

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

ТОМ 24 4/21

Индекс по каталогам «Пресса России» и «Урал Пресс» 47215



Учредитель:

Федеральное государственное
автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»
(НИТУ «МИСиС»)

Известия высших учебных заведений.
Материалы электронной техники.
2021. Т. 24, № 4(91).

Журнал основан в 1998 г.
Издается один раз в 3 месяца.

Издатель: Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»,
119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.

Почтовый адрес редакции:
119991, г. Москва, Ленинский просп., д. 4, МИСиС.

Тел.: (495) 638–45–31, внутренний 040–68,
e-mail: met.misis@inbox.ru.

Отпечатано в типографии
Издательского дома «МИСиС»,
119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.
тел.: (499) 236–76–17.

Подписано в печать 31.01.2022.
Формат 60×90/8. Печать офсетная.
Заказ № 17511. Бумага офсетная.
Печ. л. 8,0. Тираж 150. Цена свободная.

Журнал зарегистрирован
в Федеральной службе по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых комму-
никаций (ПИ № ФС 77–59522 от 23.10.2014), пре-
дыдущее свидетельство
№ 016108 от 15.05.1997 (Минпечати РФ).

Редактор М. И. Воронова
Корректор А. В. Шемерова
Верстка А. А. Космынина

Главный редактор

ПАРХОМЕНКО ЮРИЙ НИКОЛАЕВИЧ,

д-р физ.-мат. наук, проф. (АО «Гиредмет» ГНЦ РФ, Москва, Россия)

Заместители главного редактора

КИСЕЛЕВ Дмитрий Александрович, канд. физ.-мат. наук,
КОСТИШИН Владимир Григорьевич, д-р физ.-мат. наук, проф.
(НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)

Ответственный секретарь редакции

Космынина Арина Александровна

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Акчурина Р. Х., д-р техн. наук, проф. (МИТХТ, Москва, Россия)
Асеев А. Л., акад. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Барберо А., д-р биологии (Институт ядерных исследований, Мехико, Мексика)
Бдикин И. К., д-р физ.-мат. наук (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Бублик В. Т., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Васкес Л., проф., д-р физики (Университет Комплутенс, Мадрид, Испания)
Вуль А. Я., д-р физ.-мат. наук, проф. (ФТИ им. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия)
Гуляев Ю. В., акад. РАН (ИРЭ РАН, Москва, Россия)
Дзуреченский А. В., проф., член-корр. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Калошкин С. Д., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кобелева С. П., канд. физ.-мат. наук, доц. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кожитов Л. В., д-р техн. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Козлова Н. С., канд. физ.-мат. наук (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Литовченко В. Г., акад. УКАН (ИФП им. В. Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, Украина)
Ломонова Е. Е., д-р техн. наук (ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия)
Мансуров З. А., д-р хим. наук, проф. (Институт проблем горения, Алматы, Казахстан)
Маппс Д. Дж., проф. (Университет Плимута, Плимут, Великобритания)
Пенг Х. Х., проф. (Чжэцзянский университет, Ханчжоу, Китай)
Петров А. В., канд. физ.-мат. наук (НПЦ НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь)
Сафаралиев Г. К., проф., член-корр. РАН (ДГУ, Махачкала, Россия)
Соболев Н. А., проф. (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Солнышкин А. В., д-р физ.-мат. наук, проф. (ТГУ, Тверь, Россия)
Табачкова Н. Ю., канд. физ.-мат. наук (ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия)
Тодуа П. А., д-р физ.-мат. наук, проф. (ОАО «НИЦПВ», Москва, Россия)
Федотов А. К., проф. (БГУ, Минск, Беларусь)
Хернандо Б., проф. (Университет Овьедо, Овьедо, Испания)
Чаплыгин Ю. А., проф., член-корр. РАН (МИЭТ, Москва, Россия)
Шварцбург А. Б., д-р физ.-мат. наук (ОИВТ РАН, Москва, Россия)
Щербачев К. Д., канд. физ.-мат. наук (XRD Eigenmann GmbH, Шнайттах, Германия)

Журнал по решению ВАК Минобразования РФ включен в «Перечень периодических
и научно-технических изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых
рекомендуется публикация основных результатов диссертаций на соискание
ученой степени доктора наук».

Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Materialy elektronnoi tekhniki

Materials of Electronics Engineering

Vol. 24

4/21



Founders:

National University of Science
and Technology «MISIS»

**Izvestiya vuzov. Materialy
elektronnoi tekhniki =
Materials of Electronics
Engineering. 2021, vol. 24, no. 4**

*The journal was founded in 1998
and is published once in 3 months.*

Address of correspondence:
National University of Science
and Technology «MISIS»,
4 Leninskiy Prospekt, Moscow 119991, Russia
Tel./fax: +7(495)638–45–31,
e-mail: met.misis@inbox.ru,
<http://met.misis.ru>

The journal
«Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii.
Materialy Elektronnoi Tekhniki =
Materials of Electronics Engineering»
is registered in Federal Service for Supervision
in the Sphere of Mass Communications
(PI number FS 77–59522 of 10.23.2014),
the previous certificate number 016108
from 15.05.1997.

Editor M. I. Voronova
Corrector A. V. Shchemerova

Editor-in-Chief

Yuri N. Parkhomenko, Prof., Dr. Sci. (Phys.–Math.),
Scientific Chief of the State Scientific–Research and Design Institute of Rare–Metal Industry «Giredmet» JSC

Deputy Editor-in-Chief

Dmitry A. Kiselev, PhD, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
Department of the Material Science of Semiconductors and Dielectrics at the MISiS

Vladimir G. Kostishin, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof.,
Head of Department of the Technology of Electronic Materials at the MISiS

Assistant Editor

Arina A. Kosmylina

EDITORIAL BOARD

- R. Kh. Akchurin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof.,
*Lomonosov Moscow State University
of Fine Chemical Technologies, Moscow, Russia*
- A. L. Aseev**, Academician of the Russian Academy of
Sciences (RAS), *Institute of Semiconductor Physics,
SB RAS, Novosibirsk, Russia*
- I. K. Bdkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), *Aveiro Institute of
Nanotechnology (AIN), University of Aveiro, Aveiro,
Portugal*
- V. T. Bublik**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof.,
*National University of Science and Technology
«MISIS», Moscow, Russia*
- Yu. A. Chaplygin**, Corresponding Member of the Russian
Academy of Sciences (RAS), Prof., *National Research
University of Electronic Technology, Moscow, Russia*
- A. V. Dvurechenskii**, Corresponding Member of the
Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
*Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, SB RAS,
Novosibirsk, Russia*
- A. K. Fedotov**, Prof., *Belarusian State University,
Department of Energy Physics, Minsk, Belarus*
- Yu. V. Gulyaev**, Academician of the Russian Academy
of Sciences (RAS), *Kotelnikov Institute of Radio
Engineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia*
- A. Heredia-Barbero**, PhD, Dr. (Biol.), *Instituto de
Ciencias Nucleares de la UNAM, Mexico City, Mexico*
- B. Hernando**, Prof., *Universidad de Oviedo, Oviedo, Spain*
- S. D. Kaloshkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- S. P. Kobeleva**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assoc. Prof.,
*National University of Science and Technology
«MISIS», Moscow, Russia*
- L. V. Kozhitov**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- N. S. Kozlova**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- V. G. Litovchenko**, Academician of the Ukrainian
Academy of Sciences, *Institute of Semiconductors
Physics, National Academy of Sciences in Ukraine,
Kiev, Ukraine*
- E. E. Lomonova**, Dr. Sci. (Eng.), A.M. Prokhorov General
Physics Institute, *Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*
- Z. A. Mansurov**, Dr. Sci. (Chim.), Prof., *Al Farabi Kazakh
National University, Institute of Combustion Problems,
Almaty, Kazakhstan*
- D. J. Mapps**, Prof., *University of Plymouth, Plymouth,
United Kingdom*
- H.–X. Peng**, Prof., *Zhejiang University, Hangzhou, China*
- A. V. Petrov**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), *Scientific Practical
Materials Research Centre of NAS of Belarus, Minsk,
Belarus*
- G. K. Safaraliev**, Corresponding Member
of the Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
*Dagestan State University, Makhachkala,
Russia*
- K. D. Shcherbachev**, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
XRD Eigenmann GmbH, Schnaittach, Germany
- A. B. Shvartsburg**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), *Joint Institute
for High Temperatures Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*
- N. A. Sobolev**, Prof., *Aveiro University, Aveiro, Portugal*
- A. V. Solnyshkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Tver State
University, Tver, Russia*
- N. Yu. Tabachkova**, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
*A.M. Prokhorov General Physics Institute, Russian
Academy of Sciences, Moscow, Russia*
- P. A. Todua**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Research
Center for Surface and Vacuum, Moscow, Russia*
- L. Vazquez**, Ph. D., Prof., *Universidad Complutense
de Madrid, Madrid, Spain*
- A. Ya. Vul'f**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Ioffe Physico–
Technical Institute, Saint Petersburg, Russia*

*In accordance with a resolution of the Higher Attestation Committee at the Ministry of Education of the Russian Federation,
the Journal is included in the «List of Periodical and Scientific and Technical Publications Issued in the Russian Federation
in which the Publication of the Main Results of Dr.Sci. Theses is Recommended».*

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ*

К. К. Абгарян, И. С. Колбин

Расчет сопротивления Капицы на интерфейсе
кремний — альфа-кварц для различных температур 217

К. О. Петросянц, Д. С. Силкин, Д. А. Попов

Оценка влияния параметров структуры FinFET
на электрические характеристики средствами TCAD-моделирования..... 222

А. А. Зацаринный, Ю. А. Степченко, Ю. Г. Дьяченко, Ю. В. Рождественский

Сравнение сбоеустойчивых синхронных и самосинхронных схем..... 229

К. К. Абгарян, А. В. Леонов, Д. Л. Ревизников

Температурные исследования полевых датчиков Холла
на основе наноразмерных гетероструктур «кремний на изоляторе» 234

А. А. Орлов, Е. А. Ганыкина, А. А. Резванов

Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика
в системе металлизации интегральных схем 242

Е. С. Шамин, Е. С. Горнев

Анализ и сравнение различных подходов
к экстракции параметров модели мемристора 248

П. А. Сеченых

Математическое моделирование кристаллической структуры
перовскита и двойного перовскита 255

А. А. Чистякова, Д. И. Бажанов

Исследование сегрегации примеси никеля на открытых поверхностях
структуры LSNT перовскита методом первопринципной молекулярной динамики 260

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

И. Н. Ганиев, Дж. Х. Джайлоев, Ё. Дж. Холов, Н. И. Ганиева

Влияние добавок кальция на анодное поведение проводникового
алюминиевого сплава E-AlMgSi (алдрей), в среде электролита NaCl..... 267

Список статей, опубликованных в 2021 году 275

* Статьи, размещенные в выпуске, подготовлены по материалам докладов,
представленных на III-й международной конференции «Математическое моделирование
в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

CONTENTS

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS*

K. K. Abgaryan, I. S. Kolbin

Calculation of the Kapitza resistance at the silicon —
alpha-quartz interface for various temperatures 217—221

K. O. Petrosyants, D. S. Silkin, D. A. Popov

Evaluation of the effect of FinFET structure parameters
on electrical characteristics using TCAD modeling tools 222—228

A. A. Zatsarinny, Yu. A. Stepchenkov, Yu. G. Diachenko, Yu. V. Rogdestvenski

Failure-tolerant synchronous and self-timed circuits comparison 229—233

K. K. Abgaryan, A. V. Leonov, D. L. Reviznikov

Temperature studies of Hall field sensors based
on nanosized silicon-on-insulator heterostructures 234—241

A. A. Orlov, E. A. Ganykina, A. A. Rezvanov

Accounting of the porosity of the material in the simulation
of the time-dependent dielectric breakdown in the metallization system of integrated circuits 242—247

E. S. Shamin, E. S. Gornev

Analysis and comparison of different approaches
to the extraction of parameters of the memristor model 248—254

P. A. Sechenykh

Mathematical modeling of the perovskite and double perovskite crystal structures 255—259

A. A. Chistyakova, D. I. Bazhanov

The study of nickel impurity segregation on LSNT perovskite
open surfaces by means of *ab initio* molecular dynamics 260—266

PHYSICAL CHARACTERISTICS AND THEIR STUDY

I. N. Ganiev, J. H. Jayloev, E. J. Kholov, N. I. Ganieva

Effect of calcium additives on the anodic behavior of the conductive
aluminum alloy E- AlMgSi (Aldrey) in the medium of the NaCl electrolyte 267—274

List of publications for 2021 275—276

* The articles in the issue were prepared based on the materials of the reports presented
at the III International Conference "Mathematical Modeling in the Materials Science of Electronic
Components", Moscow, October 25–27, 2021.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2021. Т. 24, № 4. С. 217—221.
DOI: 10.17073/1609-3577-2021-4-217-221

УДК 621.315:536.2

Расчет сопротивления Капицы на интерфейсе кремний — альфа-кварц для различных температур

© 2021 г. К. К. Абгарян^{1,2,✉}, И. С. Колбин¹

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

✉ Автор для переписки: kristal83@mail.ru

Аннотация. При рассмотрении тепловых процессов многослойных наноструктур существенная часть энергии рассеивается на границах слоев, для учета этого фактора при моделировании используется сопротивление Капицы. В работе проведен расчет термического сопротивления на границе Si/SiO₂ (альфа-кварц) структур для интервала температур до 567 К. Вычисления велись на основе моделей акустического и диффузного несоответствия. Полученные результаты, в частности, могут быть использованы при построении моделей теплопереноса в микроэлектронике.

Ключевые слова: сопротивление Капицы, термическое сопротивление, теплоперенос в наноструктурах

Благодарности: Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-01191А. Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Для цитирования: Абгарян К.К., Колбин И.С. Расчет сопротивления Капицы на интерфейсе кремний — альфа-кварц для различных температур. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 217—221. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-217-221>

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Calculation of the Kapitza resistance at the silicon — alpha-quartz interface for various temperatures

K. K. Abgaryan^{1,2,✉}, I. S. Kolbin¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia*

✉ Corresponding author: kristal83@mail.ru

Abstract. When considering the thermal processes of multilayer nanostructures, a significant part of the energy is dissipated at the boundaries of the layers; to take this factor into account, the Kapitza resistance is used in the simulation. In this study, we calculate the thermal resistance at the Si/SiO₂ interface (alpha-quartz) structures for the temperature range up to 567 K. The calculations are carried out based on the acoustic and diffuse mismatch models. The results obtained, in particular, can be used in constructing models of heat transfer in microelectronics.

Keywords: Kapitza resistance, thermal resistance, heat transfer in nanostructures

Acknowledgments: This study was supported by the Russian Foundation for Basic Research, grant No. 19-08-01191A. This study was carried out using the infrastructure of the Center for Collective Use “High-Performance Computing and Big Data” (CCU “Informatics”), Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS), Moscow.

For citation: Abgaryana K.K., Kolbina I.S. Calculation of the Kapitza resistance at the silicon–alpha quartz interface for various temperatures. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 217–221. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-217-221>

Введение

В последнее время отрасль микроэлектроники добилась больших успехов в росте электронных характеристик полупроводников. Однако, из-за увеличения удельной мощности и уменьшения размеров устройств, тепловыделение стало одним из самых важных проблем, ограничивающих производительность и надежность проектируемых систем [1, 2].

При рассмотрении устройств масштабом порядка длины свободного пробега носителя тепла (для полупроводников и диэлектриков это фононы — кванты колебательного движения атомов кристаллов) перенос тепла в основном определяется теплопроводностью на границах раздела между соседними материалами, а не внутренними свойствами материалов [3]. Количественное изменение температуры на границе определяется сопротивлением Капицы [4].

Точное вычисление термического сопротивления является весьма сложной задачей, с другой стороны в ряде случаев достаточно воспользоваться сравнительно простыми методами: моделями акустического и диффузного несоответствия. Первая основана на анализе переноса акустических волн

через интерфейс, а вторая на анализе переноса фононов через интерфейс [5].

В работе приведен расчет термического сопротивления для интерфейса Si/SiO₂ (альфа-кварц), такая граница возникает, в частности, при проектировании устройств с использованием технологии кремний на изоляторе (*Silicon on Insulator* — SOI).

Метод расчета

Для определения сопротивления Капицы на интерфейсе Si/SiO₂ воспользуемся формулой [6] (обозначение 1 → 2 показывает направление теплового потока: от *первого материала* (кремний) к *второму* (альфа-кварц):

$$r_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{2} \left(\sum_j v_{1,j} \Gamma_{1,j} \int_0^{\omega_{D,1}} \hbar \omega \frac{dN_{1,j}(\omega, T)}{dT} d\omega \right), \quad (1)$$

$$N_{1,j}(\omega, T) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 v_{1,j}^3 \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1 \right]}, \quad (2)$$

$$\Gamma_{1,j} = \int_0^{\theta_c} \alpha_{1 \rightarrow 2}(\theta_1) \cos \theta \sin \theta d\theta, \quad (3)$$

где i — индекс материала (1 — Si, 2 — SiO₂); j — индекс ветви поляризации (1 — продольная, 2 и 3 — поперечные волны); $v_{i,j}$ — фоновая скорость i -го материала j -й ветви поляризации; $\hbar \approx 1,0545718 \times 10^{-34}$ Дж·с, постоянная Дирака; $k_B = 1,380649 \times 10^{-23}$ Дж/К, постоянная Больцмана; ω — угловая частота; $\omega_{D,i}$ — частота Дебая для i -го материала; T — температура; θ — угол между направлением распространения фононов и нормалью к интерфейсу; α — коэффициент переноса энергии упругими волнами.

Частота Дебая ω_D может быть получена из температуры Дебая T_D по формуле [7]:

$$\omega_D = \frac{k_B T_D}{\hbar}, \quad (4)$$

где температура Дебая T_D при этом может быть вычислена как [7]:

$$T_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3n N_A \rho}{4\pi M} \right) v_m, \quad (5)$$

где $h = 6,62607 \cdot 10^{-34}$, постоянная Планка; n — число атомов в молекуле; $N_A = 6,02214076 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹, постоянная Авогадро; ρ — плотность; M — молярная масса; v_m — скорость звука.

Скорость звука приближенно может быть вычислена как [7]:

$$v_m \approx \left(\frac{1}{3} \left[\frac{2}{v_S^3} + \frac{1}{v_L^3} \right] \right)^{-1/3}, \quad (6)$$

где v_S — фоновая скорость поперечной волны (v_2, v_3); v_L — фоновая скорость продольной волны (v_1).

Стоит отметить, что, вообще говоря, плотность вещества зависит от температуры. Соответственно и температура Дебая и частота Дебая также зависят от изменения температуры.

Расчет коэффициента α является весьма сложной задачей, например стоит отметить работу [8],

где задача решается через функцию Грина, однако на практике часто удовлетворительные результаты можно получить с помощью достаточно простых моделей акустического и диффузного несоответствия. Для акустического несоответствия коэффициент может быть вычислен как [9]:

$$\alpha_{1 \rightarrow 2}^A = \frac{4\rho_1 v_1 \rho_2 v_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{(\rho_1 v_1 \cos \theta_1 + \rho_2 v_2 \cos \theta_2)^2}, \quad (7)$$

из соотношения $\frac{\sin \theta_1}{v_1} = \frac{\sin \theta_2}{v_2}$ (закон Снелла),

выразим θ_2 через θ_1 :

$$\theta_2 = \arcsin \left(\frac{v_2}{v_1} \sin \theta_1 \right). \quad (8)$$

При этом важно учесть, что для $v_1 < v_2$ существует критический угол θ_C , при котором для $\theta_1 > \theta_C$ параметр передачи обнуляется:

$$\theta_C = \arcsin \left(\frac{v_1}{v_2} \right). \quad (9)$$

Для модели диффузного несоответствия коэффициент переноса энергии не зависит от угла θ и имеет вид [5]:

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,j}^D = \frac{\sum_j v_{2,j}^{-2}}{\sum_{i,j} v_{i,j}^{-2}}, \quad (10)$$

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,1}^D = \frac{v_{2,1}^{-2}}{v_{1,1}^{-2} + v_{2,1}^{-2}}, \quad (11)$$

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,2}^D = \frac{v_{2,1}^{-2} + v_{2,2}^{-2}}{v_{1,1}^{-2} + v_{2,1}^{-2} + v_{1,2}^{-2} + v_{2,2}^{-2}}, \quad (12)$$

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,3}^D = \frac{v_{2,1}^{-2} + v_{2,2}^{-2} + v_{2,3}^{-2}}{v_{1,1}^{-2} + v_{2,1}^{-2} + v_{1,2}^{-2} + v_{2,2}^{-2} + v_{1,3}^{-2} + v_{2,3}^{-2}}. \quad (13)$$

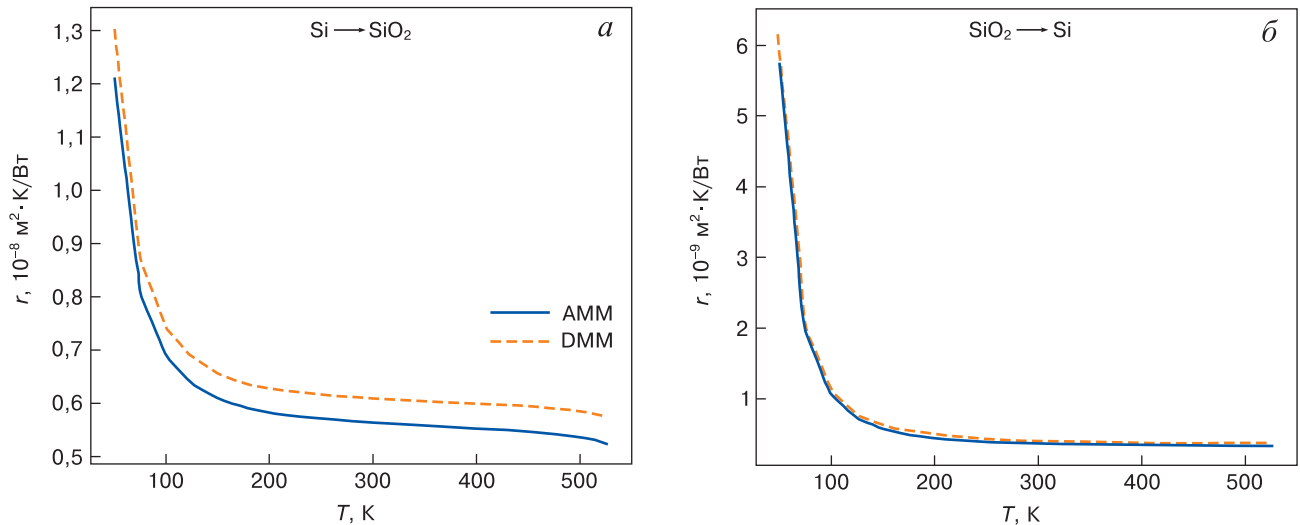


Рисунок. Зависимости термического сопротивления на границе Si/SiO₂ (а) и SiO₂/Si (б) от температуры
Figure. Dependences of thermal resistance at the Si/SiO₂ (a) and SiO₂/Si (b) interface on temperature

Стоит также отметить, что данные модели, вообще говоря, можно использовать совместно [8]:

$$\alpha_{1 \rightarrow 2}^P = P\alpha_{1 \rightarrow 2}^A + (1-P)\alpha_{1 \rightarrow 2}^D, \quad (14)$$

где P — задаваемый параметр «зеркальности» интерфейса, изменяющийся в интервале от 0 до 1.

Результаты и их обсуждение

Данные для альфа-кварца взяты из работы [10], промежуточные значения вычислены с помощью В-сплайна. Зависимости скоростей акустических волн для ветвей поляризации для кремния от температуры получены из [11], зависимость плотности от температуры получена из работы [12]. Проведен расчет термического сопротивления на основе моделей акустического (АММ) и диффузного (ДММ) несоответствия, результат представлен на рисунке для направлений Si/SiO₂ (а) и SiO₂/Si (б).

По полученным данным видно, что в зависимости от направления значения отличаются существенно: приблизительно в 2 раза в области низких температур и более чем на порядок в области нормальных и высоких.

Для сравнения можно привести работу [13], где авторы с использованием методов неравновесной молекулярной динамики получили для 300 К значение термического сопротивления $2,96 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$. В публикации [14] с использованием молекулярной динамики получено значение $4,27 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$, в статье [15] дается теоретическое значение термического сопротивления $6,88 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$. При этом, в настоящей работе значения для 300 К: $5,63 \cdot 10^{-9}$ и $6,082 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$ для моделей акустического и диффузного несоответствия, что говорит об адекватной точности используемых моделей.

Заключение

В статье было рассчитано термическое сопротивление на интерфейсе кремний–альфа кварц на основе моделей акустического и диффузного рассогласования. Продемонстрировано, что в зависимости от направления теплового потока сопротивление Капицы для данных материалов существенно варьируется: для Si/SiO₂ разница может достигать от 2 до более чем 10 раз. Полученные результаты могут представлять интерес при построении моделей теплопереноса в микроэлектронике на основе технологии кремний на изоляторе.

Библиографический список

1. Хвесюк В.И., Скрыбин А.С. Теплопроводность наноструктур. *Теплофизика высоких температур*. 2017; 55(3): 446—471. <https://doi.org/10.7868/S0040364417030127>
2. Абгарян К.К., Колбин И.С. Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов. *Известия вузов. Материалы электронной техники*. 2019; 22(3): 190—196. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-3-190-196>
3. Хвесюк В.И., Лю Б., Баринев А.А. Новый подход к расчету проводимости Капицы между твердыми телами. *Письма в журнал технической физики*. 2020; 46(19): 42—46. <https://doi.org/10.21883/PJTf.2020.19.50045.18367>
4. Kapitza P. The study of heat transfer in helium II. *Journal of Physics USSR*. 1941; 4(1–6): 181—210.
5. Swartz E.T., Pohl R.O. Thermal boundary resistance. *Reviews of Modern Physics*. 1989; 61(3): 605—668. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>
6. Szymański M. Calculation of the cross-plane thermal conductivity of a quantum cascade laser active region. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011; 44(8): 085101. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/8/085101>
7. Anderson O.L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1963; 24(7): 909—917. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(63\)90067-2](https://doi.org/10.1016/0022-3697(63)90067-2)
8. Zhao H., Freund J.B. Phonon scattering at a rough interface between two FCC lattices. *Journal of Applied Physics*. 2009; 105(1): 013515—013515. <https://doi.org/10.1063/1.3054383>
9. Prasher R. Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts. *Applied Physics Letters*. 2009; 94(4): 041905—041905. <https://doi.org/10.1063/1.3075065>
10. Ohno I., Harada K., Yoshitomi C. Temperature variation of elastic constants of quartz across the α - β transition. *Physics and Chemistry of Minerals*. 2006; 33: 1—9. <https://doi.org/10.1007/s00269-005-0008-3>
11. Nikanorov S.P., Burenkov Yu.A., Stepanov A.V. Elastic properties of silicon. *Soviet Physics – Solid State*. 1971; 13(10): 2516—2519.
12. Endo R., Fujihara Y., Susa M. Calculation of the density and heat capacity of silicon by molecular dynamics simulation. *High Temperatures – High Pressures*. 2003; 35/36(5): 505—511. <https://doi.org/10.1068/htjr135>
13. Deng B., Chernatynskiy A., Khafizov M., Hurley D.H., Phillpot S.R. Kapitza resistance of Si/SiO₂ interface. *Journal of Applied Physics*. 2014; 115: 084910. <https://doi.org/10.1063/1.4867047>
14. Lampin E., Nguyen Q.-H., Francioso P.A., Cleri F. Thermal boundary resistance at silicon–silica interfaces by molecular dynamics simulations. *Applied Physics Letters*. 2012; 100(13): 131906. <https://doi.org/10.1063/1.3698325>
15. Shichen Deng, Chengdi Xiao, Jiale Yuan, Dengke Ma, Junhui Li, Nuo Yang, Hu He. Thermal boundary resistance measurement and analysis across SiC/SiO₂ interface. *Applied Physics Letters*. 2019; 115(10): 101603. <https://doi.org/10.1063/1.5111157>

References

1. Khvesyuk V.I., Skryabin A.S. Thermal conductivity of nanostructures. *High Temperature*. 2017; 55(3): 428—450. <https://doi.org/10.1134/S0018151X17030129>
2. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Calculation of the effective thermal conductivity of a superlattice based on the Boltzmann transport equation using first-principle calculations. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019; 22(3): 190—196. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-3-190-196>
3. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A new approach to calculation of the Kapitza conductance between solids. *Technical Physics Letters*. 2020; 46(10): 983—987. <https://doi.org/10.1134/S1063785020100065>
4. Kapitza P. The study of heat transfer in helium II. *Journal of Physics USSR*. 1941; 4(1–6): 181—210.
5. Swartz E.T., Pohl R.O. Thermal boundary resistance. *Reviews of Modern Physics*. 1989; 61(3): 605—668. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>
6. Szymański M. Calculation of the cross-plane thermal conductivity of a quantum cascade laser active region. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011; 44(8): 085101. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/8/085101>
7. Anderson O.L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1963; 24(7): 909—917. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(63\)90067-2](https://doi.org/10.1016/0022-3697(63)90067-2)
8. Zhao H., Freund J.B. Phonon scattering at a rough interface between two FCC lattices. *Journal of Applied Physics*. 2009; 105(1): 013515—013515. <https://doi.org/10.1063/1.3054383>
9. Prasher R. Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts. *Applied Physics Letters*. 2009; 94(4): 041905—041905. <https://doi.org/10.1063/1.3075065>
10. Ohno I., Harada K., Yoshitomi C. Temperature variation of elastic constants of quartz across the α - β transition. *Physics and Chemistry of Minerals*. 2006; 33: 1—9. <https://doi.org/10.1007/s00269-005-0008-3>
11. Nikanorov S.P., Burenkov Yu.A., Stepanov A.V. Elastic properties of silicon. *Soviet Physics – Solid State*. 1971; 13(10): 2516—2519.
12. Endo R., Fujihara Y., Susa M. Calculation of the density and heat capacity of silicon by molecular dynamics simulation. *High Temperatures – High Pressures*. 2003; 35/36(5): 505—511. <https://doi.org/10.1068/htjrl35>
13. Deng B., Chernatynskiy A., Khafizov M., Hurlley D.H., Phillpot S.R. Kapitza resistance of Si/SiO₂ interface. *Journal of Applied Physics*. 2014; 115: 084910. <https://doi.org/10.1063/1.4867047>
14. Lampin E., Nguyen Q.-H., Francioso P.A., Cleri F. Thermal boundary resistance at silicon-silica interfaces by molecular dynamics simulations. *Applied Physics Letters*. 2012; 100(13): 131906. <https://doi.org/10.1063/1.3698325>
15. Shichen Deng, Chengdi Xiao, Jiale Yuan, Dengke Ma, Junhui Li, Nuo Yang, Hu He. Thermal boundary resistance measurement and analysis across SiC/SiO₂ interface. *Applied Physics Letters*. 2019; 115(10): 101603. <https://doi.org/10.1063/1.5111157>

Информация об авторах / Information about the authors

Абгарян Каринэ Карленовна — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; зав. кафедрой, Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>; e-mail: kristal83@mail.ru

Колбин Илья Сергеевич — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; e-mail: iskolbin@gmail.com

Karine K. Abgaryan — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher, Head of Department, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; Head of Department, Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>; e-mail: kristal83@mail.ru

Ilya S. Kolbin — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; e-mail: iskolbin@gmail.com

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 11.01.2022; принята к публикации 21.01.2022
Received 24 December 2021; Revised 11 January 2022; Accepted 21 January 2022

УДК 621.315:539.23

Оценка влияния параметров структуры FinFET на электрические характеристики средствами TCAD–моделирования

© 2021 г. К. О. Петросянц^{1,2,✉}, Д. С. Силкин¹, Д. А. Попов¹

¹ *Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова
Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики»,
ул. Таллинская, д. 34, Москва, 123458, Россия*

² *Институт проблем проектирования в микроэлектронике Российской академии наук,
ул. Советская, д. 3, Зеленоград, Москва, 124365, Россия*

✉ Автор для переписки: kpetrosyants@hse.ru

Аннотация. С помощью TCAD–моделирования исследовано влияние изменения параметров структуры FinFET, таких как размеры слоев затворного стека, форма ребра или уровни легирования, на электрические характеристики прибора.

Ключевые слова: TCAD–моделирование, FinFET, параметры структуры

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке совместного гранта РФФИ и Фонда научных исследований Китая (грант № 20–57–53004).

Для цитирования: Петросянц К.О., Силкин Д.С., Попов Д.А. Оценка влияния параметров структуры FinFET на электрические характеристики средствами TCAD–моделирования. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 222—228. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-222-228>

Evaluation of the effect of FinFET structure parameters on electrical characteristics using TCAD modeling tools

K. O. Petrosyants^{1,2,✉}, D. S. Silkin¹, D. A. Popov¹

¹ *HSE Tikhonov Moscow Institute of Electronics and Mathematics,
34 Tallinskaya Str., Moscow 123458, Russia*

² *Institute for Design Problems in Microelectronics of the Russian Academy of Sciences,
3 Sovetskaya Str., Zelenograd, Moscow 124365, Russia*

✉ Corresponding author: kpetrosyants@hse.ru

Abstract. Using TCAD modeling, the effect of changing FinFET structure parameters, such as gate stack layer sizes, rib shape, or doping levels, on the electrical characteristics of the device is investigated.

