

Запорізький національний технічний університет



Радіоелектроніка Інформатика Управління

1(28)'2013

Науковий журнал

Виходить двічі на рік

Видається з березня 1999 року

Зареєстрований **29 січня 2003 року**
Державним комітетом інформаційної політики,
телебачення та радіомовлення України.

Свідоцтво – серія **КВ № 6904**

Засновник і видавник – Запорізький національний технічний університет

Запоріжжя, ЗНТУ
2013

ISSN 1607-3274

Постановою президії ВАК України № 1-05/4 від 26.05.2010 р. журнал «Радіоелектроніка, інформатика, управління» (скорочена назва – РІУ), який видається з 1999 року, включений до переліку наукових фахових видань України, в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата технічних наук та фізико-математичних наук (радіофізика).

Інтернет-сторінка журналу: <http://journal.zntu.edu.ua/ric/index.php?page=index>.

Журнал реферується або індексується міжнародними базами INSPEC, Index Copernicus, INIS, EBSCO, РИНЦ, Національною бібліотекою України імені В. І. Вернадського, ВІНІТІ, Джерело.

Журнал розповсюджується за Каталогом періодичних видань України (передплатний індекс – 22914).

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Головний редактор – д-р фіз.-мат. наук Погосов В. В. [Pogosov V. V.]

Заст. головного редактора – канд. техн. наук Дубровін В. І. [Dubrovin V. I.]

Члени редколегії:

д-р техн. наук Безрук В. М. [Bezruk Valery M.] Україна

д-р техн. наук Бодяньський Є. В. [Bodyanskiy Yevgeniy. V.] Україна, редактор управління

д-р фіз.-мат. наук, академік РАН Васильєв С. Н. [Stanislav N. Vassilyev] Росія

канд. техн. наук Виноградов Д. В. [Vinogradov D. V.] Росія

д-р фіз.-мат. наук Горбань О. М. [Gorban A. N.] Україна

д-р фіз.-мат. наук Горр Г. В. [Gorr G. V.] Україна

д-р техн. наук Гімпілевич Ю. Б. [Gimpilevich Yu. B.] Україна

д-р фіз.-мат. наук Дробахін О. О. [Drobakhin O. O.] Україна

д-р техн. наук Карпуков Л. М. [Karpukov L. M.] Україна

д-р фіз.-мат. наук Корніч Г. В. [Kornich G. V.] Україна, редактор радіофізики

д-р техн. наук Кулік А. С. [Kulik A. S.] Україна

д-р техн. наук Лебедев Д. В. [Lebedev D. V.] Україна, редактор управління

д-р фіз.-мат. наук, проф. Марковська-Качмар У. [Markowska-Kaczmar U.] Польща

канд. фіз.-мат. наук Олещук В. О. [Ph. D, Oleshchuk V. O.] Норвегія, редактор радіоелектроніки

д-р фіз.-мат. наук Онуфрієнко В. М. [Onufrienko V. M.] Україна

д-р техн. наук Піза Д. М. [Piza D. M.] Україна

д-р техн. наук Потапенко Є. М. [Potapenko E. M.] Україна

д-р техн. наук Хаханов В. І. [Hahanov V. I.] Україна, редактор інформатики

д-р фіз.-мат. наук Чумаченко В. П. [Chumachenko V. P.] Україна, редактор радіоелектроніки

Ph. D. Шарпанських О. А. [Sharpanykykh A.] Голландія, редактор інформатики

Рекомендовано до видання вченою радою Запорізького національного технічного університету (ЗНТУ), протокол № 06 від 29.01.2013 р.

Рукописи проходять незалежне рецензування з залученням провідних фахівців України, Росії, Польщі, Норвегії та Голландії, за результатами якого редакційна колегія приймає рішення про опублікування.

Журнал зверстаний редакційно-видавничим відділом ЗНТУ.

Адреса редакції: 69063, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 64, ЗНТУ,
редакція журналу «РІУ».

