МОП-структуры на основе алюмооксида и органических полупроводников на наноуровне.
- Разработана компьютерная модель гетероструктуры защитного устройства на основе алюмооксида и нанокластеров кадмия, индия, магния, натрия и др. на наноуровне.
- Создан банк данных нанокластеров веществ, предназначенных для сборки радиоустройств различного назначения.
- 7. Разработаны рекомендации действий для проектирования элементов наноструктур для радиотехнических систем.
- Определена процедура технологии сборки радиотехнических микро- и наносистем.

Результаты исследований, приведенных в диссертационной работе и в Приложении, которое содержит структуры нанокластеров, а так же их расчет методами кристаллографии и квантовой механики, базируются:

 на классических работах по теории групп симметрии [42-45], кристаллографии [46-55],

- на исследованиях структур, расшифрованных в ВлГУ [56,58-60],
- на структурах, частично приведенных в базах данных международного Кембриджского банка [56-60] и базы WWW-MINCRYST(класс металлов и окислов),
- на конкретных исследованиях нанокластеров для наноэлектроники проведенных различными авторами работ, представленных в списке литературы [60-70].

В Приложении представлена таблица нанокластеров некоторых основных элементов, применяемых в радиоэлектронных устройствах, создана база данных по характеристикам послойного роста («магические числа» в нанотехнологии).

Литература

- Полесский С. Е., Жаднов В, А., Артюхова М. А., Прохоров В. Я. Обеспечение радиационной стойкости аппаратуры космических аппаратов при проектировании // Компоненты и технологии - № 9 – 2010. – С.93-98.
- Вологдин Э.Н., Лысенко А.П. Интегральные радиационные изменения параметров полупроводниковых материалов // МГИЭМ – М. – 1999.
- Вологдин Э.Н., Лысенко А.П. Радиационная стойкость биполярных транзисторов // МГИЭМ – М. – 2000.
- Вологдин Э.Н., Лысенко А.П., Радиационные эффекты в некоторых классах полупроводниковых приборов// МИЭМ М. 2001.
- Петросянц К.О., Харитонов И. А., Орехов Е.В., Самбурский Л.М., Ятманов А.П., Воеводин А.В. Исследование стойкости к воздействию отдельных ядерных частиц ячеек КНИ КМОП ОЗУ методами смешанного 3D TCAD-SPICE моделирования // МЭС-2012 – Москва -2012. – С.413-417.
- Азаренков Н.А, В.Н. Воеводин, В.Г. Кириченко, Г.П. Ковтун. Наноструктурные материалы в ядерной энергетике // Вестник Харьковского университета – Харьков. – вып.1, № 887 – 2010 – С.45.
- Драгунов В.П., Неизвестный И.Г. Гридчин В.А. Основы наноэлектроники // НГТУ – 2004 - 496 с.
- Кокорева М.А., Маргулис В.А., Пятаев М.А. Резонансы Фано в электронном транспорте через квантовое кольцо с примесями. //Физико-математические науки. Физика - №1 (13) – 2010 – С. 109 -117.
- Рау В.Г., Никитин О.Р., Рау Т.Ф., Ломтев Л.А., Горшков К.А. Нанокластерные системы колец для электроники // Фундаментальные исследования. – 2015. – № 5-1. – С. 137-142; URL: http://www.fundamental-research.ru/ru/article/view?id=38022

