

**ЮРОВА Валентина Александровна**

**Исследование особенностей проявления дисперсионных сил  
в наноразмерных слоистых структурах на основе кремния**

Специальность 01.04.10 – физика полупроводников

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2013

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный минерально-сырьевой университет «Горный» Минобрнауки России.

**Научный руководитель:** доктор физико-математических наук, профессор,  
заслуженный работник высшей школы РФ,  
Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»  
**Федорцов Александр Борисович**

**Официальные оппоненты:**

**ГРАБОВ Владимир Минович**, доктор физико-математических наук, профессор,  
заслуженный деятель науки РФ, РГПУ им. А.И. Герцена

**ДАВЫДОВ Сергей Юрьевич**, доктор физико-математических наук, профессор,  
ведущий научный сотрудник, ФГБУН ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)»

Защита состоится 30 мая 2013 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.01 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет», по адресу: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.29, II-й учебный корп., ауд. 265.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан «17» апреля 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор технических наук, профессор

Коротков Александр Станиславович

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** В настоящее время исследования дисперсионных сил, к которым относятся силы Ван-дер-Ваальса и Казимира, привлекают все больше внимания. С учетом тенденции миниатюризации элементов электронной техники дисперсионные силы находят все большее применение не только в чисто научной, но и технологической области. Рост интереса к этим явлениям обусловлен как внутренней логикой развития квантовой теории поля и его актуальными приложениями в различных разделах современной физики, так и природой дисперсионных сил. Область применения дисперсионного взаимодействия включает физику конденсированных сред, и нанотехнологии, а также коллоидные и кристаллические системы, используемые для адгезии в нанoeлектромеханических системах. Дисперсионные силы оказывают существенное влияние на процессы абсорбции в наноструктурах, в частности на процессы абсорбции водорода [1 – 2].

Так как дисперсионные силы проявляются и становятся преобладающими на малых расстояниях между взаимодействующими объектами, эти силы долгое время изучались только теоретически вследствие несовершенства измерительной техники. В настоящее время прогресс в технике позволяет в отдельных случаях проводить прямые измерения величины дисперсионного взаимодействия. Однако экспериментальные исследования являются весьма дорогостоящими и не всегда технически возможными. Поэтому по-прежнему представляют интерес теоретические исследования дисперсионного взаимодействия различных объектов.

Элементы современных полупроводниковых миниатюрных электромеханических и электронных устройств в настоящее время уменьшились до десятков и даже единиц нанометров. Поэтому наиболее актуальным представляется изучение проявления дисперсионных сил в структурах, которые активно используются в современной электронной технике, в частности, в структурах металл–диэлектрик–полупроводник (МДП). Эти структуры являются основой таких электронных компонентов как конденсаторы, полевые транзисторы, приборы с зарядовой связью, газовые датчики. Ряд современных исследований показывает, что дисперсионные силы, по-видимому, являются причиной отказа некоторых приборов, например, являются причиной «схлопывания» обкладок конденсатора, размеры которого составляют единицы нанометров.

Таким образом, для дальнейшего конструирования и производства реальных наноразмерных устройств электронной техники необходимо детальное изучение закономерностей действия дисперсионных сил и особенностей их проявления в реальных наноразмерных структурах. В частности, в слоистых полупроводниковых наноразмерных структурах металл–диэлектрик–полупроводник, выполненных на основе кремниевой подложки.

### **Цель и задачи исследования.**

Целью диссертационной работы является теоретическое исследование величины дисперсионных сил, действующих в современных наноразмерных слоистых структурах

электронной техники, изготовленных на основе полупроводниковой монокристаллической кремниевой подложки, и оценка влияния параметров структуры на величину этих сил.

Для достижения поставленной цели в работе необходимо было решить следующие задачи:

1) исследовать влияние слоя оксида на поверхности кремния на величину его дисперсионного взаимодействия с металлическим телом, находящемся на наноразмерном расстоянии от кремния;

2) исследовать и определить влияние толщины слоев диэлектрика и металла на величину давления, создаваемого дисперсионными силами на слой диэлектрика в наноразмерной структуре металл–диэлектрик–полупроводник;

3) сравнить результаты расчета величины дисперсионных сил, получающиеся при использовании различных физико-математических моделей для описания электрооптических параметров рассматриваемой наноразмерной слоистой структуры на основе кремниевой подложки.

В результате проведенных исследований разработаны следующие **научные положения, выносимые на защиту:**

1. Величина давления, создаваемого дисперсионными силами на слой диэлектрика в слоистой структуре металл–диэлектрик–полупроводник на кремниевой подложке, рассчитанная на основе существующей теории, очень сильно зависит от толщины диэлектрика, и при ее уменьшении до единиц нанометров возрастает на несколько порядков по величине, а именно от единиц паскалей до нескольких мегапаскалей.

2. Расчетная величина давления дисперсионных сил практически не зависит от толщины металлического слоя в слоистой твердотельной структуре на основе кремния при реально используемых значениях толщины металлического слоя.

3. Естественная пленка оксида, возникающая на поверхности кремния в воздушной среде, практически не влияет на величину дисперсионного взаимодействия между кремниевой пластиной и внешним проводником.

**Научная новизна** работы заключается в следующем.

1. Впервые проведено теоретическое исследование величины дисперсионных сил, действующих на слой диэлектрика в слоистых структурах, изготовленных на основе полупроводниковой кремниевой подложки и имеющих параметры, аналогичные параметрам наноразмерных структур, реально используемым в производстве полупроводниковых приборов.

2. Впервые проведено теоретическое исследование влияния толщины металлического слоя на величину давления, создаваемого дисперсионными силами в наноразмерных структурах металл–диэлектрик–полупроводник на основе кремниевой подложки. Установлено, что расчетная величина дисперсионного давления практически не зависит от толщины металлического слоя при ее реально используемых значениях и от моделей, которые

используются для описания диэлектрической проницаемости металла.