Тел: (061) 769-82-96 – редакційно-видавничий відділ

Факс: (061) 764-46-62

E-mail: rvv@zntu.edu.ua

© Запорізький національний технічний університет, 2013

ЗМІСТ

РАДІОФІЗИКА.....	7
<i>Babich A. V., Pogosov V. V., Vakula P. V.</i> SELF-CONSISTENT CALCULATIONS OF WORK FUNCTION, SHOTTKY BARRIER HEIGHTS AND SURFACE ENERGY OF METAL NANOFILMS IN DIELECTRIC CONFINEMENT.....	7
<i>Марченко С. В., Морозов В. М.</i> ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЛИНЕЙНОЙ ФАР С СОГЛАСУЮЩЕЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ.....	21
РАДІОЕЛЕКТРОНІКА ТА ТЕЛЕКОМУНІКАЦІЇ.....	25
<i>Величко Е. В.</i> ЛОКАЦИЯ В ДВУХСЛОЙНОЙ СРЕДЕ ПРИ ПОМОЩИ УПРОЩЕННЫХ ДАТЧИКОВ.....	25
<i>Мищенко М. В., Фарафонов О. Ю., Цицилин Ю. О., Кришук В. М., Романенко С. М.</i> МОДЕЛЮВАННЯ БАГАТОПРОВІДНИХ ЗВ'ЯЗАНИХ МІКРОСМУЖКОВИХ ЛІНІЙ У КВАЗІДИНАМІЧНОМУ НАБЛИЖЕННІ З УРАХУВАННЯМ НЕОДНОРІДНОСТЕЙ ТОПОЛОГІЇ.....	46
<i>Горбань А. Н., Кравчина В. В.</i> ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ ДЛЯ ИМС С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ИЗОЛЯЦИЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ....	30
<i>Пиза Д. М., Залевский А. П., Сиренко А. С.</i> ВЛИЯНИЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ПОМЕХ НА СИСТЕМЫ ПОМЕХОЗАЩИТЫ ИМПУЛЬСНО-ДОПЛЕРОВСКИХ РАДАРОВ.....	51
<i>Дзензерский В. А., Беда М. А., Житник Н. Е., Плаксин С. В.</i> МЕТОД ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ ОТКЛИКА ХИМИЧЕСКОГО ИСТОЧНИКА ТОКА НА ИМПУЛЬСНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ.....	35
<i>Шама С. О., Субботин С. О., Морщавка С. В.</i> ПОБУДОВА КЛАСИФІКАТОРА РОСЛИННИХ ОБ'ЄКТІВ ЗА ДОПОМОГОЮ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ.....	55
<i>Коваль Ю. А., Приймак В. Ю., Хуссейн А. Ф.</i> ВОЗМОЖНОСТИ СНИЖЕНИЯ ИОНОСФЕРНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ПОГРЕШНОСТИ СИНХРОНИЗАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ СИГНАЛОВ СИСТЕМЫ SBAS.....	40
МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ.....	62
<i>Калинин Д. А., Козина Г. Л.</i> БЫСТРОДЕЙСТВИЕ ШИФРОВ «КАЛИНА» И AES.....	62
<i>Чуб И. А.</i> МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПТИМИЗАЦИОННОЙ ЗАДАЧИ РАЗМЕЩЕНИЯ ПОЖАРООПАСНЫХ ОБЪЕКТОВ С УЧЕТОМ РЕЛЬЕФА ОБЛАСТИ РАЗМЕЩЕНИЯ.....	88
<i>Керносов М. А., Михнова А. В., Имшенецкий Д. А.</i> ГИБКАЯ МНОЖЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ УЧЕБНОГО ПЛАНА В ПОДСИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ И КОНТРОЛЯ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА ИАС ВУЗА.....	66
<i>Шкарупило В. В.</i> МОДЕЛЬ ТЛА-СПЕЦИФИКАЦИИ КОМПОЗИТНОГО ВЕБ-СЕРВИСА С МНОЖЕСТВОМ ДИНАМИК.....	94
<i>Курапов С. В., Чеченя В. С.</i> ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ РИСУНКА ГРАФА.....	72
<i>Шитикова Е. В., Табуницкий Г. В.</i> ИНФОРМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ИСПЫТАНИЙ ГАЗОТУРБИННЫХ УСТАНОВОК НАЗЕМНОГО ПРИМЕНЕНИЯ.....	101
<i>Решевская Е. С.</i> СХЕМА КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ТРЕХМЕРНОЙ ПОСТАНОВКЕ В СИСТЕМЕ MIRELA+.....	82

НЕЙРОІНФОРМАТИКА ТА ІНТЕЛЕКТУАЛЬНІ СИСТЕМИ.....109

Bodyanskiy Ye., Kulishova N.

NOISY DISTORTED IMAGES RECOVERY USING BLIND
DECONVOLUTION.....109

Субботин С.А.

ФОРМИРОВАНИЕ И РЕДУКЦИЯ ВЫБОРОК ДЛЯ
ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ.....113

ПРОГРЕСИВНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ.....119

Даніч В. М., Шевченко С. М.

КЛАСИ ЕЛЕМЕНТАРНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ В
ДИНАМІЦІ ІНФОРМАЦІЙНО-УПРАВЛІНСЬКИХ
АРХІТЕКТУР.....119

Стенин А. А., Губский А. Н., Польшакова О. М.

ЭКСПЕРТНАЯ ОЦЕНКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ
ОПЕРАТОРОВ ЭРГАТИЧЕСКИХ СИСТЕМ.....141

Бідюк П. І., Кожухівський А. Д., Кожухівська О. А.

СИСТЕМА ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ ДЛЯ
АНАЛІЗУ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ
ПІДПРИЄМСТВА.....128

Фирсов С.Н.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ
УСТОЙЧИВОСТИ ИЗМЕРИТЕЛЕЙ ПАРАМЕТРОВ
ДВИЖЕНИЯ СПУТНИКОВЫХ СИСТЕМ
СТАБИЛИЗАЦИИ И ОРИЕНТАЦИИ.....144

Миронова Н. А.

ИНФОРМАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ СИНТЕЗА
МЕТОДОВ ПРИНЯТИЯ ГРУППОВЫХ РЕШЕНИЙ.....137

Хаханов В. И., Чумаченко С. В., Литвинова Е. И., Мищенко А. С.

РАЗВИТИЕ КИБЕРПРОСТРАНСТВА
И ИНФОРМАЦИОННАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ.....151

УПРАВЛІННЯ У ТЕХНІЧНИХ СИСТЕМАХ.....158

Кудин В. Ф., Торопов А. В.