- Рау В.Г., Пархомов Л.Г., Илюхин В.В., Белов Н.В.//ДАН СССР 1980.
 Т.255. №4 С.859.
- 11. Холл М. Комбинаторика. М.: Мир, 1970, 424с.
- Valery G. Rau *, Leonty A. Lomtev and Tamara F. Rau Non-Crystallographic Symmetry in Packing Spaces. *Symmetry (USA)*, 2013, 5, 54-80: doi:10.3390/sym5010054
- Стихира П.Й., Черпак В.В., Волинюк Д.Ю. Свойства гетеропереходана основе пентацена и производных перилена // ФТП. – Том 43., Вып. 2., -2009., С.204.-209.
- 14. Малеев А.В, Рау В.Г., Потехин К.А. идр. Метод дискретного моделирования упаковок в молекулярных кристаллах Доклады АН СССР, том 315, № 6, 1990.
- 15. Рау В.Г., В.Г.Журавлев, Т.Ф.Рау, А.В.Малеев Морфогенез кристаллических структур в методе дискретного моделирования упаковок.// Кристаллография Том 47, №5, 2002, С. 793-796.
- 16. Малеев А.В., Журавлев В.Г., Шутов А.В., Рау В.Г. Программный комплекс для исследования координационных окружений в модели послойного роста графов связности // Патент ВлГУ им Столетовых № 2013617161. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013619399, 03.10. 2013
- Rau V. G., Pugaev A.A., Rau T.F., Maleev A.V. Geometrical Aspect of Solving the Problem of Real Structure Growth on the Model of Alkali Metal Halides of the NaCl Type. // Crystallography Reports, 2009, Vol. 54, No. 7. pp.28-34. ISSN 1063-7745.
- 18.Антипов А.А., Аракелян С. М., Кутровская С.В., Кучерик А.О., Рау В.Г. Зимин С. П. Формирование квантовых точек РвТе при лазерном воздействии на полупроводниковый кристалл, помещенный в жидкость. // Перспективные материалы, изд. «Интерконтакт Наука», -М.: № 14,- 2013. ISSN: 1028-978Х., С. 304-309.

- Рау В.Г., Скворцов К.В., Потехин К.А., Малеев А.В. Геометрический анализ моделей молекулярных нанокластеров серы (S₈)_x в компьютерном эксперименте. // Журнал «Структурная химия», Новосибирск, Изд. СО РАН, Том 52. – 2011. №4. С. 781-786.
- 20. Cambridge Structural Database. Version 5.29. University of Cambridge, UK.
- 21. Алферов Ж,И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур//ФТП. – Том 32, - Вып. 1. – 1998. – С.3-18.
- 22. Tsu R. Esaki L. // IBM J.Res.Dev. №14, Выпуск 61. 1970.
- 23. Журавлев В.Г. Самоподобный рост периодических разбиений и графов
 // Алгебра и анализ. №13. 2001. с. 69-92
- 24.Никитин О.Р., Рау В.Г. Руфицкий М.В., Скворцов К.В., Рау Т.Ф., Осин А.В. Моделирование и исследование микро- и наноструктурированных материалов на основе алюмооксидов.// Известия Института Инженерной Физики. Серпухов., №4 (30)., 2013. С.73-77.
- 25. Никитин О.Р., Горшков К.А., Али Аббас Мохсин Али, Рау Т.Ф., Рау В.Г. Наноструктурное исследование превращений в устройствах с радиоактивными нанокластерами// Фундаментальные исследования. 2014.–№5(часть5).стр.964-968.
- 26. Никитин О.Р., Рау В.Г., Скворцов К.В., Ломтев Л.А.. Органические полупроводники. Антрацен в компьютерном наноскопе // Известия Института Инженерной Физики. Серпухов., №4 (14).,2009.С.15-20.
- 27. Рау В.Г., Пугаев А.А., Рау Т.Ф., Малеев А.В. Модели сборки наноразмерных зародышей роста кристаллических структур.// Журнал «Структурная химия», Новосибирск, Изд. СО РАН, 2009, Том 50, С.12-17.
- Ю.В., В.Я. Моделирование 65 нм КМОП 28.Катунин Стенин триггерных ячеек с повышенной сбоеустойчивостью к воздействию отдельных ядерных частиц // Сб.научных тр. 13-ой Российской научно-технической конференции «Электроника, микро-И

наноэлектроника. 2011», 27 июня – 1 июля 2011 г., М., МИФИ, 2011, С. 24-33.