3. Впервые исследовано и установлено сильное влияние толщины диэлектрического слоя на величину давления дисперсионных сил, действующих в наноразмерных слоистых структурах металл–диэлектрик–полупроводник на основе кремниевой подложки. Расчетное значение дисперсионного давления может достигать нескольких мегапаскалей при уменьшении толщины диэлектрического слоя до единиц нанометров.

**Методами исследования**, используемыми в работе, являются теория Лифшица, математические модели диэлектрической проницаемости веществ, теория аналитических функций, теория функций комплексного переменного, теория вычетов.

**Достоверность полученных результатов определяется:**

- корректным использованием математических методов;
- проведением расчетов с использованием экспериментальных данных, полученных с помощью измерений высокой точности и не связанных с изучением дисперсионного взаимодействия;
- совпадением полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными других авторов в тех предельных областях, где это сравнение возможно;
- публикацией статей в реферируемых научных журналах;
- апробацией основных научных результатов на международных и всероссийских научно-технических конференциях и семинарах.

**Объект исследования:** наноразмерные слоистые структуры металл–диэлектрик–полупроводник (Al–SiO<sub>2</sub>–Si) на основе полупроводниковой монокристаллической кремниевой подложки.

**Практическая значимость результатов работы заключается в следующем:**

- получены численные значения, рассчитанные на основе теории Лифшица, величины дисперсионных сил в наноразмерных слоистых структурах электронной техники, которые могут быть использованы при создании и конструировании наноразмерных электронных приборов на основе исследованных структур;
- получены данные о высоком (вплоть до нескольких МПа) расчетном значении величины давления дисперсионных сил, которые представляют интерес для физики полупроводников и физики конденсированных сред, и ставят задачи по развитию теории дисперсионного взаимодействия для расстояний в единицы нанометров.
- разработан и прошел государственную регистрацию комплекс программ «Квантовомеханический расчет давления, оказываемого силой Казимира на слой диэлектрика в МДП–структуре, при толщинах диэлектрика от 1 нм до 1000 нм» (свидетельство о государственной регистрации № 2012612343 от 05.03.2012).

### **Апробация работы**

Основные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на 8 международных и всероссийских научных и научно-практических конференциях:

1. X<sup>th</sup> international conference “Quantum Field Theory Under the Influence of External Conditions”. September 18 – 24 2011, Benasque, Spain.
2. XIV всероссийская конференция «Фундаментальные исследования и инновации в национальных исследовательских университетах». 13 – 14 мая 2010, Санкт-Петербург.
3. III всероссийский форум студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и инновации в технических университетах». 28 – 30 октября 2009, Санкт-Петербург.
4. XI всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике. 30 ноября – 4 декабря 2009, Санкт-Петербург.
5. XII всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике. 21 – 25 ноября 2010, Санкт-Петербург.
6. XI международной научно-практической конференции «Анализ и прогнозирование систем управления». 15 – 18 апреля 2010, Санкт-Петербург.
7. XIII всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике. 21 – 25 ноября 2011, Санкт-Петербург.
8. Международный форум–конкурс молодых ученых «Проблемы недропользования» секция «Нанотехнологии». 25 – 27 апреля 2012, Санкт-Петербург.

### **Публикации**

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 5 статьях и 8 докладах, из них по теме диссертации 13, среди которых 3 публикации в ведущих рецензируемых изданиях, рекомендованных в действующем перечне ВАК, и 1 статья опубликована в ведущем международном журнале с высоким индексом цитирования (импакт–фактор 1,053). Имеется также свидетельство о государственной регистрации комплекса программ «Квантовомеханический расчет давления, оказываемого силой Казимира на слой диэлектрика в МДП–структуре, при толщинах диэлектрика от 1 нм до 1000 нм» (свидетельство о государственной регистрации № 2012612343 от 05.03.2012).

Научное исследование по теме диссертационной работы было отмечено дипломом победителя городского конкурса 2011 года аспирантов вузов и академических институтов Санкт-Петербурга по разделу “физика” и присуждением премии Правительства Санкт-Петербурга.

Два доклада на конференциях были отмечены дипломами.

**Личный вклад диссертанта** состоит в постановке ряда задач исследования, разработке методики расчетов совместно с проф. Г.Л. Климчицкой, разработке и реализации комплекса программ расчета на компьютерах общего пользования, выполнении всех численных расчетов, участие в анализе результатов совместно с проф. А.Б. Федорцовым и проф. Г.Л. Климчицкой.

## **Внедрение**

Результаты диссертационного исследования использованы при проведении научно-исследовательских работ, выполненных по государственным контрактам № П-184 от 16.07.2009 г., № НК-589П от 11.05.2010 г., № 16.740.11.0144 от 02.09.2010 г.

Автор выражает благодарность д.ф.-м.н., профессору главной (Пулковской) астрономической обсерватории РАН Климчицкой Галине Леонидовне за ценные консультации и помощь в проведении и проверке результатов расчетов.

## **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обосновывается выбор темы исследования и ее актуальность, ставится цель работы, и аннотируются основные решаемые задачи. Кратко излагается содержание работы, и формулируются основные положения, выносимые на защиту.

**В первой главе** приведены аналитический обзор состояния предметной области исследования.

Дисперсионные силы (это обобщенное название сил Ван-дер-Ваальса и Казимира) исследуются во всем мире. Несмотря на актуальность проводимых исследований, они все еще носят ограниченный характер, как в решении прикладных задач, так и в математическом моделировании. Это связано с тем, что экспериментальные исследования дисперсионных сил с хорошей точностью стали возможны достаточно недавно, и то в отдельных, специфических случаях. Чаще всего напрямую экспериментально определить их влияние в структурах оказывается весьма сложно или невозможно.