СУБОПТИМАЛЬНОЕ НЕЛИНЕЙНОЕ УПРАВЛЕНИЕ
ЭЛЕКТРОПРИВОДОМ УПАКОВОЧНЫХ
МЕХАНИЗМОВ.....158

CONTENTS

RADIOPHYSICS.....	7
<i>Babich A. V., Pogosov V. V., Vakula P. V.</i> SELF-CONSISTENT CALCULATIONS OF WORK FUNCTION, SHOTTKY BARRIER HEIGHTS AND SURFACE ENERGY OF METAL NANOFILMS IN DIELECTRIC CONFINEMENT.....	7
<i>Marchenko S. V., Morozov V. M.</i> ELECTRODYNAMICS CALCULATION OF LINEAR PAA WITH MATCHING PERIODICAL STRUCTURE.....	21
RADIO ELECTRONICS AND TELECOMMUNICATIONS.....	35
<i>Velichko H. V.</i> LOCATION IN THE TWO-LAYER MEDIUM WITH THE HELP OF SIMPLIFIED DETECTORS.....	25
<i>Mishchenko M., Farafonov O., Sitsilitsin Y., Krishchuk V., Romanenko S.</i> COUPLED MICROSTRIP LINES MODELLING IN QUASI- DYNAMIC APPROXIMATION WITH THE TOPOLOGY DISCONTINUITIES.....	46
<i>Gorban A. N., Kravchina V. V.</i> FEATURES OF FORMATION OF BIPOLAR TRANSISTOR FOR IC WITH DIELECTRIC ISOLATION OF ELEMENTS.....	30
<i>Piza D. M., Zalevskiy A. P., Sirenko A. S.</i> THE INFLUENCE OF JAMMING SIGNAL INTERFERENCE ON PULSE-DOPPLER RADAR ELECTRONIC COUNTER-COUNTERMEASURES.....	51
<i>Dzenzerskij V. A., Beda M. A., Zhitnik N. E., Plaksin S. V.</i> METHOD OF THE COMPUTER SIGNAL PROCESSING OF THE CHEMICAL CURRENT SOURCE RESPONSE TO A CURRENT PULSE.....	35
<i>Shama E. O., Subbotin S. A., Morshchavka S. V.</i> A CONSTRUCTION OF CLASSIFIER OF VEGETATIVE OBJECTS BY MEANS OF NEURAL NETWORKS.....	55
<i>Koval A., Pryimak V., Hussein A.</i> POSSIBLE REDUCTION OF IONOSPHERIC COMPONENTS, THE TIMING OF THE USE OF SIGNALS SBAS.....	40
MATHEMATICAL AND COMPUTER MODELLING.....	62
<i>Kalinin D. A., Kozina G. L.</i> SPEED OF CODES «KALINA» AND AES.....	62
<i>Chub I. A.</i> MODELING AND SOLVING THE OPTIMIZATION PROBLEM OF PLACING FLAMMABLE OBJECTS BASED ON THE PLACEMENT REGION TOPOGRAPHY.....	88
<i>Kernosov M. A., Mikhnova A. V., Imshenetsky D. A.</i> FLEXIBLE SET-THEORETIC MODEL OF CURRICULUM FOR THE PLANNING AND CONTROL SUBSYSTEM OF INFORMATION AND ANALYSIS SYSTEM OF UNIVERSITY.....	66
<i>Shkarupylo V. V.</i> A MODEL OF MULTI-BEHAVORAL COMPOSITE WEB SERVICE TLA-SPECIFICATION.....	94
<i>Kurapov S. V., Chechenja V. S.</i> TOPOLOGICAL METHODS OF CONSTRUCTION OF GRAPH DRAWING.....	72
<i>Shitikova Y. V., Tabunshchik G. V.</i> INFORMATION MODEL OF TEST PROCESS OF GAS TURBINE UNIT FOR TERRESTRIAL USE.....	101
<i>Reshevskaya E. S.</i> THE SCHEME CONTACT INTERACTION IN THREE- DIMENSIONAL FORMULATION OF THE SYSTEM MIRELA +.....	82

NEUROINFORMATICS AND INTELLIGENT SYSTEMS.....109

Bodyanskiy Ye., Kulishova N.
NOISY DISTORTED IMAGES RECOVERY USING BLIND
DECONVOLUTION.....109

Subbotin S. A.
SAMPLE FORMATION AND REDUCTION FOR DATA
MINING.....113

PROGRESSIV INFORMATICS TECHNOLOGIES.....119

Danich V. M., Shevchenko S. M.
CLASSES OF ELEMENTARY TRANSFORMATION IN
THE DYNAMICS OF INFORMATION-ADMINISTRATIVE
ARCHITECTURES.....119

Stenin A. A., Gubskiy A. N., Polshakova O. N.
EXPERT EVALUATION OF THE ERGATIC SYSTEMS
OPERATORS ACTIVITY.....141

Bidiuk P. I., Kozhukhivskiy A. D., Kozhukhivska O. A.
DECISION SUPPORT SYSTEM FOR ANALYSIS AND
FORECASTING STATE OF ENTERPRISE.....128

Firsov S. N.
PROVIDING OF FUNCTIONAL STABILITY OF
MEASURING UNIT OF STABILIZATION AND
ORIENTATION SATELLITE SYSTEM MOVEMENT
PARAMETERS.....144

Mironova N.
INFORMATION TECHNOLOGY FOR SYNTHESIS OF
GROUP DECISION MAKING METHODS137

Hahanov V. I., Chumachenko S. V., Litvinova E. I., Mishchenko A. S.
CYBERSPACE DEVELOPMENT AND INFORMATION
SECURITY151

CONTROL IN TECHNICAL SYSTEMS.....158

Kudin V. F., Toropov A. V.
SUBOPTIMAL NONLINEAR CONTROL OF PACKAGING
MACHINERY DRIVE.....158

РАДІОФІЗИКА

РАДИОФИЗИКА

RADIOPHYSICS

UDC 539.2

Babich A. V.¹, Pogosov V. V.², Vakula P. V.³¹Doctor of science (mathematical and physic), professor, Zaporizhian National Technical University, Ukraine²Ph.D in solid state physics, docent, Zaporizhian National Technical University, Ukraine³Assistant, Zaporizhian National Technical University, Ukraine, E-mail: vakulapavel@gmail.com.

SELF-CONSISTENT CALCULATIONS OF WORK FUNCTION, SHOTTKY BARRIER HEIGHTS AND SURFACE ENERGY OF METAL NANOFILMS IN DIELECTRIC CONFINEMENT

We suggest a method for the self-consistent calculations of characteristics of metal films in dielectric environment. Within a modified Kohn-Sham method and stabilized jellium model, the most interesting case of asymmetric metal-dielectric sandwiches is considered, for which dielectric media are different from the two sides of the film. As an example, we focus on Na, Al and Pb. We calculate the spectrum, electron work function, and surface energy of polycrystalline and crystalline films placed into passive isolators. We find that a dielectric environment generally leads to the decrease of both the electron work function and surface energy. It is revealed that the change of the work function is determined only by the average of dielectric constants from both sides of the film. We introduced the position of a conductivity band in the dielectric as a parameter in the self-consistency procedure and performed calculations, using image potential, for the aluminum film with ideal interfaces vacuum/Al(111)/SiO₂, vacuum/Al(111)/AlO and sandwiches SiO/Al(111)/AlO. As a result, effective potential profiles and the Schottky barrier heights were calculated.

Keywords: metal nanofilm, dielectric, work function, surface energy, Schottky barrier height.

1. INTRODUCTION

Thin metal films and flat islands on semiconductor or dielectric substrates can be considered as two-dimensional electron systems with properties, which are of interest both from the fundamental point of view and from the perspective of their application in nanoscale electronic devices.

There are a limited number of experimental works focused on quantum size effects in such systems (for reviews, see [1–9]) due to difficulties in sample fabrication, as well as because of lack of suitable experimental methods. One of the most important characteristics of metal nanostructures is electron work function.