Keywords: TCAD modeling, FinFET, structure parameters

Acknowledgments: This work was supported by a joint grant from the Russian Foundation for Basic Research and the China Scientific Research Foundation (grant No. 20–57–53004).

For citation: Petrosyants K.O., Silkin D.S., Popov D.A. Evaluation of the effect of FinFET structure parameters on electrical characteristics using TCAD modeling tools *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 222–152. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-222-152>

Непрерывные работы по уменьшению размеров элементов СБИС привели к переходу в промышленном производстве от планарных MOSFET к трехмерным FinFET. Минимальный топологический размер данных приборов достигает уровня 7 нм [1, 2], в промышленном производстве активно применяются технологии 14 нм [3] и более. Сложная форма и линейные размеры порядка единиц нанометров в значительной степени затрудняют экспериментальное исследование влияния структурных параметров этих транзисторов на электрические. При этом их паразитные значения сопротивления, индуктивности и емкости, вносимые схемой измерения, могут быть сопоставимы с внутренними параметрами самого транзистора, что также вносит существенные погрешности в измерения. Поэтому большое значение при решении такого рода задач приобретает приборно–технологическое моделирование.

В рамках российско–китайского гранта была разработана TCAD–модель 8–fin FinFET с различ-

ными длинами канала и трапецеидальным ребром. Основой для модели послужили экспериментальные структуры производства Институтом микроэлектроники Китайской академии наук (IMECAS). Элементарная ячейка и сравнение смоделированных и измеренных сток–затворных ВАХ транзистора представлено на рис. 1. Погрешность модели не превышает 15 % [4].

На базе этой модели была проведена оценка влияния на электрические характеристики следующих параметров:

1. Уровень легирования ребра.
2. Уровень легирования областей сток/исток.
3. Толщины подзатворных диэлектриков.

Оценивалось влияние данных параметров на максимальный ток FinFET, крутизну характеристики, а также напряжение смещения. Анализ экспериментальных данных показал, что ток утечки при измерениях ведет себя нестабильно. Выяснить причины такого поведения и отразить их в модели

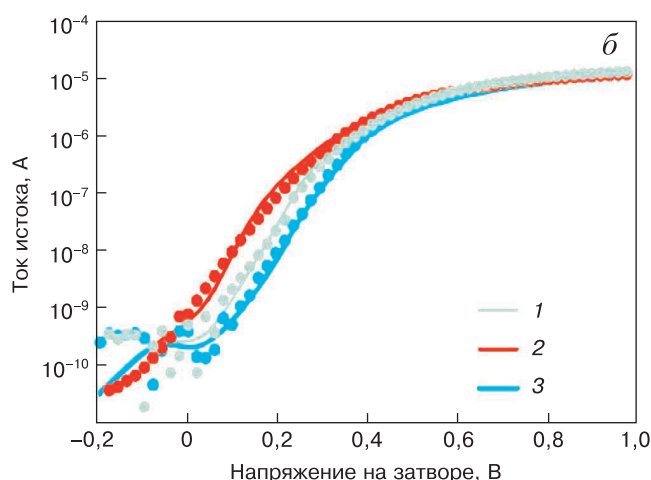
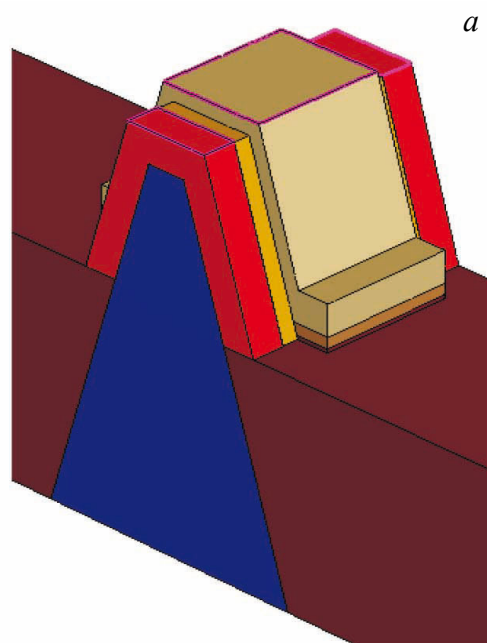


Рис. 1. Элементарная ячейка (а) и сравнение эксперимента и моделирования (б) для 8–fin FinFET с длинами канала 30 (1), 40 (2) и 60 (3) нм

Fig. 1. Unit cell (а) and comparison of experiment and simulation (б) for 8–fin FinFET with channel lengths of 30 (1), 40 (2) and 60 (3) nm

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

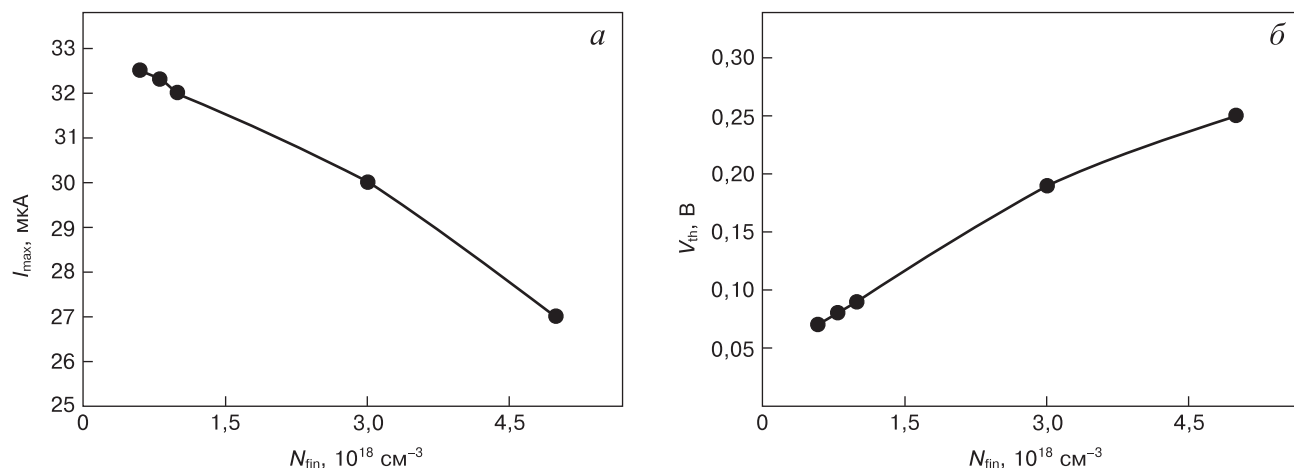


Рис. 2. Зависимость параметров FinFET от концентрации в ребре:
а — зависимость максимального тока; б — зависимость порогового напряжения

Fig. 2. Dependence of FinFET parameters on the concentration in the fin: (a) dependence of the maximum current, (b) dependence of the threshold voltage

не представляется возможным, поэтому в рамках данной работы оценка влияния параметров структуры на ток утечки не проводилась.

Результаты моделирования представлены на рис. 2 и 3.

С увеличением концентрации примеси в ребре увеличивается пороговое напряжение и уменьшается максимальный ток. Это связано с тем, что необходима более высокая концентрация неосновных

носителей для образования инверсного слоя в подзатворной области, а концентрация в полученном канале сильнее компенсируется исходной концентрацией примеси, увеличивая поверхностное сопротивление канала.

Концентрация примеси в областях сток/исток влияет лишь на максимальный ток. При этом из рис. 3, а видно, что при концентрации менее $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ зависимость становится нелинейной.

С увеличением эквивалентной толщины окисла растет пороговое напряжение и уменьшается максимальный ток. Увеличение толщины окисла при-

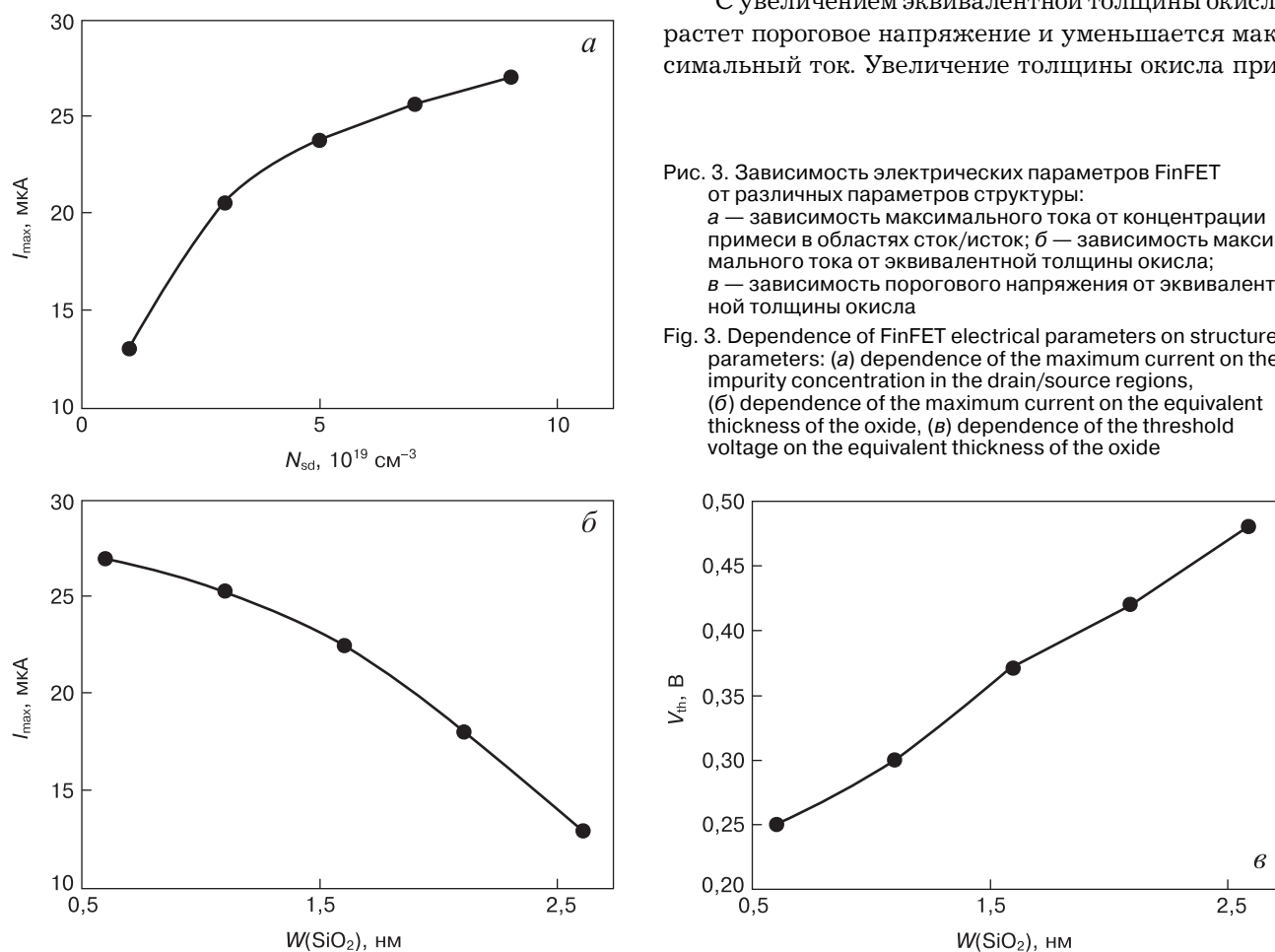


Рис. 3. Зависимость электрических параметров FinFET от различных параметров структуры:
а — зависимость максимального тока от концентрации примеси в областях сток/исток; б — зависимость максимального тока от эквивалентной толщины окисла; в — зависимость порогового напряжения от эквивалентной толщины окисла

Fig. 3. Dependence of FinFET electrical parameters on structure parameters: (a) dependence of the maximum current on the impurity concentration in the drain/source regions, (b) dependence of the maximum current on the equivalent thickness of the oxide, (c) dependence of the threshold voltage on the equivalent thickness of the oxide

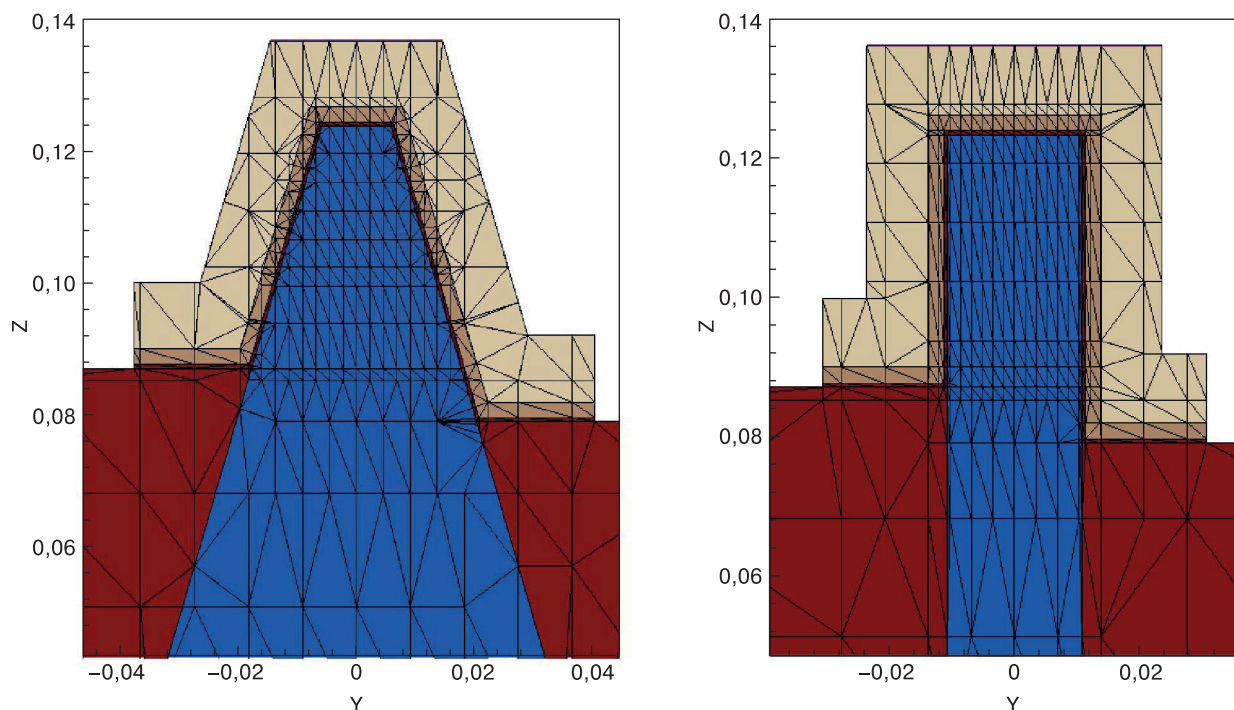


Рис. 4. Сравнимые структуры FinFET
Fig. 4. Comparable FinFET structures

водит к уменьшению емкости, а значит при том же значении напряжения на затворе в подзатворной области будет накапливаться меньший заряд и, как следствие, уменьшится концентрация носителей заряда в канале.

В целом, влияние рассмотренных параметров структуры на электропараметры аналогично тому, что можно наблюдать в традиционных MOSFET. Примечательно, что ни один из параметров не оказал влияния на крутизну характеристики.

Другим важным фактором, оказывающим влияние на параметры прибора, является форма ребра [5, 6]. Типичной является прямоугольная форма [7—10], однако встречаются также варианты [11] в форме трапеции [12—14]. Несовершенство технологии приводит к тому, что боковые грани ребра могут иметь разные размеры [15].

В рамках данной работы было рассмотрено два варианта структуры: трапецидальный и прямоугольный. Каждый вариант был смоделирован в двух исполнениях. В первом была установлена разница высот боковых стенок fin'a 8 нм (см. рис. 4), во втором разница высот отсутствовала. Размеры подбирались таким образом, чтобы высота ребра, а также его периметр оставались постоянны. Благодаря этому постоянной осталась ширина канала FinFET, а значит любые изменения значения максимального тока в модели обусловлены иными факторами.

Задействованные при расчете модели физических эффектов, сохранены без изменений. Сравнение параметров, смоделированных FinFET приведено в табл. 1.

Изменение формы fin'a на прямоугольную приводит к уменьшению порогового напряжения на 4 % по сравнению с трапецидальной моделью. Причиной является различное распределение напряженности электрического поля внутри fin'a. В прямоугольном fin'e боковые электрические поля от противоположных стенок ребра эффективнее компенсируют друг друга, тем самым уменьшая боковую составляющую электрического поля, являющуюся причиной деградации подвижности носителей заряда в полевых транзисторах. За счет этого также увеличивается и скорость переключения, из табл. 1 видно, что подпороговый наклон уменьшился на 7,5 %.

Наличие разницы высот боковых стенок fin'a приводит к изменению максимального тока, что связано с изменением ширины канала. Эти результаты согласуются с приведенными в [15].

Вместе с тем изменение формы fin'a значительно сказывается на сложности модели и длитель-

Таблица 1

Сравнение параметров FinFET
Comparison of FinFET parameters

Разница высот	SS, мВ/декада		V_{th} , мВ		I_{max} , мкА	
						
0	72	78	239	249	31	27
8 нм	72	78	239	249	28,5	25

Сравнение параметров прямоугольного FinFET с разной шириной ребра
Comparison of rectangular FinFET parameters with different fin widths

SS, мВ/декада			V_{th} , мВ			I_{max} , мкА		
10 нм	25 нм	40 нм	10 нм	25 нм	40 нм	10 нм	25 нм	40 нм
69	72	74	160	230	265	33	31	27

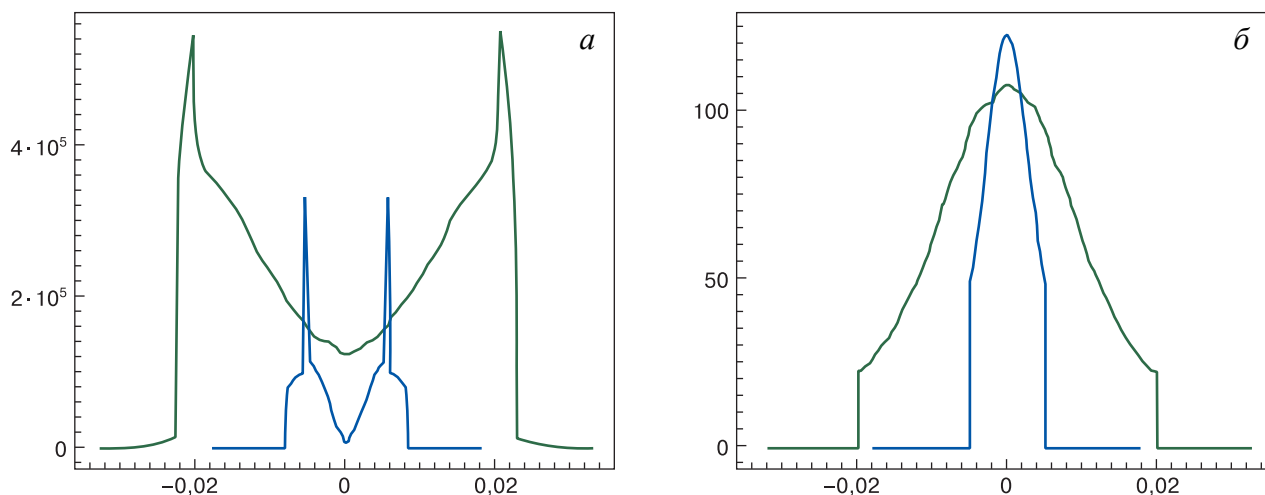


Рис. 5. Распределение напряженности электрического поля (а) и подвижности носителей заряда (б) в FinFET с разной шириной ребра

Fig. 5. Distribution of electric field strength (a) and charge carrier mobility (б) in FinFET with different edge widths

ности расчета. Количество элементов расчетной сетки для fin'a прямоугольной формы значительно сократилось: с 56000 до 32000. Время расчета уменьшилось на 50 %.

Для варианта с прямоугольным ребром без разницы высот боковых стенок снята зависимость параметров от ширины ребра. Результаты приведены в табл. 2.

Как видно из табл. 2, уменьшение ширины ребра сказывается на всех параметрах FinFET, приводит к росту максимального тока и ускоряет переключение транзистора, что также связано с компенсацией напряженности бокового электрического поля внутри ребра транзистора. Это отражено на примере прямоугольных FinFET с шириной 45 и 10 нм на рис. 5.

Таким образом, по итогам работы можно заключить, что поведение FinFET в зависимости

от параметров физической структуры, таких как концентрации легирующей примеси или толщины подзатворных диэлектриков, в целом схоже с поведением MOSFET.

Вместе с тем значительное влияние на электрические параметры этого типа транзисторов оказывает форма ребра. Уменьшение размеров, в первую очередь ширины ребра, ускоряет переключение транзистора, увеличивает максимальный ток и уменьшает пороговое напряжение.

Это связано с тем, что при уменьшении ширины ребра происходит взаимная компенсация электрических полей от боковых стенок FinFET, которые являются главной причиной уменьшения подвижности носителей заряда в канале полевого транзистора.

Библиографический список

1. Sicard E. Introducing 7-nm FinFET technology in Microwind. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01558775/document>
2. Mohammed M.U., Nizam A., Chowdhury M.H. Performance stability analysis of SRAM cells based on different FinFET devices in 7nm technology. *2018 IEEE SOI-3D-Subthreshold Microelectronics Technology Unified Conference (S3S)*. Burlingame: IEEE; 2018: 1—3. <https://doi.org/10.1109/S3S.2018.8640161>
3. Sicard E. Introducing 14-nm FinFET technology in Microwind June, 2017. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01541171/document>
4. Петросянц К.О., Силкин Д.С., Попов Д.А., Бо Ли, Сюй Чжан. TCAD-моделирование нанометровых структур FinFET на объемном кремнии с учетом воздействия радиации. *Известия высших учебных заведений. Электроника*. 2021; 26(5): 374—386. <https://doi.org/10.24151/1561-5405-2021-26-5-374-386>

5. Gaynor B.D., Hassoun S. Fin shape impact on FinFET leakage with application to multithreshold and ultralow-leakage FinFET design. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2014; 61(8): 2738—2744. <https://doi.org/10.1109/TED.2014.2331190>
6. Baravelli E., Marchi L., Speciale N. Fin shape fluctuations in FinFET: Correlation to electrical variability and impact on 6-T SRAM noise margins. *Solid-State Electronics*. 2009; 53(12): 1303—1312. <https://doi.org/10.1016/j.sse.2009.09.015>
7. Kawasaki H., Basker V.S., Yamashita T., Lin C.-H., Zhu Y., Faltermeier J., Schmitz S., Cummings J., Kanakasabapathy S., Adhikari H., Jagannathan H., Kumar A., Maitra K., Wang J., Yeh C.-C., Wang C., Khater M., Guillorn M., Fuller N., Chang J., Chang L., Muralidhar R., Yagishita A., Miller R., Ouyang Q., Zhang Y., Paruchuri V.K., Bu H., Doris B., Takayanagi M., Haensch W., McHerron D., O'Neill J., Ishimaru K. Challenges and solutions of FinFET integration in an SRAM cell and a logic circuit for 22 nm node and beyond. *2009 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*. Baltimore: IEEE; 2009: 1—4. <https://doi.org/10.1109/IEDM.2009.5424366>
8. Liu Y., Masahara M., Ishii K., Sekigawa T., Takashima H., Yamauchi H., Suzuki E. A highly threshold Voltage-controllable 4T FinFET with an 8.5-nm-thick Si-fin channel. *IEEE Electron Device Letters*. 2004; 25(7): 510—512. <https://doi.org/10.1109/LED.2004.831205>
9. Magnone P., Mercha A., Subramanian V., Parvais P., Collaert N., Dehan M., Decoutere S., Groeseneken G., Benson J., Merelle T., Lander R.J.P., Crupi F., Pace C. Matching performance of FinFET devices with fin widths down to 10 nm. *IEEE Electron Device Letters*. 2009; 30(12): 1374—1376. <https://doi.org/10.1109/LED.2009.2034117>
10. Guillorn M., Chang J., Bryant A., Fuller N., Dokumaci O., Wang X., Newbury J., Babich K., Ott J., Haran B.,

- Yu R., Lavoie C., Klaus D., Zhang Y., Sikorski E., Graham W., To B., Lofaro M., Tornello J., Koli D., Yang B., Pyzyna A., Neumeyer D., Khater M., Yagishita A., Kawasaki H., Haensch W. FinFET performance advantage at 22nm: An AC perspective. *2008 Symposium on VLSI Technology*. Honolulu, USA: IEEE; 2008: 12—13. <https://doi.org/10.1109/VLSIT.2008.4588544>
11. Wu X., Chan P.C.H., Chan M. Impacts of nonrectangular fin cross section on the electrical characteristics of FinFET. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2005; 52(1): 63—68. <https://doi.org/10.1109/TED.2004.841334>
12. Li K.-S., Chen P.-G., Lai T.-Y., Lin C.-H., Cheng C.-C., Chen C.-C., Wei Y.-J., Hou Y.-F., Liao M.-H., Lee M.-H., Chen M.-C., Sheih J.-M., Yeh W.-K., Yang F.-L., Salahuddin S., Hu C. Sub-60mV-swing negative-capacitance FinFET without hysteresis. *2015 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*. Washington, USA; 2015: 22.6.1—22.6.4. <https://doi.org/10.1109/IEDM.2015.7409760>
13. Fried D.M., Duster J.S., Kornegay K.T. Improved independent Gate N-type FinFET fabrication and characterization. *IEEE Electron Device Letters*. 2003; 24(9): 592—594. <https://doi.org/10.1109/LED.2003.815946>
14. Lin C.-H., Kambhampati R., Miller R.J., Hook T.B., Bryant A., Haensch W., Oldiges P., Lauer I., Yamashita T., Basker V., Standaert T., Rim K., Leobandung E., Bu H., Khare M. Channel doping impact on FinFETs for 22nm and beyond. *2012 Symposium on VLSI Technology (VLSIT)*. Honolulu, USA: IEEE; 2012: 15—16. <https://doi.org/10.1109/VLSIT.2012.6242438>
15. Li B., Huang Y.-B., Yang L., Zhang Q.-Z., Zheng Z.-S., Li B.-H., Zhu H.-P., Bu J.-H., Yin H.-X., Luo J.-J., Han Z.-S., Wang H.-B. Process variation dependence of total ionizing dose effects in bulk nFinFETs. *Microelectronics Reliability*. 2018; 88—90: 946—951. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2018.07.020>

References

1. Sicard E. Introducing 7-nm FinFET technology in Microwind. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01558775/document>
2. Mohammed M.U., Nizam A., Chowdhury M.H. Performance stability analysis of SRAM cells based on different FinFET devices in 7nm technology. *2018 IEEE SOI-3D-Subthreshold Microelectronics Technology Unified Conference (S3S)*. Burlingame: IEEE; 2018: 1—3. <https://doi.org/10.1109/S3S.2018.8640161>
3. Sicard E. Introducing 14-nm FinFET technology in Microwind June, 2017. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01541171/document>
4. Petrosyants K.O., Silkin D.S., Popov D.A., Li Bo, Zhang Xu. TCAD modeling of nanoscale bulk FinFET structures with account of radiation exposure. *Proceedings of Universities. Electronics*. 2021; 26(5): 374—386. (In Russ.). <https://doi.org/10.24151/1561-5405-2021-26-5-374-386>
5. Gaynor B.D., Hassoun S. Fin shape impact on FinFET leakage with application to multithreshold and ultralow-leakage FinFET design. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2014; 61(8): 2738—2744. <https://doi.org/10.1109/TED.2014.2331190>
6. Baravelli E., Marchi L., Speciale N. Fin shape fluctuations in FinFET: Correlation to electrical variability and impact on 6-T SRAM noise margins. *Solid-State Electronics*. 2009; 53(12): 1303—1312. <https://doi.org/10.1016/j.sse.2009.09.015>
7. Kawasaki H., Basker V.S., Yamashita T., Lin C.-H., Zhu Y., Faltermeier J., Schmitz S., Cummings J., Kanakasabapathy S., Adhikari H., Jagannathan H., Kumar A., Maitra K., Wang J., Yeh C.-C., Wang C., Khater M., Guillorn M., Fuller N., Chang J., Chang L., Muralidhar R., Yagishita A., Miller R., Ouyang Q., Zhang Y., Paruchuri V.K., Bu H., Doris B., Takayanagi M., Haensch W., McHerron D., O'Neill J., Ishimaru K. Challenges and solutions of FinFET integration in an SRAM cell and a logic circuit for 22 nm node and beyond. *2009 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*. Baltimore: IEEE; 2009: 1—4. <https://doi.org/10.1109/IEDM.2009.5424366>
8. Liu Y., Masahara M., Ishii K., Sekigawa T., Takashima H., Yamauchi H., Suzuki E. A highly threshold Voltage-controllable 4T FinFET with an 8.5-nm-thick Si-fin channel. *IEEE Electron Device Letters*. 2004; 25(7): 510—512. <https://doi.org/10.1109/LED.2004.831205>
9. Magnone P., Mercha A., Subramanian V., Parvais P., Collaert N., Dehan M., Decoutere S., Groeseneken G., Benson J., Merelle T., Lander R.J.P., Crupi F., Pace C. Matching performance of FinFET devices with fin widths down to 10 nm. *IEEE Electron Device Letters*. 2009; 30(12): 1374—1376. <https://doi.org/10.1109/LED.2009.2034117>
10. Guillorn M., Chang J., Bryant A., Fuller N., Dokumaci O., Wang X., Newbury J., Babich K., Ott J., Haran B., Yu R., Lavoie C., Klaus D., Zhang Y., Sikorski E., Graham W., To B., Lofaro M., Tornello J., Koli D., Yang B., Pyzyna A., Neu-

meyer D., Khater M., Yagishita A., Kawasaki H., Haensch W. FinFET performance advantage at 22nm: An AC perspective. *2008 Symposium on VLSI Technology*. Honolulu, USA: IEEE; 2008: 12—13. <https://doi.org/10.1109/VLSIT.2008.4588544>

11. Wu X., Chan P.C.H., Chan M. Impacts of nonrectangular fin cross section on the electrical characteristics of FinFET. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2005; 52(1): 63—68. <https://doi.org/10.1109/TED.2004.841334>

12. Li K.-S., Chen P.-G., Lai T.-Y., Lin C.-H., Cheng C.-C., Chen C.-C., Wei Y.-J., Hou Y.-F., Liao M.-H., Lee M.-H., Chen M.-C., Sheih J.-M., Yeh W.-K., Yang F.-L., Salahuddin S., Hu C. Sub-60mV-swing negative-capacitance FinFET without hysteresis. *2015 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*. Washington, USA; 2015: 22.6.1—22.6.4. <https://doi.org/10.1109/IEDM.2015.7409760>

13. Fried D.M., Duster J.S., Kornegay K.T. Improved independent Gate N-type FinFET fabrication and charac-

terization. *IEEE Electron Device Letters*. 2003; 24(9): 592—594. <https://doi.org/10.1109/LED.2003.815946>

14. Lin C.-H., Kambhampati R., Miller R.J., Hook T.B., Bryant A., Haensch W., Oldiges P., Lauer I., Yamashita T., Basker V., Standaert T., Rim K., Leobandung E., Bu H., Khare M. Channel doping impact on FinFETs for 22nm and beyond. *2012 Symposium on VLSI Technology (VLSIT)*. Honolulu, USA: IEEE; 2012: 15—16. <https://doi.org/10.1109/VLSIT.2012.6242438>

15. Li B., Huang Y.-B., Yang L., Zhang Q.-Z., Zheng Z.-S., Li B.-H., Zhu H.-P., Bu J.-H., Yin H.-X., Luo J.-J., Han Z.-S., Wang H.-B. Process variation dependence of total ionizing dose effects in bulk nFinFETs. *Microelectronics Reliability*. 2018; 88–90: 946—951. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2018.07.020>

Информация об авторах / Information about the authors

Петросянц Константин Орестович — доктор техн. наук, профессор, профессор-исследователь, Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», ул. Таллинская, д. 34, Москва, 123458, Россия; Институт проблем проектирования в микроэлектронике Российской академии наук, ул. Советская, д. 3, Зеленоград, Москва, 124365, Россия; <https://orcid.org/0000-0001-7969-4786>; e-mail: kpetrosyants@hse.ru

Силкин Денис Сергеевич — канд. техн. наук, научный сотрудник, Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», ул. Таллинская, д. 34, Москва, 123458, Россия; <https://orcid.org/0000-0001-8541-9422>; e-mail: dsilkin@hse.ru

Попов Дмитрий Александрович — канд. техн. наук, доцент, Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», ул. Таллинская, д. 34, Москва, 123458, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-4972-3280>; e-mail: da.popov@hse.ru

Konstantin O. Petrosyants — Dr. Sci. (Eng.), Professor, Professor-Researcher, HSE Tikhonov Moscow Institute of Electronics and Mathematics, 34 Tallinskaya Str., Moscow 123458, Russia; Institute for Design Problems in Microelectronics of the Russian Academy of Sciences, 3 Sovetskaya Str., Zelenograd, Moscow 124365, Russia; <https://orcid.org/0000-0001-7969-4786>; e-mail: kpetrosyants@hse.ru

Denis S. Silkin — Cand. Sci. (Eng.), Researcher, HSE Tikhonov Moscow Institute of Electronics and Mathematics, 34 Tallinskaya Str., Moscow 123458, Russia; <https://orcid.org/0000-0001-8541-9422>; e-mail: dsilkin@hse.ru

Dmitriy A. Popov — Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, HSE Tikhonov Moscow Institute of Electronics and Mathematics, 34 Tallinskaya Str., Moscow 123458, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-4972-3280>; e-mail: da.popov@hse.ru

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 11.01.2022; принята к публикации 21.01.2022
Received 24 December 2021; Revised 11 January 2022; Accepted 21 January 2022

УДК 621.382:004.052.2

Сравнение сбоеустойчивых синхронных и самосинхронных схем

© 2021 г. А. А. Зацаринный¹, Ю. А. Степченков^{1,✉}, Ю. Г. Дьяченко¹,
Ю. В. Рождественский¹

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

✉ Автор для переписки: YStepchenkov@ipiran.ru

Аннотация. Статья рассматривает проблему разработки синхронных и самосинхронных (СС) цифровых схем, устойчивых к логическим сбоям. В синхронных схемах для обеспечения устойчивости к однократному сбою традиционно используется принцип голосования 2–из–3, приводящий к увеличению аппаратных затрат в три раза. В СС–схемах, благодаря парафазному кодированию сигналов и двухфазной дисциплине функционирования, даже дублирование обеспечивает уровень защиты от логического сбоя в 2,1—3,5 раз выше, чем троированный синхронный аналог. Разработка новых средств высокоточного моделирования механизмов возникновения сбоев в микроэлектронных компонентах позволит получить более точные оценки сбоеустойчивости электронных схем.