- 29. Мягкова И.Н. Гео эффективность солнечной активности и космическая погода: электронный учебник // НИИЯФ МГУ, 2009 г. <u>nuclphys.sinp.msu.ru</u>>cosm/index-1083.htm
- 30.Мирошниченко Л.И. Физика Солнца и солнечно-земных связей: учебное пособие // Под ред. М.И. Панасюка – Москва: Университетская книга, 2011 г. – 174 с.
- 31.Крымский Г.Ф. Космические лучи и погода // Наука и техника в Якутии. - № 1(8) – 2005. – С 3-6. http://www.kosmofizika.ru/pdf/kl_pogoda.pdf
- 32.Варламов В.В., Ишханов Б.С., Комаров С.Ю. Атомные ядра. Основные характеристики: учебное пособие. –М.: Университетская книга, 2010. 334 с.
- 33. Martin T.P. et al. Chem. Phys., 1991. 176., S.343.
- 34. Аракелян С.М., Кучерик А.О., Прокошев В.Г., Рау В,Г., Сергеев А.Г. Введение в фемтонанофотонику. М.: Логос, 2015. -744с.
- 35. Мартинес-Дуарт Дж.М., Мартин-Палма Р.Дж., Агулло-Руеда Ф. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. Москва: Техносфера. 2009. 368 с.
- Смирнов Б.М. Берри Р.С. Фазовые переходы в кластерах различных типов. // УФН. — 2009. — с. 147-177.
- 37. Федоров А.В. Физика и технология гетероструктур, оптика квантовых наноструктур: Учебное пособие СПб: СПбГУ ИТМО, 2009. 56 с.
- 38. Блатов В. А. Илюшин Г. Д. Кластерная самоорганизация кристаллообразующих систем: супраполиэдрические кластерыпредшественники и самосборка икосаэдрической структуры ZrZn22 // Кристаллография. — 2009. — с. 590-595.

- 39. Болховитянов Ю.Б., Двуреченский А.В., Соколов Л.В., Никифоров А.И., Якимов А.И., Фойхтлендер Б. Пчеляков О.П. Кремнийгерманиевые наноструктуры с квантовыми точками: механизмы образования и электрические свойства. Обзор. // ФТП. — №34., Выпуск 11. — 2000. — с. 1281-1299.
- 40. Келдыш Л. В. Свойства полупроводниковых сверхрешеток // ФТТ. Выпуск 4. — 1962. — с. 2265.
- 41. Weismuller J., Gleiter H. Hockel P.G. Precipitation in nanocrystalline Al-Ag prepared by high energy ball milling and inert gas condensation // Nanostructured Materials. — №43, — Выпуск 3. — 1995. — с. 1087-1098.
- 42. А.А. Мохсин Али Одномерные циклические разбиения в наноэлектронике // Методы и устройства передачи и обработки информации. – Муром – 2015 - №17 – С.62 – 65.
- 43.А.А.Мохсин Али, О.Р.Никитин, Т.Ф.Рау, К.А. Горшков, В.Г.Рау Моделирование и проектирование защиты нанокластеров и радиоустройств на их основе// Методы и устройства передачи и обработки информации. – Муром – 2015 - №17 – С.65 – 70.
- 44. Холл М. Дж. Теория групп (пер. с англ.). М.: ИЛ, 1962. 468с.
- 45.Нокс Р., Голд А. Симметрия в твердом теле (пер. с англ.). М.: Наука, 1970. 424с.
- 46.Никулин В.В., Шафаревич И.Р. Геометрии и группы. М.: Наука, 1983.- 240с.
- 47.Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Изд. Ф.М.-литературы, 1959. 532с.
- 48.Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография (в четырех томах).Том
 1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. М.: Наука, 1979. 384с.

- 49.Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Справочное руководство. – М.: Наука, 1986. - 368с.
- 50.Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и спектроскопия (пер. с англ.). М.: Мир, Научный Мир, 2004. 763с.
- 51. Чупрунов Е.В. Симметрия и псевдосимметрия кристаллов. Н.Новгород. изд. ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2015. - 658с.
- 52.Раменская М.Е. Взаимодействие кристаллов со средой: Структурногеометрический анализ. – М.: изд МГУ, 2008. - 238с.
- 53.Портнов В.Н., Чупрунов Е.В. Возникновение и рост кристаллов. М.: Изд. Физико-математической литературы, 2006. 328с.
- 54.Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971. 424с.
- 55.Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография (в четырех томах).Том3. Образование кристаллов. М.: Наука, 1980. 408с.
- 56.Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М.: Мир, 1989. 240с.
- 57.Ченга Л., Плога К. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры.
 М.: Мир, 1989. 584с.
- 58.Bondar V.I., Kurkutova E.N., Rau V.G., Ilyukhin V.V., Belov N.V. Hexakis(Urea)-chromium(iii) diammine-tetranitro-cobalt(iii) trihydrate (URCRCO), Dokl.Akad.Nauk SSSR(Russ.) (Proc.Nat.Acad.Sci.USSR), 1979, 244, p.358.
- 59.Niven M.L., Nassimbeni L.R., Gafner G. Hexakis(Urea)-chromium(iii) trichloride trihydrate (URCRCL), Cryst.Struct.Commun. 1980, 9, p.1133.
- 60.Bondar V.I., Rau V.G., Rozman S.P., Struchkov Yu.T., Ilyukhin V.V., Belov N.V. Hexakis(Urea)-chromium bis(dimethylglyoximato)- dinitrocobalt diammine-tetranitro-cobalt (URCRCP), Dokl.Akad.Nauk SSSR (Russ.) (Proc.Nat.Acad.Sci.USSR), 1980, 255, p.569.