As a rule, calculations of electron work functions for films are performed for the idealized case of films in vacuum. Similarly to clusters, this quantity defines an ionization potential. There are different methods, which enable one to calculate electron structure of slabs (in vacuum) consisting of few monoatomic layers (ML). Let us combine them into three groups according to the complexity of computations:

I – the Sommerfeld electrons in-a-box model (analytical calculations, slabs and wires) [10–15]; II – self-consistent calculations within various versions of jellium model (slabs and wires) [16–20]; III – *ab initio* calculations (slabs) [21–24]. The obtained results are illustrated in Fig. 1 for all these three groups. An important ingredient of approaches within group III is the monolayer number in the film (see dots in Fig. 1). For groups I and II, L changes continuously.

In group I, the Fermi energy (kinetic energy) $\varepsilon_F(L)$ is counted from the *flat* bottom of conductivity band, while the work function $W(L)$ is counted from the vacuum level. Therefore, their size dependencies are «asymmetric». In addition to quantum oscillations, these quantities contain monotonic size contributions, which, at small film thicknesses, *together* show up through inequalities $0 < W(L) < W_0$ and $\varepsilon_F(L) > \bar{\varepsilon}_F > 0$, where W_0 and $\bar{\varepsilon}_F$ correspond to the three dimensional (3D) metal (allowing for the energy counting for $\bar{\varepsilon}_F$).

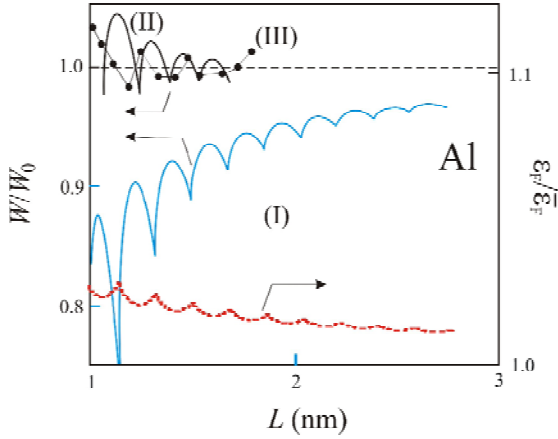


Fig. 1. Illustration of the computation results for groups I, II and III (data for group I are deduced from [12])

In [25, 26], an asymptotic behavior of electron chemical potential for spherical clusters of radius R was determined, from which it follows that

$$W(R) = W_0 - \frac{c_1}{R} < W_0, \quad (1)$$

where $c_1 = 2, 5eV \cdot a_0$ for simple metals, $a_0 = \hbar^2/(me^2)$. It is expectable that such a monotonic contribution must appear for films also. However, in contrast to the case of group I, self-consistent calculations of groups II and III (see Fig. 1), at small film thickness, point out to the suppression of monotonic dependence (having an asymptotic (1)) by corrections of higher orders of smallness. For instance, compensation of terms $-c_1/L + c_2/L^2$ occurs at $L^* = c_2/c_1$, and L^* is large, provided $c_2 \gg c_1 > 0$.

Experimental results also do not allow to draw unambiguous conclusions on the character of monotonic component of $W(L)$: in experiments [3], it is absent (Yb films on Si substrate), while, according to [2, 5], it coincides with the one of group I. Note that the comparison of a measured work function for the sandwich consisting of Ag film on Fe(100) in [2, 5] with calculated results for slabs *in vacuum* is rather relative.

If the film placed on the substrate is considered, in order to determine characteristics of contacts in the easiest case, it is necessary to know the dielectric constant κ as well as the position of conductivity band $-\chi$ (χ is the electron affinity) in dielectric material. The approximation $\chi = 0$ was widely used to the work function, polarizability and surface plasmon resonance of jellium spheres and wires embedded in different dielectric matrices (see [19, 27–29] and references therein).

The aim of this work is to compute energy characteristics of metal films in dielectrics. We suggest a method for self-consistent calculations of equilibrium profiles of electron concentration, effective potential, energy spectrum, and integral characteristics of metal films in dielectrics and dielectric substrates. The developed method is based on a stabilized jellium model [30] and local density approximation for exchange-correlation potential [31], which were used by us before [32] to analyze characteristics of semi-infinite metal

with dielectric coating. For our problem, in the spirit of Serena et al. [33], we introduce the nonlocal potential matched at the image-plane positions to the local exchange-correlation potential. We also introduce the position of a conductivity band in the dielectric as a parameter in the self-consistency procedure and performed calculations the effective potential profiles and the Schottky barrier heights for the vacuum/Al(111)/SiO₂, vacuum/Al(111)/Al₂O₃ and sandwich SiO₂/Al(111)/Al₂O₃.

This paper is organized as follows. In Section II, we formulate our model. In Section III, we presents our main results and provide a discussion of them. We conclude in Section IV.

2. MODEL

Let us consider a metallic film of thickness L at zero temperature. We direct z -axis perpendicularly to the film surface (Fig. 2 (a), $\Lambda \gg L$).

Principal identities for the film can be obtained within a model of a rectangular well for conduction electrons. To perform a preliminary analysis, we suppose that the bottom of the potential well is flat and we count energies starting from its value. Final expression for the kinetic energies of conduction electrons depends only on energy differences; therefore, energies counting in such a way is allowed.