Ключевые слова: синхронная схема, самосинхронная схема, логический сбой, сбоеустойчивость, троирование, дублирование, надежность

Благодарность: Работа выполнена в рамках государственного задания № 0063–2019–0010.

Для цитирования: Зацаринный А.А., Степченков Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Рождественский Ю.В. Сравнение сбоеустойчивых синхронных и самосинхронных схем. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 229—233. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-229-233>

Failure–tolerant synchronous and self–timed circuits comparison

A. A. Zatsarinny¹, Yu. A. Stepchenkov^{1,✉}, Yu. G. Diachenko¹, Yu. V. Rogdestvenski¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control”
of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia*

✉ Автор для переписки: YStepchenkov@ipiran.ru

Abstract. The article considers the problem of developing synchronous and self–timed (ST) digital circuits that are tolerant to soft errors. Synchronous circuits traditionally use the 2–of–3 voting principle

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

to ensure single failure, resulting in three times the hardware costs. In ST circuits, due to dual-rail signal coding and two-phase control, even duplication provides a soft error tolerance level 2.1 to 3.5 times higher than the triple modular redundant synchronous counterpart. The development of new high-precision software simulating microelectronic failure mechanisms will provide more accurate estimates for the electronic circuits' failure tolerance.

Keywords: synchronous circuit, self-timed circuit, soft error, failure tolerance, triple modular redundancy, duplication, reliability

Acknowledgment: The work was carried out within the framework of the state assignment No. 0063–2019–0010.

For citation: Zatsarinny A.A., Stepchenkov Yu.A., Diachenko Yu.G., Rogdestvenski Yu.V. Failure-tolerant synchronous and self-timed circuits comparison. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki* = *Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 229–233. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-229-233>

Введение

Маскирование логических сбоев, возникающих из-за воздействия ядерных частиц, электромагнитных импульсов, шумовых наводок и других причин, является важной задачей при решении проблемы надежности электронной аппаратуры. Под сбоем понимается изменение логического состояния выхода элемента, вызванное одиночным событием, не приводящим к выходу из строя его активных компонентов [1].

Обнаружение и маскирование сбоя в синхронных схемах обеспечивается с помощью сбоеустойчивых кодов [2] или одновременной обработки входных данных несколькими параллельными идентичными устройствами с последующим выбором (голосованием) правильного результата [3]. Сбоеустойчивый код рассчитан на парирование ограниченного подмножества сбоев из всех возможных. С увеличением плотности размещения транзисторов на площади микросхемы целесообразность его применения уменьшается из-за появления множественных сбоев при воздействии одиночной причины, на которые данный реализованный код не был рассчитан.

Принцип голосования обеспечивает надежное маскирование любого количества сбоев, возникших в минорном подмножестве каналов. Обычно применяется принцип «2-из-3» [3], который гарантирует надежную работу схемы в условиях, когда в каждый момент времени наблюдается не более одного логического сбоя. При большей интенсивности сбоев существует вероятность одновременного сбоя в двух и более каналах из трех, ведущего к критической ошибке.

Безусловным преимуществом троированной схемы является принятие решения «на лету» и продолжение корректной работы при однократном логическом сбое в любом канале. Она также обеспечивает защиту от множественного сбоя в одном канале.

Самосинхронные (СС) цифровые схемы [4], благодаря двухфазному режиму работы и контролю завершения переключения схемы в текущую фазу, характеризуются не только независимостью поведения от задержек элементов, но и более высокой естественной устойчивостью к логическим сбоям [5–6], чем их синхронные аналоги. В работе [7] были предложены методы повышения уровня сбоеустойчивости СС-схем, которые, однако, не обеспечивают полной защиты от сбоев.

Данная статья посвящена исследованию возможностей и способов построения стопроцентных сбоеустойчивых СС-схем и их сравнению с синхронными аналогами.

Обеспечение сбоеустойчивости СС-схем

Основным преимуществом действительно СС-схем является функциональная корректность их работы при любых задержках формирования и распространения внутренних и выходных сигналов за счет контроля завершения переключения всех элементов схемы в очередную фазу работы. Уменьшение напряжения питания и/или повышение окружающей температуры замедляет работу СС-схемы, но не нарушает корректности выполняемого ею алгоритма обработки данных. Свойство независимости от задержек элементов позволяет не ориентироваться на наихудший случай и обеспечивает временную приостановку работы СС-схемы до окончания сбоя в случае его обнаружения. Но классическая СС-схема обнаруживает не все типы сбоев.

Самый простой способ обеспечения маскирования СС-схемой всех сбоев — ее дублирование [8], изображенное на рисунке. Два идентичных канала обрабатывают один набор входных данных D_{in} . Их информационные выходы D_1 и D_2 сравниваются в схеме голосования «1-из-2» с целью выбора корректного результата D_{out} . При бессбойной работе на выход D_{out} передается выход D_1 канала-1. Индика-

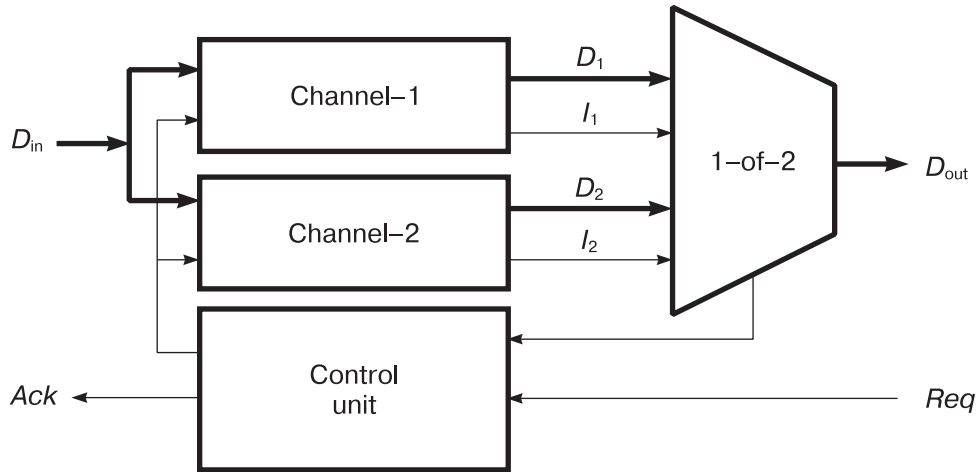


Рисунок. Сбоеустойчивая СС-схема
Figure. Fault-tolerant self-timed circuit

торные выходы каналов I_1 и I_2 служат признаками готовности выходов каналов. Вход Req разрешает переключение данной СС-схемы в следующую фазу функционирования, а выход Ack подтверждает успешное завершение переключения данной СС-схемы в текущую фазу.

Соответствующее топологическое проектирование СС-схемы обеспечивает защиту от сбоев типа «некорректное рабочее состояние» [6]. Тогда поразрядное сравнение выходов D_1 и D_2 гарантирует обнаружение сбоя как состояния, не соответствующего текущей фазе работы СС-схемы.

Дублированная СС-схема имеет два источника, которые в паре могут служить признаком корректности результата: два набора информационных выходов и два индикаторных выхода. Если они попарно совпадают, значит, обе половины схемы находятся в одном состоянии. В противном случае либо переключение какого-то канала еще не завершилось, либо где-то случился логический сбой.

Сравним вероятности появления логического сбоя в синхронной и СС-схеме, считая, что вероятность сбоя прямо пропорциональна площади топологической реализации схемы, а значит, и числу транзисторов в ней.

Сравнение обычных схем

Интенсивность сбоев λ в обычной схеме, не использующей принципа голосования, можно оценить по формуле [3]:

$$\lambda = N\lambda_0\alpha,$$

где N — число транзисторов в схеме; λ_0 — плотность потока случайных воздействий (число воздействий в единицу времени), инициирующих сбой в одном транзисторе; α — вероятность сбоя при повреждении одного транзистора. Тогда отношение интенсив-

ностей K_I сбоев синхронной схемы и ее СС-аналога будет иметь вид:

$$K_I = \frac{\lambda_S}{\lambda_{ST}} = \frac{N_S\lambda_0\alpha_S}{N_{ST}\lambda_0\alpha_{ST}} = \frac{N_S\alpha_S}{N_{ST}\alpha_{ST}} = \frac{\alpha_S}{A_R\alpha_{ST}}, \quad (1)$$

где λ_S — интенсивность сбоев синхронной схемы; λ_{ST} — интенсивность сбоев СС-схемы; N_S — число транзисторов синхронной схемы; N_{ST} — число транзисторов СС-схемы; α_S — вероятность сбоя при повреждении одного транзистора синхронной схемы; α_{ST} — вероятность сбоя при повреждении одного транзистора СС-схемы; $A_R = N_{ST}/N_S$ — коэффициент избыточности аппаратуры СС-схемы по отношению к синхронной схеме.

Примем во внимание соотношение числа транзисторов синхронного и СС-аналога в комбинационных схемах в наихудшем случае $A_{R_C} = 2,7$ (из практики реализации комбинационных СС-схем разного типа), вероятности проявления сбоя $\alpha_{S1} = 0,5$ и $\alpha_{ST1} = 0,156$ [9]. Столь малая вероятность сбоя в СС-схеме обусловлена полнотой предложенного в [6] парафазного кодирования информационных сигналов, когда состояние, противоположное спейсеру, не считается запрещенным, но индицируется как спейсер. Тогда для комбинационных синхронной и СС-схем:

$$K_{I_C} = \frac{\alpha_{S1}}{A_{R_C}\alpha_{ST1}} = \frac{0,5}{2,7 \cdot 0,156} = 1,19. \quad (2)$$

Для триггерных схем соотношение числа транзисторов синхронного и СС-аналога равно $A_{R_S} = 1,5$ в наихудшем случае, как показывает сравнение их схемотехнических реализаций, вероятности проявления сбоя $\alpha_{S2} = 0,5$ и $\alpha_{ST2} = 0,17$ [10]. Тогда:

$$K_{I_S} = \frac{\alpha_{S2}}{A_{R_S}\alpha_{ST2}} = \frac{0,5}{1,5 \cdot 0,17} = 1,96. \quad (3)$$

Формулы (1)—(3) наглядно демонстрируют лучшую сбоеустойчивость СС-схем по сравнению с синхронными аналогами даже несмотря на их аппаратную избыточность.

Сравнение сбоеустойчивых схем

Оценим время бессбойной работы для сбоеустойчивых вариантов троированной синхронной и дублированной СС-схем. В синхронной схеме результат считается правильным, если он совпадает хотя бы у двух из трех блоков. Вероятность бессбойной работы $R_{M\text{-of-}N}(t)$ для N одинаковых блоков до тех пор, пока как минимум M из них работают без сбоя, описывается уравнением [3]:

$$R_{M\text{-of-}N}(t) = \sum_{i=0}^{N-M} \left\{ \frac{N!}{i!(N-i)!} [1-R(t)]^i R(t)^{N-i} \right\},$$

где $R(t)$ — вероятность бессбойной работы одного блока.

Тогда в случае синхронной схемы с мажоритированием ($N = 3$, $M = 2$) время бессбойной работы T_{FF-T} составит [3]:

$$\begin{aligned} T_{FF-T} &= \int_0^{\infty} R_{2\text{-of-}3}(t) dt = \\ &= \int_0^{\infty} [3R(t)^2 - 2R(t)^3] dt = \frac{5}{6\lambda_S}. \end{aligned}$$

В дублированной СС-схеме $N = 2$, $M = 1$. Тогда время ее бессбойной работы:

$$\begin{aligned} T_{FF-D} &= \int_0^{\infty} R_{1\text{-of-}2}(t) dt = \\ &= \int_0^{\infty} [2R(t) - R(t)^2] dt = \frac{3}{2\lambda_{ST}}. \end{aligned}$$

С учетом формул (1)—(3), отношение времени бессбойной работы дублированной СС-схемы и

мажоритарного варианта ее синхронного аналога составит:

$$K_{TC} = \frac{T_{FF-D}}{T_{FF-T}} = \frac{3 \cdot 6 \cdot \lambda_S}{5 \cdot 2 \cdot \lambda_{ST}},$$

или $K_{TC} = 2,14$ для комбинационных схем и $K_{TS} = 3,53$ для триггерных схем.

Таким образом, за счет присущего им маскирования одиночных логических сбоев СС-схемы в случае дублирования аппаратуры обеспечивают время бессбойной работы от 2,1 до 3,5 раз больше, чем их синхронные аналоги, реализующие принцип троирования с мажоритированием результата. При этом в 1,5 раза уменьшается их избыточность по отношению к синхронному аналогу. Поэтому они являются перспективной альтернативой синхронным схемам для проектирования высоконадежных микроэлектронных устройств.

Приведенные оценки вероятностей проявления сбоя α_S и α_{ST} получены эвристическим путем в предположении, что все ветви в «дереве» событий, порождаемом причиной логического сбоя, имеют равную вероятность наблюдения. Повысить точность оценок можно только на основе программных средств моделирования механизмов возникновения сбоев в микроэлектронных компонентах.

Заключение

1. Синхронные схемы с голосованием типа « N -из- M » не обеспечивают защиту от часто повторяющихся одиночных и множественных сбоев.
2. В первом приближении дублированная СС-схема обладает в 2,1—3,5 раза лучшей устойчивостью к сбоям, чем троированный синхронный аналог.
3. Разработка новых программных средств моделирования механизмов возникновения сбоев в микроэлектронных компонентах позволит получить более точные оценки сбоеустойчивости электронных схем и разработать более эффективные сбоеустойчивые решения.

Библиографический список

1. Викторова В.С., Лубков Н.В., Степанянц А.С. Анализ надежности отказоустойчивых управляющих вычислительных систем. М.: Институт проблем управления РАН; 2016. 117 с. https://www.ipu.ru/sites/default/files/card_file/VLS.pdf (дата обращения: 08.06.2021).
2. Alagoz B.B. Boolean Logic with Fault Tolerant Coding. *OncuBilim Algorithm and Systems Labs*. 2009. V. 09, Art. No 03.
3. Dubrova E. Fault-tolerant design. KTH Royal Institute of Technology, Krista, Sweden, 2013, Springer, 185 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-2113-9>
4. Zakharov V., Stepchenkov Y., Diachenko Y., Rogdestvenski Y., Self-Timed Circuitry Retrospective. *International Conference Engineering Technologies and Computer Science EnT*. Moscow (Russia), 24–27 June 2020, pp. 58—64.
5. Stepchenkov Y.A., Kamenskih A.N., Diachenko Y.G., Rogdestvenski Y.V., Diachenko D.Y. Fault-tolerance of self-timed circuits. *10th International Conference on Dependable Systems, Services, and Technologies (DESSERT)*, 2019. <https://doi.org/10.1109/DESSERT.2019.8770047>
6. Stepchenkov Y.A., Kamenskih A.N., Diachenko Y.G., Rogdestvenski Y.V., Diachenko D.Y. Improvement of the natural self-timed circuit tolerance to short-term soft errors. *Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal*. 2020; 5(2): 44—56. <https://doi.org/10.25046/aj050206>
7. Зацаринный А.А., Степченков Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Рождественский Ю.В. Самосинхронные схемы как база создания высоконадежных высокопроизводительных компьютеров следующего поколения. *Материалы II Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных ком-*

понентов» (МММЭК–2020). 19–20 октября 2020, Москва. М.: МАКС Пресс; 2020: 114—116. <https://doi.org/10.29003/m1535.MMMSEC-2020/114-116>

8. Monnet Y., Renaudin M., Leveugle R. Hardening techniques against transient faults for asynchronous circuits. *11th IEEE International Conference: On-Line Testing Symposium*, 2005. <https://doi.org/10.1109/IOLTS.2005.30>

9. Степченко Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Рождественский Ю.В., Морозов Н.В., Степченко Д.Ю., Дьяченко Д.Ю. Устойчивость самосинхронного конвейера к логическим сбоям в комбинационной части. *Системы и средства информатики*. 2020; (3(30)): 49—55. <https://doi.org/10.14357/08696527200305>; <http://selftiming.ru/new/2020/12/07/ustojchivost-samosinhronnogo-konveyera-k-logicheskim-sboyam-v-kombinacziionnoj-chasti> (дата обращения: 08.06.2021).

10. Соколов И.А., Степченко Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Рождественский Ю.В. Повышение сбоеустойчивости самосинхронных схем. *Информатика и ее применения*. 2020; 14(4): 63—68. <https://doi.org/10.14357/19922264200409>; <http://selftiming.ru/new/2021/02/01/povyshenie-sboeustojchivosti-samosinhronnyh-shem> (дата обращения: 08.06.2021).

References

1. Viktorova V.S., Lubkov N.V., Stepanyants A.S. Reliability analysis of fault-tolerant control computing systems. Moscow: Institute for Control Problems of the Russian Academy of Sciences; 2016. 117 p. (In Russ.). https://www.wipu.ru/sites/default/files/card_file/VLS.pdf (accessed: 08.06.2021).

2. Alagoz B.B. Boolean Logic with Fault Tolerant Coding. *OncuBilim Algorithm and Systems Labs*. 2009. V. 09, Art. No 03.

3. Dubrova E. Fault-tolerant design. KTH Royal Institute of Technology, Krista, Sweden, 2013, Springer, 185 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-2113-9>

4. Zakharov V., Stepchenkov Y., Diachenko Y., Rogdestvenski Y. Self-Timed Circuitry Retrospective. *International Conference Engineering Technologies and Computer Science EnT*. Moscow (Russia), 24–27 June 2020, pp. 58—64.

5. Stepchenkov Y.A., Kamenskih A.N., Diachenko Y.G., Rogdestvenski Y.V., Diachenko D.Y. Fault-tolerance of self-timed circuits. *10th International Conference on Dependable Systems, Services, and Technologies (DESSERT)*, 2019. <https://doi.org/10.1109/DESSERT.2019.8770047>

6. Stepchenkov Y.A., Kamenskih A.N., Diachenko Y.G., Rogdestvenski Y.V., Diachenko D.Y. Improvement of the natural self-timed circuit tolerance to short-term soft errors. *Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal*. 2020; 5(2): 44—56. <https://doi.org/10.25046/aj050206>

7. Zatsarinny A.A., Stepchenkov Yu.A., Diachenko Yu.G., Rogdestvenski Yu.V. Self-timed circuits as a basis for developing next generation high-reliable high-performance computers. *Proceedings of the international conference “Mathematical modeling in materials science of electronic components” (ICM3SEC–2020). October 19–20, 2020, Moscow*. Moscow: MAKS Press; 2020: 114—116. (In Russ.). <https://doi.org/10.29003/m1535.MMMSEC-2020/114-116>

8. Monnet Y., Renaudin M., Leveugle R. Hardening techniques against transient faults for asynchronous circuits. *11th IEEE International Conference: On-Line Testing Symposium*, 2005. <https://doi.org/10.1109/IOLTS.2005.30>

9. Stepchenkov Yu.A., Diachenko Yu.G., Rogdestvenski Yu.V., Morozov N.V., Stepchenkov D.Yu., Diachenko D.Yu. Self-timed pipeline immunity to soft errors in its combinational part. *Systems and Means of Informatics*. 2020; (3(30)): 49—55. (In Russ.). <https://doi.org/10.14357/08696527200305>; <http://selftiming.ru/new/2020/12/07/ustojchivost-samosinhronnogo-konveyera-k-logicheskim-sboyam-v-kombinacziionnoj-chasti> (accessed: 08.06.2021).

10. Sokolov I.A., Stepchenkov Yu.A., Diachenko Yu.G., Rogdestvenski Yu.V. Improvement of self-timed circuit soft error tolerance. *Informatics and Applications*. 2020; 14(4): 63—68. (In Russ.). <https://doi.org/10.14357/19922264200409>; <http://selftiming.ru/new/2021/02/01/povyshenie-sboeustojchivosti-samosinhronnyh-shem> (accessed: 08.06.2021).

Информация об авторах / Information about the authors

Зацаринный Александр Алексеевич — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, заместитель директора, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>; e-mail: AZatsarinny@ipiran.ru

Степченко Юрий Афанасьевич — канд. техн. наук, заведующий отделом, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; <https://orcid.org/0000-0003-4784-7519>; e-mail: YStepchenkov@ipiran.ru

Дьяченко Юрий Георгиевич — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; <https://orcid.org/0000-0003-0212-4931>; e-mail: diaura@mail.ru

Рождественский Юрий Владимирович — канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; e-mail: YRogdest@ipiran.ru

Alexander A. Zatsarinny — Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>; e-mail: AZatsarinny@ipiran.ru

Yury A. Stepchenkov — Cand. Sci. (Eng.), Department Head, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; <https://orcid.org/0000-0003-4784-7519>; e-mail: YStepchenkov@ipiran.ru

Yury G. Diachenko — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; <https://orcid.org/0000-0003-0212-4931>; e-mail: diaura@mail.ru

Yury V. Rogdestvenski — Cand. Sci. (Eng.), Leading Researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; e-mail: YRogdest@ipiran.ru

УДК 621.315:004.94

Температурные исследования полевых датчиков Холла на основе наноразмерных гетероструктур «кремний на изоляторе»

© 2021 г. К. К. Абгарян¹✉, А. В. Леонов², Д. Л. Ревизников¹

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

² *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов
Российской академии наук, ул. Осипьяна, д. 6, Черноголовка, 142432, Россия*

✉ Автор для переписки: kristal83@mail.ru

Аннотация. Микроэлектроника относится к числу отраслей промышленности, которые в последние десятилетия развиваются рекордно быстрыми темпами. Важнейшую роль в развитии цифровой экономики играет разработка и организация производства нового поколения микроэлектронных датчиков внешних воздействий и микросистем на их основе. В связи с необходимостью эксплуатации таких устройств в различных условиях, включая широкие температурные интервалы, определение диапазонов их надежной работы является актуальной задачей. Тепловые исследования проводились с применением построенной ранее двухуровневой математической модели полевого датчика Холла (ПДХ) на основе гетероструктуры «кремний на изоляторе» (КНИ). Представлены результаты расчетных и экспериментальных исследований влияния температуры на характеристики ПДХ КНИ. Показана возможность функционирования датчика в широком диапазоне температур. Проведена параметрическая идентификация разработанной авторами математической модели по экспериментальным данным. Определена функция чувствительности электрического тока к изменению температуры. Предложенный подход позволяет оценить требуемую чувствительность датчика для определения температуры с заданной точностью.

Ключевые слова: полевой датчик Холла, кремний на изоляторе, гетероструктура, математическое моделирование

Для цитирования: Абгарян К.К., Леонов А.В., Ревизников Д.Л. Температурные исследования полевых датчиков Холла на основе наноразмерных гетероструктур «кремний на изоляторе». *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 234—241. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-234-241>

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Temperature studies of Hall field sensors based on nanosized silicon–on–insulator heterostructures

K. K. Abgaryan¹✉, A. V. Leonov², D. L. Reviznikov¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control”
of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia*

² *Institute of Microelectronics Technology and High-Purity Materials of the Russian Academy
of Sciences, 6 Academician Ossipyan Str., Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia*

✉ Corresponding author: kristal83@mail.ru

Abstract. Microelectronics is one of the industries that have been developing at a record pace in recent decades. The most important role in the development of the digital economy is played by the development and organization of the production of a new generation of microelectronic sensors of external influences and microsystems based on them. Due to the need to operate such devices under various conditions, including wide temperature ranges, determining the ranges of their reliable operation is an urgent task. Thermal studies are carried out using the previously constructed two-level mathematical model of a Hall field sensor (HFS) based on a silicon–on–insulator (SOI) heterostructure. The results of computational and experimental studies of the influence of temperature on the characteristics of the SOI HFS are presented. The possibility of operation of the sensor in a wide temperature range is shown. Parametric identification of the mathematical model developed by the authors based on the experimental data is carried out. The sensitivity function of the electric current to temperature change is determined. The proposed approach makes it possible to estimate the required sensitivity of the sensor to determine the temperature with the given accuracy.

Keywords: Hall field sensor, silicon–on–insulator, heterostructure, mathematical modeling

For citation: Abgaryan K.K., Leonov A.V., Reviznikov D.L. Temperature studies of Hall field sensors based on nanosized silicon–on–insulator heterostructures. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki* = *Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 234–241. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-234-241>

Введение

Работа продолжает цикл исследований авторов по моделированию полупроводниковых гетероструктур [1–4]. Развивается разработанная ранее двухуровневая математическая модель полевого датчика Холла (ПДХ) на основе гетероструктуры «кремний на изоляторе» (КНИ) [5].

На сегодняшний день классические датчики Холла на основе кремния практически достигли своих предельных параметров, таких как пороговая чувствительность, рабочая температура, диапазон рабочих частот, радиационная стойкость. В то же время развитие сенсорной техники, которое продолжается ускоренными темпами [6–8], требует повышения характеристик магнитосенсоров. Решение этой проблемы может осуществляться путем использования для создания датчиков Холла новых КНИ-структур [6–13]. Такие структуры представляют собой трехслойную систему, в которой тонкий рабочий слой кремния отделен от подложки слоем диэлектрика. КНИ-технология позволяет улуч-

шить свойства датчиков Холла, поскольку она дает возможность трансформировать традиционный датчика Холла, являющийся пассивным элементом резистивного типа, в активный элемент транзисторного типа. Это обусловлено тем, что скрытый диэлектрик КНИ-структуры и Si-подложка могут быть использованы в системе «металл–диэлектрик–полупроводник» (МДП), позволяющей управлять проводимостью кремниевого слоя с помощью полевого эффекта.

Одним из важных достоинств ПДХ, изготовленного на КНИ-структуре, является возможность его работы в широком диапазоне рабочих температур. Физически это обусловлено тем, что в отличие от стандартных кремниевых датчиков Холла [14], где рабочая область отделена от подложки p – n -переходом, в ПДХ КНИ рабочая область расположена на слое диэлектрика (SiO_2), скрытого в кремниевой пластине. С ростом температуры в стандартном датчике начинается утечка тока через p – n -переход, поэтому максимальная рабочая температура таких датчиков обычно не превосхо-

дит 423 К. В то же время в ПДХ КНИ диэлектрик структуры надежно подавляет утечку носителей заряда из подложки. Причиной, ограничивающей рабочую температуру, является лишь термогенерация электронов и дырок непосредственно в рабочем теле элемента. Наличие диэлектрического слоя в КНИ-структуре, который препятствует утечке тока в подложку, позволяет ПДХ работать в диапазоне от гелиевых (криогенных) температур до температур порядка 600 К [15, 16].

Ранее авторами была разработана двухуровневая локально-одномерная вычислительная модель для расчета полевых датчиков Холла на основе КНИ-структуры с двумя управляющими затворами [5]. На первом уровне решается серия одномерных уравнений Шредингера—Пуассона, описывающих распределение плотности носителей заряда поперек гетероструктуры в различных сечениях. Полученная информация передается на второй уровень, где осуществляется расчет токовых характеристик элемента.

Ниже рассмотрены вопросы параметрической идентификации двухуровневой модели по экспериментальным данным в широком диапазоне температур.

Математическая модель

Полевой датчик Холла представляет собой гетерогенную структуру, состоящую из двух слоев диэлектрика, между которыми расположен слой легированного кремния, образующий проводящий канал. На боковых гранях канала расположены два омических контакта (1, 2) для измерения ЭДС Холла. Подробное описание ПДХ дано в работах [5, 10]. Структурная схема датчика представлена на рис. 1.

С точки зрения математического моделирования можно выделить три основных составляющих:

- расчет распределения плотности заряда в гетероструктуре;
- расчет подвижности носителей заряда;
- расчет электрического тока в проводящем канале.

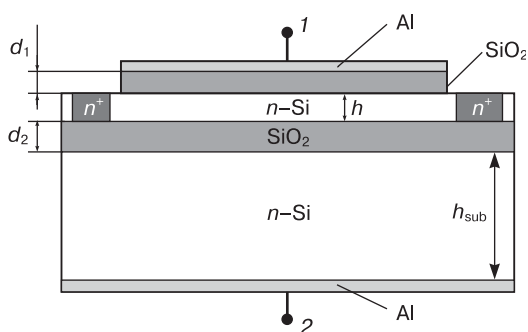


Рис. 1. Структурная схема полевого датчика Холла (ПДХ)
Fig. 1. Structural diagram of the Hall field sensor (HFS)

Соответствующая математическая модель подробно описана в работе [5]. Здесь приведем основные уравнения модели.

Модель, описывающая распределения плотности заряда поперек гетероструктуры, представляет собой систему уравнений Шредингера и Пуассона:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz} \right) + V(z)\psi(z) = E\psi(z); \quad (1)$$

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d\phi}{dz} \right) = -e(N_d(z) - N_a(z) - n(z)); \quad (2)$$

$$V(z) = -e\phi(z) + \Delta E_c(z); \quad (3)$$

$$n(z) = \sum_i [\psi_i(z)]^2 n_i(z); \quad (4)$$

$$n_i(z) = k_B T \frac{m^*(z)}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right]. \quad (5)$$

Здесь E_i , $\psi_i(z)$ — энергетические уровни и соответствующие им волновые функции; $n(z)$ — электронная плотность; $\hbar$ — постоянная Планка; e — заряд электрона; m^* — эффективная масса электрона; E_F — положение уровня Ферми; $\phi(z)$ — электростатический потенциал; ε — диэлектрическая постоянная материала; ΔE_c — сдвиг зоны проводимости материала; k_B — постоянная Больцмана; T — температура. Функция $u(z)$ описывает распределение легирующих примесей в системе, $N_d(z)$, $N_a(z)$ — концентрации донорной и акцепторной примесей.

На границах системы ($z = 0$, $z = H$, где H — общая толщина слоистой структуры) задаются условия равенства нулю волновых функций:

$$\psi(0) = 0; \psi(H) = 0. \quad (6)$$

Граничные условия для уравнения Пуассона имеют вид

$$\phi(0) = \phi_{b0} + \phi_{g0}; \phi(H) = \phi_{bH} + \phi_{gH}. \quad (7)$$

Здесь ϕ_b — потенциальный барьер в приконтактном слое, граничащим с затвором; ϕ_g — смещение потенциала вследствие приложенного напряжения на затворе.

Подробное описание алгоритмов решения задачи (1)–(7) дано в работах [1–3].

Выражение для расчета электрического тока в проводящем канале записывается следующим образом [17]:

$$I_D = \frac{eW}{L} \int_{u_s}^{u_d} \mu(u) N(u) du, \quad (8)$$

где L , W — длина и ширина кремниевых каналов соответственно; $u = v_g - v$; v_g — значение потенциала на затворе; v — текущее значение потенциала в ка-

нале; v_d — потенциал стока; v_s — потенциал источника (полагается равным нулю); μ — подвижность электронов в канале; N — слоевая концентрация

электронов в канале $N = \int_0^H n(z) dz$.

Для адекватного отражения результатов измерений в вычислительных экспериментах требуется соответствующая настройка параметров модели. Центральным моментом в настройке является определение зависимости подвижности носителей заряда, входящей в выражение для расчета электрического тока в проводящем канале, от локального напряжения и температуры. Прямой расчет подвижности затруднен из-за отсутствия надежных данных по интенсивностям различных видов рассеяния электронов. Поэтому целесообразным представляется использование аппроксимационной зависимости, построенной по экспериментальным данным. Ранее мы использовали простую эмпирическую зависимость, включающую локальную разность потенциалов:

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \alpha u},$$

где μ_0 — объемная подвижность носителей заряда, которая для кремния принимается равной $0,13 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$; α — фактор уменьшения подвижности [18]. Такой подход позволил получить согласование с экспериментальными вольт-амперными характеристиками для определенных напряжений на затворах. Однако расширение диапазона изменения напряжений требует более точной аппроксимационной модели. С этой целью в модель введена зависимость подвижности от слоевой концентрации электронов в проводящем канале. При учете влияния температуры на подвижность принципиальным является тот факт, что при используемых в ПДХ уровнях легирования кремния изменение температуры практически не отражается на слоевой концентрации электронов. Таким образом, выражение для подвижности может быть представлено в мультипликативном виде:

$$\mu(T, N) = \mu(T)G(N).$$

Для функции $G(N)$ естественной представляется степенная параметризация $G(N) \propto N^p$. Хорошее согласование с экспериментальными данными в широком диапазоне напряжений питания и напряжений на затворах дает показатель степени $p = -1/3$.