Поэтому представляет особый интерес проведение теоретического исследования дисперсионного взаимодействия различных объектов, разделенных расстоянием менее 200 нм. С нашей точки зрения наиболее актуальным является изучение проявления дисперсионных сил в структурах, которые активно используются в современной электронной и электромеханической технике. Это обусловлено тем, что элементы современных электромеханических и электронных устройств уменьшились до десятков и даже единиц нанометров. Ранее [3–4] в экспериментальных исследованиях прикладного характера было установлено, что действие дисперсионных сил на таких расстояниях препятствует проведению измерений параметров нанoeлектромеханических систем и их функционированию. Эти обстоятельства делают актуальной задачей изучение особенностей проявления дисперсионных сил, а также их зависимости от свойств используемых материалов в реальных структурах (п.1.1). Такое исследование позволит определить тот рубеж, при котором дисперсионные силы становятся значительными, и даст возможность учета нежелательного действия этих явлений или, наоборот, их использования в работе элементов электронной техники.

Во многих экспериментальных исследованиях по определению величины дисперсионных сил между макроскопическими телами используют тела со слабо искривленными поверхностями, радиусы кривизны которых значительно превышают

расстояние между объектами ( $R \gg a$ ). Например, взаимодействие между плоской пластиной (как правило, из кремния или металла) и металлической сферой [4]. Величину дисперсионного взаимодействия в этом случае определяли, как экспериментально, так и теоретически. Также были исследованы возможности модуляции силы взаимодействия с помощью облучения полупроводниковой пластины лазерными импульсами. Однако исследование проводилось для вакуума, в то время как большинство наноэлектромеханических систем на основе подобной конструкции работают в воздушной среде, в которой на поверхности кремниевой пластины возникает слой естественного окисла. Такой слой может оказывать влияние на модуляцию величины дисперсионного взаимодействия между полупроводниковой пластиной и металлической сферой при облучении пластины лазерными импульсами (п. 1.2).

Функционирование большей части микро- и наноэлектронных устройств основываются на использовании полупроводниковых материалов. В тоже время объектами большинства исследований экспериментальных и теоретических работ по изучению эффекта Казимира до сих пор являются лишь металлические тела различных конфигураций. С учетом общей тенденции к миниатюризации современной электронной аппаратуры представляет интерес провести определение величины дисперсионных сил для структур, применяемых в реальной электронной технике, выполненных на основе полупроводников, в первую очередь, такого распространенного, как кремний.

В качестве объекта таких исследований дисперсионных сил с нашей точки зрения оптимальным является выбор многослойной структуры металл–диэлектрик–полупроводник, которая широко используется в современной полупроводниковой технике [5]. На основе выбранной для нашего исследования структуры, а именно структуры алюминий–оксид кремния–кремний, изготавливаются такие широко используемые электронные элементы и устройства, как конденсаторы, полевые транзисторы, приборы с зарядовой связью, датчики водорода. Физические и электрооптические параметры таких структур можно направленно и управляемо изменять в широком диапазоне. При этом возможно с достаточно высокой точностью контролировать характер и значение этих изменений и сопутствующих им параметров (п.1.3).

Глава оканчивается постановкой цели диссертационной работы.

**Во второй главе** диссертации представлены методика расчетов величины дисперсионных сил и обоснования выбора технологии использования теоретических моделей для определения зависимости этой величины от реальных свойств взаимодействующих объектов, которые вносят вклад в дисперсионные явления [4, 6].

Основой для теоретического изучения дисперсионных сил, используемой в данной работе, является теория Лифшица, которая является справедливой для расстояний между взаимодействующими телами от нескольких единиц до тысяч ангстрем. Общее выражение для энергии дисперсионного взаимодействия  $E_{pp}(a, T)$  в случае двух полупространств, разделенных

щелью ширины  $a$ , было получено в работе Лифшица [7], и в дальнейшем обобщено на случай слоистых структур [8], в том числе и с произвольным числом слоев [11, 12]. Это обобщенное выражение имеет вид

$$E_{pp}(a, T) = \frac{k_B T}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \left(1 - \frac{\delta_{l0}}{2}\right) \cdot \int_0^{\infty} k_{\perp} dk_{\perp} \sum_q \ln \left[1 - R_q^{(I)}(i\xi_l, k_{\perp}) R_q^{(II)}(i\xi_l, k_{\perp})\right] \quad (1)$$

Здесь  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура, выраженная в Кельвинах;  $\delta_{l0}$  – символ Кронекера;  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  – целое число;  $k_{\perp}$  – модуль проекции волнового вектора электромагнитной волны на плоскость пластин, параллельную границе раздела сред;  $\xi_l = 2\pi k_B T l / \hbar$  – частоты Мацубары. Индекс  $q$  используется для обозначения магнитной и электрической составляющих электромагнитного поля.

Значения коэффициентов отражения Френеля  $R_q^{(I)}(i\xi_l, k_{\perp})$  и  $R_q^{(II)}(i\xi_l, k_{\perp})$  для двух поляризаций падающей электромагнитной волны вычисляются при мнимых значениях частоты:

$$R_{TM}^{(I,II)}(i\xi_l, k_{\perp}) = \frac{\varepsilon_l^{(n')} K_l^{(n)} - \varepsilon_l^{(n)} K_l^{(n')}}{\varepsilon_l^{(n')} K_l^{(n)} + \varepsilon_l^{(n)} K_l^{(n')}}, \quad R_{TE}^{(I,II)}(i\xi_l, k_{\perp}) = \frac{K_l^{(n)} - K_l^{(n')}}{K_l^{(n)} + K_l^{(n')}}. \quad (2)$$

Здесь используется обозначение

$$K_l^{(n)} \equiv \sqrt{k_{\perp}^2 + \varepsilon_l^{(n)} \frac{\xi_l^2}{c^2}}, \quad (3)$$

причем значения диэлектрических проницаемостей вычисляются при мнимых значениях мацубаровской частоты  $\varepsilon_l^{(n)} = \varepsilon^{(n)}(i\xi_l)$ ;  $c$  – скорость распространения электромагнитной волны в вакууме.