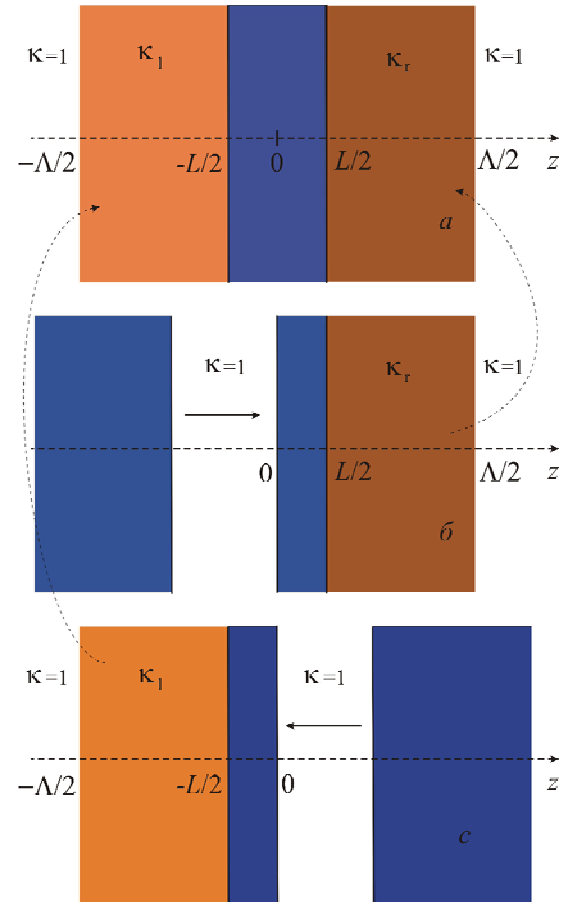


Fig. 2. (a) – Scheme of the film in dielectric environment; (b) and (c) – split semi-infinite metal samples, which have been in contact with dielectrics before the splitting. Split parts form a sandwich in figure 2 (a)

We study a film of thickness L comparable in magnitude to the Fermi wavelength $\bar{\lambda}_F = 2\pi/\bar{k}_F$ of an electron in 3D metal. The longitudinal sizes of the sample are assumed to be considerably larger than the film thickness ($L = L_x, L_y$), which leads to the pronounced quantization of the transverse component of the electron momentum. The three-dimensional Schrodinger equation for a quantum box can be separated into one-dimensional equations.

The eigenenergies are given by

$$\varepsilon_{ik_{\parallel}} = \varepsilon_i + \frac{k_{\parallel}^2}{2}, k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (2)$$

where ε_i is the eigenvalue of the i -th perpendicular state $\psi_i(z)$ (hereafter the Hartree atomic units are used: $\hbar = m = e = 1$). The eigenvalue ε_i is the bottom of the i -th subband. For finite and periodic systems in the z -direction Dirichlet and periodic boundary conditions are used, respectively. Therefore, possible allowed electron states k_x, k_y, k_z form a system of parallel planes in the k -space, $k_z \equiv k_i$.

Occupation of electron states starts from the point $\{0, 0, k_1\}$ and follows an increase of radius-vector. As a result, it turns out that all the occupied states are contained within the area of k -space, confined between the plane $k_z = k_1$ and semi-sphere of radius $k_F = \sqrt{2\varepsilon_F}$ (see Fig. 3).

The number of states dZ in each of the circles, formed by the intersection of Fermi semi-sphere with planes $k_z = k_i$ of area $S = L_x L_y$, within the interval of wave vectors $(k_{\parallel}, k_{\parallel} + dk_{\parallel})$ and taking into account both possible spin projections, is $dZ(k_{\parallel}) = 2Sd(\pi k_{\parallel}^2)/(2\pi)^2$. The maximum value of k_{\parallel} in each circle numbered by i , is equal to the circle radius $k_{F(i)} = (k_F^2 - k_i^2)^{1/2}$. In order to find the number of the occupied states, which coincides with the number of valence electrons N in the film, one should integrate dZ over k_{\parallel} in each circle, and then sum up contributions of all the circles:

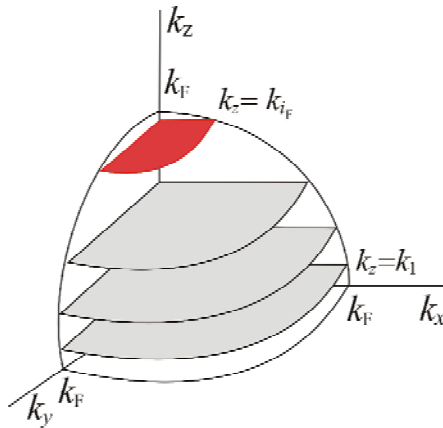


Fig. 3. Scheme for the occupation of electronic states in the k space

$$N = \frac{S}{\pi} \sum_{i=1}^{i_F} \int_0^{k_{F(i)}} dk_{\parallel} k_{\parallel} = \frac{S}{2\pi} \left(i_F k_F^2 - \sum_{i=1}^{i_F} k_i^2 \right). \quad (3)$$

Taking into account an expression for electron kinetic energy $\frac{1}{2}(k_{\parallel}^2 + k_i^2)$, the total kinetic energy of electron subsystem equals

$$T_s = \frac{S}{2\pi} \sum_{i=1}^{i_F} \int_0^{k_{F(i)}} dk_{\parallel} k_{\parallel} (k_{\parallel}^2 + k_i^2) = \frac{S}{4\pi} \sum_{i=1}^{i_F} k_{F(i)}^2 \left(\frac{k_{F(i)}^2}{2} + k_i^2 \right), \quad (4)$$

where i_F is the number of the last occupied or partially occupied subband.

In the frame of density-functional theory and stabilized jellium model (SJ), the total energy of metal sample is represented by the functional of nonhomogeneous electron concentration $n(r)$:

$$E_{SJ}[n(r)] = T_s + E_{xc} + E_H + E_{ps} + E_M, \quad (5)$$

where T_s is the (non-interacting) electron kinetic energy, E_{xc} is the exchange-correlation energy, E_H is the Hartree (electrostatic) energy, E_{ps} is the pseudopotential (Ashcroft) correction, and E_M is the Madelung energy. The sum of first three terms in expression (5) corresponds to the energy of «ordinary» jellium, E_J . The average energy per valence electron in the bulk of metal is $\bar{\varepsilon}_{SJ,J} = E_{SJ,J}[\bar{n}]/N$, where N is a total number of free electrons of concentration \bar{n} , defined by valence and atomic density.