Для параметризации функции $\mu(T)$ примем в рассмотрение следующие факты. Известно, что в примесных полупроводниках при низких температурах преобладает рассеяние электронов на ионах примеси. Оно, главным образом, лимитирует под-

вижность электронов, которая при данном виде рассеяния может быть представлена в виде

$$\mu_a = aT^\alpha.$$

Здесь $\alpha > 0$, т. е. функция подвижности является возрастающей. Для объемных полупроводников показатель степени $\alpha = 3/2$.

При повышении температуры все большую роль начинает играть рассеяние электронов на тепловых колебаниях кристаллической решетки. Подвижность электронов при таком виде рассеяния может быть представлена убывающей степенной зависимостью

$$\mu_b = bT^{-\beta},$$

где $\beta > 0$. Для объемных полупроводников показатель степени β также принимается равным $3/2$.

Таким образом, имеют место две противоречивые тенденции в поведении подвижности электронов при изменении температуры, что может приводить к появлению максимума на кривой зависимости подвижности от температуры. Об этом свидетельствуют представленные экспериментальные данные, согласно которым, максимальная подвижность наблюдается при температурах 80—120 К.

Для определения итоговой подвижности будем использовать правило Маттисена:

$$\mu(T) = \frac{1}{\frac{1}{\mu_a} + \frac{1}{\mu_b}} = \frac{1}{\frac{1}{a}T^{-\alpha} + \frac{1}{b}T^{\beta}}.$$

Переходя к относительным величинам, получим

$$\gamma(T) = \frac{\mu(T)}{\mu_*} = \frac{\frac{1}{a}T_*^{-\alpha} + \frac{1}{b}T_*^{\beta}}{\frac{1}{a}T^{-\alpha} + \frac{1}{b}T^{\beta}},$$

или

$$\gamma(T) = \frac{T_*^{-\alpha} + cT_*^{\beta}}{T^{-\alpha} + cT^{\beta}},$$

где μ_* , T_* — опорные значения подвижности и температуры.

В процессе параметрической идентификации модели необходимо определить значения параметров α , β , c , а также значение подвижности при опорных значениях температуры и концентрации носителей заряда.

Результаты расчетов и экспериментов

Температурные исследования проводили на измерительной установке (рис. 2), которая позволяет измерять характеристики ПДХ в диапазоне температур от 77 до 600 К.

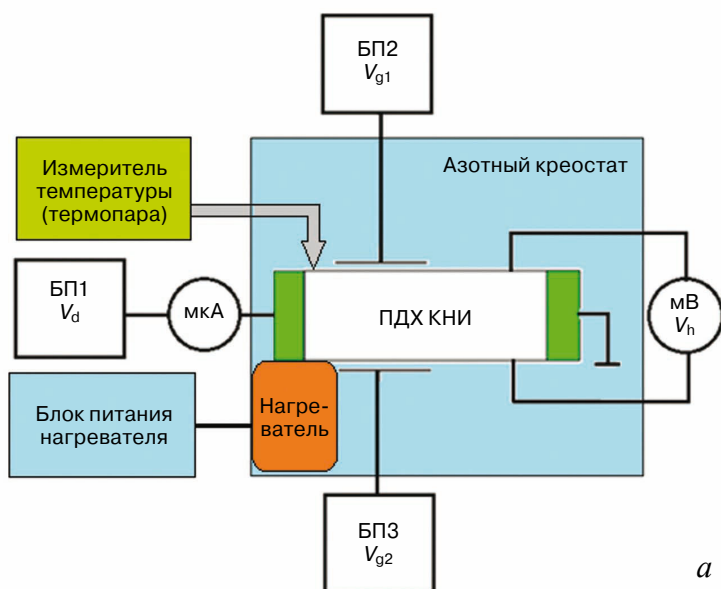
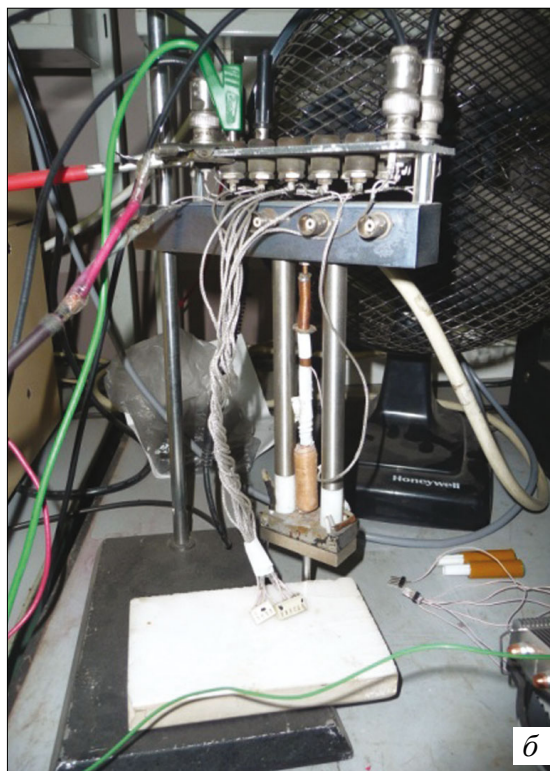


Рис. 2. Блок-схема установки для температурных измерений характеристик ПДХ (а) и нагреватель со специальной колодкой для фиксации ПДХ КНИ и катушка

Fig. 2. Block diagram of the installation for temperature measurements of the characteristics of the HFS (а) and a heater with a special block for fixing the SOI HFS and a coil (б)



В экспериментах варьировали значения напряжения питания, напряжения на затворах и температуры. Получены вольт-амперные, сток-затворные и холл-затворные характеристики ПДХ (рис. 3—5).

Результаты проведенных температурных исследований позволяют сделать вывод о возможности функционирования ПДХ КНИ в широком диапазоне температур с сохранением работоспособности.

Приведенные экспериментальные данные использовались для параметрической идентификации

модели подвижности носителей заряда. Параметрический анализ показал, что значения относительной подвижности γ , близкие к наблюдаемым в экспериментах, получаются при следующих параметрах: $\alpha = 1$, $\beta = 1,5$, $c = 2,5 \cdot 10^{-5}$.

Результаты параметрической идентификации модели подвижности носителей заряда представлены на рис. 6. Экспериментальные данные при каждой температуре усреднялись по реализациям, в которых менялись напряжение питания и напряжения на затворах. Из рис. 6 видно хорошее согла-

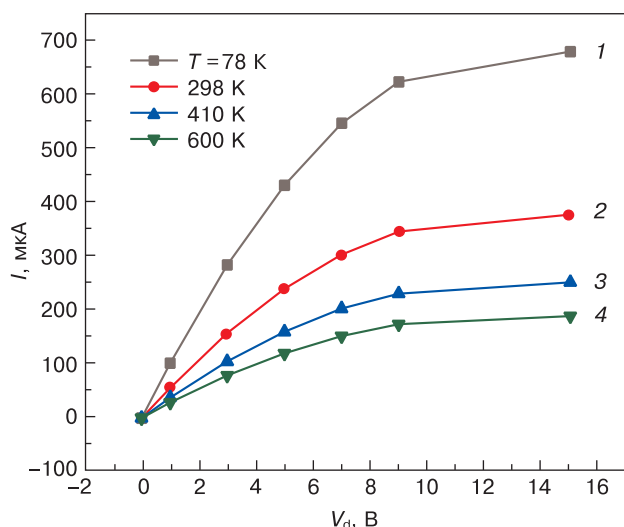


Рис. 3. Вольт-амперные характеристики при различных рабочих температурах T , К: 1 — 78; 2 — 298; 3 — 410; 4 — 600. $V_{g1} = V_{g2} = 9$ В

Fig. 3. Volt-ampere characteristics at different operating temperatures T , К: (1) 78; (2) 298; (3) 410; (4) 600. $V_{g1} = V_{g2} = 9$ В

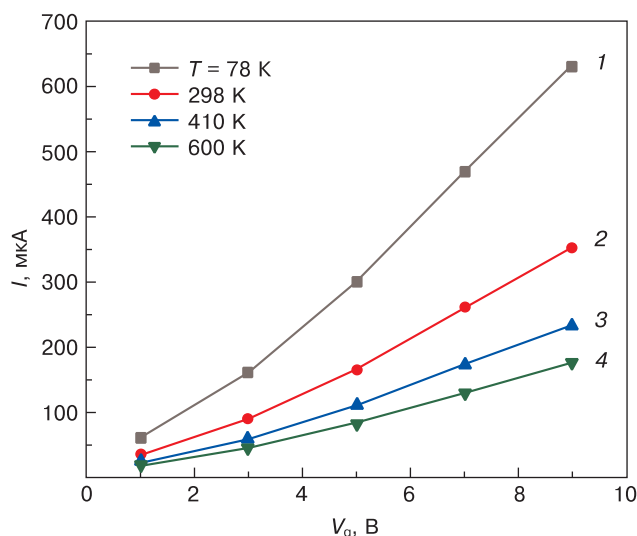


Рис. 4. Сток-затворные характеристики при различных рабочих температурах T , К: 1 — 78; 2 — 298; 3 — 410; 4 — 600. $V_d = 9$ В, $V_g = V_{g1} = V_{g2}$

Fig. 4. Drain-gate characteristics at various operating temperatures T , К: (1) 78; (2) 298; (3) 410; (4) 600. $V_d = 9$ В, $V_g = V_{g1} = V_{g2}$

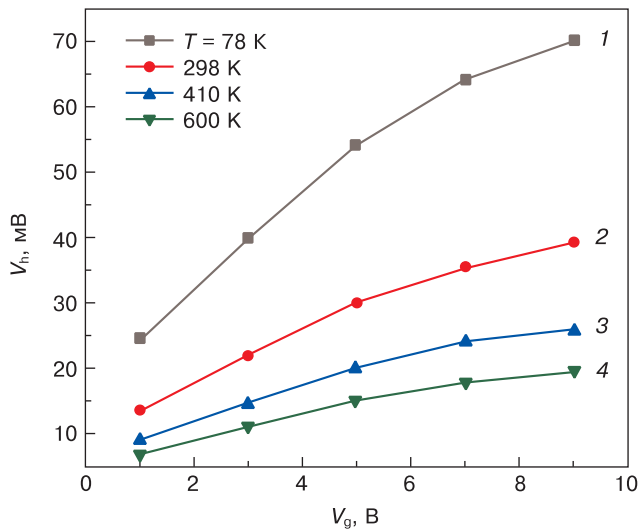


Рис. 5. Холл-затворные характеристики при различных рабочих температурах T , К: 1 — 78; 2 — 298; 3 — 410; 4 — 600. $V_d = 9$ В, $V_g = V_{g1} = V_{g2}$

Fig. 5. Hall-shutter characteristics at various operating temperatures T , K: (1) 78; (2) 298; (3) 410; (4) 600. $V_d = 9$ В, $V_g = V_{g1} = V_{g2}$

сование расчетных и экспериментальных данных при температурах выше 150 К. При низких температурах наблюдается различие: расчетная кривая демонстрирует более интенсивное убывание подвижности при уменьшении температуры. При этом количественное различие в диапазоне температур 60—100 К не превышает 15 %.

Как отмечалось выше, для проведения расчетов требуется знать значение подвижности при опорных значениях температуры и концентрации носителей заряда. Эта величина также может быть идентифицирована по экспериментальным данным. Применительно к рассматриваемому ПДХ

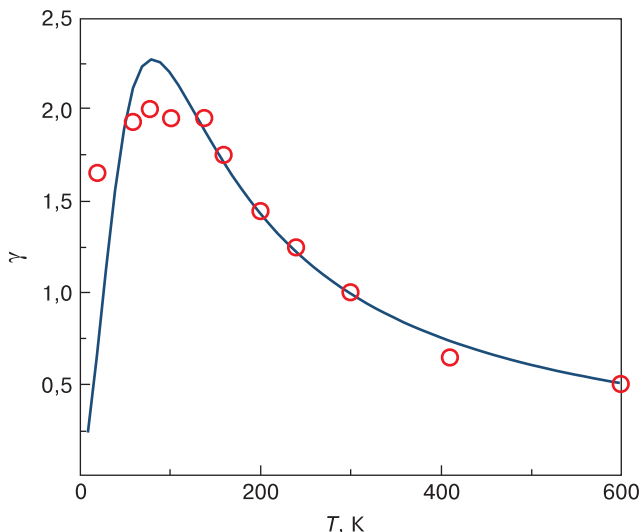


Рис. 6. Зависимость относительной подвижности от температуры. Сплошная кривая — расчет; «○» — эксперимент

Fig. 6. Dependence of relative mobility on temperature. The solid curve is the calculation; ○ is the experiment

в качестве опорного значения подвижности берется $0,13 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, что соответствует объемной подвижности носителей заряда при комнатной температуре и концентрации носителей 10^{15} м^{-3} .

На рис. 7 показаны рассчитанные с использованием найденных параметров сток-затворные характеристики ПДХ при различных температурах. Сравнение с графиками на рис. 4 показывает хорошее согласование расчетных и экспериментальных кривых при высоких температурах (кривые 2—4). При низких температурах (кривая 1) расчетная характеристика проходит выше экспериментальной, что связано с более высокой относительной подвижностью в этой области (см. рис. 6).

Представленный подход позволяет оценить возможность использования ПДХ в качестве датчика температуры. С этой целью вычислим чувствительность тока к изменению температуры, продифференцировав зависимость $\gamma(T)$:

$$\eta(T) = \frac{\partial \gamma}{\partial T} = -\frac{T_*^{-\alpha} + cT_*^{\beta}}{(T^{-\alpha} + cT^{\beta})^2} (-\alpha T^{-(\alpha+1)} + c\beta T^{\beta-1}).$$

График функции чувствительности $\eta(T)$ приведен на рис. 8.

Таким образом, можно оценить требуемую чувствительность датчика для определения температуры с заданной точностью.

Закключение

Экспериментальные исследования токовых характеристик ПДХ позволяют сделать вывод о возможности функционирования ПДХ КНИ в широком диапазоне температур с сохранением работоспособности.

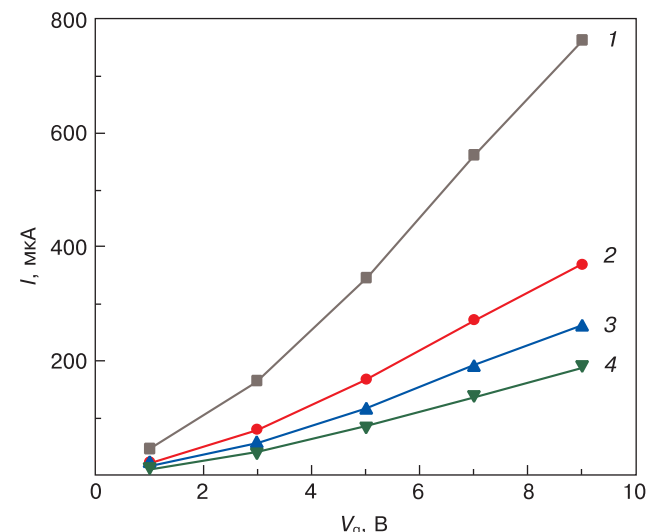


Рис. 7. Расчетные сток-затворные характеристики при различных температурах T , К: 1 — 78; 2 — 298; 3 — 410; 4 — 600

Fig. 7. Estimated drain-gate characteristics at various temperatures T , K: (1) 78; (2) 298; (3) 410; (4) 600

Проведена параметрическая идентификация разработанной авторами математической модели по экспериментальным данным. Предложена аппроксимационная зависимость подвижности носителей заряда от температуры и концентрации. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными в широком диапазоне температур, напряжений питания и напряжений на затворах.

Определена функция чувствительности электрического тока к изменению температуры. Такой подход позволяет оценить требуемую чувствительность датчика для определения температуры с заданной точностью.

Библиографический список

1. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Вычислительные алгоритмы в задачах моделирования и оптимизации полупроводниковых гетероструктур. М.: МАКС Пресс; 2016, 120 с.
2. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2015; 56(1): 153—164. <https://doi.org/10.7868/S004446691601004X>
3. Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures. *Physica Status Solidi (c)*. 2015; 12(4–5): 460—465. <https://doi.org/10.1002/PSSC.201400200>
4. Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures with various Al concentrations. *Physica Status Solidi (c)*. 2015; 12(12): 1376—1382. <https://doi.org/10.1002/PSSC.201510159>
5. Mordkovich V.N., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L., Leonov A.V. Simulation of hall field elements based on nano-sized silicon-on-insulator heterostructures. *Russian Microelectronics* 2021; 50(8): 617—622. <https://doi.org/10.1134/S1063739721080059>
6. Мордкович В.Н. Датчики на основе структур «кремний на изоляторе». *Электронная техника. Серия 2: Полупроводниковые приборы*. 2008; 2(221): 34—44.
7. Huijsing I.H. Smart Sensor Systems: Why? Where? How? G.C.M. Meijer, ed. Great Britain: I. Wiley and Sons; 2008. 385 p. <https://doi.org/10.1002/9780470866931.CH1>
8. Balakrishnan V., Phan H.-P., Dinh T., Dao D.V., Nguyen N.-T. Sensors for harsh environments. *Sensors*. 2017; 17(9): 2060—2092. <https://doi.org/10.3390/s17092061>
9. Baumgartner A., Ihn T., Ensslin K., Papp G., Peeters F., Maranowski K., Gossard A.C. Classical Hall effect in scanning gate experiments. *Physical Review B*. 2006. 74: 165426. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.165426>
10. Щербачев К.Д., Бублик В.Т., Мордкович В.Н., Пажин Д.М. Особенности образования радиационных дефектов в слое кремния структур «кремний на изоляторе». *Физика и техника полупроводников*. 2011; 45(6): 754—758.

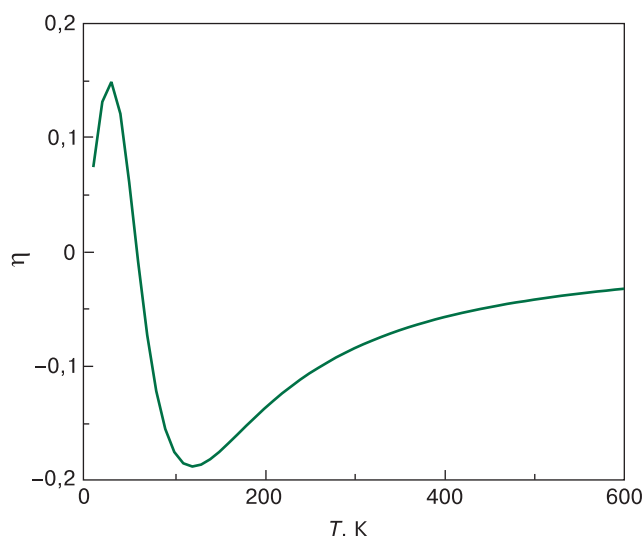


Рис. 8. Зависимость чувствительности от температуры
Fig. 8. Dependence of sensitivity on temperature

11. Громов Д.В., Мордкович В.Н., Пажин Д.М., Скобобогатов П.К. Релаксационные эффекты в полевых датчиках Холла при воздействии импульса ионизирующего облучения. *Электронная техника. Серия 2: Полупроводниковые приборы*. 2011; 1(226): 19—26.
12. Королев М.А., Козлов А.В., Петрунина С.С. Особенности функционирования полевого датчика Холла на основе КНИ структур, предназначенного для работы в телекоммуникационных сетях. *Труды МФТИ*. 2015; 7(3): 91—95.
13. Королев М.А., Павлюк М.И., Девликанова С.С. Физическая модель полевого датчика Холла на основе КНИ-структуры. *Известия высших учебных заведений. Электроника*. 2017; 22(2): 166—170. <https://doi.org/10.24151/1561-5405-2017-22-2-166-170>
14. Popovich R.S. Hall effect devices. 2nd. ed. Bristol; Philadelphia: Institute of Physics; 2004. 419 p.
15. Леонов А.В., Малых А.А., Мордкович В.Н., Павлюк М.И. Тонкопленочный кремниевый магниточувствительный полевой транзистор холловского типа с расширенным до 350 °С диапазоном рабочих температур. *Письма в журнал технической физики*. 2016; 42(2): 30—36.
16. Leonov A.V., Malykh A.A., Mordkovich V.N., Pavlyuk M.I. Field controlled Si hall element with extended operation temperature range from liquid helium temperature up to 650 K. *Procedia Engineering*. 2015; 120: 1197—1200. <https://doi.org/10.1016/J.PROENG.2015.08.786>
17. Stengel F., Noor Mohammad S., Morkoc H. Theoretical investigation of electrical characteristics of AlGaIn/GaN modulation doped field-effect transistors. *Journal of Applied Physics*. 1996; 80(5): 3031—3042. <https://doi.org/10.1063/1.363162>
18. Наумова О.В., Зайцева Э.Г., Фомин Б.И., Ильницкий М.А., Попов В.П. Зависимость подвижности электронов в режиме обогащения от их плотности в полностью обедняемых пленках кремний-на-изоляторе. *Физика и техника полупроводников*. 2015; 49(10): 1360—1365.

References

1. Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Computational algorithms in problems of simulation and optimization of semiconductor heterostructures. Moscow: MAKS Press; 2016, 120 p. (In Russ.)
2. Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Numerical simulation of the distribution of charge carrier in nanosized semiconductor heterostructures with account for polarization effects. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2015; 56(1): 153—164. (In Russ.). <https://doi.org/10.7868/S004446691601004X>
3. Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures. *Physica Status Solidi (c)*. 2015; 12(4–5): 460—465. <https://doi.org/10.1002/PSSC.201400200>
4. Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures with various Al concentrations. *Physica Status Solidi (c)*. 2015; 12(12): 1376—1382. <https://doi.org/10.1002/PSSC.201510159>
5. Mordkovich V.N., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L., Leonov A.V. Simulation of hall field elements based on nanosized silicon-on-insulator heterostructures. *Russian Microelectronics*. 2021; 50(8): 617—622. <https://doi.org/10.1134/S1063739721080059>
6. Mordkovich V.N. Sensors based on “silicon on insulator” structures. *Elektronnaya Tekhnika. Seriya 2: Poluprovodnikovye Pribory*. 2008; 2(221): 34—44. (In Russ.)
7. Meiyer G.C.M., ed. Huijsing I.H. Smart Sensor Systems: Why? Where? How? Great Britain: I. Wiley and Sonus; 2008. 385 p. <https://doi.org/10.1002/9780470866931.CH1>
8. Balakrishnan V., Phan H.-P., Dinh T., Dao D.V., Nguyen N.-T. Sensors for harsh environments. *Sensors*. 2017; 17(9): 2060—2092. <https://doi.org/10.3390/s17092061>
9. Baumgartner A., Ihn T., Ensslin K., Papp G., Peeters F., Maranowski K., Gossard A.C. Classical Hall effect in scanning gate experiments. *Physical Review B*. 2006. 74: 165426. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.165426>
10. Shcherbachev K.D., Bublik V.T., Mordkovich V.N., Pazhin D.M. Specific features of formation of radiation defects in the silicon layer in “silicon-on-insulator” structures. *Semiconductors*. 2011; 45(6): 754—758. (In Russ.)
11. Mordkovich V.N., Pazhin D.M., Gromov D.V., Skorobogatov P.C. Relaxation effects in field hall sensor influence of impulse ionizing irradiation. *Elektronnaya Tekhnika. Seriya 2: Poluprovodnikovye Pribory*. 2011; 1(226): 19—26. (In Russ.)
12. Korolev M.A., Kozlov A.V., Petrunina S.S. Functioning features of the SOI field-effect hall sensor designed for application in telecommunications networks. *Trudy MFTI*. 2015; 7(3): 91—95. (In Russ.)
13. Korolev M.A., Pavlyuk M.I., Devlikanova S.S. Physical model of SOI field-effect hall sensor. *Proceedings of Universities. Electronics*. 2017; 22(2): 166—170. <https://doi.org/10.24151/1561-5405-2017-22-2-166-170>
14. Popovich R.S. Hall effect devices. 2nd. ed. Bristol; Philadelphia: Institute of Physics; 2004. 419 p.
15. Leonov A.V., Malykh A.A., Mordkovich V.N., Pavlyuk M.I. Thin-film silicon magnetically sensitive field-effect transistor of the Hall type with an extended operating temperature range up to 350 °C. *Technical Physics Letters*. 2016; 42(2): 30—36. (In Russ.)
16. Leonov A.V., Malykh A.A., Mordkovich V.N., Pavlyuk M.I. Field controlled Si hall element with extended operation temperature range from liquid helium temperature up to 650 K. *Procedia Engineering*. 2015; 120: 1197—1200. <https://doi.org/10.1016/J.PROENG.2015.08.786>
17. Stengel F., Noor Mohammad S., Morkoc H. Theoretical investigation of electrical characteristics of AlGaIn/GaN modulation doped field-effect transistors. *Journal of Applied Physics*. 1996; 80(5): 3031—3042. <https://doi.org/10.1063/1.363162>
18. Naumova O.V., Zaitseva E.G., Fomin B.I., Il'inskiy M.A., Popov V.P. Density dependence of electron mobility in the accumulation mode for fully depleted soi films. *Semiconductors*. 2015; 49(10): 1360—1365. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Абгарян Каринэ Карленовна — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>; e-mail: kristal83@mail.ru

Леонов Алексей Владимирович — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник; Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов Российской академии наук, ул. Осипьяна, д. 6, Черноголовка, 142432, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-3437-9501>

Ревизников Дмитрий Леонидович — доктор физ.-мат. наук, профессор; Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; <https://orcid.org/0000-0003-0998-7975>; e-mail: reviznikov@gmail.com

Karine K. Abgaryan — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher, Head of Department, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>; e-mail: kristal83@mail.ru

Alexey V. Leonov — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Researcher; Institute of Microelectronics Technology and High-Purity Materials of the Russian Academy of Sciences, 6 Academician Ossipyan Str., Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-3437-9501>

Dmitry L. Reviznikov — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor; Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; <https://orcid.org/0000-0003-0998-7975>; e-mail: reviznikov@gmail.com

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 12.01.2022; принята к публикации 21.01.2022
Received 24 December 2021; Revised 12 January 2022; Accepted 21 January 2022

УДК 621.3.049.771.12

Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика в системе металлизации интегральных схем

© 2021 г. А. А. Орлов^{1,2,✉}, Е. А. Ганыкина^{1,2}, А. А. Резванов^{1,2}

¹ *АО «НИИ молекулярной электроники»,
ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия*

² *Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет),
Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия*

✉ Автор для переписки: orlov.aa@phystech.edu

Аннотация. В работе выполнено имитационное моделирование процессов диффузии ионов меди в low-k диэлектрик между двумя близлежащими медными линиями. Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм (для входных параметров, указанных в статье) за счет увеличения диффузионного пути можно оценить в 16 %. При этом совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26 % относительно плотного материала.

Ключевые слова: low-k диэлектрик, пористость, временной пробой диэлектрика

Для цитирования: Орлов А.А., Ганыкина Е.А., Резванов А.А. Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика в системе металлизации интегральных схем. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 242—247. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-242-247>

Accounting of the porosity of the material in the simulation of the time-dependent dielectric breakdown in the metallization system of integrated circuits

A. A. Orlov^{1,2,✉}, E. A. Ganykina^{1,2}, A. A. Rezvanov^{1,2}

¹ *Molecular Electronics Research Institute, JSC,
6-1 Academician Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia*

² *Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University),
9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region 141701, Russia*

✉ Corresponding author: orlov.aa@phystech.edu

Abstract. In this work, simulation modeling of processes of the diffusion of copper ions in low-k dielectric between two neighboring copper lines is performed. It was found that an increase in

the diffusion time of an ion in a material with a porosity of 30% and a pore radius of 1 nm (for the input parameters specified in the work) due to an increase in the diffusion path can be estimated at 16%. Moreover, the combined consideration of the effect of an increase in the electric field at the edges of the pores and a decrease in the diffusion activation energy leads to a decrease in the time to breakdown by 26% relatively dense material.

Keywords: low- k dielectric, porosity, TDDDB

For citation: Orlov A.A., Ganykina E.A., Rezvanov A.A. Accounting of the porosity of the material in the simulation of the time-dependent dielectric breakdown in the metallization system of integrated circuits. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 242–247. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-242-247>

Введение

Временной пробой диэлектрика (*Time-Dependent Dielectric Breakdown* — **TDDDB**), согласно международной дорожной карте для устройств и систем (*International Roadmap for Devices and Systems* — IRDS 2020), является одной из основных проблем, приводящих к отказу сверхбольших интегральных схем (**СБИС**) [1]. В системе медной металлизации для технологий 90 нм и ниже основной причиной снижения надежности СБИС являются диффузия и дрейф ионов меди в low- k диэлектрик (пористый OSG — диоксид кремния SiO_2 , в матрице которого часть связей $\text{Si}-\text{O}$ замещена связями $\text{Si}-\text{CH}_3$ и добавлена искусственная пористость [2]) под действием внешнего электрического поля [3, 4]. Для технологий с проектными нормами 32 нм и ниже обычно рассматривается временной пробой диэлектрика между двумя близлежащими металлическими линиями (*Intermetal Dielectric* — **IMD**), так как толщина IMD значительно меньше, чем толщина диэлектрика, разделяющего уровни системы металлизации.

Стоит отметить, что временной пробой диэлектрика устанавливает ограничение на минимальное пространство между соседними линиями для определенного low- k материала, вызывая замедление масштабирования значения диэлектрической проницаемости.

Описание модели расчета временного пробоя пористого low- k диэлектрика

Одной из перспективных моделей для оценки времени до пробоя пористого low- k диэлектрика является модель, основанная на расчете изменения концентрации ионов металла на границе межслой-

ный диэлектрик/low- k диэлектрик [5, 6]. Причиной TDDDB в этой модели полагается формирование проводящего слоя ловушек, соединяющего близлежащие металлические линии, что впоследствии приводит к существенному увеличению тока. Ловушки являются центрами локализации туннелирующих электронов из электродов, и расстояние между ними определяется как $r_{i,j} = C(x,y,t)^{-1/2}$ [6]. Таким образом, наибольшее расстояние между ловушками соответствует минимальной концентрации ионов меди ($C^{\min}$) в слое диэлектрика. Пробой происходит в области максимального расстояния между ловушками при достижении $C^{\min}$ некоего порогового значения (например, величины предельной растворимости ионов меди в диэлектрике).

Основными недостатками описанной в указанных работах модели являются отсутствие явного учета пористости и размера пор low- k диэлектрика в диффузионно-дрейфовом уравнении движения ионов металла в материале, а также ограниченный температурный диапазон. Далее в работе будут рассмотрены положения, позволяющие ввести в указанную модель параметры пористости low- k диэлектрика.

Расчет временного пробоя пористого low- k диэлектрика

Схематичное изображение моделируемой 2D системы представлено на рис. 1 (требуемые входные параметры для расчета времени до пробоя представлены вверху рисунка; рассматривается движение ионов меди только в слое диэлектрика).