Если одна из пластин или обе представляют собой слоистую структуру, тогда к границе раздела примыкает слой толщины  $d$  из материала с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon^{(1)}(\omega)$ , а остальная часть пластины выполнена из материала с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon^{(2)}(\omega)$ . При этом давление на щель, заполненную материалом с  $\varepsilon^{(0)}$ , также определяется выражением (1), но коэффициенты  $R_q^{(I)}(i\xi_l, k_{\perp})$ ,  $R_q^{(II)}(i\xi_l, k_{\perp})$  в этом выражении имеют более сложный вид [4]:

$$R_q^{I,II}(i\xi_l, k_{\perp}) = \frac{r_q^{(0,1)}(i\xi_l, k_{\perp}) + r_q^{(1,2)}(i\xi_l, k_{\perp}) e^{-2K_{1,2}^{(1)} d}}{1 + r_q^{(0,1)}(i\xi_l, k_{\perp}) r_q^{(1,2)}(i\xi_l, k_{\perp}) e^{-2K_{1,2}^{(1)} d}}. \quad (4)$$

Значение дисперсионной силы можно определить по известному выражению для свободной энергии:

$$F(a, T) = -\frac{\partial E_{pp}(a, T)}{\partial a}. \quad (5)$$

Одним из параметров дисперсионного взаимодействия является давление дисперсионных сил на разделяющий проводящие объекты слой. Формула для определения величины давления, создаваемого дисперсионными силами на слой, находящийся в состоянии

теплового равновесия при температуре  $T$  (в Кельвинах), будет иметь вид:

$$P(a, T) = -\frac{k_B T}{8\pi a^3} \sum_{l=0}^{\infty} \left(1 - \frac{\delta_{l0}}{2}\right) \int_0^{\infty} k_{\perp} dk_{\perp} K_l^{(0)} \sum_q \left[ \frac{e^{2K_l^{(0)} a}}{r_q^{(0,1)}(i\xi_l, k_{\perp}) r_q^{(0,2)}(i\xi_l, k_{\perp})} - 1 \right] \quad (6)$$

Знак “минус” здесь показывает, что взаимодействующие пластины притягиваются под действием дисперсионных сил, возникающих между ними.

Рассмотренные выражения (1) – (6) для определения параметров дисперсионных сил показывают, что их величину определяют такие параметры, как расстояние между проводящими слоями, диэлектрическая проницаемость веществ, температура.

Для проведения численных расчетов необходимо знать значения диэлектрических проницаемостей всех рассматриваемых сред при мнимых значениях частоты ( $i\xi_l$ ), которые вычисляются с использованием различных приближенных методов [5, 6], основанных на измерении вещественной и мнимой частей комплексного показателя преломления.

В настоящей работе дисперсионное взаимодействие исследовалось для случая кремниевой пластины, толщина которой, как правило, составляет около 150 – 200 мкм. Поэтому в соответствие с ранее проведенными исследованиями, верным будет считать такую пластину эквивалентной полупространству [9].

Выражение для определения диэлектрической проницаемости кремниевой пластины с равномерно распределенным зарядом в объеме полупроводниковой пластины с собственной концентрацией менее  $10^{17} \text{ см}^{-3}$  имеет вид:

$$\varepsilon_{\text{Si}}(i\xi) = 1,035 + \frac{10,73 \cdot \omega_{\text{Si}}^2}{\xi^2 + \omega_{\text{Si}}^2}. \quad (7)$$

Здесь плазменная частота для кремния  $\omega_{\text{Si}} = 6,6 \cdot 10^{15} \text{ рад/с}$ .

Поведение диэлектрической проницаемости диэлектрического слоя диоксида кремния, образующегося на поверхности кремниевой пластины, достаточно точно описывается формулой для двухосцилляторной модели и хорошо согласуется с экспериментальными данными [6, 10]:

$$\varepsilon_{\text{SiO}_2}(i\xi) = 1 + \frac{c_{UV} \cdot \omega_{UV}^2}{\omega_{UV}^2 + \xi^2} + \frac{c_{IR} \cdot \omega_{IR}^2}{\omega_{IR}^2 + \xi^2}. \quad (8)$$

Здесь используются следующие обозначения:  $c_{UV} = 1,098$ ;  $\omega_{UV} = 2,033 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}$ ;  $c_{IR} = 1,703$ ;  $\omega_{IR} = 2,88 \cdot 10^{14} \text{ рад/с}$ .

При исследовании модуляции лазерными импульсами величины дисперсионных сил, которые действуют между кремниевой пластиной и золотой сферой, разделенными воздушной щелью ( $\varepsilon_0 = 1$ ), хорошим приближением для описания диэлектрической проницаемости золота является [4, 10]

$$\varepsilon_{\text{Au}}(i\xi) = 1 + \frac{\omega_{p, \text{Au}}^2}{\xi^2} + \sum_{j=1}^6 \frac{g_j}{\omega_j^2 + \xi^2 + \gamma_j \xi}. \quad (9)$$

Здесь плазменная частота для золота  $\omega_{p, \text{Au}} = 13,671 \cdot 10^{15} \text{ рад/с}$ ,  $g_j$ ,  $\omega_j$ ,  $\gamma_j$  – параметр,

частота осцилляций и коэффициент затухания соответственно, значения которых для золота приведены в приложении.

Для большинства реально используемых МДП–структур в качестве металлического слоя обычно используют алюминий. Для описания комплексной диэлектрической проницаемости алюминия, как правило, используются две модели – модель Друде или плазменная модель. Различие этих моделей заключается в разном учете энергии рассеяния в процессах столкновения свободных электронов проводимости с ионами решетки и влияния межзонных переходов.

В модели Друде диэлектрическая проницаемость алюминия определяется выражением:

$$\varepsilon_{Al}^D(i\xi) = 1 + \frac{\omega_{p,Al}^2}{\xi(\xi + \gamma_{Al})}, \quad (10)$$

где  $\omega_{p,Al} = 13$  эВ – плазменная частота и  $\gamma_{Al} = 6,45$  мэВ – параметр релаксации [11].