The positive (ionic) charge distribution can be modeled by the step function

$$\rho(z) = \bar{n}\theta(L/2 - |z|). \quad (6)$$

Solving the Kohn-Sham equations

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\psi_i(z) + v_{\text{eff}}[z, n(z)]\psi_i(z) = \varepsilon_i\psi_i(z), \quad (7)$$

$$v_{\text{eff}}[z, n(z)] = \phi(z) + v_{xc}(z) + \langle\delta v\rangle_{\text{face}}\theta(L/2 - |z|) \quad (8)$$

together with the Poisson equation

$$\nabla^2\phi(z) = -\frac{4\pi}{\kappa(z)}[n(z) - \rho(z)], \quad (9)$$

with the step function

$$\kappa(z) = \begin{cases} 1; & z < -\Lambda/2, -L/2 < z < L/2, z > \Lambda/2, \\ \kappa_1; & -\Lambda/2 < z < -L/2, \\ \kappa_2; & L/2 < z < \Lambda/2, \end{cases} \quad (10)$$

we obtain the single electron wave function and the eigenvalue ε_i self-consistently.

It is generally believed that the more «physical» potential, the better the result of computations for the location of the Fermi energy (as the eigenvalue of the highest occupied state). One of the limitations of the method of effective potentials in LDA is its failure in reproducing a correct behavior of image potentials outside metal surfaces (see [34] and references therein). Therefore, for our problem, in the spirit of the work [33], we introduce the nonlocal potential $v_{xc}^{NL}(z)$ matched at the image-plane positions to the local exchange-correlation potential $v_{xc}^{LD}(z) = d[n(z)\varepsilon_{xc}(z)]/dn(z)$:

$$v_{xc}(z) = \begin{cases} v_{xc}^{NL,l}(z), & z \leq Z^l, \\ v_{xc}^{LD}(z), & Z^l \leq z \leq Z^r, \\ v_{xc}^{NL,r}(z), & z \geq Z^r, \end{cases} \quad (11)$$

where $Z^l = -L/2 - z_0^l$, $Z^r = L/2 + z_0^r$, and the image-plane positions ($z_0^{l,r} > 0$) are counted from the left and right sides of film surfaces,

$$v_{xc}^{NL,l} = -\chi^l + \frac{1 - [1 - (z - Z^l)/(4\lambda_l)]e^{(z - Z^l)/\lambda_l}}{4\kappa_l(z - Z^l)}, \quad (12)$$

$$v_{xc}^{NL,r} = -\chi^r - \frac{1 - [1 + (z - Z^r)/(4\lambda_r)]e^{-(z - Z^r)/\lambda_r}}{4\kappa_r(z - Z^r)}. \quad (13)$$

For instance, far from the surface, (13) has a correct asymptotic behavior $\{-\chi^r - [4\varepsilon_r(z - Z^r)]^{-1}\}$, which is an image potential. From the condition of matching of potential (11) as well as its first derivatives in the image planes from left and right sides, we obtain simple relations:

$$\lambda_{l,r} = -\frac{3}{16\kappa_{l,r}[v_{xc}^{LD}(Z^{l,r}) + \chi^{l,r}]},$$

$$\frac{|dv_{xc}^{LD}(z)/dz|_{z=Z^{l,r}}}{[v_{xc}^{LD}(Z^{l,r}) + \chi^{l,r}]^2} = \frac{16}{9}\kappa_{l,r}. \quad (14)$$

The second relation in (14) is treated as an equation for $z_0^{l,r}$. The values of $z_0^{l,r}$ at the left and right sides out of the film are calculated self-consistently by solving at every iteration the Kohn-Sham equations. In this way the effective potential is matched self-consistently to its image-potential-like form at large distances. The result of the work [33] for the semi-infinite metal is reproduced $\kappa = 1$ and $\chi = 0$.

The term $\langle \delta v \rangle_{face}$ in (8), which makes it possible to distinguish different crystal faces, represents the difference between the potential of the ionic lattice and the electrostatic potential of the positively charged background averaged over the Wigner-Seitz cell:

$$\langle \delta v \rangle_{face} = \langle \delta v \rangle_{WS} - \left(\frac{\bar{\varepsilon}_M}{3} + \frac{\pi\bar{n}}{6} d^2 \right), \quad \langle \delta v \rangle_{WS} = -\bar{n} \frac{d\varepsilon_J}{d\bar{n}},$$

where d is the distance between the atomic planes parallel to the surface. The term $\langle \delta v \rangle_{WS}$ describes a polycrystalline sample [30]. In equation (10) ε_l and ε_r are dielectric constants of isolators from the left and right side of the film, respectively.

The electron density profile $n(z)$ is expressed through the wave functions $\psi_i(z)$

$$n(z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^{i_F} k_{F(i)}^2 \frac{|\psi_i(z)|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty} dz |\psi_i(z)|^2}. \quad (15)$$

Values of i_F and ε_F are determined by the solution of the equation

$$\pi L \bar{n} + \sum_{i=1}^{i_F} \varepsilon_i - i_F \varepsilon_F = 0; \quad i = 1, 2, \dots, i_F; \quad \varepsilon_i \leq \varepsilon_F, \quad (16)$$

which follows from the normalization condition (3) and definition of the Fermi energy. In this equation, the integration over k_{\parallel} is already performed and therefore the summation is made only over the subband number.

In nanofilms, the spatial oscillation of a electronic density is significant throughout the sample. Therefore, energies are counted from the vacuum level, which is the energy of the electron in rest in the area $|z| \gg \Lambda/2$. For bound states, energies are negative, including ε_F .

We use iterative procedure (see Appendix) allowing us to solve self-consistently the system of equations (7), (9), (15) and to find optimal profiles $n(z)$, $\varphi(z)$, as well as spectrum of one-particle energies. As a result, metal/vacuum and metal/dielectric work functions are defined in the form

$$W = -\varepsilon_F, \quad (17)$$

$$W_d^{l,r} = -\varepsilon_F(\kappa, \chi^{l,r}) - \chi^{l,r}. \quad (18)$$

There are two situations, when $|\varepsilon_F| > \chi^{l,r}$ and $\leq \chi^{l,r}$. The value W_d is the Schottky barrier height.

Let us consider a scheme for the surface energy determination (see figure 2 (b) and (c)) for the film of thickness L in a dielectric environment.