Нормированную (на величину растворимости ионов меди в диэлектрике) минимальную концентрацию ионов $C_{\text{norm}}^{\min}$ можно определить, исходя из уравнения диффузии и дрейфа ионов меди

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

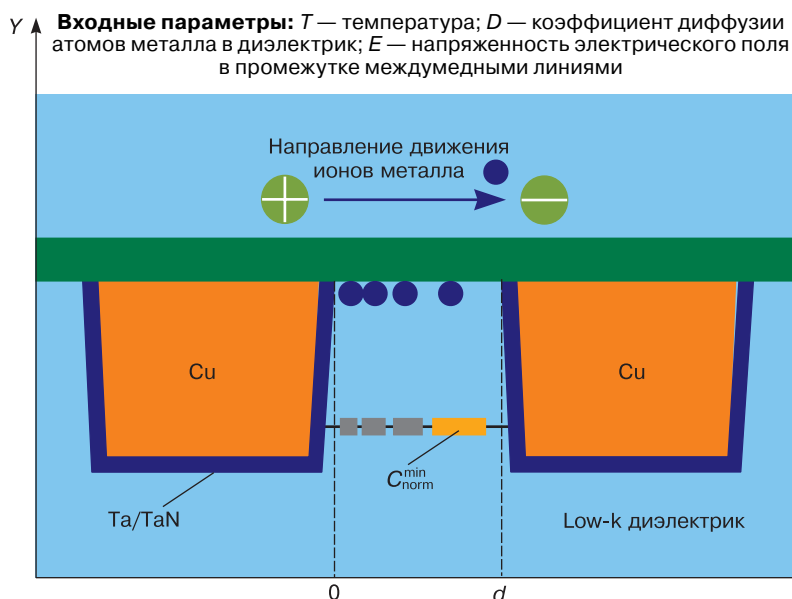


Рис. 1. Схематичное изображение моделируемой 2D системы (требуемые входные параметры модели указаны сверху рисунка)

Fig. 1. Schematic representation of the simulated 2D system (the required model input parameters are indicated at the top of the figure)

в электрическом поле (1) и граничными условиями на электродах (2) [7].

$$\frac{\partial C_{\text{norm}}}{\partial t} = D \Delta C_{\text{norm}} - qDE \frac{\nabla C_{\text{norm}}}{k_B T}; \quad (1)$$

$$C_{\text{norm}}(x=0) = C_{\text{norm}}(x=d) = 1, \quad (2)$$

Для расчета изменения входных параметров в модели оценки времени до пробоя диэлектрика при

введении пористости в качестве плотного материала будет рассмотрен диоксид кремния SiO_2 . Предположим, что введение пористости в плотный SiO_2 будет имитировать пористый OSG low- k диэлектрик. Данное приближение в отношении пористого OSG low- k диэлектрика обусловлено тем, что метильные CH_3 группы преимущественно расположены на стенках пор. Дополнительно, не рассматривается движение ионов меди внутри пор. В упрощенной модели, под

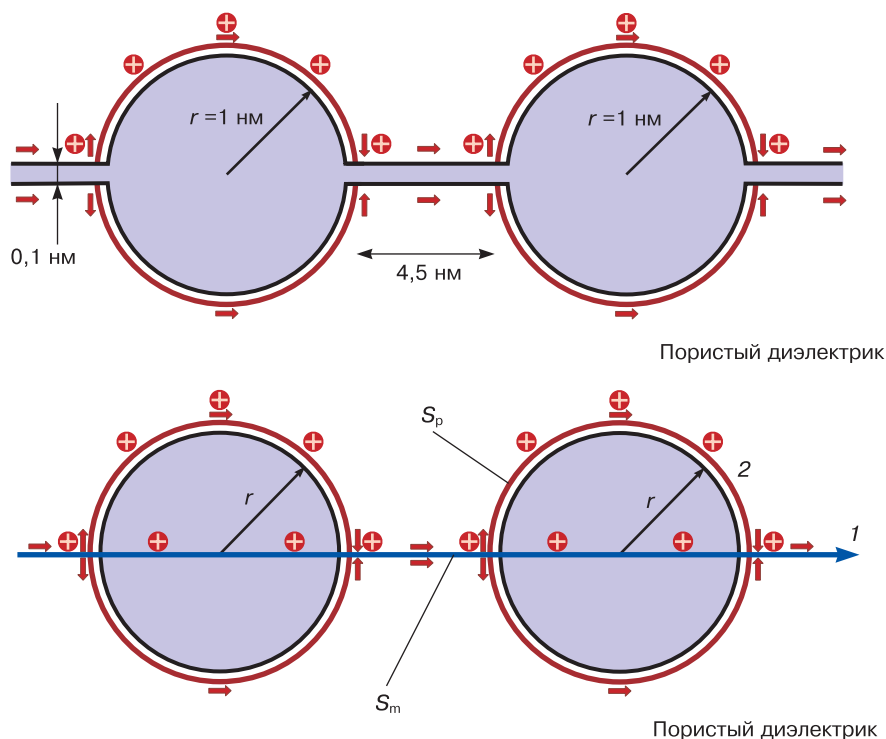


Рис. 2. Изменение диффузионного пути иона меди в материале диэлектрика с введением пористости:

a — без учета наличия соединений между порами; b — с учетом соединений между порами (синяя стрелка (1) — диффузионный путь иона в материале без пор; красные стрелки (2) — направление движение иона в присутствии пористости)

Fig. 2. Change in the diffusion path of the copper ion in the dielectric material with the introduction of porosity: a — without taking into account the presence of connections between the pores; b — taking into account connections between pores (blue arrow (1) is diffusion path of an ion in a material without pores; red arrows (2) is direction of ion movement in the presence of porosity)

порами мы будем понимать сферы, имеющие постоянный радиус, и их соединения между собой, заполненные воздухом. В качестве факторов, влияющих на изменение времени до пробоя диэлектрика с введением пористости, рассматриваются следующие предположения, указанные далее.

С введением пористости в материал диффузионный путь иона увеличивается в $\pi/2$ раз, так как вместо расстояния $2r$ (диаметр поры, где r — радиус поры) ему необходимо пройти расстояние πr (половину длины дуги поры). Пояснения представлены на рис. 2.

Полный диффузионный путь L^* иона в материале пористого диэлектрика можно представить следующим образом:

$$L^* = VS_p + (1 - V)S_m, \quad (3)$$

где V — значение пористости материала; S_p — часть диффузионного пути на краях пор; S_m — часть диффузионного пути в материале (см. рис. 2, а).

Таким образом, диффузионный путь иона в материале с пористостью 30 % и радиусом пор 1 нм относительно диффузионного пути L в непористом диэлектрике равен:

$$L^* = 0,3 \frac{\pi}{2} L + 0,7L = 1,17L. \quad (4)$$

Дополнительно, в предположении, что при величине пористости $V \approx 30\%$ и радиусе пор 1 нм геометрические размеры соединения можно примерно оценить как $0,1 \times 4,5 \text{ нм}^2$ увеличение диффузионного пути (с учетом поправки на сглаженность траектории движения иона меди) составляет (см. рис. 2, б):

$$L^* = 0,28 \frac{\pi - 0,6}{2} L + 0,72L = 1,08L. \quad (5)$$

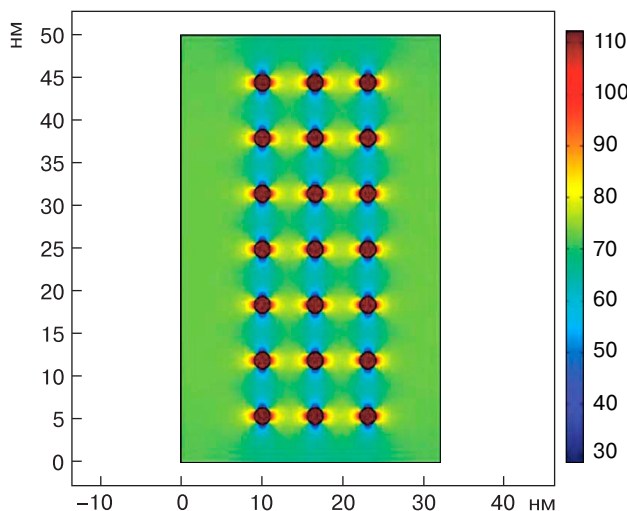


Рис. 3. Распределение электрического поля в материале SiO_2 с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм и приложенной разностью потенциалов 3,63 В при толщине 50 нм

Fig. 3. Distribution of the electric field in a SiO_2 material with a porosity of 30%, a pore radius of 1 nm and an applied potential difference of 3.63 V at a thickness of 50 nm

При введении пористости в материал происходит увеличение напряженности внешнего электрического поля на краях пор относительно величины поля в плотном материале. На рис. 3 приведено моделирование распределения электрического поля в материале SiO_2 с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм и приложенной разностью потенциалов 3,63 В при толщине 50 нм.

Из рис. 3 видно, что области повышенного электрического на краях пор для материала с пористостью 30 % и радиусом пор 1 нм не перекрываются. Исходя из расчетов, также получено, что область краевого эффекта (область движения иона меди в повышенном электрическом поле) для пор размера порядка единиц нанометров составляет примерно 40 % от половины длины окружности поры.

Заключительным фактором, связанным с введением пористости в материал, рассматривается понижение энергии активации диффузии ионов меди за счет внешнего электрического поля. В работе [8] показано, что величина энергии активации диффузии ионов меди в SiO_2 уменьшается в направлении поля и определяется выражением:

$$E_a^* = E_a - \frac{qbE}{2}, \quad (6)$$

где E_a^* — величина энергии активации диффузии в присутствии внешнего поля; q — заряд иона меди; b — величина диффузионного прыжка из одной потенциальной ямы в соседнюю яму (2,2 нм [8]).

В итоге, выражение для расчета коэффициента диффузии с поправкой на изменение энергии активации во внешнем электрическом поле принимает следующий вид:

$$D = D_0 \exp \left(- \frac{E_a - \frac{qbE}{2}}{k_B T} \right). \quad (7)$$

Моделирование проводилось в программе COMSOL Multiphysics® методом конечных элементов (процесс расчета подробно описан в [5, 6]) со следующими входными параметрами: $V = 30\%$, $r = 1 \text{ нм}$, разность потенциалов 3.63 В, температура 398 К, энергия активации 0,93 эВ [9], множитель перед экспонентой в законе Аррениуса для коэффициента диффузии $1,68 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$ [10], расстояние между линиями 50 нм.

Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале (с учетом квадратичной зависимости времени диффузии от диффузионной длины [11]) за счет увеличения диффузионного пути можно оценить в 16 %, а совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26 % относительно плотного материала.

Заключение

Проведены оценки влияния явного учета пористости материала на численное значение временного пробоя low- k диэлектрика ионами меди. Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм за счет увеличения диффузионного пути можно оценить

в 16 %, а совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26% относительно плотного материала. В дальнейшем планируется провести калибровку полученных результатов на экспериментальных структурах.

Библиографический список

1. International technology roadmap for semiconductors (ITRSTM) interconnect. 2020 Edition. <https://irds.ieee.org/editions/2020>
2. Maex K., Shamiryan D., Iacopi F., Brongersma S.H., Baklanov M.R., Yanovitskaya Z.S. Low dielectric constant materials for microelectronics. *Journal of Applied Physics*. 2003; 93(11): 8793—8841. <https://doi.org/10.1063/1.1567460>
3. Lloyd J.R., Murray C.E., Ponoth S., Cohen S., Linienger E. The effect of Cu diffusion on the TDDDB behavior in a low- k interlevel dielectrics. *Microelectronics Reliability*. 2006; 46(9–11): 1643—1647. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2006.08.003>
4. Патент (РФ) № 2486632 С2, МПК H01L 21/768. Валеев А.С., Красников Г.Я., Гвоздев В.А. Способ изготовления усовершенствованной многоуровневой медной металлизации с применением диэлектриков с очень низкой диэлектрической постоянной (ultra low- k). Заявл.: 20.07.2011; опублик.: 27.06.2013. https://yandex.ru/patents/doc/RU2486632C2_20130627
5. Huang X., Sukharev V., Qi Z., Kim T., Tan S.X.-D. Physics-based full-chip TDDDB assessment for BEOL interconnects. In: *Proc. of the 53rd Annual Design Automation Conf. (DAC'16)*. 5 June 2016; 45: 1—6. <https://doi.org/10.1145/2897937.2898062>
6. Peng S., Zhou H., Kim T., Chen H.-B., Tan S. Physics-based compact TDDDB models for low- k beol copper interconnects with time-varying voltage stressing. *IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems*. 2018; 26(2): 239—248. <https://doi.org/10.1109/TVLSI.2017.2764880>
7. Groove A.S. Physics and technology of semiconductor devices. NY, USA: Wiley & Sons Inc.; 1991. 388 p.
8. Hwang S.-S., Jung S.-Y., Joo Y.-C. The electric field dependence of Cu migration induced dielectric failure in interlayer dielectric for integrated circuits. *Journal of Applied Physics*. 2007; 101(7): 074501. <https://doi.org/10.1063/1.2714668>
9. Achanta R.S., Gill W.N., Plawsky J.L. Predicting the lifetime of copper/barrier/dielectric systems: Insights for designing better barriers for reducing copper ion drift/diffusion into the dielectric. *Journal of Applied Physics*. 2009; 106(7): 074906. <https://doi.org/10.1063/1.3238517>
10. Shacham-Diamand Y., Dedhia A., Hoffstetter D., Oldham W.G. Copper transport in thermal SiO₂. *Journal of the Electrochemical Society*. 1993; 140(8): 2427—2432. <https://doi.org/10.1149/1.2220837>
11. Kuo Y.-L., Lee H.-H., Lee C., Lin J.-C., Shue S.L., Liang M.-S., Daniels B.J. Diffusion of copper in titanium zirconium nitride thin films. *Electrochemical and Solid-State Letters*. 2004; 7(3): C35—C37. <https://doi.org/10.1149/1.1644355>

References

1. International technology roadmap for semiconductors (ITRSTM) interconnect. 2020 Edition. <https://irds.ieee.org/editions/2020>
2. Maex K., Shamiryan D., Iacopi F., Brongersma S.H., Baklanov M.R., Yanovitskaya Z.S. Low dielectric constant materials for microelectronics. *Journal of Applied Physics*. 2003; 93(11): 8793—8841. <https://doi.org/10.1063/1.1567460>
3. Lloyd J.R., Murray C.E., Ponoth S., Cohen S., Linienger E. The effect of Cu diffusion on the TDDDB behavior in a low- k interlevel dielectrics. *Microelectronics Reliability*. 2006; 46(9–11): 1643—1647. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2006.08.003>
4. Patent (RU) No. 2486632 C2, IPC H01L 21/768. Valeev A.S., Krasnikov G.J., Gvozdev V.A. Method for manufacturing of improved multilevel copper metallisation using dielectrics with ultra low dielectric constant (ultra low- k). Appl.: 20.07.2011; publ.: 27.06.2013. (In Russ.). https://yandex.ru/patents/doc/RU2486632C2_20130627
5. Huang X., Sukharev V., Qi Z., Kim T., Tan S.X.-D. Physics-based full-chip TDDDB assessment for BEOL interconnects. In: *Proc. of the 53rd Annual Design Automation Conf. (DAC'16)*. June 5, 2016; (45): 1—6. <https://doi.org/10.1145/2897937.2898062>
6. Peng S., Zhou H., Kim T., Chen H.-B., Tan S. Physics-based compact TDDDB models for low- k beol copper interconnects with time-varying voltage stressing. *IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems*. 2018; 26(2): 239—248. <https://doi.org/10.1109/TVLSI.2017.2764880>
7. Groove A.S. Physics and technology of semiconductor devices. NY, USA: Wiley & Sons Inc.; 1999. 388 p.
8. Hwang S.-S., Jung S.-Y., Joo Y.-C. The electric field dependence of Cu migration induced dielectric failure in interlayer dielectric for integrated circuits. *Journal of Applied Physics*. 2007; 101(7): 074501. <https://doi.org/10.1063/1.2714668>
9. Achanta R.S., Gill W.N., Plawsky J.L. Predicting the lifetime of copper/barrier/dielectric systems: Insights for designing better barriers for reducing copper ion drift/diffusion into the dielectric. *Journal of Applied Physics*. 2009; 106(7): 074906. <https://doi.org/10.1063/1.3238517>
10. Shacham-Diamand Y., Dedhia A., Hoffstetter D., Oldham W.G. Copper transport in thermal SiO₂. *Journal of the Electrochemical Society*. 1993; 140(8): 2427—2432. <https://doi.org/10.1149/1.2220837>
11. Kuo Y.-L., Lee H.-H., Lee C., Lin J.-C., Shue S.L., Liang M.-S., Daniels B.J. Diffusion of copper in titanium zirconium nitride thin films. *Electrochemical and Solid-State Letters*. 2004; 7(3): C35—C37. <https://doi.org/10.1149/1.1644355>

Информация об авторах / Information about the authors

Орлов Андрей Алексеевич — младший научный сотрудник; АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; e-mail: aorlov@niime.ru

Ганыкина Екатерина Андреевна — научный сотрудник; АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; e-mail: eganykina@niime.ru

Резванов Аскар Анварович — канд. физ.-мат. наук, начальник лаборатории; АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-1677-9122>; e-mail: arezvanov@niime.ru

Andrey A. Orlov — Junior Researcher; Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; e-mail: aorlov@niime.ru

Ekaterina A. Ganykina — Researcher; Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; e-mail: eganykina@niime.ru

Askar A. Rezvanov — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Head of the Laboratory; Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-1677-9122>; e-mail: arezvanov@niime.ru

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 12.01.2022; принята к публикации 28.01.2022
Received 24 December 2021; Revised 12 January 2022; Accepted 28 January 2022

УДК 621.3.049.771.12

Анализ и сравнение различных подходов к экстракции параметров модели мемристора

© 2021 г. Е. С. Шамин^{1,2,✉}, Е. С. Горнев^{1,2}

¹ *Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет),
Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия*

² *АО «НИИ молекулярной электроники»,
ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия*

✉ Автор для переписки: eshamin@niime.ru

Аннотация. В работе проведен анализ различных подходов к задаче экстракции параметров эмпирической модели мемристора. Приводится описание особенностей процесса экстракции для модели модификации подвижности мемристора, а также предлагается оригинальный вариант алгоритма экстракции, основанный на оптимизационном алгоритме Нелдера—Мида с целевой функцией, основанной на расчете признаков исследуемой вольтамперной характеристики. Проводится сравнение предложенного алгоритма с двумя другими — с целевой функцией, основанной на симметрической разности площадей модельной и экспериментально полученной вольтамперных характеристик и с целевой функцией, основанной на MSE между точками рассматриваемых вольтамперных характеристик. Сравнение проводится по критерию фиксированного бюджета с помощью специализированного программного средства. Предложенный алгоритм экстракции не уступает двум другим в точности, при этом предлагая возможность тонкой настройки.

Ключевые слова: мемристор, экстракция, оптимизация, модель мемристора

Благодарности: Авторы работы благодарят Д.А. Жевненко, Ф.П. Мещанинова и В.С. Кожевникова за неоценимый вклад в подготовке статьи.

Для цитирования: Шамин Е.С., Горнев Е.С. Анализ и сравнение различных подходов к экстракции параметров модели мемристора. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 248—254. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-248-254>

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Analysis and comparison of different approaches to the extraction of parameters of the memristor model

E. S. Shamin^{1,2,✉}, E. S. Gornev^{1,2}

¹ *Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University),
9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia*

² *Molecular Electronics Research Institute, JSC,
6–1 Academician Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia*

✉ Corresponding author: eshamin@niime.ru

Abstract. The paper analyzes various approaches to the problem of extracting the parameters of an empirical memristor model. A description of the features of the extraction process for the memristor mobility modification model is given, and an original version of the extraction algorithm is proposed, based on the Nelder–Mead optimization algorithm with an objective function based on the calculation of features of the studied current–voltage characteristic. The proposed algorithm is compared with two others — with an objective function based on the symmetric difference between the areas of the model and experimentally obtained current–voltage characteristics and with an objective function based on the MSE between the points of the considered current–voltage characteristics. The comparison is carried out according to the criterion of a fixed budget using a specialized software tool. The proposed extraction algorithm is not inferior to the other two in accuracy, while offering the possibility of fine tuning.

Keywords: memristor, extraction, optimization, memristor model

Acknowledgments: The authors are grateful to D.A. Zhevnenko, F.P. Meshchaninov and V.S. Kozhevnikov for his invaluable contribution to the preparation of the article.

For citation: Shamin E.S., Gornev E.S. Analysis and comparison of different approaches to the extraction of parameters of the memristor model. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 248–254. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-248-254>

Введение

Мемристор — сравнительно новое микроэлектронное устройство. Первая успешная реализация мемристора датируется 2008–м годом [1] и задача построения его полной физически обоснованной модели до сих пор не решена [2]. В связи с этим большинство существующих на данный момент моделей мемристоров являются эмпирическими. Один из основных вопросов, возникающих при работе с эмпирическими моделями мемристора является вопрос экстракции модельных параметров из эксперимента. Для экстракции применяются различные методы описанные в работах [3, 4], однако чаще всего эта операция проводится посредством применения алгоритмов оптимизации, или, иначе, с помощью аппроксимации экспериментального контура моделью. Такая операция в зависимости от сложности выбранного алгоритма, целевой функции, модели мемристора и экспериментальных дан-

ных (например, даже в рамках одного устройства может присутствовать значительный разброс значений напряжения переключения в разных рабочих циклах [5]) может занимать значительное время.

На сегодняшний день вопрос выбора оптимального алгоритма оптимизации — задача в общем смысле не решенная [6]. Все существующие наработки по этой тематике несут исключительно рекомендационный характер. Более того, как указано в работе [7], эффективность алгоритмов и их параметров неразрывно связана с задачей, для которой они применяются. Таким образом, исследования, направленные на улучшение качества аппроксимации в каждом конкретном случае имеют важное прикладное значение. Иначе говоря, решение вопроса сравнения качества работы различных алгоритмов экстракции параметров эмпирических моделей мемристора из экспериментальных данных является крайне актуальным и полагается главной целью данной работы.

Обзор простейших алгоритмов экстракции и особенностей их применения

Первое, о чем стоит задуматься — это инструментарий для анализа работы рассматриваемой модели мемристора и, в частности, алгоритмов экстракции ее параметров. К рассмотрению предлагается оригинальное программное средство под названием Visualizer, интерфейс которого представлен на рис. 1. Данный инструмент удобен для сравнения различных алгоритмов решения задачи экстракции между собой. Также его можно использовать для исследования взаимосвязей между параметрами рассматриваемой модели мемристора и особенностями соответствующих им вольтамперных характеристик.

С помощью функционала, предоставляемого Visualizer, можно получить следующие данные:

- отклик вида ВАХ рассматриваемой модели мемристора на изменение ее параметров;
- динамическая визуализация изменения ВАХ прямо в процессе оптимизации;
- оптимальные параметры модели для импортируемого экспериментального контура;
- сводная таблица результатов оптимизации расписанная по итерационно;
- значения стандартных и импортируемых целевых функций;
- время, затраченное на оптимизацию.

Проанализируем работу двух наиболее очевидных алгоритмов экстракции параметров модели мемристора на примере модели модификации подвижности [8], основанной на модели Yakopcic S. et al. [9]. Важно отметить, что в рамках данной работы будут рассматриваться только алгоритмы поиска локальных минимумов ввиду того, что не всегда корректно проводить сравнение алгоритмов поиска глобальных минимумов, а

алгоритмы поиска локальных минимумов всегда можно глобализовать. Для простоты сравнения оба рассматриваемых алгоритма будут на основе Нелдера—Мида [10], но с разными целевыми функциями (рис. 2):

1. Целевая функция на основе симметрической разности площадей (нормированный на площадь, заметаемую экспериментальным контуром, результат операции XOR между площадями, заметаемыми экспериментальным и модельным контуром);

2. Целевая функция на основе MSE между 200 точками обрабатываемых контуров.

При запуске оптимизаций становится более ясна специфика задачи — алгоритм экстракции в работе с рассматриваемой системой дифференциальных уравнений (моделью мемристора) сталкивается с множеством практически равнозначных локальных минимумов, причем это не зависит от выбора целевой функции. Дополнительно не редка ситуация, когда алгоритм сходится в нежелательный минимум — модельная ВАХ, или один из ее лепестков, схлопывается в прямую. Это так же обусловлено особенностями исследуемой модели.

Отдельной сложностью является слабая чувствительность ВАХ к изменению параметров модели при некоторых их значениях. Ввиду этих проблем не редкими являются резкие изменения целевых функций, что обуславливает выбор алгоритма Нелдера—Мида в качестве основного для рассмотрения.

Последняя рассматриваемая особенность задачи, связана уже с исследуемыми алгоритмами и относится к невозможности адресовать конкретные особенности обрабатываемых экспериментальных контуров — если, например, алгоритм оптимизации схлопнул левую ветку ВАХ,

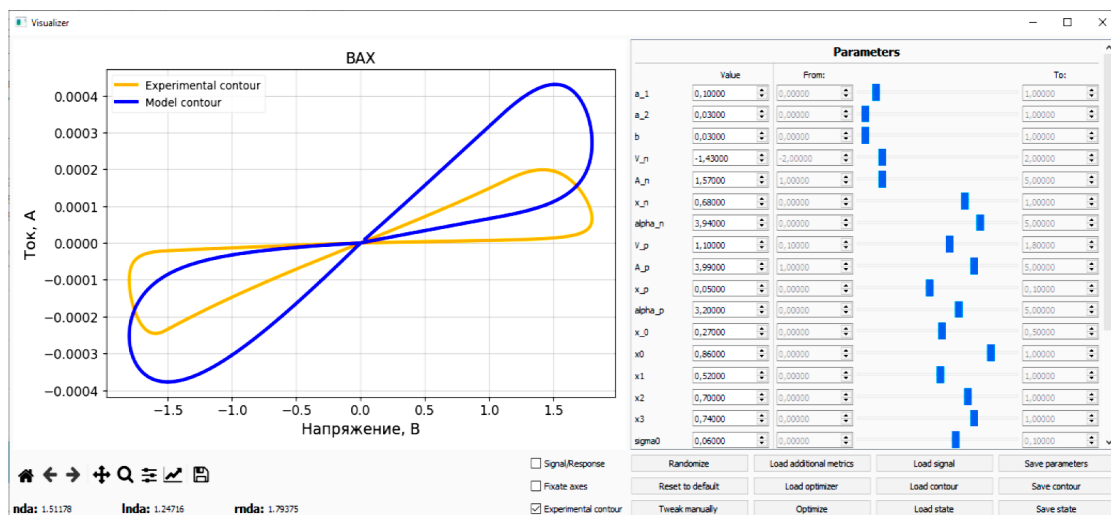


Рис. 1. Интерфейс программного средства Visualizer

Fig. 1. Visualizer interface

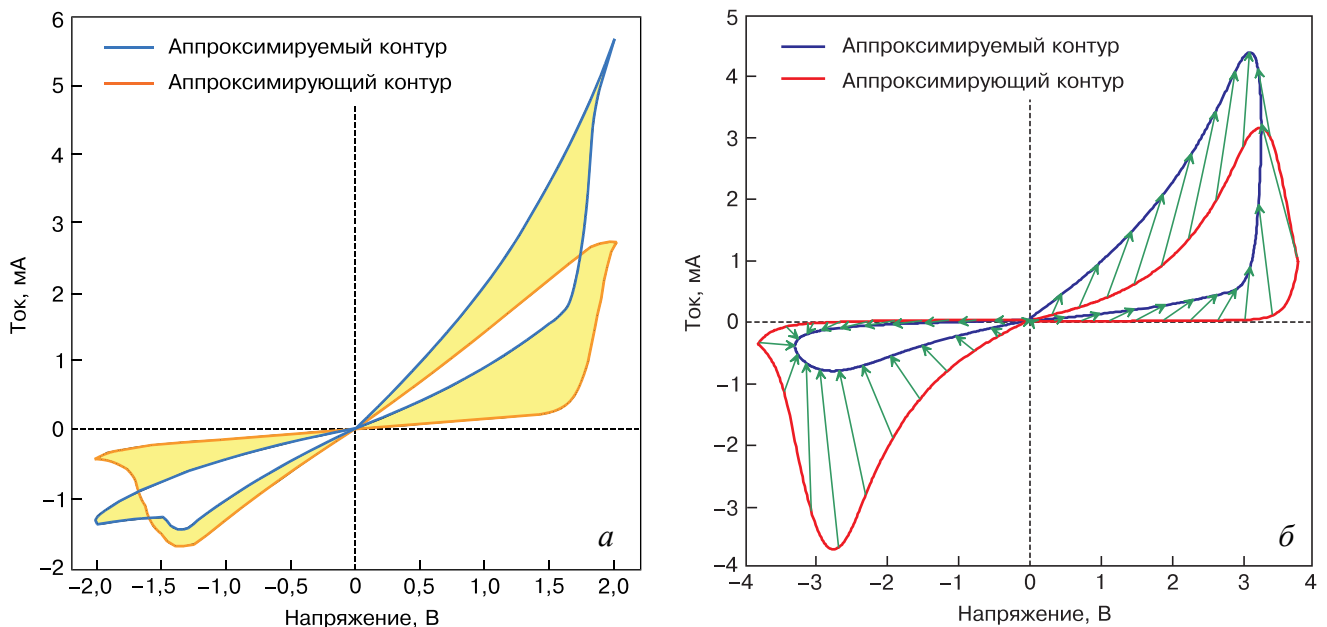


Рис. 2. Визуализация целевой функции на основе симметрической разности площадей (а) и на основе MSE между точками рассматриваемых контуров (б)

Fig. 2. Visualization of the objective function based on the symmetric area difference (a) and based on the MSE between the points of the considered contours (б)

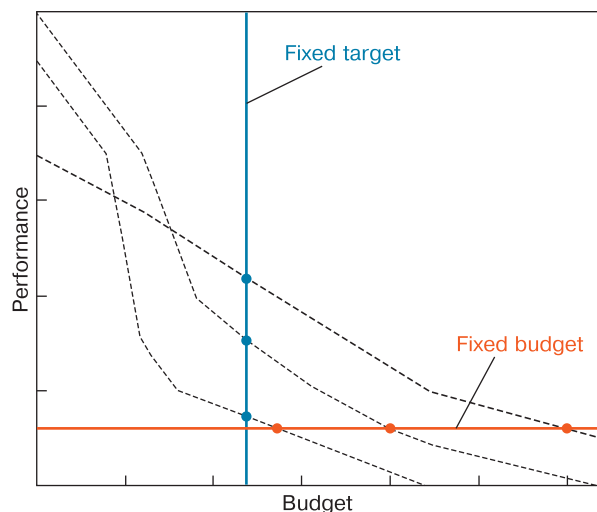


Рис. 3. Визуализация критерия фиксированной цели (значения целевой функции) и фиксированного бюджета (затраченного времени) [6]

Fig. 3. Visualization of the criterion of a fixed target (objective function value) and a fixed budget (time spent) [6]

или плохо обработал область переключения — это никак не исправишь подстройкой алгоритма.

Сравнение алгоритмов будем проводить по критерию фиксированного бюджета, описанному в [6] (рис. 3). Под бюджетом в данном случае подразумевается затраченное на оптимизацию время. Этот критерий выгодно использовать ввиду того, что в рамках конкретной задачи нас больше интересует не точность аппроксимации, а ее скорость. Для получения показательных результатов будем сравнивать алгоритмы для частного случая ВАХ, отображенных на рис. 1. Сравнение будем проводить по значениям функции сим-

метрической разности площадей, как наиболее показательной.

Как видно из рис. 4, алгоритм с целевой функцией на основе симметрической разности площадей намного быстрее решает задачу экстракции. Это является очень важным, если его применение подразумевает обработку десятков тысяч экспериментально полученных переключений.

Оригинальный алгоритм экстракции и анализ его работы

Как уже было упомянуто, применение обоих вышеописанных алгоритмов не дает возможности адресовать конкретные особенности обрабатываемых экспериментальных контуров, что является крайне важным для некоторых задач.

Решение этой проблемы легло в основу разработки оригинального алгоритма экстракции параметров модели мемристора. Новый алгоритм должен был отрабатывать аналогично или не на много хуже аналога с целевой функцией на основе симметрической разности площадей, при этом предоставляя широкий функционал по модификации.

Очевидной идеей была реализация алгоритма на основе признаков ВАХ. С помощью программного средства Visualizer было проведено выделение признаков ВАХ, наиболее подверженных изменениям при варьировании параметров рассматриваемой модели. Каждому признаку был приписан вес, после чего была составлена целевая функция для задачи экстракции, в основе которой лежит суммирование отношений

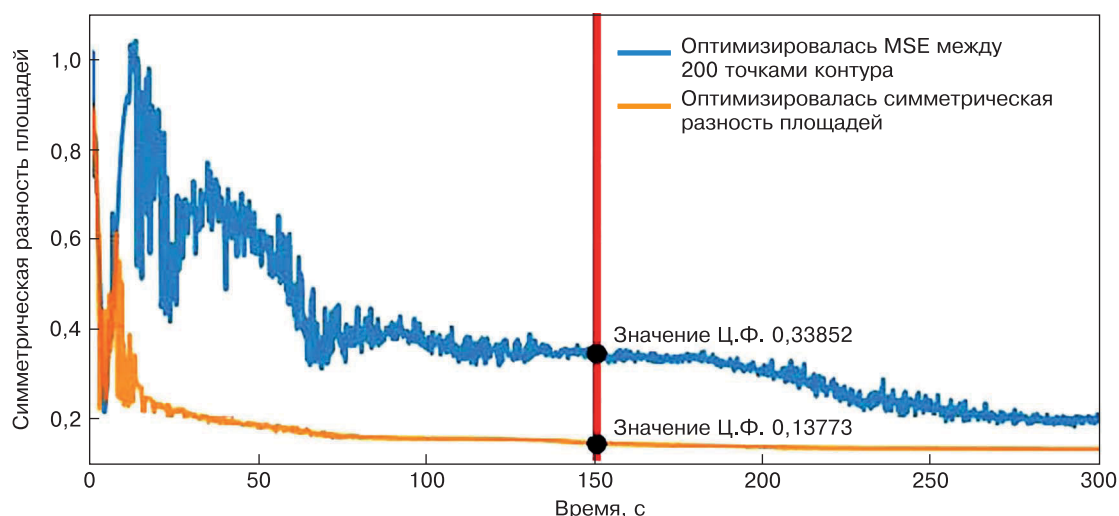


Рис. 4. Сравнение работы алгоритмов экстракции с целевой функцией на основе симметрической разности площадей и MSE между 200 точками рассматриваемых контуров

Fig. 4. Comparison of the operation of extraction algorithms with an objective function based on the symmetric area difference and MSE between 200 points of the considered contours

признаков экспериментальной и модельной ВАХ в степени приписанных каждому признаку весов. Полный список выделенных признаков и приписанных им весов представлен в табл. 1. Номера точек, фигурирующие в табл. 1 соответствуют особым точкам на рис. 5.

Было проведено аналогичное сравнение разработанного алгоритма с двумя рассмотренным

ранее. Результаты этого сравнения можно видеть на рис. 6. Для большей наглядности работа каждого алгоритма отображена на отдельном графике.

Заключение

Как видно из рис. 6, наилучшим вариантом (в рассматриваемом частном случае), как и раньше является алгоритм на основе симметрической разности площадей. Тем не менее алгоритм на основе признаков ВАХ не слишком уступает ему в точности, при этом предлагая широкий функционал по тонкой настройке.