Так называемая плазменная модель описания диэлектрической проницаемости алюминия является хорошим приближением в области толщины слоя менее ста нанометров [4, 10]. В этой модели учитывается движение электронов без столкновения с фононами кристаллической решетки материала. При этом свободные электроны в веществе рассматриваются как равномерно распределенное облако, то есть плазма. Уравнение для этой модели диэлектрической проницаемости алюминия имеет вид [6]:

$$\varepsilon_{Al}(i\xi) = 1 + \frac{\omega_{p,Al}^2}{\xi^2}. \quad (11)$$

В исследуемой МДП–структуре толщины диэлектрического слоя могут составлять единицы нанометров, поэтому для определения величины дисперсионного взаимодействия необходима более полная информация для описания диэлектрической проницаемости материалов в весьма большом диапазоне частот, вплоть до  $\xi \approx 658$  эВ.

Как известно [4], применение простых моделей (10) и (11) в области столь высоких частот является неверным. Поэтому для проведения вычислений давления дисперсионных сил для диапазона толщин диэлектрического слоя от  $a = 40$  нм до  $a = 1$  нм мы используем экспериментальные данные [12] для комплексного показателя преломления для диапазона частот от  $\xi = 0,04$  эВ до  $\xi = 10$  кэВ. Значение диэлектрической проницаемости вдоль мнимой оси частот можно вычислить с помощью дисперсионных соотношений Крамерса–Кронига [4, 13]:

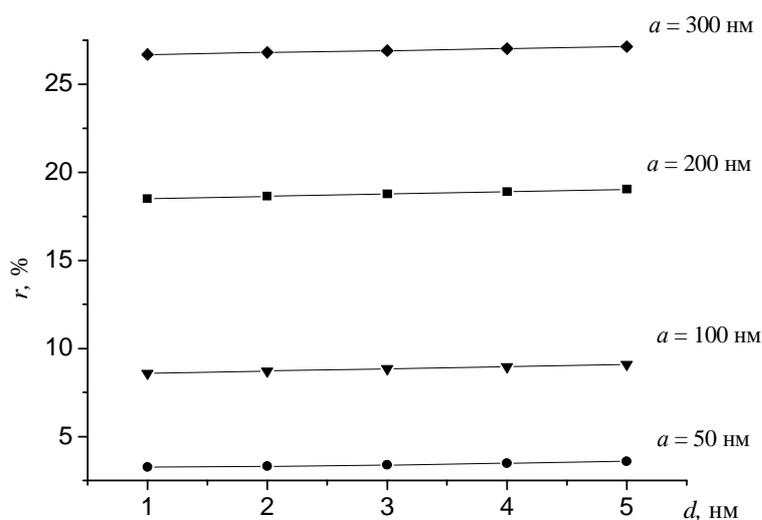
$$\varepsilon(i\xi) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_{\min}} \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{\omega^2 + \xi^2} d\omega + \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{\omega^2 + \xi^2} d\omega + \frac{2}{\pi} \int_{\omega_{\max}}^{\infty} \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{\omega^2 + \xi^2} d\omega. \quad (12)$$

При этом использовали значения плазменной частоты и параметра релаксации для алюминия, представленные ранее.

**В третьей главе** представлены результаты теоретического исследования особенностей проявления дисперсионных сил в наноразмерных слоистых структурах на основе кремния, выполненного на основе теории Лифшица.

Одной наиболее широко используемой слоистой структурой является кремниевая пластина с диоксидом кремния на поверхности, который либо формируют технологически, либо который образуется естественным путем из-за окисления поверхности в воздушной среде. Такие структуры служат основой различных электронных и микроэлектромеханических систем. Для исследования влияния окисления поверхности кремниевой пластины на ее дисперсионное взаимодействие с внешним проводником была теоретически рассчитана возможность модуляции величины дисперсионных сил между кремниевой пластиной и золотой сферой радиусом  $R = 100$  мкм, разделенных воздушной прослойкой шириной  $a$  менее 500 нм (п. 3.1). В ходе проведенных теоретических исследований было установлено, что наличие пленки оксида на поверхности кремниевой пластины приводит к некоторому уменьшению расчетной величины дисперсионных сил. Так на расстояниях  $a = 50, 100$  и  $200$  нм сила уменьшается соответственно на 2,8; 1,6 и 0,85 %. Таким образом, с увеличением расстояния относительное влияние толщины слоя диоксида кремния на силу Казимира падает. Однако величина относительного изменения силы растет с увеличением расстояния.

Ранее в работе [14] была экспериментально продемонстрирована возможность модуляции в условиях высокого вакуума величины дисперсионных сил облучением поверхности кремниевой пластины лазерными импульсами. Нами была проведена оценка влияния слоя диоксида кремния на поверхности кремния на силу Казимира и ее изменение под воздействием лазерного облучения. Проведенные расчеты показали, что возможность модуляции силы Казимира лазерными импульсами сохраняется и в воздушной среде, когда поверхность кремниевой пластины покрыта пленкой оксида (рис. 1). Наличие тонкой пленки слабо влияет на возможность такой модуляции, когда расстояние между взаимодействующими телами мало (порядка  $a = 100$  нм и менее).



*Рис. 1. Расчетная зависимость относительного изменения глубины модуляции дисперсионной силы  $r$  от толщины пленки оксида на кремнии  $d$  при различных расстояниях  $a$  между сферой и пластиной*

Таким образом, было установлено, что окисление поверхности кремниевой пластины слабо влияет на величину дисперсионного взаимодействия кремния с металлическим электродом. При увеличении расстояния между взаимодействующими объектами возможность модуляции величины дисперсионных сил облучением кремниевой поверхности лазерными импульсами снижается, однако эта область представляет меньший практический интерес, так как силы Казимира становятся слишком малыми по величине.

В пункте 3.2 диссертации представлены результаты теоретических исследований особенностей проявления дисперсионных сил в наноразмерных слоистых структурах металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) на основе кремниевой подложки.