First, we take a semi-infinite metal (Me_{∞}) covered by a dielectric (κ_r). Let us denote the energy of such a sample as $E\{Me_{\infty} | \kappa_r\}$. We now split the sample and move the parts, as shown in Fig. 2 (b). As a result, two new surfaces of the same area S are formed, which are in a contact with the vacuum ($\kappa = 1$). We denote the energies of these two parts as $E\{Me_{\infty} | 1\}$ and $E\{1 | Me_{L/2} | \kappa_r\}$, while the irreversible work A , which is needed to form them, as

$$E\{Me_{\infty} | 1\} + E\{1 | Me_{L/2} | \kappa_r\} - E\{Me_{\infty} | \kappa_r\}. \quad (19)$$

Let us stress that, as a result of these manipulations, the «fabricated» sandwich represents a film of thickness $L/2 \geq d$ on the dielectric substrate in vacuum (air).

Similar manipulations with another sample (Fig. 2 (c)) require a work

$$E\{1 | \text{Me}_\infty\} + E\{\kappa_1 | \text{Me}_{L/2} | 1\} - E\{\kappa_1 | \text{Me}_\infty\}. \quad (20)$$

Next, a simplifying step is taken in separating the total energy of the system into bulk and surface contributions, assuming that the former is the same for a thin film as for a semi-infinite film (see, for example, [18])

$$E = E^b + E^s.$$

Then, bulk components E^b do compensate in the expressions (19) and (20). In each case considered above, the specific surface energy γ equals $A/2S$. When the width of the film tends to infinity, the term E^s for the slab approaches the surface components of the semi-infinite system.

The work needed to «create» a film on a dielectric is

$$A\{\kappa | \text{Me}_{L/2} | 1\} = \frac{1}{2}[E^s\{\kappa | \text{Me}_{L/2} | 1\} + E^s\{1 | \text{Me}_\infty\} - E^s\{\kappa | \text{Me}_\infty\}]. \quad (21)$$

Now, we join two sandwiches by their free surfaces. We obtain a film shown in Fig. 2 (a). The work to create it can be represented as the energy of *adhesion* of such two pieces with the minus sign

$$A\{\kappa_1 | \text{Me}_L | \kappa_r\} = \frac{1}{2}[E^s\{\kappa_1 | \text{Me}_L | \kappa_r\} - E^s\{\kappa_1 | \text{Me}_{L/2} | 1\} - E^s\{1 | \text{Me}_{L/2} | \kappa_r\}]. \quad (22)$$

Electron density profiles and potentials for each of the contributions in the expressions (21) and (22) are different, so that they must be calculated self-consistently and separately.

As similar to the definition for the semi-infinite metal [35, 32], E^s for the film is determined by the difference between the total film energy (5) and the energy of homogeneous metal (stabilized jellium) of the same volume:

$$E^s\{\kappa_1 | \text{Me}_L | \kappa_r\} = E_{\text{SJ}}(L) - SL\bar{n}\bar{\epsilon}_{\text{SJ}} = 2S \left\{ \gamma_J + \langle \delta v \rangle_{\text{face}} \int_{-L/2}^{L/2} dz [n(z) - \bar{n}] \right\}. \quad (23)$$

By using equation (4), quantum-mechanical definition of an energy

$$k_i^2 = - \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_i(z) \nabla^2 \psi_i(z),$$

as well as the definition given by equation (23), we obtain an expression for the first component of γ_J :

$$\gamma_s = \frac{1}{8\pi} \sum_{i=1}^{i_F} k_{\text{F}(i)}^2 \left(\frac{1}{2} k_{\text{F}(i)}^2 - \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_i(z) \nabla^2 \psi_i(z) \right) - \frac{1}{2} L \bar{n} \bar{\epsilon}_s, \quad (24)$$

where $\bar{\epsilon}_s = 3\bar{k}_F^2/10$ is the kinetic energy per 1 electron for bulk. The remaining components are

$$\gamma_{xc} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz n(z) \epsilon_{xc}[n(z)] - \frac{1}{2} L \bar{n} \epsilon_{xc}(\bar{n}); \quad (25)$$

$$\gamma_H = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) [n(z) - \rho(z)]. \quad (26)$$

For asymmetric sandwiches, $\{\kappa_1 | \text{Me}_L | \kappa_r\}$, due to the formal division on the doubled area, the surface energy is calculated «in average». This is the consequence of the definition of γ through the integral of tangential component of pressure tensor over z from $-\infty$ to $+\infty$. The pressure tensor contains the nonelectrostatic part and the Maxwell stress tensor (see, for example, [36]).

3. RESULTS AND DISCUSSION

We perform calculations for both polycrystalline and crystalline films made of Na, Al and Pb, with electron concentration $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$ with corresponding electron parameter $r_s = 3,99; 2,07$ and $2,30 a_0$. The minimal thickness of «crystalline» sandwiches should be not less than $2d$. It must be equal to $4d$ for $\{\epsilon_1 | \text{Me} | \epsilon_r\}$, only in the case Eq. (22) is used. d is comparable to $\bar{\lambda}_F/2$ ($\bar{\lambda}_F = 13,06, 6,78$ and $7,53$ for Na, Al and Pb, respectively).

Let us firstly perform calculations: (i) taking into account formulas (11)–(14), in which it is formally assumed that $\chi = 0$ and $v_{xc} \equiv v_{xc}^{\text{LD}}$; (ii) using (11)–(14) and $\chi \neq 0$.

(i) For symmetric sandwich the effect of a dielectric coating on the surfaces is reduced to the «elongation» of the electron distribution tail and the effective potential beyond the surface of a metal (polycrystalline films $\{1 | \text{Al} | 1\}$ and $\{3 | \text{Al} | 3\}$ on Fig. 4). The calculations were performed for $\kappa = 1, \dots, 12$. Inside the film one can see the Friedel oscillations of electron density with peaks near geometrical boundaries. The period of oscillations is close to $\bar{\lambda}_F/2$ and only weakly depends on the presence of dielectric coatings. The situation is similar for Na and Pb films.