Таблица 1

Список выделенных признаков ВАХ и приписанных им весов

The list of selected I-V characteristics features and the weight assigned to them in the comparison of parameters

Название признака ВАХ	Приписанный вес
Дифференциальная проводимость на ветви 4—7 (R_{on})	3
Ток в точках 4, 7	7
Напряжение в точках 4, 7, 2, 9	1,5
Ток в точках 2, 9	4
Расстояние от точки 2 до ветви 0—4	3
Расстояние от точки 9 до ветви 0—7	3
Площадь правого и левого лепестка ВАХ	7
Разница между площадями правого и левого лепестка ВАХ	1,5
Длина ветви 2—4, 7—9	4
Длина ветви 0—2, 4—0, 0—7, 0—9	1,5
Производная в серединах ветвей 2—3, 3—4, 8—9, 7—8	1,5
Кривизна в точках 1, 3, 5, 6, 8, 10	2

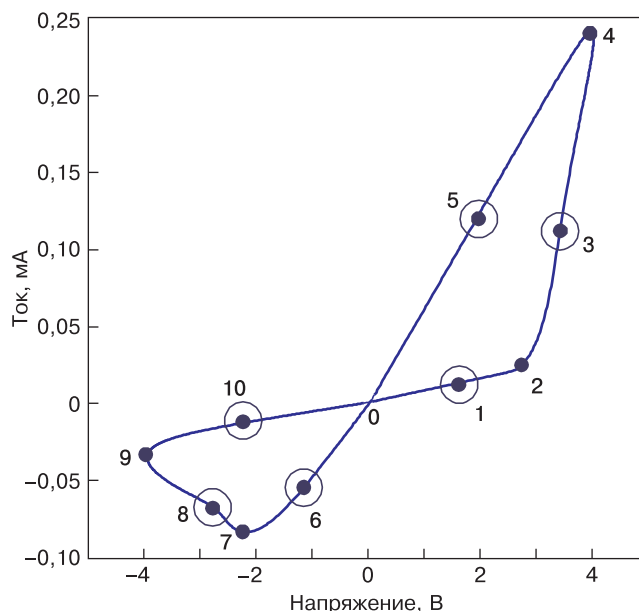


Рис. 5. Особые точки ВАХ (пояснение к табл. 1)

Fig. 5. Singular points of the I-V characteristics (explanation to Table 1)

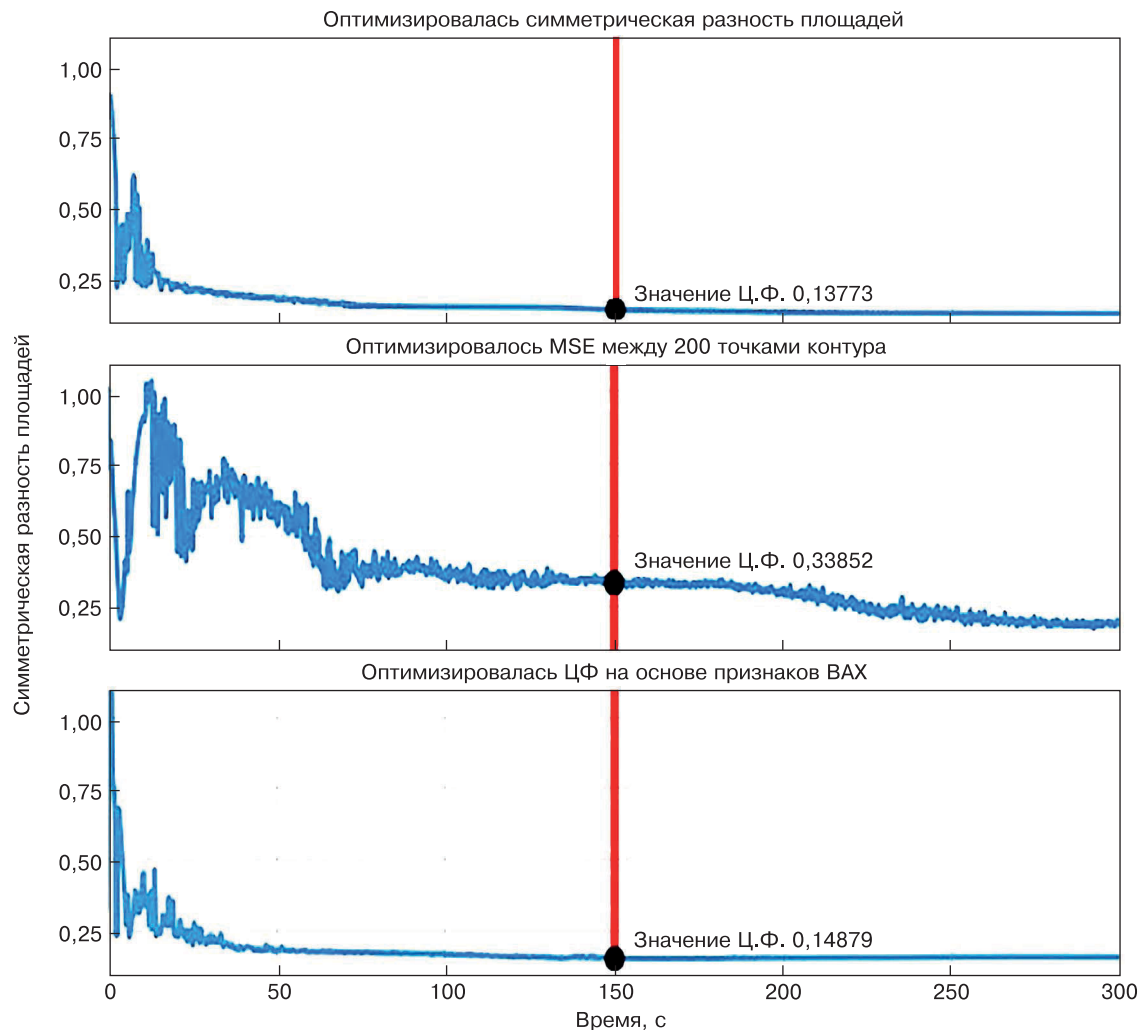


Рис. 6. Сравнение алгоритма на основе признаков ВАХ с алгоритмами на основе симметрической разности площадей и MSE между 200 точками обрабатываемых ВАХ

Fig. 6. Comparison of the algorithm based on the I–V characteristics with algorithms based on the symmetric area difference and MSE between 200 points of the processed I–V characteristics

Библиографический список

1. Strukov D.B., Snider G.S., Stewart D., Williams S. The missing memristor found. *Nature*. 2008; 453(7191): 80—83. <https://doi.org/10.1038/nature06932>
2. Pershin Y.V., Di Ventra M. On the validity of memristor modeling in the neural network literature. *Neural Networks*. 2020; 121: 52—56. <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2019.08.026>
3. Al Chawa M.M., Picos R. A simple quasi-static compact model of bipolar ReRAM memristive devices. *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs*. 2019; 67(2): 390—394. <https://doi.org/10.1109/TCSII.2019.2915825>
4. Garcia A.A., Reyes L.O. Analysis and parameter extraction of memristive structures based on Strukov's non-linear model. *Journal of Semiconductors*. 2018; 39(12): 124009. <https://doi.org/10.1088/1674-4926/39/12/124009>
5. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологии и микроэлектроника. *Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника*. В 3 ч. Ч. 1. Уровни описания технологии. 2017; 1(165): 51—69. Ч. 2. Вопросы метода и классификации. 2017; 4(168): 16—41. Ч. 3. Уровень технологической операции. 2018; 3(171): 63—93.
6. Bartz-Beielstein T., Doerr C., Bossek J., Chandrasekaran S., Eftimov T., Fischbach A., Kerschke P., López-Ibáñez M., Malan K., Moore J.H., Naujoks B., Orzechowski P., Volz V., Wagner M., Weise T. Benchmarking in optimization: Best practice and open issues. NY, USA: Cornell University; 2020. 50 p. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110382>
7. Brownlee J. A note on research methodology and benchmarking optimization algorithms. Technical Report. Melbourne, Australia: Swinburne University of Technology; Victoria, Australia, 2007. 6 p.
8. Zhevnenko D., Meshchaninov F., Kozhevnikov V., Shamin E., Gornev E., Belov A., Gerasimova S., Guseinov D., Mikhaylov A. Simulation of memristor switching time series in response to spike-like signal. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2021; 142: 110382. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110382>
9. Yakopcic C., Taha T., Subramanyam G., Pino R., Rogers S. A memristor device model. *IEEE Electron Device Letters*. 2011; 32(10): 1436—1438. <https://doi.org/10.1109/LED.2011.2163292>
10. Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*. 1965; 7(4): 308—313. <https://doi.org/10.1093/COMJNL/7.4.308>

References

1. Strukov D.B., Snider G.S., Stewart D., Williams S. The missing memristor found. *Nature*. 2008; 453(7191): 80—83. <https://doi.org/10.1038/nature06932>
2. Pershin Y.V., Di Ventra M. On the validity of memristor modeling in the neural network literature. *Neural Networks*. 2020; 121: 52—56. <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2019.08.026>
3. Al Chawa M.M., Picos R. A simple quasi-static compact model of bipolar ReRAM memristive devices. *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs*. 2019; 67(2): 390—394. <https://doi.org/10.1109/TCSII.2019.2915825>
4. Garcia A.A., Reyes L.O. Analysis and parameter extraction of memristive structures based on Strukov's non-linear model. *Journal of Semiconductors*. 2018; 39(12): 124009. <https://doi.org/10.1088/1674-4926/39/12/124009>
5. Krasnikov G.Y., Gornev E.S., Matushkin I.V. General theory of technology and microelectronics. *Electronic Engineering. Series 3. Microelectronics*. In 3 p. Part 1. Levels of technology. 2017; 1(165): 51—59. Part 2. Issues of methodology and classification. 2017; 4(168): 16—41. Part 3. Technological operation level. 2018; 3(171): 63—93. (In Russ.)
6. Bartz-Beielstein T., Doerr C., Bossek J., Chandrasekaran S., Eftimov T., Fischbach A., Kerschke P., López-Ibáñez M., Malan K., Moore J.H., Naujoks B., Orzechowski P., Volz V., Wagner M., Weise T. Benchmarking in optimization: Best practice and open issues. NY, USA: Cornell University; 2020. 50 p. <https://doi.org/10.1016/j.arxiv.2007.03488>
7. Brownlee J. A note on research methodology and benchmarking optimization algorithms. Technical Report. Melbourne, Australia: Swinburne University of Technology; 2007. 6 p.
8. Zhevnenko D., Meshchaninov F., Kozhevnikov V., Shamin E., Gornev E., Belov A., Gerasimova S., Guseinov D., Mikhaylov A. Simulation of memristor switching time series in response to spike-like signal. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2021; 142: 110382. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110382>
9. Yakopcic C., Taha T., Subramanyam G., Pino R., Rogers S. A memristor device model. *IEEE Electron Device Letters*. 2011; 32(10): 1436—1438. <https://doi.org/10.1109/LED.2011.2163292>
10. Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*. 1965; 7(4): 308—313. <https://doi.org/10.1093/COMJNL/7.4.308>

Информация об авторах / Information about the authors

Шамин Евгений Сергеевич — аспирант, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; научный сотрудник, АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-0470-350X>; e-mail: eshamin@niime.ru

Горнев Евгений Сергеевич — чл.-корр. РАН, доктор тех. наук, профессор, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; заместитель руководителя приоритетного технологического направления — начальник управления РПТН, АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; <https://orcid.org/0000-0003-1706-4142>; e-mail: egornev@niime.ru

Evgeniy S. Shamin — Postgraduate Student, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; Researcher, Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Academician Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-0470-350X>; e-mail: eshamin@niime.ru

Evgeniy S. Gornev — Corresponding Member of RAS, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; Deputy Head of Priority Technological Direction – Head of PTD Department, Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Academician Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; <https://orcid.org/0000-0003-1706-4142>; e-mail: egornev@niime.ru

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 30.12.2021; принята к публикации 15.01.2022
Received 24 December 2021; Revised 30 December 2021; Accepted 15 January 2022

УДК 621.315:004.94

Математическое моделирование кристаллической структуры перовскита и двойного перовскита

© 2021 г. П. А. Сеченых^{1,2,✉}

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

✉ Автор для переписки: p-sechenyh@mail.ru

Аннотация. В работе рассмотрено моделирование материалов с кристаллической структурой перовскита и двойного перовскита. Из-за высокой сложности получения объектов микро- и наноразмеров данные о структуре и свойствах таких материалов особенно важны. Это делает актуальным применение компьютерного моделирования для прогнозирования требуемых характеристик материалов. Электронные, магнитные, механические и другие свойства кристаллических веществ обусловлены особенностью их строения — периодичностью и симметрией решетки. В работе рассматриваются соединения с общими химическими формулами ABO_3 и $A_2BB'O_6$ и кристаллической решеткой кубического типа симметрии — структурные типы перовскит (*Perovskite*) и двойной перовскит (*Double Perovskite*). Использована модель ионно-атомных радиусов, широко распространенная при моделировании различных кристаллических структур. Показано применение алгоритма имитации отжига для вычисления метрических параметров рассматриваемых соединений. Используемая в работе программная реализация алгоритма позволяет по заданной химической формуле и пространственной группе симметрии вычислить координаты атомов, входящих в элементарную ячейку кристаллической решетки, постоянную решетки и плотность упаковки атомов в ячейке кристалла. Перечисленные структурные характеристики могут быть использованы для последующего определения электронных, магнитных, тепловых свойств перовскитоподобных соединений. В статье приведено сравнение значений постоянных решетки, полученных в результате численного моделирования, с опубликованными в открытых источниках данными.

Ключевые слова: структура перовскита, структура двойного перовскита, алгоритм имитации отжига, плотная упаковка

Для цитирования: Сеченых П.А. Математическое моделирование кристаллической структуры перовскита и двойного перовскита. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 255—259. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-255-259>

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Mathematical modeling of the perovskite and double perovskite crystal structures

P. A. Sechenykh^{1,2,✉}

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia*

✉ Corresponding author: p-sechenyh@mail.ru

Abstract. The paper considers the problem of modeling materials with the crystal structure of perovskite and double perovskite. Due to the high complexity of obtaining micro- and nanoscale objects, data on the structure and properties of such materials are especially important. This makes it relevant to use computer modeling to predict the required characteristics of materials. Electronic, magnetic, mechanical and other properties of crystalline substances are determined by the specificity of their structure – the periodicity and symmetry of the lattice. The paper considers compounds with the common chemical formulas ABO_3 and $A_2BB'O_6$ and the crystal lattice of cubic symmetry type are the structural types Perovskite and Double Perovskite. The model of ion-atomic radii, widely used in modeling various crystal structures, is applied. The application of the annealing simulation algorithm to calculate the metric parameters of the compounds under consideration is shown. The software implementation of the algorithm used in the work makes it possible to calculate the coordinates of the atoms included in the elementary cell of the crystal lattice, the lattice constant and the packing density of atoms in the crystal cell according to the given chemical formula and the spatial symmetry group. The listed structural characteristics can be used for the subsequent determination of the electronic, magnetic, and thermal properties of perovskite-like compounds. The article presents a comparison of the values of the lattice constants obtained as a result of numerical modeling with the data published in open sources.

Keywords: perovskite structure, double perovskite structure, annealing simulation algorithm, close packing

For citation: Sechenykh P.A. Mathematical modeling of the perovskite and double perovskite crystal structures. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 255–259. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-255-259>

Введение

Материалы с перовскитоподобной структурой широко востребованы в микроэлектронике, в частности, при разработке солнечных батарей, оптоэлектронных приборов и фотоэлементов. Высокая сложность получения таких материалов обуславливает необходимость применять методы математического моделирования для прогнозирования их свойств.

В работе исследовались соединения с кубической кристаллической решеткой, реализуемые в следующих структурных типах:

– перовскит (рис. 1; пространственная группа симметрии $Pm\bar{3}m$, общая химическая формула ABO_3),

– двойной перовскит (рис. 2; пространственная группа симметрии $Fm\bar{3}m$, общая химическая формула $A_2BB'O_6$),

здесь A, B, B' — катионы с различным химическим составом, в качестве аниона рассматривался кислород.

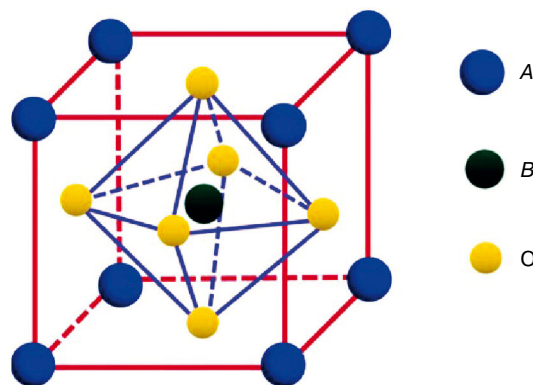


Рис. 1. Структура перовскита
Fig. 1. Perovskite structure

Данная статья посвящена численному моделированию метрических характеристик соединений с кристаллической решеткой перовскита и двойного перовскита.

Расчет метрических параметров

К метрическим параметрам кристаллических соединений, в частности, относятся постоянные решетки и координаты атомов, входящих в элементарную ячейку.

Для решения поставленной задачи была применена модель ионно-атомных радиусов, подробно описанная в работах [1, 2].

Согласно данной модели, атомы химических элементов представляют собой твердые шары с заданными радиусами. Плотность упаковки определяется как отношение суммарного объема атомов, входящих в элементарную ячейку, к ее объему.

Необходимо найти конфигурацию атомов элементарной ячейки, при которой будет достигнуто минимальное значение объема ячейки, так как оно будет соответствовать максимальному значению плотности упаковки. Если значение плотности упаковки попадает в интервал $[0,47, 0,74]$, то кристаллохимическое соединение считается устойчивым в рамках данной модели [1, 2].

Для расчета метрических параметров и плотности упаковки соединений, реализуемых в рассматриваемых структурных типах, использовалась собственная программная реализация алгоритма имитации отжига на языке программирования C# [2—4]. Входными параметрами этой реализации служат химическая формула соединения, пространственная группа симметрии, радиусы атомов химических элементов и справочная кристаллографическая информация (в частности, операции симметрии и позиции Уайкова, допустимые в выбранной пространственной группе [5—7]).

Таблица 1

Рассматриваемые соединения

Compounds under consideration

Группа симметрии	Атом	Позиция Уайкова	Катионы
$Pm\bar{3}m$	A	1a	$\text{Ca}^{2+}, \text{Ba}^{2+}, \text{La}^{3+}, \text{Sr}^{2+}$
	B	1b	$\text{Ti}^{4+}, \text{Al}^{3+}, \text{Fe}^{3+}$
	O	3c	$(\text{O}^{2-}\text{—анион})$
$Fm\bar{3}m$	A	8c	$\text{Sr}^{2+}, \text{La}^{3+}, \text{Ba}^{2+}$
	B	4a	$\text{Fe}^{3+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Co}^{2+}$
	B'	4b	$\text{Mo}^{5+}, \text{Mo}^{6+}, \text{Ti}^{4+}, \text{W}^{6+}$
	O	24e	$(\text{O}^{2-}\text{—анион})$

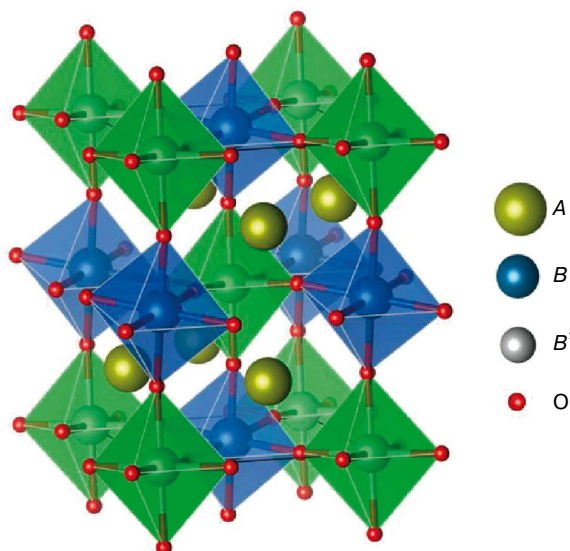


Рис. 2. Структура двойного перовскита

Fig. 2. Structure of double perovskite

Выходными параметрами являются постоянные решетки, координаты атомов, а также плотность упаковки атомов.

В табл. 1 приведена информация о кристаллической решетке структурных типов перовскита и двойного перовскита (пространственная группа симметрии и позиции Уайкова), использованная в качестве входных данных при расчете.

Доступ к справочным кристаллографическим данным осуществляется с использованием библиотеки Entity Framework 6.1.3 для взаимодействия с системой управления базами данных (СУБД) и обработки информации, хранимой в базе данных [2, 8]. Для работы была выбрана реляционная СУБД MS SQL Server [9].

Радиусы атомов химических элементов были взяты из [10].

Результаты расчетов

Были рассмотрены наиболее распространенные химические соединения, реализуемые в описанных структурных типах.

Основные результаты вычислений приведены в табл. 2.

Данные, приведенные в табл. 2, показывают, что результаты расчета структурных характеристик рассмотренных соединений близки к опубликованным значениям [11, 12].

Заключение

В работе выполнено моделирование материалов с кристаллической структурой перовскита и двойного перовскита. Рассчитанные значения метрических параметров согласуются с экспериментальными данными. Полученные результаты могут быть ис-

Таблица 2

Структурные характеристики
Structural characteristics

Химическая формула	Группа симметрии	Плотность упаковки ρ	Постоянная решетки a (выч.), нм	Постоянная решетки a (таб.), нм*	Относительная погрешность
SrTiO ₃	$Pm\bar{3}m$	0,566	0,401	0,3899	0,0285
BaTiO ₃	$Pm\bar{3}m$	0,577	0,401	0,397	0,0101
CaTiO ₃	$Pm\bar{3}m$	0,513	0,401	0,399	0,0050
LaAlO ₃	$Pm\bar{3}m$	0,572	0,387	0,378	0,0238
LaFeO ₃	$Pm\bar{3}m$	0,517	0,402	0,387	0,0388
Sr ₂ FeMoO ₆	$Fm\bar{3}m$	0,593	0,7880	0,7899	0,0024
La ₂ CuTiO ₆	$Fm\bar{3}m$	0,483	0,8270	0,7869	0,0509
Sr ₂ CoMoO ₆	$Fm\bar{3}m$	0,555	0,8080	0,7918	0,0205
Ba ₂ CoWO ₆	$Fm\bar{3}m$	0,566	0,8100	0,8103	0,0004

* Постоянная решетки a (таб.) представлена по данным литературных источников [11, 12].

пользованы при проведении квантовомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [13, 14], с помощью которых можно уточ-

нить структуру системы атомов, а также рассчитать электронные, магнитные, тепловые свойства перовскитоподобных соединений.

Библиографический список

1. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс; 2017. 284 с.
2. Сеченых П.А. Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2019; 22(4): 268—271. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-4-268-271>
3. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*. 1949; 44(247): 335—341. <https://doi.org/10.2307/2280232>
4. Документация по C#. <https://docs.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (дата обращения: 02.11.2019).
5. De Graef M., McHenry M. Structure of materials (2nd ed.). Cambridge University Press; 2012. 767 p.
6. Солодовников С.Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии (словарь-пособие). Новосибирск: ИНХ СО РАН; 2005. 113 с.
7. Hahn Th. International tables for crystallography. Vol. A: Space group symmetry. Springer; 2005. 911 p. <https://doi.org/10.1107/97809553602060000100>

8. Документация по Entity Framework 6.1.3. <https://docs.microsoft.com/ru-ru/ef/> (дата обращения: 01.11.2021).
9. Документация по MS SQL Server. <https://docs.microsoft.com/ru-ru/sql/relational-databases/sql-server-guides?view=sql-server-2017/> (дата обращения: 01.11.2021).
10. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность / пер. с англ. под ред. Б.Д. Степина, Р.А. Лидина. М.: Химия; 1987. 696 с.
11. Crystallography open database. <http://www.crystallography.net/cod/> (дата обращения 10.09.2021).
12. Зиненко В.И., Павловский М.С., Шинкоренко А.С. Электронная структура, динамика решетки и магнитоэлектрические свойства двойного перовскита La₂CuTiO₆. *Физика твердого тела*. 2016; 58(11): 2212—2217. <https://doi.org/10.21883/ftt.2016.11.43743.97>
13. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*. 1964; 136(3B): 864. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
14. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*. 1965; 140(4A): 1133. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

References

1. Abgaryan K.K. Multiscale modeling in problems of structural materials science. Moscow: MAKS Press; 2017. 284 p. (In Russ.)
2. Sechenykh P.A. Mathematical modeling of perspective structures of metal oxides. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019; 22(4): 268—271. (In Russ.) <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-4-268-271>

3. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*. 1949; 44(247): 335—341. <https://doi.org/10.2307/2280232>
4. Documentation on C#. <https://docs.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (accesses on: 02.11.2019).
5. De Graef M., McHenry M. Structure of materials (2nd ed.). Cambridge University Press; 2012. 767 p.

6. Solodovnikov S.F. Basic terms and concepts of structural crystallography and crystal chemistry. Novosibirsk: INKh SO RAN; 2005. 113 p. (In Russ.)
7. Hahn Th. International tables for crystallography. Vol. A: Space group symmetry. Springer; 2005. 911 p. <https://doi.org/10.1107/97809553602060000100>
8. Documentation on Entity Framework 6.1.3. <https://docs.microsoft.com/ru-ru/ef/> (accesses on: 01.11.2021).
9. Documentation on MS SQL Server. <https://docs.microsoft.com/ru-ru/sql/relational-databases/sql-server-guides?view=sql-server-ver15> (accesses on: 01.11.2021).
10. Huheey J.E. Inorganic chemistry. The structure of matter and reactivity. B.D. Stepina, R.A. Lidina (eds.). Moscow: Khimiya; 1987. 696 p. (In Russ.)
11. Crystallography open database. <http://www.crystallography.net/cod/> (accesses on: 10.09.2021).
12. Zinenko V.I., Pavlovskii M.S., Shinkorenko A.S. Electronic structure, lattice dynamics, and magnetoelectric properties of double perovskite $\text{La}_2\text{CuTiO}_6$. *Physics of the Solid State*. 2016; 58(11): 2294—2299. <https://doi.org/10.1134/S1063783416110408>
13. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*. 1964; 136(3B): 864. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
14. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*. 1965; 140(4A): 1133. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

Информация об авторе / Information about the author

Сеченых Полина Алексеевна — младший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; старший преподаватель, Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия; e-mail: p-sechenyh@mail.ru

Polina A. Sechenykh — Junior Researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; Senior Lecturer, Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia; e-mail: p-sechenyh@mail.ru

Поступила в редакцию 03.12.2021; поступила после доработки 20.12.2021; принята к публикации 21.01.2022

Received 3 December 2021; Revised 20 December 2021; Accepted 21 January 2022

УДК 621.315:004.94

Исследование сегрегации примеси никеля на открытых поверхностях структуры LSNT перовскита методом первопринципной молекулярной динамики

© 2021 г. А. А. Чистякова¹, Д. И. Бажанов^{1,2,3,✉}

¹ *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия*

² *Федеральный исследовательский центр
«Информатика и управление» Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

³ *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

✉ Автор для переписки: dima@kintechlab.ru

Аннотация. В работе методом первопринципной молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности исследуется сегрегация примеси Ni в направлении открытых поверхностей легированного перовскита титаната стронция на примере модельной ячейки со стехиометрией $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{TiO}_{3x}$. Представленные исследования основываются на недавних экспериментальных наблюдениях по сегрегации примесных атомов Ni и их стремлении образовывать кластеры вблизи границ дефектов структуры перовскита $\text{La}_{0.2}\text{Sr}_{0.7}\text{Ni}_{0.1}\text{Ti}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$ (LSNT). Результаты первопринципных расчетов энергии сегрегации показали, что Ni действительно активно сегрегирует в направлении открытых поверхностей. Было обнаружено, что в процессе сегрегации атомы никеля выходят из кристаллического объема к поверхности перовскита и поднимаются над ее верхнем слое. Таким образом результаты расчетов подтверждают данные экспериментальных наблюдений по сегрегации и формированию кластеров никеля на открытых поверхностях LSNT.

Ключевые слова: перовскит, сегрегация, кластер, катион, LST и LSNT материалы, подрешетка, теория функционала плотности

Благодарности: Авторы благодарят за финансовую поддержку Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 19–29–03051мк). Первопринципные расчеты проводились с использованием возможностей центра коллективного пользования вычислительными ресурсами МСЦ РАН.

Для цитирования: Чистякова А.А., Бажанов Д.И. Исследование сегрегации примеси никеля на открытых поверхностях структуры LSNT перовскита методом первопринципной молекулярной динамики. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 260—266. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-260-266>

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

The study of nickel impurity segregation on LSNT perovskite open surfaces by means of *ab initio* molecular dynamics

A. A. Chistyakova¹, D. I. Bazhanov^{1,2,3,✉}

¹ *Lomonosov Moscow State University,
1–2 Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia*

² *Federal Research Center “Computer Science and Control”
of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia*

³ *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia*

✉ Corresponding author: dima@kintechlab.ru

Abstract. In this paper, the segregation of the Ni impurity on open surfaces of the doped strontium titanate perovskite is investigated by means of *ab initio* molecular dynamics method based on the density functional theory and applied to a model periodic cell with stoichiometry $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{TiO}_3$ (LST). The performed studies are based on recent experimental observations on the segregation of Ni impurity atoms and their tendency to form clusters at the boundaries of defect structure of $\text{La}_{0.2}\text{Sr}_{0.7}\text{Ni}_{0.1}\text{Ti}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$ (LSNT) perovskite. The results of the first-principles calculations of segregation energy showed that Ni does actively segregate toward the open surfaces. It was found that during segregation, nickel atoms leave the crystal volume to the perovskite surface and rise above its upper layer. Thus, the obtained results confirm the experimental data on the segregation and formation of nickel clusters on open LSNT surfaces.

Keywords: perovskite, segregation, cluster, cation, LST and LSNT materials, sublattice, density functional theory

Acknowledgment. The authors are grateful for financial support from the Russian Foundation for Basic Research (grant No. 19–29–03051mk). *Ab initio* calculations were carried out using the capabilities of the center for the collective use of computing resources of the Interdepartmental Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences.

For citation: Chistyakova A.A., Bazhanov D.I. The study of nickel impurity segregation on LSNT perovskite open surfaces by means of *ab initio* molecular dynamics. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 260–266. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-260-266>

Введение

Традиционные ископаемые виды топлива являются основными источниками энергии в настоящее время и в обозримом будущем. Однако источники энергии этого типа ограничены по своей природе и не возобновляемы, что может привести к серьезным энергетическим кризисам в будущем [1].

Твердооксидные топливные элементы появились как эффективная и экологически безопасная технология для решения некоторых проблем энергетической промышленности. Типичный одиночный элемент твердооксидного топливного элемента состоит из трех основных компонентов: катода, анода и керамического электролита. В настоящее время предприняты активные усилия по разработке но-

вых анодных катализаторов, поскольку одной из основных проблем, связанных с использованием углеводородного топлива в твердооксидных топливных элементах, является закоксовывание анодного катализатора и отравление серой [2].

Перовскиты, класс оксидов металлов, недавно заняли лидирующее положение в классе соединений, которые были исследованы в качестве электродных материалов для топливных элементов. Перовскиты состоят из подрешеток двух типов: «А» и «В», таким образом, общая структура перовскита записывается как ABX_3 , где А и В — катионы, а X — анион (чаще всего кислород) [1, 3].

Перовскиты на основе титаната стронция (SrTiO_3), легированные La (LST материалы, например: $\text{La}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{TiO}_3$, $\text{La}_{0.1}\text{Sr}_{0.9}\text{TiO}_3$ и др.), широко

исследуются из-за их высокой электронной проводимости, превосходной химической стабильности при окислительно-восстановительных реакциях и стойкости к углеводородным соединениям [4]. Высокий интерес также представляют LSMT соединения, допированные другими каталитически активными металлами (М) в 'В'-подрешетке (например, $\text{La}_{0,2}\text{Sr}_{0,25}\text{Ca}_{0,45}\text{TiO}_3$ (LSCT), $\text{La}_{0,4}\text{Sr}_{0,4}\text{Ga}_{0,05}\text{Ti}_{0,95}\text{O}_3$ (LSGT) и др.) [5].

Стоит также отметить, что титанат стронция используется для построения таких систем как мемристоры. Их работа основана на явлении резистивного переключения на основе окислительно-восстановительного потенциала. Такие системы имеют большие перспективы для применения в памяти следующего поколения и нейроморфных нитях на различных этапах эволюции. Резистивное переключение включает образование и разрушение электропроводящих нитей за счет миграции ионов, сопровождающейся локальными электрохимическими окислительно-восстановительными реакциями. Титанат стронция в таких системах служит в качестве оксидной прослойки, в которой образуются эти нити [6].

В связи со всеми вышеперечисленными свойствами перовскитов, в данной работе исследуется сегрегация примеси Ni в соединении $\text{La}_{0,2}\text{Sr}_{0,7}\text{Ni}_{0,1}\text{Ti}_{0,9}\text{O}_{(3-\delta)}$ (LSNT) [5]. Нашей целью является подтверждение экспериментальных данных о сегрегации Ni к поверхности данного перовскита и формирование им кластеров на этой поверхности.