- 61.Kurkutova E.N., Rau T.F. Tetrakis(Urea) hexakis(urea)-cobalt nitrate (URCONT), Dokl.Akad.Nauk SSSR (Russ.) (Proc.Nat.Acad.Sci.USSR) 1972, 204, p.342.
- 62.Rau V.G., Rau T.F., Lebedev G.O.,Kurkutova E.N. Hexakis(Urea)chromium(iii)tris(dinitro-dimethylglyoxime-dimethylgyloximato-cobalt(iii)) dihydrate(WOKNIT),Kristallografiya(Russ.)(Crystallogr.Rep.),2000,45, p.653.
- 63.Елисон М.И. Исследование физических проблем микро- и наноэлектроники в ИРЭ РАН (60-90-е годы)// Зарубежная радиоэлектроника., 1998. №8. – С.22-33.
- 64. Ткач Н.В. Электрон-фононное взаимодействие в сферических многослойных наногетероструктурах // ФТТ., 1997., Т. 39., № 6., С.1109-1113.
- 65.Шишкин Г.Г., Агеев И.М. Наноэлектроника. Элементы., Приборы.,
 Устройства. М.: БИНОМ, Лаборатория знаний., 2011. 408с.
- M. М., Лапин A. Н., 66. Михайлов Радиационная стойкость термостабилизирующих покрытий космических аппаратов на основе титаната бария. Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева., Выпуск № 1. - 2010., -С. 134-136.
- 67.Неволин В.К. Зондовые нанотехнологии в электронике. М.: Техносфера., 2005. - 152с.
- 68.Илюшин В.А., Величко А.А. Процессы в нанотехнологии. -Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. 107с.
- 69.Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. М.: Бином, 2005.,135с.
- 70.Матвеев Б.А. Сюрпризы средневолновых ИК-светодиодов на основе гетероструктур А³В⁵. Фотоника, №2 (50), 2015. С.62-69.
- 71.Герасименко Н.Н., Рыгалин Б.Н., Смирнов Д.И., Турьянский АюГю Рентгеновские методы исследования наноструктур и нанообъектов

электроники. – Нанотехнологии в электронике. Вып.2.,– М.: Техносфера, 2013. 688с.

72.Вернер В.Д., Кузнецов Е. Б., Сауров А.К. Закону Мура 50 лет: Развитие микронаноэлектроники. Наноиндустрия, №5 (59), 2015.С.56-72
ПРИЛОЖЕНИЕ 1 Расчет нанокластеров на примере α-кристобалита, его изоструктурных аналогов (типа α-кристобалита)

Шаг 1. Построение начинается с анализа кристаллографической информации, представленной в международной базе данных WWW-MINCRIST (в открытом доступе сети Интернет)

Название:	Кристобалит (CRISTOBALITE)				
Спецификация:	[20], структурный тип - cristobalite-alpha, analogue				
Формула:	Na _{1,95} Al _{1,95} Si _{0,05} O	4			
Сингония:	тетрагональная				
Пространственная группа:	P 4(1)2(1)2				
Параметры ячейки:	a = 5.2997 c =	7.0758			
Кол-во формульных единиц:	Z = 2	Объем ячейки, Å ³ :	V _c = 198.74		
Кол-во атомных позиций на полную ячейку:	P/U = 16	Мольный объем, см ³ /моль:	V _m = 59.85		
Кол-во рефлексов для определения структуры:	-	Расчетная плотность, г/см³:	p = 2.72		
R-фактор:	-	Линейный коэффициент поглощения, 1/см:	μ = 78.974		
Длина волны для расчетных поликристалл-рентгенограмм:	Cu=1.54056	Массовый коэффициент поглощения, см²/г:	μ/p = 29.031		
Тэта-интервал для CPDP.	T/I = 1-45				

Шаг. 2. В рамках этой программы можно получить первичную информацию о положении атомов в кристаллической ячейке в изображении вместе с осями координат ячейки.