В частности, подпункт 3.2.1 посвящен теоретическому исследованию зависимости давления, создаваемого дисперсионными силами на диэлектрический слой диоксида кремния в МДП–структуре, от толщины металлического слоя, который выполнен из алюминия. Принятая в расчетах толщина диэлектрического слоя, на который оказывают давление дисперсионные силы, составляла  $a = 80$  нм. Прямые численные расчеты были проведены для различных толщин металлического слоя  $d$ , равных 50 нм, 100 нм и 1 мкм. Значения давления дисперсионных сил, полученные с использованием плазменной модели диэлектрической проницаемости алюминия, составили, соответственно,  $-5,515$  Па,  $-5,517$  Па и  $-5,517$  Па. При использовании модели Друде для описания диэлектрической проницаемости слоя алюминия величина давления дисперсионных сил, рассчитанная при этих же толщинах металлического слоя, составляет  $-5,489$  Па,  $-5,491$  Па,  $-5,491$  Па. Знак минус, в соответствии с уравнением (6), отвечает силе притяжения.

Из полученных данных следует, что увеличение толщины слоя алюминия более 100 нм не приводит к увеличению расчетной величины давления на слой диэлектрика, заключенный между алюминием и кремнием. Уменьшение же толщины металлического слоя от 100 нм до 50 нм уменьшает давление всего на 0,03 %. Меньшие толщины металлизации редко используются на практике.

Расхождение результатов расчета дисперсионных сил с использованием рассмотренных моделей для описания диэлектрической проницаемости веществ (плазменной модели и модели Друде) не превышает 0,5 % – это весьма высокое совпадение результатов вычислений для малых расстояний между объектами.

Полученные расчетные значения дисперсионного давления по порядку величины хорошо согласуются с результатами экспериментов по измерению дисперсионных сил в близких по параметрам системах. Например, эффективное давление между двумя золотыми пластинами, разделенными вакуумной щелью, измеренное с высокой точностью, составляет  $-1,1$  Па при ширине щели 162 нм [15]. Так как с уменьшением расстояния это давление возрастает примерно обратно пропорционально четвертой степени расстояния, поэтому при рассматриваемой нами ширине щели  $a = 80$  нм оно должно составить величину около 15 Па. Золото и алюминий

близки по своему влиянию на дисперсионные силы. Замена одной из металлических пластин на кремниевую приведет к уменьшению величины дисперсионных сил примерно на 30 %. Таким образом, численный расчет показывает, что давление между алюминиевой и кремниевой пластинами, разделенными вакуумной щелью шириной 80 нм, составляет  $-10,5$  Па.

В подпункте 3.2.3 главы 3 исследована зависимость величины давления, создаваемого дисперсионными силами на слой диоксида кремния в МДП–структуре, от толщины этого слоя. Вычисления величины давления дисперсионных сил проводились с использованием модели Друде (10) и плазменной модели (11) для описания диэлектрической проницаемости алюминия при его толщине  $d = 100$  нм. В результате было установлено, что с уменьшением расстояния  $a$  от 80 нм до 40 нм между проводящими слоями металла и полупроводника, то есть в 2 раза величина давления быстро возрастает: от  $-5,5$  Па до  $-67,3$  Па, то есть почти в 12 раз.

Когда расстояния между взаимодействующими слоями становятся еще меньше и составляют единицы нанометров, для определения величины дисперсионного взаимодействия необходима более полная информация для описания диэлектрической проницаемости материалов в весьма большом диапазоне частот, вплоть до  $\xi \approx 10$  кэВ. Поэтому исследования дисперсионных сил в МДП–структуре при толщинах диэлектрического слоя менее 40 нм проводились с использованием выражения (12) для описания диэлектрической проницаемости алюминия в рамках модели Друде и плазменной модели. Для описания диэлектрической проницаемости кремния также использовалась более точная модель при вычислениях величины дисперсионного давления в исследуемой МДП–структуре.

Результаты проведенных вычислений на основе теории Лифшица показали, что при толщине диэлектрического слоя меньше, чем  $a < 5$  нм, расчетная величина давления дисперсионных сил может достигать  $-8$  МПа ( $-82$  атм.) в структуре алюминий–диоксид кремния–кремний. То есть величина давления дисперсионных сил может увеличиваться в  $10^5$  раз при уменьшении толщины диэлектрического слоя в 40 раз в соответствии с этой теорией (рис. 2).

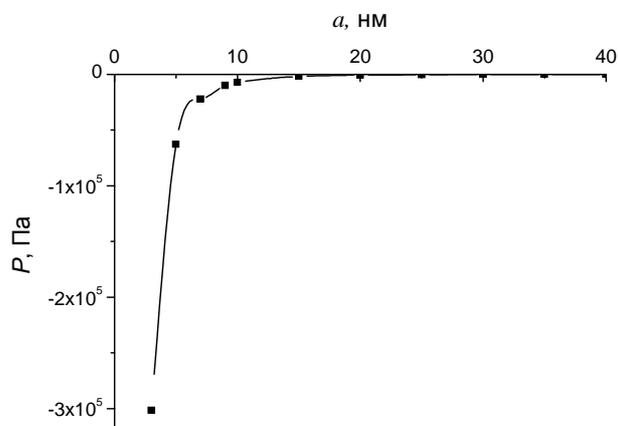


Рис. 2. Расчетная зависимость давления дисперсионных сил  $P$  от толщины  $a$  диэлектрического слоя, составляющей десятки – единицы нанометров в МДП–структуре

Полученная величина давления не зависит от типа модели, выбранной для описания диэлектрической проницаемости алюминия: Друде или плазменная. Расхождение результатов вычислений с использованием разных моделей расчета составило менее 1 %, что характеризует высокое совпадение полученных результатов при малых (менее 40 нм) толщинах диоксида кремния в исследуемой МДП–структуре.