Метод моделирования

В результате экспериментальных исследований было обнаружено, что примесные атомы Ni сегрегируют в 'В'-подрешетке из кристаллического массива в направлении поверхности перовскита,

формируя на ней кластеры. Также было установлено, что наличие двух разных катионов с разными размерами в подрешетке 'А' в блоках перовскита и их упорядочение в локальных областях, могут быть причиной возникновения противофазных границ (*Antiphase Boundaries* — **APB**). [1, 3] Из литературных источников [4] известно, что наличие APB в свою очередь приводит к химической неоднородности в локальных областях и улучшает сегнетоэлектрическую усталостную способность слоистых оксидов перовскита. Это подтверждается проведенным исследованием оксида перовскита с помощью просвечивающей электронной микроскопии.

Мы предполагаем, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, дислокации, APB и др.), которые приводят к активной кластеризации атомов Ni вблизи границ дефектов структуры. Как следствие, в результате сегрегации и кластеризации никеля может возрастать каталитическая активность и электрохимические характеристики соединения [1]. Важно отметить, что для 'А'-подрешетки перовскита необходимо наличие именно двух типов катионов, в нашей системе это La и Sr. Это связано с тем, что в процессе формирования APB, разные типы катионов не создают кластеры, а наоборот заполняют межузельные пространства 'А'-подрешетки равномерно, образуя более упорядоченную структуру, что делает APB стабильной. Используя методы математического моделирования и пакет VASP (*Vienna ab initio Simulation Package*) [7–9] для выполнения квантово-механических вычислений, мы исследуем сегрегацию Ni на примере модельной LST ячейки со стехиометрией $\text{La}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{TiO}_3$ [10]. Мы рассматриваем процесс сегрегации в направлении двух поверхностей LST(001) и LST(110), в виду того, что данные поверхности участвуют в формиро-

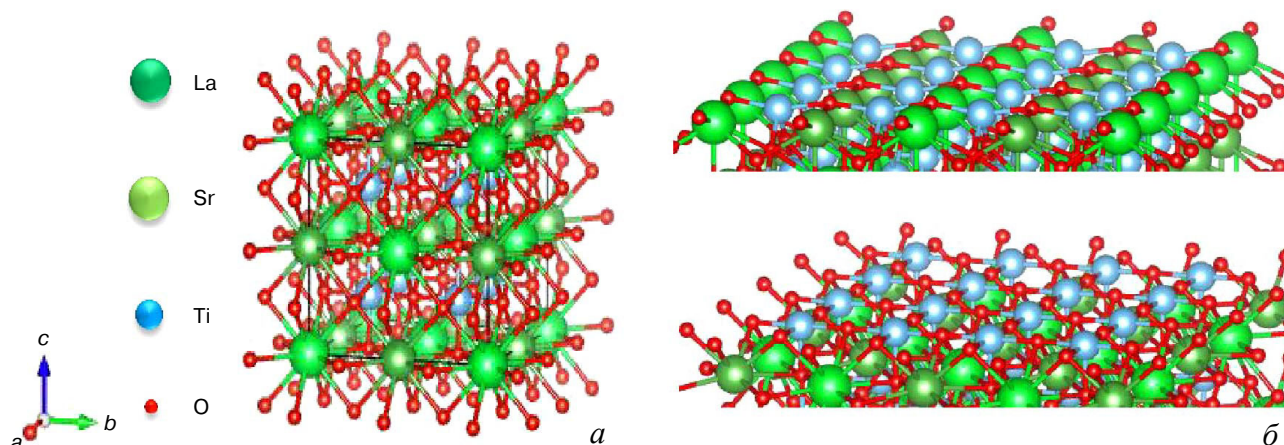


Рис. 1. Модельная ячейка $\text{La}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{TiO}_3$ (а) и модельные периодические структуры открытых поверхностей (б) SLTO (LST(110)) (вверху) и TiO (LST(001)) (снизу).

Темно-зеленым цветом обозначены атомы La, светло-зеленым атомы Sr, голубым атомы Ti, красным атомы O

Fig. 1. Model cell $\text{La}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{TiO}_3$ (a) and model periodic structures of open surfaces (б) SLTO (LST(110)) (top) and TiO (LST(001)) (bottom). La atoms are shown in dark green, Sr atoms in light green, Ti atoms in blue, and O atoms in red

нии дефектов структуры, таких как дислокации и APB в LST (рис. 1), а также потому, что именно на этих поверхностях наблюдался значительный рост кластеров Ni [10].

Сегрегация исследуется на основе расчета энергии сегрегации E_{seg} , которая определяется, как разность полных энергий системы с металлом М в 'В'-подрешетке, расположенным на поверхности и в объеме [10]:

$$E_{\text{seg}} = E_{(\text{B})\text{surf}} - E_{(\text{B})\text{bulk}},$$

где $E_{(\text{B})\text{surf}}$ и $E_{(\text{B})\text{bulk}}$ — полные энергии системы с примесным металлом в 'В'-подрешетке, расположенным вблизи поверхности и внутри кристаллического массива соответственно. Согласно такому определению более отрицательное значение энергии сегрегации означает более предпочтительное направление сегрегации к открытой поверхности. Расчет полной энергии системы проводится в рамках теории функционала плотности [8, 9] через решение уравнений Кона—Шэма по формуле [11]:

$$E_{\text{полн}} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \frac{n'(r)n'(r')}{|r-r'|} dr' dr + \\ + E_{xc}[n] - \int v_{xc}(n)n(r)dr,$$

где ε_i — действительные собственные значения гамильтониана Кона—Шэма; $v_{xc}(r)$ — функциональная производная; E_{xc} — обменно-корреляционная энергия [12].

Решение уравнений Кона—Шэма определяет одночастичные ε_i энергии и волновые функции для занятых и незанятых электронных состояний. Преимущество уравнений Кона—Шэма состоит в том, что они включают как корреляцию, так и обменное взаимодействие, таким образом, позволяя получить довольно точные результаты при расчетах.

Уравнения Кона—Шэма решаются в рамках подхода суперячейки с учетом периодических граничных условий и базисного набора плоских волн. Расширение базиса плоских волн было ограничено энергией отсечки 400 эВ для описания электронных состояний в системе. Эффекты электронного обмена и корреляции были учтены с помощью приближения обобщенного градиента (GGA) в рамках трактовки Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [13].

Для расчетов полной энергии и силы мы использовали PAW-метод, основанный на полностью электронном проекторе [14]. Схема Монкхорста—Пака [15] использовалась для семплирования по k -точкам зоны Бриллюэна (BZ), в то время как интегрирование по BZ выполнялось на Γ -центрированной сетке $4 \times 4 \times 1$ k -точечной сетки с использованием метода тетраэдров с поправками Блохля [16]. Эта сетка по k -точкам оказалась оптимальной для всех расчетов модели.

Структурная релаксация геометрии открытых поверхностей была выполнена с помощью квази-ньютонского алгоритма с использованием прямого расчета сил Геллмана—Фейнмана, действующих на каждый атом. Суммарные энергии всех открытых поверхностей были сведены к 1 мэВ/атом, в то время как остаточная сила, действующая на каждый атом, была меньше 0,001 эВ/нм. Мы обнаружили, что выбранные параметры обеспечивают достаточную надежность в точности проведенных расчетов. Кроме того, чтобы учесть сильное локальное кулоновское отталкивание среди 3d-электронов перовскита LSTN, был применен GGA + U -подход, где эффективное кулоновское отталкивание U_{eff} было выбрано равным 4,6 и 6,0 эВ соответственно для атомов Ti и Ni соответственно [17].

Результаты и их обсуждение

Нами были проведены первопринципные исследования сегрегации в направлении двух поверхностей LST перовскита. При расчетах были использованы две модельные поверхности для рассмотрения процесса сегрегации: TiO-терминированная (LST(001)) и SLTO-терминированная (LST(110)), поскольку именно на этих поверхностях наблюдался активный рост кластеров Ni [10]. На основе изображений, полученных с помощью просвечивающей электронной микроскопии [18], были построены две поверхностные модели открытых поверхностей вдоль плоскостей (110) и (010) с использованием псевдокубической элементарной ячейки $\text{La}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{TiO}_3$ с оптимизированной структурой $Pm3m$ ($a = b = c = 0,7889$ нм) (см. рис. 1). Для данных поверхностных моделей были проведены расчеты полной энергии системы. Результаты расчетов показали, что в направлении открытых поверхностей сегрегация идет очень активно, и Ni действительно может сегрегировать в направлении этих поверхностей, образуя каталитические частицы согласно экспериментальным данным (рис. 2 и табл. 1). Было проведено сравнение расстояний между атомами O и Ti при отсутствии Ni в структуре кристаллической решетки и между атомами O и Ni, когда никель включен в структуру. Согласно релаксационным расчетам установлено, что межузельное пространство увеличивается при замещении титана никелем (расстояние $r_{\text{Ti-O}} = 0,0245$ нм в отсутствии Ni и $r_{\text{Ni-O}} = 0,0251$ нм при замещении Ni). Это говорит о том, что примесные атомы Ni меняют межатомные расстояния и привносят напряжение в структуру кристаллической ячейки перовскита, которое энергетически не выгодно системе. В результате система стремится снять напряжение за счет сегрегации примесных атомов Ni к открытой поверхности. Мы обнаружили, что в процессе сегрегации к поверхности атомы никеля выходят на поверхность и поднима-

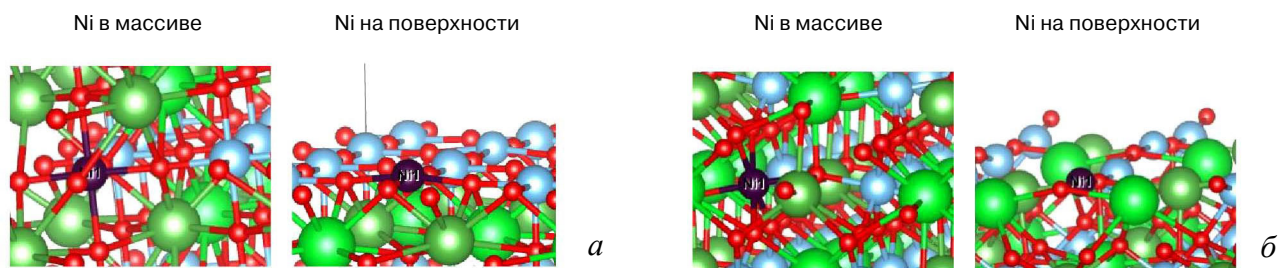


Рис. 2. Исследование процесса сегрегации на открытых поверхностях:

а — TiO-терминированная поверхность (параметры решетки: $a = 0,7889$ нм; $b = 0,7889$ нм; $c = 2,7613$ нм); б — SLTO-терминированная поверхность (параметры решетки: $a = 0,7889$ нм; $b = 1,1157$ нм; $c = 2,2315$ нм)

Fig. 2. Study of the segregation process on open surfaces: (a) TiO-terminated surface (lattice parameters: $a = 0.7889$ nm; $b = 0.7889$ nm; $c = 2.7613$ nm); (b) SLTO-terminated surface (lattice parameters: $a = 0.7889$ nm; $b = 1.1157$ nm; $c = 2.2315$ nm)

ются на высоту h над этой поверхностью. Так для TiO-терминированной поверхности было получено значение величины $h = 0,0193$ нм, а для SLTO-терминированной поверхности $h = 0,0367$ нм, что согласуется с расчетами величин энергий сегрегации для этих поверхностей. Аналогичные расчеты для чистых поверхностей без примесей показали, что для TiO-терминированной поверхности атом TiO находится фактически в верхнем слое поверхности с $h = 0,0001$ нм, тогда как для SLTO-терминированной поверхности он немного поднимается на высоту $h = 0,0054$ нм. Таким образом результаты наших расчетов подтверждают данные экспериментальных наблюдений по сегрегации примесных атомов Ni и по их стремлению образовывать кластеры за счет коллективного взаимодействия на открытых поверхностях LSNT перовскита.

Следует отметить, что перовскит, исследуемый в данной работе, является парамагнетиком, но поскольку все расчеты проводятся для системы в основном состоянии, мы можем допустить наличие спиновой поляризации внутри перовскита. В связи с этим, был проведен дополнительный анализ влияния намагниченности на сегрегацию в системе. Как показывают результаты наших расчетов, система действительно имеет тенденцию к намагничиванию. При этом наблюдается слабая поляризация атомов Ni и его локального окружения в виде намагниченности атомов Ti, как в объеме, так и на поверхности. Однако результаты расчетов показывают, что намагниченность может повлиять на величину энергии сегрегации, но не влияет на сам процесс сегрегации, что для наших расчетов является более важным результатом.

В настоящий момент проводятся дополнительные исследования влияния кислородных вакансий на сегрегацию. Согласно экспериментальным данным [8, 9], было выдвинуто предположение о том, что вакансии могут улучшать процесс сегрегации. Для подтверждения этой гипотезы необходимо сравнить два механизма сегрегации в направлении открытых поверхностей перовскита: сегрегация самих кислородных вакансий и сегрегация примесных атомов Ni вместе с кислородной вакансией. Если сегрега-

Таблица 1

Расчет энергии сегрегации никеля на открытых поверхностях

Calculation of nickel segregation energy on exposed surfaces

Расчеты	TiO-term	SLTO-term
E_{seg}	-1,01 эВ	-2,62 эВ

ция окажется энергетически выгодной, это будет означать, что на поверхности будут формироваться пустоты, образованные большим количеством кислородных вакансий. В этом случае, мы будем иметь дело с участками открытой поверхности в которые Ni может активно сегрегировать и, в конечном итоге, образовывать крупные кластеры на границе раздела поверхности в соответствии с экспериментальными наблюдениями.

Заключение

В результате проведенных исследований были рассчитаны значения энергии сегрегации примесных атомов никеля по направлению к открытым поверхностям LST(001) и LST(110) LSNT перовскита, которые показывают, что данный процесс энергетически выгоден системе. Таким образом результаты наших расчетов подтверждают данные экспериментальных наблюдений по сегрегации и формированию кластеров никеля на открытых поверхностях.

Библиографический список

1. Su D., Xu Q.Y., Zhu J.S., Wang Y.N. Comment on "Model of phase transition induced antiphase boundaries in perovskite and layered perovskite oxides" [Journal of Applied Physics. 2002; 92: 5425]. Journal of Applied Physics. 2004; 95(2): 770—771. <https://doi.org/10.1063/1.1633659>
2. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. Physical Review B. 1976; 13(12): 5188—5192. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.13.5188>
3. Han H., Park J., Nam S.Y., Kim K.J., Choi G.M., Parkin S.S.P., Jang H.M., Irvine J.T.S. Lattice strain-enhanced exsolution of nanoparticles in thin films. Nature Communi-

cation. 2019; 10(1): 1471. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-09395-4>

4. Wang L.Q., Schaffer B., MacLaren I., Miao S., Cra-ven A.J., Reaney I.M. Atomic scale structure and chemistry of anti-phase boundaries in $(\text{Bi}_{0.85}\text{Nd}_{0.15})(\text{Fe}_{0.9}\text{Ti}_{0.1})\text{O}_3$ ceramics. *Journal of Physics: Conference Series*. 2012; 371: 012036. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/371/1/012036>

5. Kim K.J., Han H., Defferriere T., Yoon D., Na S., Kim S.J., Dayaghi A.M., Son J., Oh T.-S., Jang H.M., Choi G.M. Facet-dependent in situ growth of nanoparticles in epitaxial thin films: the role of interfacial energy. *Journal of the American Chemical Society*. 2019; 141(18): 7509—7517. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b02283>

6. Du H., Jia C.-L., Koehl A., Barthel J., Dittmann R., Waser R., Mayer J. Nanosized conducting filaments formed by atomic-scale defects in redox-based resistive switching memories. *Chemistry of Materials*. 2017; 29(7): 3164—3173. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b00220>

7. VASP full version. 04.12.2018. <https://sourceforge.net/projects/vasp-full-version/>

8. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for open-shell transition metals. *Physical Review. B: Condensed Matter*. 1993; 48(17): 13115—13118. <https://doi.org/10.1103/physrevb.48.13115>

9. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review. B: Condensed Matter*. 1996; 54(16): 11169—11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>

10. Zhou X., Yan N., Chuang K., Luo J. Progress in La-doped SrTiO_3 (LST)-based anode materials for solid

oxide fuel cells. *RSC Advances*. 2014; 4: 118—131. <https://doi.org/10.1039/C3RA42666A>

11. Марч Н., Кон В., Вашишта П., Лундквист С., Уильяме А., Барт У., Лэнг Н. Теория неоднородного электронного газа / пер. с англ. М.: Мир; 1987. 400 с.

12. Kohn W. Nobel lecture: electronic structure of matter — wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*. 1999; 71: 1253—1266. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253>

13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*. 1996; 77: 3865—3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

14. Blöchl P.E. Projector augmented-wave method. *Physical Review. B: Condensed Matter*. 1994; 50(24): 17953—17979. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.50.17953>

15. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*. 1976; 13(12): 5188—5192. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.13.5188>

16. Blöchl P.E., Jepsen O., Andersen O.K. Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations. *Physical Review. B: Condensed Matter*. 1994; 49(23): 16223—16233. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.49.16223>

17. Kwon O., Sengodan S., Kim K., Kim G., Jeong H.Y., Shin J., Ju Y.-W., Han J.W., Kim G. Exsolution trends and co-segregation aspects of self-grown catalyst nanoparticles in perovskites. *Nature Communications*. 2017; 8: 15967. <https://doi.org/10.1038/ncomms15967>

18. Ding Y., Liang D.D. A model of phase transition induced antiphase boundaries in perovskite and layered. *Journal of Applied Physics*. 2002; 92: 5425—5428. <https://doi.org/10.1063/1.1510563>

References

1. Su D., Xu Q.Y., Zhu J.S., Wang Y.N. Comment on “Model of phase transition induced antiphase boundaries in perovskite and layered perovskite oxides” [*Journal of Applied Physics*. 2002; 92: 5425]. *Journal of Applied Physics*. 2004; 95(2): 770—771. <https://doi.org/10.1063/1.1633659>

2. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*. 1976; 13(12): 5188—5192. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.13.5188>

3. Han H., Park J., Nam S.Y., Kim K.J., Choi G.M., Parkin S.S.P., Jang H.M., Irvine J.T.S. Lattice strain-enhanced exsolution of nanoparticles in thin films. *Nature Communication*. 2019; 10(1): 1471. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-09395-4>

4. Wang L.Q., Schaffer B., MacLaren I., Miao S., Cra-ven A.J., Reaney I.M. Atomic scale structure and chemistry of anti-phase boundaries in $(\text{Bi}_{0.85}\text{Nd}_{0.15})(\text{Fe}_{0.9}\text{Ti}_{0.1})\text{O}_3$ ceramics. *Journal of Physics: Conference Series*. 2012; 371: 012036. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/371/1/012036>

5. Kim K.J., Han H., Defferriere T., Yoon D., Na S., Kim S.J., Dayaghi A.M., Son J., Oh T.-S., Jang H.M., Choi G.M. Facet-dependent in situ growth of nanoparticles in epitaxial thin films: the role of interfacial energy. *Journal of the American Chemical Society*. 2019; 141(18): 7509—7517. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b02283>

6. Du H., Jia C.-L., Koehl A., Barthel J., Dittmann R., Waser R., Mayer J. Nanosized conducting filaments formed by atomic-scale defects in redox-based resistive switching memories. *Chemistry of Materials*. 2017; 29(7): 3164—3173. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b00220>

7. VASP full version. 04.12.2018. <https://sourceforge.net/projects/vasp-full-version/>

8. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for open-shell transition metals. *Physical Review. B: Condensed Matter*. 1993; 48(17): 13115—13118. <https://doi.org/10.1103/physrevb.48.13115>

9. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review. B: Condensed Matter*. 1996; 54(16): 11169—11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>

10. Zhou X., Yan N., Chuang K., Luo J. Progress in La-doped SrTiO_3 (LST)-based anode materials for solid oxide fuel cells. *RSC Advances*. 2014; 4: 118—131. <https://doi.org/10.1039/C3RA42666A>

11. March N., Cohn V., Vashishta P., Lundqvist S., Williams A., Bart W., Lang N. Theory of the inhomogeneous electron gas. NY, USA; Great Britain, London: Plenum Press; 1983. 400 p. (Russ. Transl.: March N., Cohn V., Vashishta P., Lundqvist S., Williams A., Bart W., Lang N. Teoriya neodnorodnogo ehlektronnogo gaza. Moscow: Mir; 1987. 400 p.)

12. Kohn W. Nobel lecture: electronic structure of matter — wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*. 1999; 71: 1253—1266. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253>

13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*. 1996; 77: 3865—3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

14. Blöchl P.E. Projector augmented-wave method. *Physical Review B. Condensed Matter*. 1994; 50(24): 17953—17979. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.50.17953>
15. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*. 1976; 13(12): 5188—5192. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.13.5188>
16. Blöchl P.E., Jepsen O., Andersen O.K. Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B. Condensed Matter*. 1994; 49(23): 16223—16233. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.49.16223>
17. Kwon O., Sengodan S., Kim K., Kim G., Jeong H.Y., Shin J., Ju Y.-W., Han J.W., Kim G. Exsolution trends and co-segregation aspects of self-grown catalyst nanoparticles in perovskites. *Nature Communications*. 2017; 8: 15967. <https://doi.org/10.1038/ncomms15967>
18. Ding Y., Liang D.D. A model of phase transition induced antiphase boundaries in perovskite and layered. *Journal of Applied Physics*. 2002; 92: 5425—5428. <https://doi.org/10.1063/1.1510563>

Информация об авторах / Information about the authors

Чистякова Анна Александровна — студент, Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия; e-mail: anutochkachi@gmail.com

Anna A. Chistyakova — Student, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, 1–2 Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; e-mail: anutochkachi@gmail.com

Бажанов Дмитрий Игоревич — канд. физ.-мат. наук, старший преподаватель кафедры физики твердого тела, Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия; Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия; e-mail: dima@kintechlab.com

Dmitriy I. Bazhanov — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Lecturer, Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, 1–2 Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia; e-mail: dima@kintechlab.com

Поступила в редакцию 03.12.2021; поступила после доработки 20.12.2021; принята к публикации 21.01.2022
Received 3 December 2021; Revised 20 December 2021; Accepted 21 January 2022

* * *

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

PHYSICAL CHARACTERISTICS AND THEIR STUDY

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2021. Т. 24, № 4. С. 267—274.
DOI: 10.17073/1609-3577-2021-4-267-274

УДК 620.193+669.715

Влияние добавок кальция на анодное поведение проводников алюминевого сплава E–AlMgSi (алдрей), в среде электролита NaCl

© 2021 г. И. Н. Ганиев¹✉, Дж. Х. Джайлоев¹, Ё. Дж. Холов², Н. И. Ганиева³

¹ *Институт химии им. В.И. Никитина Национальной академии наук Таджикистана,
ул. Садриддина Айни, д. 299/2, Душанбе, 734063, Таджикистан*

² *Дангаринский государственный университет,
ул. Маркази, д. 25, Дангара, 735320, Таджикистан*

³ *Таджикский технический университет имени академика М.С. Осими,
просп. Акад. Ражабовых, д. 10, Душанбе, 734042, Таджикистан*

✉ Автор для переписки: ganiev48@mail.ru

Аннотация. При создании новых материалов, предназначенных для работы в особо жестких условиях, встает задача придания им коррозионной стойкости. Практическое решение проблемы связано с уровнем знаний в области противокоррозионной защиты металлов и сплавов. При использовании проводниковых алюминиевых сплавов для изготовления тонкой проволоки могут возникнуть определенные сложности. Это связано с их недостаточной прочностью и малым числом перегибов до разрушения. В последние годы разработаны новые алюминиевые сплавы, которые в мягком состоянии обладают удовлетворительными прочностными характеристиками, что позволяет использовать их в качестве проводникового материала. Одним из известных проводниковых сплавов является алюминиевый сплав E–AlMgSi (алдрей). Этот сплав относится к термоупрочняемым сплавам. Данный сплав отличается хорошей пластичностью и высокой прочностью. При соответствующей термической обработке сплав приобретает высокую электропроводность. Провода, изготовленные из него, используются почти исключительно для воздушных линий электропередач. В данной работе представлены результаты исследования коррозионного поведения алюминевого проводникового сплава E–AlMgSi (алдрей) с кальцием, в среде электролита 0,03, 0,3 и 3,0 % NaCl. Исследование анодного поведения сплавов проводилось потенциостатическим методом на потенциостате ПИ–50–1.1 при скорости развертки потенциала 2 мВ/с. Легирование алюминевого сплава E–AlMgSi (алдрей) кальцием повышает его коррозионную устойчивость на 15—20 %. Потенциалы коррозии, питтингообразования и репассивации сплавов, содержащих

кальций смещаются в положительную область значений. От концентрации электролита хлорида натрия указанные потенциалы уменьшаются.

Ключевые слова: проводниковый алюминиевый сплав E–AlMgSi (алдрей), кальций, потенциостатический метод, электролит NaCl, скорость коррозии, потенциалы свободной коррозии и питтингообразования

Для цитирования: Ганиев И.Н., Джайлоев Дж.Х., Холов Ё.Дж., Ганиева Н.И. Влияние добавок кальция на анодное поведение проводникового алюминиевого сплава E–AlMgSi (алдрей), в среде электролита NaCl. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 267–274. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-267-274>

Effect of calcium additives on the anodic behavior of the conductive aluminum alloy E–AlMgSi (Aldrey), in the medium of the NaCl electrolyte

I. N. Ganiev¹✉, J. H. Jayloev¹, E. J. Kholov², N. I. Ganieva¹

¹ *V.I. Nikitin Institute of Chemistry, Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, 299/2 Sadriddin Ayni Str., Dushanbe 734063, Tajikistan*

² *Dangara State University, 25 Markazi Str., Dangara, 735320, Tajikistan*

³ *Tajik Technical University named after academician M.S.Osimi, 10 Academicians Radjabov's Ave., Dushanbe, 734042, Tajikistan*

✉ Corresponding author: ganiev48@mail.ru

Abstract. When creating new materials designed to work in particularly harsh conditions, the task of giving them corrosion resistance arises, the practical solution of which is associated with the level of knowledge in the field of high-temperature oxidation of metals and alloys. When using conductive aluminum alloys for the manufacture of thin wire, for example, winding wire, etc., certain difficulties may arise due to their insufficient strength and a small number of kinks before failure. In recent years, aluminum alloys have been developed, which even in a soft state have strength characteristics that allow them to be used as a conductor material. One of the conductive aluminum alloys is the E–AlMgSi alloy (Aldrey), which refers to thermally strengthened alloys. It is characterized by high strength and good ductility. This alloy under appropriate heat treatment acquires high electrical conductivity. The wires made from it are used almost exclusively for overhead power lines.

The results of the study of the anodic behavior of the aluminum conductor alloy E–AlMgSi (Aldrey) with calcium, in an electrolyte medium of 0.03; 0.3 and 3.0% NaCl are presented. Corrosion–electrochemical study of alloys was carried out by the potentiostatic method on the PI–5.0–1.1 potentiostat at a potential sweep rate of 2 mV/s. It is shown that alloying the aluminum alloy E–AlMgSi (Aldrey) with calcium increases its corrosion resistance by 20%. The potentials of corrosion, pitting and repassivation of alloys during doping with calcium are shifted to the positive range of values, and from the concentration of sodium chloride in the negative direction of the ordinate axis.

Keywords: aluminum conductor alloy E–AlMgSi (Aldrey), calcium, potentiostatic method, NaCl electrolyte, corrosion rate, free corrosion and pitting formation potentials

For citation: Ganiev I.N., Jayloev J.H., Kholov E.J., Ganiev N.I. Effect of calcium additives on the anodic behavior of the conductive aluminum alloy E–AlMgSi (Aldrey), in the medium of the NaCl electrolyte. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering.* 2021; 24(4): 267–274. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-267-274>

Введение

В электротехнике алюминий и его сплавы широко применяют в качестве проводникового и конструкционного материала. Алюминий как проводниковый материал характеризуется высокой электропроводностью. После меди алюминий характеризуется максимальным уровнем электропроводности среди всех технически применяемых металлов. Он также отличается малой плотностью, высокой стойкостью против воздействия химических веществ, коррозионной стойкостью в атмосферных условиях [1].

Другое его отличие заключается в том, что он проявляет нейтральное поведение по отношению к изоляционным материалам. Например, к маслам, лакам и термопластам он проявляет инертность, в том числе при повышенных температурах. Алюминий отличается от других металлов малой магнитной восприимчивостью. Он образует неэлектропроводный, легко устранимый порошкообразный продукт (Al_2O_3) в электрической дуге [2, 3].

Использование алюминия и его сплавов регламентируется особыми предписаниями или общими правилами конструирования, особенно, когда речь идет о материалах для коммутационных аппаратов, матч линии электропередач, корпусов электродвигателей и выключателей и т. д.

Наилучшим соотношением стоимости алюминия к стоимости меди объясняется экономическая

целесообразность применения алюминия в качестве проводникового материала. Следует учесть и тот фактор, что в течение многих лет стоимость алюминия практически не меняется [2].

При изготовлении тонкой проволоки, например, обмоточного провода и т. д. из проводниковых алюминиевых сплавов, могут возникнуть определенные сложности, связанные с их недостаточной прочностью и небольшим числом перегибов до разрушения [1].

Одним из проводниковых сплавов с высокой прочностью и хорошей пластичностью является алюминиевый сплав Е-АlMgSi (алдрей). Данный сплав относится к термоупрочняемым сплавам, и при соответствующей термической обработке приобретает высокую электропроводность. Провода изготовленные из него используются почти исключительно для воздушных линий электропередач [1—3].

Вопросы повышения коррозионной стойкости сплавов алюминия являются актуальными, т. к. линии электропередачи из них эксплуатируются в открытой атмосфере [4—6].

Цель работы — исследование влияния добавок кальция на коррозионно-электрохимическое поведение алюминиевого проводникового сплава Е-АlMgSi (алдрей), химического состава, % (мас.): Si — 0,5; Mg — 0,5.

Экспериментальная часть

Синтез сплавов проводился в интервале температур 750—800 °С в шахтной лабораторной печи сопротивления типа СШОЛ. При получении алюминиевого сплава Е-АlMgSi шихтой служил алюминий марки А6, который дополнительно легировался расчетным количеством кремния и магния. При легировании сплава кремнием учитывалось его количество равное 0,1 % (мас.) в составе первичного алюминия. Завернутый в алюминиевую фольгу металлический магний, вводился в расплав алюминия с помощью колыбельчика. Кальций вводился в расплав в виде лигатуры с алюминием. Содержание кальция в лигатуре составило 10 % (мас.). Химический анализ полученных сплавов на содержание кремния и магния проводился в Центральной заводской лаборатории ГУП «Таджикская алюминиевая компания». Также контролировался состав сплавов взвешиванием шихты и полученных образцов. В случае отклонения веса образцов более чем на 1—2 % (отн.) их синтез проводился заново. Далее из расплава удалялся шлак и производилось литье образцов в графитовую изложницу для коррозионно-электрохимических исследований. Полученные образцы цилиндрической формы имели диаметр 8 мм и длину 140 мм.

Образцы для электрохимических исследований поляризовали в положительном направлении. При этом исходили от потенциала, установившегося при

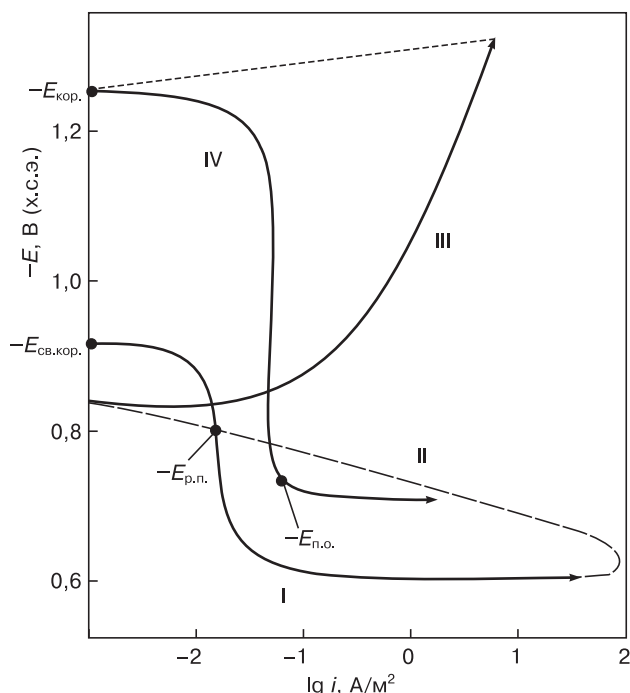


Рис. 1. Анодная и катодная поляризационная (2 мВ/с) кривые алюминиевого сплава Е-АlMgSi (алдрей), в среде электролита 3 % NaCl

Fig. 1. Anode and cathode polarization (2 mV/s) curves of E-AlMgSi (Aldrey) aluminum alloy in a 3% NaCl electrolyte medium

погружении в исследуемый раствор NaCl ($E_{\text{св.кор.}}$ — потенциал свободной коррозии или стационарный) до значения потенциала, при котором происходит резкое возрастание плотности тока (рис. 1, кривая I). Затем, образцы поляризовали в обратном направлении (рис. 1, кривые II и III) до значения потенциала $-1,3$ В. В результате происходило растворение пленки оксида. Наконец, образцы повторно поляризовали в положительном направлении (рис. 1, кривая IV). При этом, при переходе от катодного к анодному ходу, фиксировался потенциал питтингообразования ($E_{\text{п.о.}}$) сплавов.