Кристобалит (CRISTOBALITE), [20], структурный тип - cristobalite-alpha, analogue, Na_{1.95}Al_{1.95}Si_{0.05}O₄



Рисунок 1

Шаг. 3. Производится анализ информации о пространственной группе симметрии кристалла, и фиксируются реферативные данные о публикации статьи, авторами которой исследована структура методами рентгеновской дифракции.

CRISTOBALITE α-тип Si O(2),
20, t-cristobalite-alpha, analogue
Na(1.95)Al(1.95)Si(0.05)O(4)
Tetragonal P 4(1)2(1)2 Z = 2, P4(1)2(1)2
20 .4 .1999
Ref.Str.: J.G. Thompson, R.L. Withers, A. Melnitchenko, S.R. Palethorpe (1998),
* Acta Cryst., B54, 531-546

Шаг. 4. Фиксируются для дальнейших расчетов основные параметры кристаллической ячейки. Эти параметры могут быть введены в программу «Компьютерный наноскоп». Для ускорения первичной обработки данных о структуре достаточно сделать несущественные для координации связей в наноструктуре округления значений координат.

Lattice parameters (cub. angs.,degr.):

Шаг 5. Co-ordinates for all atomic positions :

No	No	oP x/a	y/b	z/c
1	1	0.3061	0.3061	0.0
2	2	0.2891	0.2891	0.5
3	3	0.2337	0.127	0.1989
4	3	0.127	0.2337	0.8011
5	1	0.1939	0.8061	0.25
<mark>6</mark>	1	0.6939	0.6939	0.5
7	1	0.8061	0.1939	0.75
8	2	0.2109	0.7891	0.75
9	2	0.7109	0.7109	0.0
10	2	0.7891	0.2109	0.25
11	3	0.373	0.7337	0.4489
12	3	0.7663	0.873	0.6989
13	3	0.627	0.2663	0.9489
14	3	0.2663	0.627	0.0511
15	3	0.873	0.7663	0.3011
16	3	0.7337	0.373	0.5511

Таким образом, как это представлено ниже, полученные данные будут занесены в «Блокнот» программы «Компьютерный наноскоп» для расчета кластеров:

4 9 4.98 4.98 6.95 90.0 90.0 90.0

0.30 0.30 0.0	1
0.20 0.80 0.25	2
0.70 0.70 0.50	3
0.80 0.20 0.75	4

Одинаковым цветом в Блокноте и Списке координат из банка выделены те координатные параметры, которые совпадают с позициями независимых атомов в структуре.

В верхнюю строку Блокнота заносится информация следующим образом:

Первое число (4) показывает количество атомов, выбранных для расчета. Второе число (9) перечисляет связи между атомами, третье, четвертое и пятое числа определяют параметры ячейки в ангстремах, а последние три числа относятся к величинам углов в ячейке кристалла.

X-ray density (g/cm cub.) = 2.72

MU (1/cm) = 78.974 Mass attenuation coefficient $(cm^{**}2/g) = 29.031$

Selected interatomic distances (cation-anion, anion-anion):

NoP	A	tom	Rad.spl	n. C.N.	Distance	NoP N.
			(angs.)	(angs.)		
1	Al	,Si	2.316	4		
				1.7404	3	
				1.7404	3	
				1.7514	3	
				1.7514	3	
2	Na	,Na	2.808	4		
				2.3159	3	
				2.3159	3	
				2.4249	3	
				2.4249	3	
3	0		3.264	6		
				2.9262	3	
				2.8317	3	
				2.8317	3	
				2.854	3	
				2.854	3	
				2.7985	3	

Шаг. 6. Производится тщательный анализ структуры, необходимый для выбора связей между атомами. Возможен предварительный этап расчетов,