В подпункте 3.2.4 рассмотрен случай расчета величины дисперсионных сил в нерелятивистском пределе при толщинах диэлектрического слоя менее 5 нм в МДП–структуре. Это связано с тем, что такие расстояния становятся сопоставимыми по величине с длиной волны, характерной для спектра поглощения материала. Для оценки величины давления, оказываемого дисперсионными силами на слой диоксида кремния, в случае нерелятивистского предела была рассчитана константа Гамакера для двух моделей, используемых для описания диэлектрической проницаемости алюминия. Эта постоянная оказалась равной  $H = 1,61 \cdot 10^{-19}$  Дж при вычислении с использованием модели Друде, и  $H = 1,60 \cdot 10^{-19}$  Дж – в случае расчета с использованием плазменной модели. Это свидетельствует о том, что результат вычислений дисперсионного давления и в случае использования нерелятивистского предела в МДП–структуре не зависит от моделей, которые используются для описания диэлектрической проницаемости алюминия. Значение дисперсионного давления, рассчитанное в нерелятивистском пределе при толщине диэлектрического слоя  $a = 3$  нм составляет  $-3,01 \cdot 10^5$  Па, то есть отличается от его значения, рассчитанного в релятивистском случае менее чем на 3 %. Таким образом, для предварительной оценки величины дисперсионного взаимодействия в МДП–структуре с очень тонким диэлектриком (тоньше 5 нм), по-видимому, возможно использовать более простую формулу для нерелятивистского случая, когда давление обратно пропорционально кубу расстояния между проводящими слоями.

### **Заключение**

В последнее время ведущие мировые лаборатории и крупнейшие производители электронной техники ведут активные разработки электронных устройств в виде слоистых структур на основе кремния. При этом налицо стремление для эффективного управления электронными процессами в кремнии использовать все более тонкие слои диэлектрика между металлическим электродом и кремнием. В рекордных случаях толщина диэлектрического слоя уменьшается до нескольких нанометров ( $a \leq 3,0$  нм) [16]. Большинство таких полупроводниковых приборов создаются по очень сложной технологии. Это приводит к значительному увеличению их себестоимости, причем иногда наноразмерные электронные устройства оказываются неработающими и, как показано в работах [3, 10], причиной неисправности в ряде случаев становятся именно дисперсионные силы.

Таким образом, остается актуальным поставленная в начале проведения данного исследования цель определения величины дисперсионных сил, действующих в современных наноразмерных слоистых структурах, изготовленных на основе монокристаллического кремния.

Эта цель была достигнута путем выполнения расчетов на основе теории Лифшица с использованием разработанных технологий расчета.

В ходе работы было установлено, что расчетная величина дисперсионных сил, которая действует между кремниевой пластиной и металлическим телом, находящимися в воздушной среде, слабо зависит от образования на поверхности кремниевой пластины тонкой диэлектрической пленки диоксида кремния. В рамках общепринятой теории дисперсионных сил было теоретически исследовано проявление дисперсионных сил, действующих на диэлектрический слой в МДП–структуре на основе кристалла кремния. В результате мы получили, что с уменьшением толщины слоя диоксида кремния от 80 нм до 3 нм расчетная величина давления дисперсионных сил на этот слой резко, на шесть порядков, возрастает по модулю примерно от 5 Па до 0,3 МПа, что может оказать существенное влияние на функционирование приборов. Разумеется, для толщины диэлектрика в единицы нанометров, то есть в несколько атомных слоев, понятие диэлектрической проницаемости, используемое в теории Лифшица, не является вполне корректным. Результаты, полученные для этой области, имеют оценочный характер.

Полученные значения давления дисперсионных сил при малых толщинах диэлектрического слоя (менее 5 нм) хорошо согласуются с нерелятивистским способом рассмотрения дисперсионного взаимодействия. Расхождение результатов вычислений с использованием релятивистского и нерелятивистского рассмотрения составляет менее 3 %.

Теория дисперсионных сил в настоящее время считается применимой в области расстояний между взаимодействующими объектами менее 500 нм. В области малых расстояний (единицы ангстрем) дисперсионные силы становятся сравнимыми по величине с другими обменными взаимодействиями и вносят вклад в величину полной энергии общего взаимодействия в виде слагаемого. Пока взаимодействующие тела сохраняют свою индивидуальность, то есть не наблюдается перекрытия электронных оболочек атомов, вклад дисперсионных сил в полную энергию является существенным. Для определения некоторого конечного значения величины дисперсионных сил используют различные вариационные методы, аналогичные расчету электронных оболочек молекул (метод электронных корреляций, фрагментаций молекулярных оболочек и т.д.), каждый из которых адекватен в очень малом диапазоне расстояний.

Таким образом, полученные в данной работе высокие значения давления дисперсионных сил, действующих между проводящими слоями в наноразмерной слоистой структуре алюминий – диоксид кремния – кремний, могут явиться отправной точкой исследования, целью которого будет решение вопроса о пределах применимости общепринятой теории дисперсионных сил. Сопоставление полученной расчетной величины давления, создаваемого дисперсионными силами на слой диоксида кремния, с действием других сил, имеющих место в исследуемой структуре, пока остается задачей для дальнейших исследований, которые желательно связать с

экспериментальными исследованиями этого явления.

### **Основные результаты:**

1. Впервые получена расчетная величина давления, создаваемого дисперсионными силами в наноразмерной МДП–структуре на основе кремниевой подложки, и установлено значительное возрастание этого давления (до нескольких мегапаскалей) при уменьшении толщины диэлектрического слоя до единиц нанометров.

2. Установлены основные зависимости расчетной величины дисперсионного взаимодействия от геометрических и электрооптических параметров слоев наноразмерной слоистой структуры на кремниевой пластине в диапазоне реально используемых значений этих параметров.

3. Установлено слабое влияние используемых физико-математических моделей, используемых для описания диэлектрической проницаемости слоев наноразмерной слоистой структуры на основе кремния, на результаты вычисления величины давления дисперсионных сил.

4. Исследовано влияние слоя диоксида кремния на поверхности полупроводниковой подложки на возможность модуляции величины дисперсионного взаимодействия в воздушной среде между кремниевой пластиной и внешним проводником лазерными импульсами и получены зависимости расчетной величины дисперсионных сил от окисления поверхности кремниевой пластины.

Актуальность результатов работы подтверждена актами внедрения полученных результатов в научно-исследовательские работы, проведенные по государственным контрактам № П-184 от 16.07.2009, № НК-589П от 11.05.2010 г., № 16.740.11.0144 от 02.09.2010 г.

### **ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ**

#### **Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК**

1. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Давление силы Казимира на слой диэлектрика в наноразмерных слоистых твердотельных структурах алюминий–оксид кремния–кремний // СПб.: Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, серия Физико-математические науки, № 3. 2012, – С. 22 – 28.