Основные электрохимические потенциалы сплавов определялось на полученной таким образом поляризационных кривых: $-E_{\text{ст.}}$ или $-E_{\text{св.кор.}}$ — стационарный потенциал или потенциал свободной коррозии; $-E_{\text{рп.}}$ — потенциал репассивации; $-E_{\text{п.о.}}$ — потенциал питтингообразования; $-E_{\text{кор.}}$ — потенциал коррозии; $i_{\text{кор.}}$ — ток коррозии.

Расчет тока коррозии проводили с учетом тафеловской наклонной $A = 0,12$ В по катодной кривой.

При этом имелось ввиду, что процесс питтинговой коррозии алюминия и его сплавов, в нейтральных средах определяется катодной реакцией ионизации кислорода. В свою очередь, скорость коррозии являясь функцией тока коррозии вычисляется по формуле:

$$K = i_{\text{кор.}} k,$$

где $k = 0,335$ г/(А·ч) — электрохимический эквивалент алюминия.

Воспроизводимость измерения электрохимических потенциалов равнялся $\pm 1 \div \pm 2$ мВ, плотность тока коррозии составляла $(0,001—0,005) \cdot 10^{-2}$ А/м². Методика снятия поляризационных кривых сплавов подробно описан в работах [5—14].

Обсуждение результатов

Результаты коррозионно-электрохимических исследований, в среде электролита NaCl, алюминии-

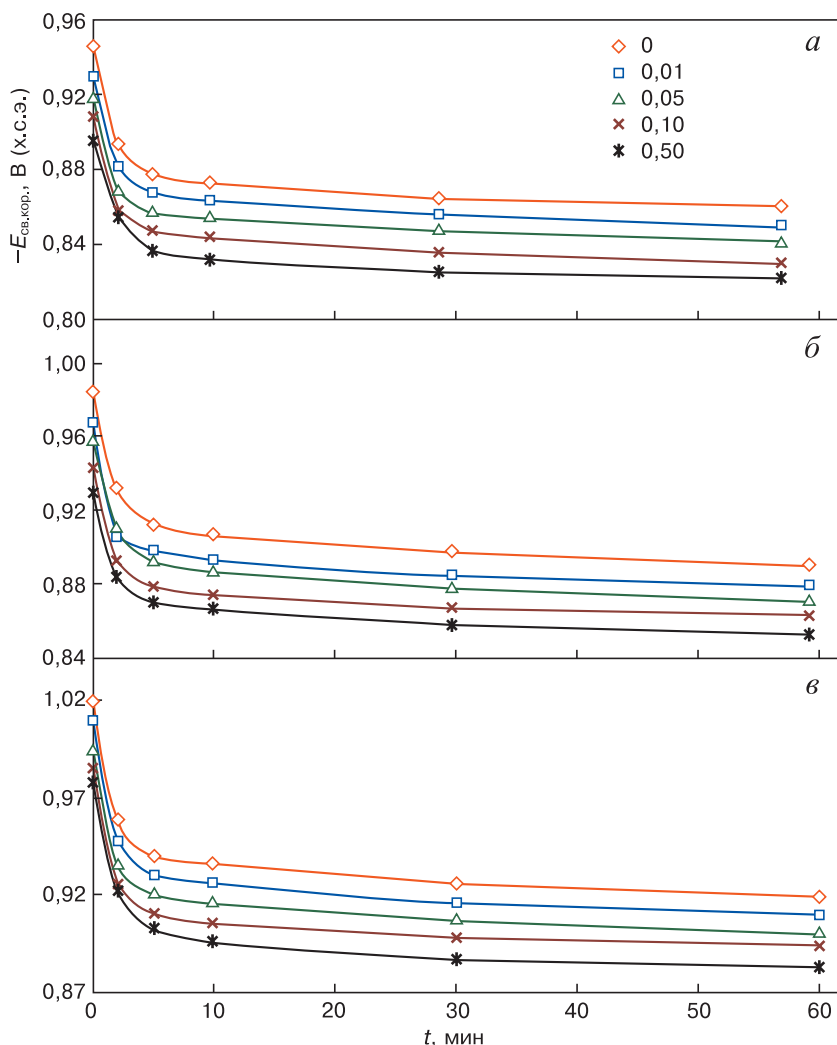


Рис. 2. Зависимость потенциала свободной коррозии алюминиевого сплава E-AlMgSi (алдрей), содержащего кальций, в среде электролита 0,03 % (а); 0,3 % (б) и 3,0%-ного (в) NaCl от времени

Fig. 2. Temporal dependence of the free corrosion potential of calcium-doped E-AlMgSi (Aldrey) aluminum alloy in (a) 0.03%; (б) 0.3% and (в) 3.0% NaCl electrolyte media

Коррозионно–электрохимические характеристики алюминиевого сплава E–AlMgSi (алдрей) с кальцием, в среде электролита NaCl

Corrosion and electrochemical characteristics of calcium–doped E–AlMgSi (Aldrey) aluminum alloy in NaCl electrolyte medium

Среда NaCl, % (мас.)	Содержание кальция в сплаве, % (мас.)	Электрохимические потенциалы, В (х.с.э.)				Скорость коррозии	
		$-E_{\text{св.кор.}}$	$-E_{\text{кор.}}$	$-E_{\text{п.о.}}$	$-E_{\text{р.п.}}$	$i_{\text{кор.}}, 10^2 \text{ А/м}^2$	$K, 10^3 \text{ г/м}^2 \cdot \text{ч}$
0,03	—	0,860	1,100	0,600	0,720	0,049	16,41
	0,01	0,850	1,088	0,590	0,715	0,046	15,41
	0,05	0,842	1,072	0,578	0,715	0,044	14,74
	0,10	0,830	1,055	0,566	0,710	0,041	13,73
	0,50	0,822	1,040	0,552	0,707	0,039	13,06
0,3	—	0,890	1,180	0,680	0,768	0,066	22,11
	0,01	0,878	1,169	0,664	0,760	0,064	21,44
	0,05	0,870	1,152	0,656	0,754	0,061	20,43
	0,10	0,863	1,137	0,647	0,750	0,058	19,43
	0,50	0,852	1,124	0,640	0,750	0,055	18,42
3,0	—	0,919	1,240	0,735	0,800	0,082	27,47
	0,01	0,910	1,230	0,724	0,785	0,079	26,46
	0,05	0,900	1,228	0,718	0,780	0,076	25,46
	0,10	0,894	1,216	0,710	0,780	0,074	24,71
	0,50	0,883	1,205	0,700	0,770	0,072	24,12

евого сплава E–AlMgSi (алдрей) с кальцием, представлены в таблице и на рис. 2—5. На рис. 2 приведена графическая зависимость потенциала свободной коррозии ($-E_{\text{св.кор.}}$, В) от времени для образцов из сплавов с кальцием, в среде электролита NaCl. Видно, что при погружении образцов в электролит NaCl происходит смещение потенциала $-E_{\text{св.кор.}}$ в положительную область.

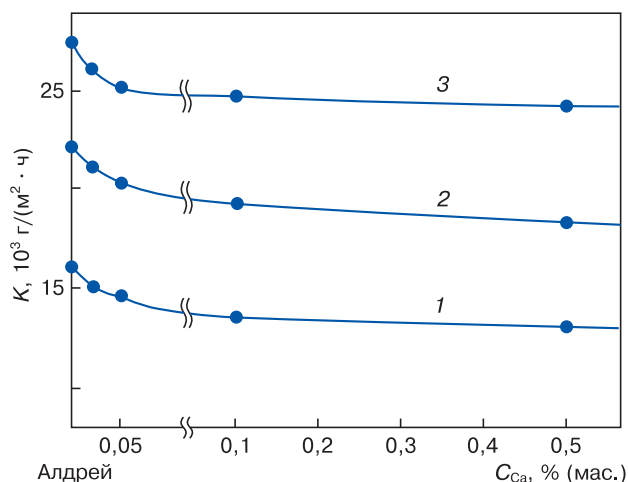


Рис. 3. Зависимость скорости коррозии алюминиевого сплава E–AlMgSi (алдрей) от концентрации кальция, в среде электролита 0,03 % (1); 0,3 % (2) и 3,0%-ного (3) NaCl

Fig. 3. Corrosion rate of E–AlMgSi (Aldrey) aluminum alloy as a function of calcium concentration in (1) 0.03%, (2) 0.3% and (3) 3.0% NaCl electrolyte medium

Из таблицы видно, что добавки кальция от 0,01 до 0,5 % (мас.) к исходному алюминиевому сплаву, в исследуемых средах сдвигают потенциалы коррозии, репассивации и питтингообразования в положительную область значений. Одновременно с этим повышается стойкость сплавов к питтинговой коррозии.

На рис. 3 приведен зависимость скорости коррозии алюминиевого сплава E–AlMgSi (алдрей) от содержания кальция, в среде электролита 0,03, 0,3 и 3,0%-ного NaCl. Добавки кальция к сплаву уменьшает на 15—20 % скорость его коррозии во всех исследованных средах электролита NaCl.

Наряду с этим рост концентрации электролита NaCl (хлорид–иона) способствует увеличению скорости коррозии сплавов (рис. 4). При концентрации 0,5 % (мас.) кальция скорость коррозии и плотность тока коррозии алюминиевого сплава AlMgSi (алдрей) имеет минимальное значение. Следовательно, указанный состав сплавов является оптимальным в коррозионном отношении.

Анодные ветви поляризационных кривых алюминиевого сплава E–AlMgSi (алдрей) с кальцием, приведены на рис. 5. Как видно из хода кривых, рост содержания легирующего компонента — кальция, смещается в область положительных значений всех электрохимических потенциалов, в среде электролита NaCl. Это свидетельствует о снижении скоро-

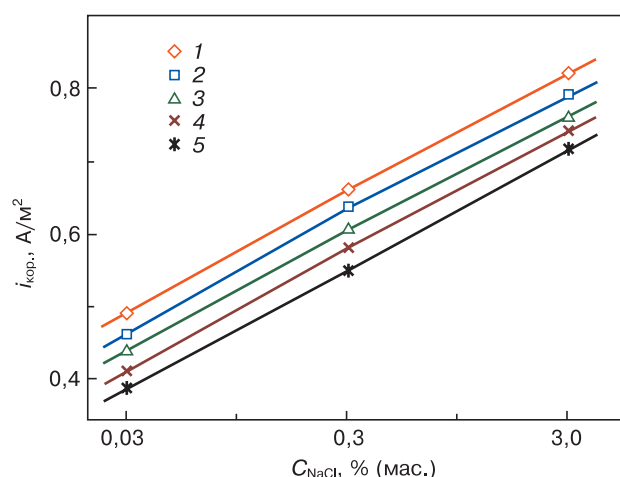
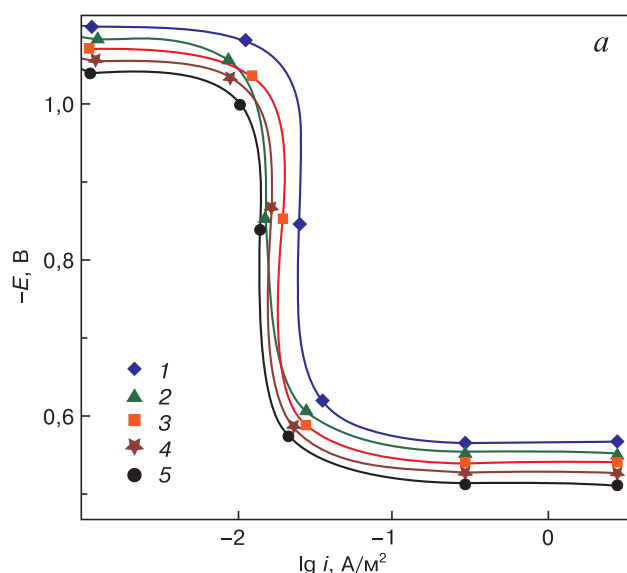


Рис. 4. Зависимость плотности тока коррозии алюминиевого сплава E-AlMgSi (алдрей) (1), содержащего кальций от концентрации NaCl, % (мас.): 2 — 0,01; 3 — 0,05; 4 — 0,1; 5 — 0,5

Fig. 4. Corrosion current density of (1) pure E-AlMgSi (Aldrey) aluminum alloy and with calcium content, wt.%: (2) 0.01; (3) 0.05; (4) 0.1; (5) 0.5 as a function of NaCl concentration



сти анодного растворения легированных кальцием сплавов по сравнению с исходным сплавом.

Закключение

Потенциостатическим методом (при скорости развертки потенциала 2 мВ/с) в среде электролита NaCl исследовано анодное поведение алюминиевого сплава E-AlMgSi (алдрей) с кальцием. Показано, что добавки кальция до 0,5 % (мас.) увеличивают коррозионную стойкость исходного сплава. При этом, растет питтингоустойчивость сплавов, о чем свидетельствует сдвиг потенциалов питтингообразования и коррозии в положительную область значений.

Установлено, что с увеличением концентрации хлорид-иона в электролите в 1,5 раза возрастает скорость коррозии сплавов.

Экспериментально выявлено, что добавки кальция в пределах 0,1—0,5 % (мас.) являются оптимальными в плане разработки состава новых композиций на основе сплава E-AlMgSi (алдрей).

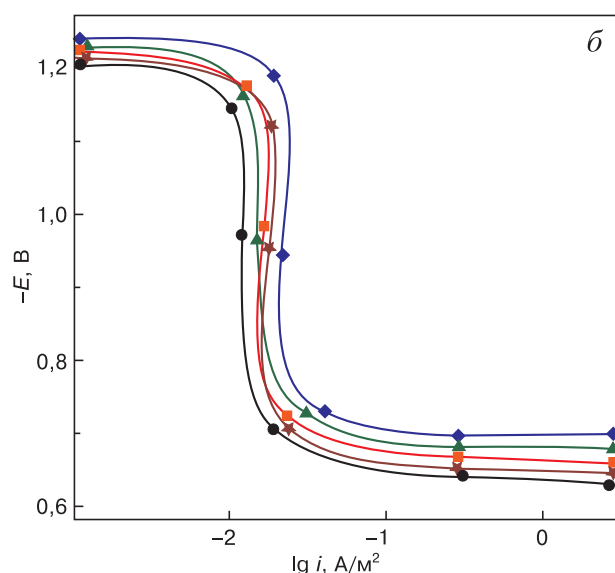


Рис. 5. Анодные поляризационные (2 мВ/с) кривые алюминиевого сплава E-AlMgSi (алдрей) (1), содержащего кальций, % (мас.): 2 — 0,01; 3 — 0,05; 4 — 0,1; 5 — 0,5, в среде электролита 0,03 % (а) и 3%-ного (б) NaCl

Fig. 5. Anodic polarization curves (2 mV/s) of (1) pure E-AlMgSi (Aldrey) aluminum alloy and with calcium content, wt.%: (2) 0.01; (3) 0.05; (4) 0.1 and (5) 0.5 in (a) 0.03% and (б) 3% NaCl electrolyte medium

Библиографический список

1. Усов В.В., Займовский А.С. Материалы и сплавы в электротехнике. В 2 т. Т. 2. Проводниковые, реостатные и контактные материалы М.; Л.: Госэнергоиздат; 1957. 184 с.
2. Алюминиевые сплавы: свойства, обработка, применение; под ред. Л.Х. Райтбарга, М.Е. Дрица. Пер. с нем. М.: Металлургия; 1979. 679 с.
3. Алиева С.Г., Альтман М.Б., Амбарцумян С.Б. Промышленные алюминиевые сплавы: справ. 2-е изд. М.: Металлургия; 1984. 528 с.
4. Умарова Т.М., Ганиев И.Н. Коррозия двойных алюминиевых сплавов в нейтральной среде. Душанбе: Дониш; 2007. 237 с.
5. Ганиев И.Н., Алиев Ф.А., Одиназода Х.О., Сафаров А.М., Джайлоев Д.Х. Теплоемкость и термодинами-

ческие функции алюминиевого проводникового сплава E-AlMgSi (алдрей), легированного галлием. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2019; 22(3): 219—227. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-3-219-227>

6. Ганиев И.Н., Отаджонов С.Э., Иброхимов Н.Ф., Махмудов М. Температурная зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АК1М2, легированного стронцием. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2018; 21(1): 35—42. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2018-1-35-42>

7. Ганиев И.Н., Абдулаков А.П., Джайлоев Д.Х., Алиев Ф.А., Рашидов А.Р. Коррозионно-электрохимическое поведение алюминиевого проводникового сплава

Е–AlMgSi (алдрей) с оловом в среде электролита NaCl. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2019; 22(2): 128–134. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-2-128-134>

8. Джайлоев Дж.Х., Ганиев И.Н., Амонов И.Т., Якубов У.Ш. Анодное поведение сплава Al + 2,18%Fe, легированного стронцием, в среде электролита NaCl. *Вестник Сибирского государственного индустриального университета*. 2019; (1(27)): 42–46.

9. Ганиев И.Н., Абулаков А.П., Джайлоев Дж.Х., Ганиева Н.И., Якубов У.Ш. Влияние добавок свинца на анодное поведение проводникового алюминиевого сплава Е–AlMgSi («Алдрей»), в среде электролита NaCl. *Вестник Санкт–Петербургского государственного университета технологии и дизайна. Серия 1. Естественные и технические науки*. 2020; (2): 109–113.

10. Худойбердизода С.У., Ганиев И.Н., Муллоева Н.М., Джайлоев Д.Х., Якубов У.Ш. Потенциодинамическое исследование сплавов свинца с теллуром, в среде электролита NaCl. *Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук*. 2020; (2): 238–245. https://doi.org/10.51884/2413-452X_2020_2_238

11. Бокиев Л.А., Ганиев И.Н., Хакимов А.Х., Якубов У.Ш. Потенциал свободной коррозии алюминиевого

сплава АЖ5К10 с литием, в среде электролита NaCl. В сб.: *Вопросы физической и коллоидной химии. Материалы IV Междунар. конф., посвященной памяти докторов химических наук, профессоров Хамида Мухсиновича Якубова и Зухриiddина Нуриддиновича Юсуфова. 3–4 мая 2019 г., Таджикистан*. Таджикистан: Таджикский национальный университет; 2019. С. 107–111.

12. Бокиев Л.А., Ганиев И.Н., Ганиева Н.И., Хакимов А.Х., Якубов У.Ш. Влияние лития на коррозионно–электрохимическое поведение алюминиевого сплава АЖ5К10, в среде электролита NaCl. *Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия*. 2019; (3(37)): 79–89.

13. Худойбердизода С.У., Ганиев И.Н., Муллоева Н.М., Эшов Б.Б., Джайлоев Д.Х., Якубов У.Ш. Потенциодинамическое исследование свинцового сплава ССуЗ, легированного медью, в среде электролита NaCl. *Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук*. 2019; (1): 206–213.

14. Ганиев И.Н., Джайлоев Д.Х., Амонов И.Т., Эсанов Н.Р. Влияние щелочноземельных металлов на анодное поведение сплава Al + 2,18%Fe, в нейтральной среде. *Вестник Сибирского государственного индустриального университета*. 2017; (3(21)): 40–44.

References

1. Usov V.V., Zaimovskii A.S. Materials and alloys in electrical engineering. In 2 vol. Vol. 2. Conducting, rheostatic and contact materials. Moscow; Leningrad: Gosenergoizdat; 1957. 184 p. (In Russ.)

2. Reitbarg L.Kh., Drits M.E., eds. Aluminium–Taschenbuch. Düsseldorf; 1974. 689 p. (Russ. Transl.: Reitbarg L.Kh., Drits M.E., eds. Alyuminievye splavy: svoystva, obrabotka, primeneniye. Moscow: Metallurgy; 1979. 679 p.)

3. Alieva S.G., Al'tman M.B., Ambartsumyan S.B. Industrial aluminum alloys. 2nd ed. Moscow: Metallurgy; 1984. 528 p. (In Russ.)

4. Umarova T.M., Ganiev I.N. Corrosion of double aluminum alloys in neutral environments. Dushanbe: Donish; 2007. 237 p. (In Russ.)

5. Ganiev I.N., Aliev F.A., Odinzoda H.O., Safarov A.M., Jayloev J.H. Heat capacity and thermodynamic functions of aluminum conductive alloy E–AlMgSi (Aldrey) doped with gallium. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019; 22(3): 219–227. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-3-219-227>

6. Ganiev I.N., Otajonov S.E., Ibrohimov N.F., Mahmudov M. Temperature dependence of the specific heat and thermodynamic functions AK1M2 alloy, doped strontium. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2018; 21(1): 35–42. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2018-1-35-42>

7. Ganiev I.N., Abulakov A.P., Jailoev J.H., Aliev F.A., Rashidov A.R. Corrosion–electrochemical behavior of an aluminum conductive E–AlMgSi alloy (aldrey) with tin in the environment of NaCl electrolyte. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019; 22(2): 128–134. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-2-128-134>

8. Jailoev J.Kh., Ganiev I.N., Amonov I.T., Yakubov U.Sh. Anodic behavior of the Al + 2.18% Fe alloy doped with strontium in the NaCl electrolyte environment. *Vestnik*

Sibirskogo gosudarstvennogo industrial'nogo universiteta = Bulletin of the Siberian State Industrial University. 2019; (1(27)): 42–46. (In Russ.)

9. Ganiev I.N., Abulakov A.P., Jailoev J.Kh., Ganieva N.I., Yakubov U.Sh. Influence of lead additions on the anodic behavior of the conductive aluminum alloy E–AlMgSi (“Aldrey”) in an electrolyte NaCl environment. *Vestnik Sankt–Peterburgskogo gosudarstvennogo universiteta tekhnologii i dizaina. Seriya 1. Estestvennye i tekhnicheskie nauki*. 2020; (2): 109–113. (In Russ.)

10. Khudoyberdizoda S.U., Ganiev I.N., Mulloeva N.M., Jailoev J.Kh., Yakubov U.Sh. Potentiodynamic study of alloys of lead with tellurium in the medium of electrolyte. *Vestnik Tadzhikskogo natsional'nogo universiteta. Seriya estestvennykh nauk = Bulletin of the Tajik National University. Series of Natural Sciences*. 2020; (2): 238–245. (In Russ.). https://doi.org/10.51884/2413-452X_2020_2_238

11. Bokiev L.A., Ganiev I.N., Khakimov A.Kh., Yakubov U.Sh. Potential of free corrosion of the aluminum alloy AZh5K10 with lithium in an electrolyte NaCl environment. In: *Questions of physical and colloidal chemistry. Proceed. of the IV Inter. conf. dedicated to the memory of doctors of chemical sciences, professors Khamid Mukhsinovich Yakubov and Zukhuriddin Nuriddinovich Yusufov, May 3–4, 2019, Tajikistan*. Tajikistan: Tadzhikskii natsional'nyi universitet; 2019. P. 107–111. (In Russ.)

12. Bokiev L.A., Ganiev I.N., Ganieva N.I., Khakimov A.Kh., Yakubov U.Sh. The influence of lithium on the corrosion–electrochemical behavior of the AZh5K10 aluminum alloy in the NaCl electrolyte environment. *Vestnik Tverskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Khimiya = Bulletin of the Tver State University. Series: Chemistry*. 2019; (3(37)): 79–89. (In Russ.)

13. Khudoyberdizoda S.U., Ganiev I.N., Mulloeva N.M., Eshov B.B., Jailoev J.Kh., Yakubov U.Sh. Potentiodynamic study of lead–antimony alloy, doped with copper, in the medium of electrolyte NaCl. *Vestnik Tadzhikskogo natsional'nogo universiteta. Seriya estestvennykh nauk = Bulletin of the*

Tajik National University. Series of Natural Sciences. 2019; (1): 206—213. (In Russ.)

14. Ganiev I.N., Jailoyev J.Kh., Amonov I.T., Esanov N.R. The influence of alkaline earth metals on the anodic behavior

of the Al + 2.18% Fe alloy, in a neutral environment. *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo industrial'nogo universiteta* = *Bulletin of the Siberian State Industrial University*. 2017; (3(21)): 40—44. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Ганиев Изатулло Наврузович — доктор хим. наук, профессор, академик НАНТ, зав. лабораторией, Институт химии им. В.И. Никитина Национальной академии наук Таджикистана, ул. Садриддина Айни, д. 299/2, Душанбе, 734063, Таджикистан; <https://orcid.org/0000-0002-2791-6508>; e-mail: ganievizatullo48@gmail.com, ganiev48@mail.ru

Джайлоев Джамшед Хусейнович — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, Институт химии им. В.И. Никитина Национальной академии наук Таджикистана, ул. Садриддина Айни, д. 299/2, Душанбе, 734063, Таджикистан; e-mail: husenzod85@mail.ru

Холов Ёрмахмат Джонмахмадович — ассистент кафедры геологии и электроснабжения, Дангаринский государственный университет, ул. Маркази, д. 25, Дангара, 735320, Таджикистан

Ганиева Наргис Изатуллоевна — канд. техн. наук, доцент кафедры материаловедения, металлургических машин и оборудования, Таджикский технический университет имени академика М.С. Осими, просп. Акад. Раджабовых, д. 10, Душанбе, 734042, Таджикистан; e-mail: n.ganieva1977@mail.ru

Izatullo N. Ganiev — Dr. Sci. (Eng.), Professor, Academician of Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, Head of Laboratory, V.I. Nikitin Institute of Chemistry, Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, 299/2 Sadridin Ayni Str., Dushanbe, 734063, Tajikistan; <https://orcid.org/0000-0002-2791-6508>; e-mail: ganievizatullo48@gmail.com, ganiev48@mail.ru

Jamshed H. Jayloev — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, V.I. Nikitin Institute of Chemistry, Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, 299/2 Sadridin Ayni Str., Dushanbe, 734063, Tajikistan; e-mail: husenzod85@mail.ru

Ermakhmad J. Kholov — Assistant of the Department of Geology and Power Supply, Dangara State University, 25 Markazi Str., Dangara, 735320, Tajikistan

Nargis I. Ganieva — Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor of the Department of Materials Science, Metallurgical Machines and Equipment, Tajik Technical University named after academician M.S.Osimi, 10 Academicians Radjabov's Ave., Dushanbe, 734042, Tajikistan; e-mail: n.ganieva1977@mail.ru

Поступила в редакцию 04.10.2021; поступила после доработки 09.12.2021; принята к публикации 23.12.2021
Received 4 October 2021; Revised 09 December 2021; Accepted 23 December 2021

* * *

Список статей, опубликованных в 2021 году

В.Н. Яркин, О.А. Кисарин, Т.В. Критская

Методы получения трихлорсилана для производства поликристаллического кремния 1 5—26

Ю.А. Федотова

Влияние условий синтеза и состава на структурно-фазовые состояния и электрические свойства наногранулированных пленок $(\text{FeCoZr})_x(\text{ЦТС})_{100-x}$ ($30 \leq x \leq 85$ % (ат.)) 3 143—152

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ПОЛУПРОВОДНИКИ

Т.Г. Югова, А.Г. Белов, В.Е. Каневский, Е.И. Кладова, С.Н. Князев

Сравнение результатов оптических и электрофизических измерений концентрации свободных электронов в образцах n -GaAs, легированных теллуром 1 27—33

Т.Г. Югова, А.Г. Белов, В.Е. Каневский, Е.И. Кладова, С.Н. Князев, И.Б. Парфентьева

Сравнение результатов оптических и электрофизических измерений концентрации свободных электронов в образцах n -InAs .. 3 153—161

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ДИЭЛЕКТРИКИ

А.А. Мололкин, Д.В. Рощупкин, Е.В. Емелин, Р.Р. Фахртдинов

Особенности высокотемпературной монодоменизации конгруэнтных сегнетоэлектрических кристаллов твердого раствора $\text{LiNb}_{0,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_3$ 1 34—39

О.В. Малышкина, А.И. Иванова, Г.С. Шишков, А.А. Мартянов

Зависимость диэлектрических свойств керамики титаната бария и композита на его основе от температуры спекания 1 40—47

Ю.С. Терехова, Д.А. Киселев, А.В. Солнышкин

Исследование сегнетоэлектрических нанокомпозитов на основе P(VDF-TrFE) методами сканирующей зондовой микроскопии..... 2 71—78

А.И. Щеглова, И.Л. Кислова, Т.С. Ильина, Д.А. Киселев, Е.В. Барабанова, А.И. Иванова

Диэлектрические и пьезоэлектрические свойства керамики PLZT $x/40/60$ ($x = 5; 12$)..... 3 162—169

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

А.Н. Алёшин, Н.В. Зенченко, О.А. Рубан

Моделирование вольт-амперной характеристики мемристора $\text{TiN}/\text{HfO}_2/\text{Pt}$ при различной толщине токопроводящего канала..... 2 79—87

В.Л. Евдокимов

Моделирование процесса газофазного осаждения и базовых неоднородностей слоев оксида кремния 2 88—96

Е.С. Шамин, Д.А. Жевненко, Ф.П. Мещанинов, В.С. Кожевников, Е.С. Горнев

Поиск начального приближения для задачи экстракции параметров модели мемристора с помощью методов машинного обучения ... 2 97—101

А.А. Орлов, А.А. Резванов

Моделирование времени до пробоя пористого диэлектрика в системе металлизации интегральных схем современного топологического уровня 2 102—106

А.И. Простомолотов, Н.А. Вerezуб

Анализ гидродинамики при синтезе кристаллов из водно-солевых растворов..... 3 170—175

К.К. Абгарян, И.С. Колбин

Расчет сопротивления Капицы на интерфейсе кремний — альфа-кварц для различных температур 4 217—221

К.О. Петросянц, Д.С. Силкин, Д.А. Попов

Оценка влияния параметров структуры FinFET на электрические характеристики средствами TCAD-моделирования 4 222—228

А.А. Зацаринный, Ю.А. Степченко, Ю.Г. Дьяченко, Ю.В. Рождественский

Сравнение сбоеустойчивых синхронных и самосинхронных схем 4 229—233

К.К. Абгарян, А.В. Леонов, Д.Л. Ревизников

Температурные исследования полевых датчиков Холла на основе наноразмерных гетероструктур «кремний на изоляторе» 4 234—241

А.А. Орлов, Е.А. Ганыкина, А.А. Резванов

Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика в системе металлизации интегральных схем 4 242—247

Е.С. Шамин, Е.С. Горнев

Анализ и сравнение различных подходов
к экстракции параметров модели
мемристора 4 248—254

П.А. Сеченых

Математическое моделирование
кристаллической структуры перовскита
и двойного перовскита 4 255—259

А.А. Чистякова, Д.И. Бажанов

Исследование сегрегации примеси никеля
на открытых поверхностях структуры LSNT
перовскита методом первопринципной
молекулярной динамики 4 260—266

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ**Д.Г. Муратов, Л.В. Кожитов, Е.В. Якушко,
А.А. Васильев, А.В. Попкова, В.А. Тарала,
Е.Ю. Коровин**

Синтез, структура и электромагнитные
свойства нанокмполитов FeCoAl/C 3 176—189

**ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ СЛОИ И МНОГОСЛОЙНЫЕ
КОМПОЗИЦИИ****К.Л. Енишерлова, Л.А. Сейдман, Э.М. Темпер,
Ю.А. Концевой**

Влияние особенностей PECVD процессов
осаждения SiNx на электрические параметры
структур SiN_x/AlGaIn/GaN 2 107—118

**ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ****С.С. Кормилицина, Е.В. Молодцова,
С.Н. Князев, Р.Ю. Козлов, Д.А. Завражин,
Е.В. Жарикова, Ю.В. Сыров**

Исследование влияния вида обработки
на прочность монокристаллических пластин
нелегированного антимонида индия 1 48—56

**А.В. Леонов, В.Н. Мурашев, Д.Н. Иванов,
В.Д. Кирилов**

Эффект зарядовой связи в полевом
элементе Холла на основе тонкопленочного КНИ МОП
транзистора 1 57—62

Н. М. Томпакова, А. А. Полисан

Исследование влияния кратковременного
воздействия кислородной и водородной плазмы
на состав и структуру тонких пленок
диоксида олова 2 119—130

**И.Н. Ганиев, Ё.Дж. Холов, Дж.Х. Джайлоев,
Н.И. Ганиева, В.Д. Абулхаев**

Кинетика окисления алюминиевого
проводникового сплава E-AlMgSi (алдрей) с кадмием,
в твердом состоянии 2 131—137

**Р.Ю. Козлов, С.С. Кормилицина,
Е.В. Молодцова, Е.О. Журавлев**

Выращивание монокристаллов антимонида индия
диаметром 100 мм модифицированным методом
Чохральского 3 190—198

**А.С. Шпортенко, И.В. Кубасов, А.М. Кислюк,
А.В. Турутин, М.Д. Малинкович, Ю.Н. Пархоменко**

Влияние контактных явлений на измерение
электропроводности восстановленного
ниобата лития 3 199—210

**И.Н. Ганиев, Дж.Х. Джайлоев, Ё.Дж. Холов,
Н.И. Ганиева**

Влияние добавок кальция на анодное поведение
проводникового алюминиевого сплава E-AlMgSi
(алдрей), в среде электролита NaCl 4 267—274

ОБЩАЯ ИНФОРМАЦИЯ**П.П. Федоров**

Рецензия на статью
«Reversed Crystal Growth» 1 63—64

Вячеславу Александровичу

Харченко — 80 лет 1 65—66

Памяти Андрея Георгиевича Казанского

(01.09.1946—27.07.2021) 3 211—212