112

когда вычисляются характеристики многогранников Дирихле в разбиении на атомы и по общим граням определяются соседи. На центры масс атомов, координаты которых известны, накладывается «граф соседства». Этот граф и определяет межатомные связи. Но эта процедура хорошо отражает реальные связи только в случае одинаковых атомов в структуре или одинаковых молекул. В данном случае приходится поступать иначе, так как разбиение на молекулы оксида кремния неоднозначно: часть расстояний характеризует межмолекулярные связи, а часть - межатомные. Возникает многовариантная задача по определению набора связей в структуре. Нами предлагается упрощенная модель разбиения, в которой атомам кислорода отводится роль связующих элементов, которые распределяют атомы кремния таким образом, какими мы их наблюдаем в структуре. Поэтому достаточно зафиксировать атомы кремния и строить связи между ними простым анализом самой структуры, или, более точно, рассчитывая межатомные расстояния по заданным координатам атомов кремния и выбирая кратчайшие между ними. Шаг. 7. Построение и анализ структуры в различных проекциях.



Рисунок 2



Кристобалит (CRISTOBALITE), [20], структурный тип cristobalite-alpha, analogue, Na_{1.95}Al_{1.95}Si_{0.05}O₄

Рисунок 3



Рисунок 4

Reference:

Chichagov A.V. et al.

Information-Calculating System on Crystal Structure Data of Minerals

(MINCRYST)

- Kristallographiya, v.35, n.3, 1990, p.610-616 (in Russian)

В данной конкретной структуре количество выбранных для расчетов связей оказалось равным 9.

Шаг. 8. Переход к программе «Компьютерный наноскоп».

Вид Блокнота



Рисунок 5

Шаг. 9. Выбор проекции 3-D - структуры из интерфейса программы (результат расчета нанокластера кристобалита).



Рисунок 6

Правая колонка вводимых вариантов расчета показывает, что для файла Блокнота «КРИСТОБАЛЛ 1 был выбран вариант, в котором задано: (1) изображение только внешних связей, (2) масштаб для величины связи задан как 4 условные единицы длины, (3) произведено 8 этапов расчета и (4) на внешней поверхности растущего кластера оказалось 162 атома кремния. От каждого внешнесферного атома видно направление связей, на которые при следующем этапе присоединяться атомы 9-го этапа роста структуры.

Уменьшая размеры шаров, задающих положение атомов, можно детальнее исследовать связи. Увеличивая размеры шаров, определяем геометрическую форму растущего нанокластера. Эта процедура видна на последующих рисунках. Трехмерная модель структуры позволяет представить проекции в различных направлениях проектирования.



Рисунок 7



Рисунок 8

По расстояниям между атомами легко оценить размеры выросшего кластера кристобалита. В данном эксперименте, в среднем, эта величина составляет около 5,5 нм. Естественно, что при увеличении количества этапов роста, например в 2 раза, увеличатся и размеры структуры приблизительно в два раза.

9. Пример расчета нанокластеров в структурах комплексных соединений с карбамидом.

Интересные модели роста кластеров возникают в классе структур комплексных соединений. Квантовомеханические расчеты для такого большого количества атомов с различными типами связи пока произвести не удается.

Первая особенность комплексных соединений заключается в наличии водородных связей. С точки зрения технологических проблем создания молекулярных компьютеров, комплексные соединения, исследованные в ВлГУ, содержат структуру, которая легко перестраивается. При этом, использование напрямую кристаллов тетрагональной мочевины (карбамида) нерентабельно, так как переключение водородных связей в этой структуре будет носить массовый характер, и приводить к ее разрушению. Другое дело, если отдельные молекулы карбамида располагаются в комплексном катионе переходного металла. В работах [60-62] общим молекулярным кластером является структура комплексного катиона [M(OCN₂H₄)₆]^{2+,3+}, изображенная ниже.

118



Рисунок 9

После перестройки водородных связей в этой структуре, изображенная далее структура встречается в другом комплексном соединении, следовательно, природа уже «научилась перестраивать эти связи (рисунок ниже).



Рисунок 10

Всего обнаружено 7 симметричных вариантов распределения Н-связей.

Симметрия молекул относительно легко определяется по физическим свойствам и по рассеянию рентгеновских лучей. Поэтому структуру без симметричного распределения Н-связей легко отличить от симметричных конфигураций. В результате имеем проект ячейки молекулярного компьютера нанометрового размера с байтом вариантов для записи информации (1 вариант – без симметрии и 7 вариантов симметричных).