2. Yurova V.A., Fedortsov A.B., Churkin Yu. V., Klimchitskaya G. L., Bukina M.N. Casimir pressure in MDS–structures // Intern. Journ. of Modern Physics: Conference series. Vol. 14, 2012, – P. 566 – 575.

3. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Расчет дисперсионных сил в структурах металл–диэлектрик–полупроводник //СПб.: Физика твердого тела. Том 53, выпуск 9, 2011, – С. 1820 – 1825.

4. Юрова В.А., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В., Букина М.Н. Модуляция силы Казимира

лазерными импульсами: влияние окисных пленок на поверхности кремния //СПб.: Физика твердого тела. Том 52, выпуск 10, 2010, – С. 1897 – 1902.

5. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Комплекс программ «Квантовомеханический расчет давления, оказываемого силой Казимира на слой диэлектрика в МДП–структуре, при толщинах диэлектрика от 1 нм до 1000 нм» (Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ в Федеральной службе по интеллектуальной собственности № 2012612343 от 05.03.2012 г.).

#### **Публикации в других изданиях**

6. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Расчет дисперсионных сил в структурах металл–диэлектрик–полупроводник. Сб. «Физические основы высоких технологий» // СПб: Изд-во СЗТУ, 2010, – С. 3 – 15.

7. Юрова В.А., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В., Букина М.Н. Влияние пленки естественного окисла на пульсирующую силу Казимира. Сб. «Физические основы высоких технологий» // СПб: Изд-во СЗТУ, 2010, С. 16 – 30.

8. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Давление дисперсионных сил в структурах металл–диэлектрик–полупроводник. Сб. «Анализ и прогнозирование систем управления» // СПб.: СЗТУ, 2010, – С. 197–203.

9. Юрова В.А. Расчет сил Казимира, действующих в структурах МДП, используемых при производстве интегральных схем. Сб. "Наука и инновации в технических университетах" // СПб: Изд-во СПбГПУ, 2009. – С. 128.

10. Юрова В.А. Структуры МДП интегральных схем как объект исследования дисперсионных сил. Сборник тезисов докладов XI Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике // СПб: Изд-во СПбГПУ, 2009, – С. 119.

11. Юрова В.А., Федорцов А.Б. Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Исследование дисперсионных сил в наноразмерных твердотельных системах. Материалы XIV Всероссийской конференции, Т.1, «Фундаментальные исследования и инновации в национальных исследовательских университетах»// СПб: Изд-во СПбГПУ, 2010.– С. 42.

12. Юрова В.А. Анализ влияния параметров структуры металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) на дисперсионные силы. Тезисы докладов XII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике // СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2010. – С. 18.

13. Юрова В.А., Федорцов А.Б. Исследование эффекта Казимира в структуре металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) с наноразмерной толщиной диэлектрика. Сборник тезисов докладов XIII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике // СПб: Изд-во СПбГПУ, 2011. – С. 13.

## ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Расчет дисперсионных сил в структурах металл–диэлектрик–полупроводник // Физика Твердого Тела. 2011. Т. 53, № 9. С. 1820 – 1825.
2. Юрова В.А., Федорцов А.Б., Климчицкая Г.Л., Чуркин Ю.В. Давление силы Казимира на слой диэлектрика в наноразмерных слоистых твердотельных структурах Al–SiO<sub>2</sub>–Si // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, серия Физико-математические науки. 2012. № 3. С. 22 – 28.
3. Buks E., Roukes M. L. Metastability and the Casimir effect in micromechanical systems // Europhys. Lett. 2001. Vol. 54 (2). P. 220–226.
4. Borgard M., Klimchitskaya G.L., Mohideen U., Mostepanenko V.M. Advances in the Casimir effect. – Oxford: Oxford University Press, 2009. – 768 p.
5. Громов Д.Г., Мочалов А.И. Металлизация ультрабольших интегральных схем: учебное пособие. – М.: БИНОМ, 2009. – 277 с.
6. Parsegian V.A. Van der Waals forces: a handbook for biologists, chemists, engineers and physicists. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. 394 p.
7. Дзялошинский И.Е., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Общая теория Ван–дер–Ваальсовых сил // УФН. 1961. Т. 73, № 3. С. 381 – 422.
8. Zhou F., Spruch L. Van der Waals and retardation (Casimir) interactions of an electron or an atom with multilayered walls // Phys. Rev. A. 1995. Vol. 52. P. 297 – 310.
9. Lambrecht A., Pirozhenko I., Duraffourg L., Andreucci Ph. The Casimir effect for silicon and gold slabs // Europhys. Lett. 2007. Vol. 77, P. 44006 – 44010.
10. Klimchitskaya G.L., Mohideen U., Mostepanenko V.M. The Casimir force between real materials: Experiment and theory // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P. 1827 -1885.
11. Ordal M.A., Bell R.I., Alexander Ir. R.W., Long L.L., Query M.R. Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared: Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W // Appl. Opt. 1985. Vol. 24, 4493 – 4499.
12. Palik, E. D. (ed.) Handbook of Optical Constants of Solids. NY: Academic Press, 1985. Vol. I. 749 p.
13. Bimonte, G. Making precise predictions of the Casimir force between metallic plates via a weighted Kramers–Kronig transform // Phys. Rev. A. 2011. Vol. 83. P. 042109 – 42126.
14. Klimchitskaya G.L., Mohideen U., Mostepanenko V.M. Pulsating Casimir force // J. Phys. A.: Math. Theor. 2007. Vol. 40, № 34. P. F841 – F847.
15. Decca R.S., Lopez D., Fischbach E., Klimchitskaya G.L., Krause D.E., Mostepanenko V.M. Precise comparison of theory and new experiment for the Casimir force leads to stronger constraints on thermal quantum effects and long-range interactions // Ann. Phys. N.Y. 2005. Vol. 318, 37 – 80.
16. Щука А.А. Нанoeлектроника. – М.: Физматкнига, 2007. – 464 с.