В работе [62] представлена структура, содержащая комплексный катион $[Cr(OCN_2H_4)_6]^{,3+}$, информация о которой содержится в приведенной ниже таблице и рисунке (реф.код структуры в международном Кембриджском банке: WOKNIT).

	- 0		X	
Current structure	e: WOKNIT		•	
Customise	Identifier	WOKNIT		
Structure	Author(s)	V.G.Rau, T.F.Rau, G.O.Lebedev, E.N.Kurkutova	-	
Diagram	Literature Reference	Kristallografiya(Russ.)(Crystallogr.Rep.) (2000), 45, 653		
Atoms	Formula	C ₆ H ₂₄ Cr N ₁₂ O ₆ ³⁺ ,3(C ₈ H ₁₄ Co N ₆ O ₈ ⁻),2(H ₂ O)		
Bonds	Compound Namo	hexakis(Urea)-chromium(iii) tris(dinitro-dimethylglyoxime-		
Contacts	Compound Name	dimethylgyloximato-cobalt(iii)) dihydrate	=	
Centroids	Synonym			
Planes	Space Group	P -1		
Symmetry	Cell Lengths	a 10.389(4) b 10.974(4) c 14.523(4)		
Distances	Cell Angles	α 87.46(3) β 73.92(3) γ 86.98(3)		
Angles	Cell Volume	1588		
Torsions	Z, Z'	Z: 1 Z': 0.5		
All Angles	R-Factor (%)	2.5	-	
All Torsions				
Close				



Рисунок 11

Для построения нанокластера структуры выбраны основные позиции комплексных катионов в структуре и занесены в Блокнот программы «Компьютерный наноскоп» для расчетов. Содержимое Блокнота и результаты расчета 10 этапов роста, с 602 центрами молекулярных кластеров структуры поверхности представлены ниже. Конечные размеры такого кластера можно оценить величиной около 20нм. Форма растущего полиэдра – гексагональная дипирамида.

<u> </u>	ARB 154.dat	— Блокн	от			X
Фай	л Правка	Формат	Вид Спр	авка		
4 24	4 10.97 14.5	52 10.39	73.9 87.0 8	87.5		
000)					
0.5 (0.5					
0.25	0.49 0.25					
0.75	0.51 0.75					
12	000	23	000			
12	-100	23	0 -1 0			
12	0 0 -1	24	0 -1 0			
12	-10-1	3 1	010			
13	000	24	000			
13	0 -1 0	34	000			
14	-1 -1 -1	32	010			_
14	-10-1	34	-10-1			=
21	000	4 1	101			
21	100	4 1	111			
21	001	42	010			
21	101	43	101			
4						

Рисунок 12



Рисунок 13. «Магические числа» роста (для точек поверхности) составляют последовательность $N_k = 6k^2+2$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

АКТЫ ВНЕДРЕНИЯ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ



АКТ ВНЕДРЕНИЯ

результатов диссертационной работы Али Аббас Мохсин Али на тему «Исследование структурных превращений нанокластерных элементов радиоустройств и организации технологии их защиты от радиации».

Настоящий акт составлен о том, что материалы диссертационной работы Али Аббас Мохсин Али, представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.12.04 - Радиотехника, в том числе системы и устройства телевидения, внедрены в учебный процесс на кафедре радиотехники и радиосистем ВлГУ по дисциплине «Электроника».

Заведующий кафедрой радиотехники и радиосистем д.т.н., профессор

Tr

О.Р. Никитин

«УТВЕРЖДАЮ» Генеральный директор ОАО «Владимирское конструкторское бюро радиосвязи», к.т.н. BKBP А.Е. Богданов 1/ » 2016 г.

Для предоставления в диссертационный совет Д 212.025.04

АКТ ВНЕДРЕНИЯ

результатов диссертационной работы на соискание ученой степени кандидата технических наук Али Аббас Мохсин Али на тему «Исследование структурных превращений нанокластерных элементов радиоустройств и организации технологии их защиты от радиации».

Настоящим актом подтверждается, что в ОАО "Владимирское конструкторское бюро радиосвязи" при разработке перспективных систем радиоаппаратуры будут использованы разработанные в диссертации Али Аббас Мохсин Али алгоритмы и доведенные до инженерных решений программные средства организации технологии сборки системы защиты от радиации для наноэлектронных устройств.

Начальник лабораторного сектора, к.т.н. _____И.с. Прохоров