At the boundaries between the metal film and the coatings, there are jumps in the derivative of the electrostatic potential $\phi'(z)$, which disappear, provided the dielectric constants of the coatings are equal to 1. These jumps are due to the boundary conditions (28) at $z = \pm L/2$. The jumps are also reflected on $v_{\text{eff}}(z)$ profile, since $\phi(z)$ is one of its components. In addition, at the borders, there are another jumps of not only the derivative $v_{\text{eff}}'(z)$, but also of $v_{\text{eff}}(z)$

profile itself for any values of κ , including $\kappa = 1$. Such jumps have another origin compared to the first ones. This fact is linked to some features of the model [30], namely to the presence of the effective potential component $\langle \delta v \rangle_{\text{face}} \theta(L/2 - |z|)$. These nonphysical jumps should not be taken into account in the estimation of the effective force

$$F_{\text{eff}}(z) \equiv -\nabla v_{\text{eff}}(z).$$

It is seen from Fig. 4 that force orientations are opposite at both sides of the film, so that the film in whole must be stressed. The existence of the force should lead to the increase of spacings between some lattice planes d , while spacings between other planes must become narrower.

The depth of the potential well, in which the electrons are located in metal film, decreases «in average» with increasing ε and, as a result, the electron work function $W = -\varepsilon_F(\kappa_{l,r}, \chi^{l,r} = 0)$ also decreases (see Fig. 5).

Film spectra $\{1|Al_L|1\}$ are presented in Fig. 5. For comparison, in the same figure, we also provide the results obtained within the electrons-in-a-box model with the well depth $U_0 = -(W_0 + \bar{\varepsilon}_F) < 0$.

It is seen from Fig. 5 that the dependence of the eigenstate energies on the film thickness, within the SJ model, is oscillating and decreasing. For subbands with large numbers $i = 10, 11$, there are gaps due to the algorithm instability in the vicinity of the vacuum level. Within the rectangular-box

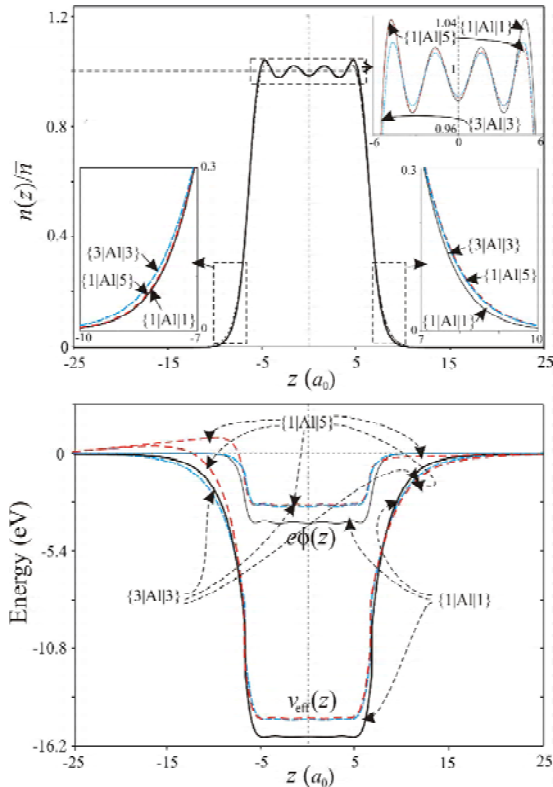


Fig. 4. The results of self-consistent calculations of the profiles of the one-electron effective potential $v_{\text{eff}}(z)$, and the electrostatic potential $\phi(z)$ for sandwiches: $\{1|Al|1\}$, $\{1|Al|5\}$ and $\{3|Al|3\}$ with $L = 2\bar{\lambda}_F$

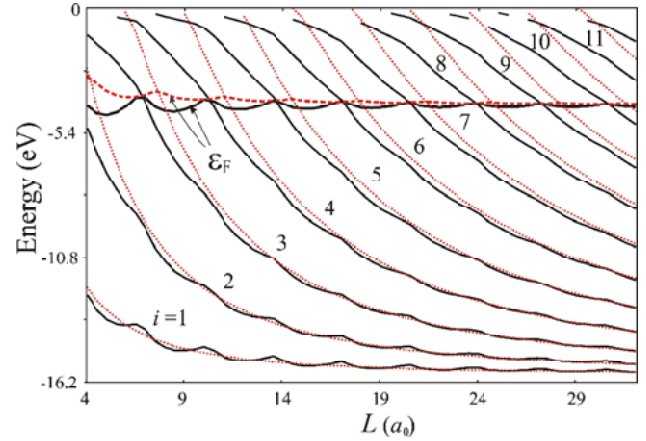


Fig. 5. Results of calculation for the energy spectrum (subbands) and Fermi energy $\varepsilon_F(L)$ of the film $\{1|Al|1\}$ by the self-consistent method (solid lines) and in rectangular-box model (dashed lines)

model, this dependence is only decreasing. Due to smoother edges of the self-consistent well, it contains more subbands compared to the model of a rectangular box. Difference in subbands numbers significantly affects calculated dielectric function and optical conductivity of the nanofilm [14].

Within the rectangular-box model, in contrast to the SJ model, $\varepsilon_F(L)$ is always located above one for 3D metal. Amplitudes of oscillations decrease as L increases. Within both models, maximum Fermi energies (minimum work functions (17)) correspond to the points, in which curves of eigenenergies intersect Fermi energies. Within the SJ model, in contrast to the rectangular-box model, minimum Fermi energies correspond to the points, in which Fermi energy is located between two nearest eigenenergies (magic film thicknesses similar to magic numbers in clusters).

Asymmetric sandwiches $\{\kappa_l|Me|\kappa_r\}$ and $\{1|Me|\kappa_r\}$, which contacts the air or vacuum, are of particular interest from the viewpoint of experimental investigation due to the perspective of their use in technological applications (see, for example, [5]).

Let us consider both electron density and potential profiles for the polycrystalline film $\{1|Al|5\}$. Presence of a dielectric at the right side of the film leads to the asymmetry of electron distribution (see the insets in Fig. 4), so that there appears a hump in both the electrostatic and effective potential at the left side above the vacuum level. This should result, for example, in the anisotropy of a field emission along the z -axis. It is worth mentioning that bottoms of wells for sandwiches $\{1|Al|5\}$ and $\{3|Al|3\}$ are essentially the same, some difference appears only in «tails» of potential profiles.

It is of interest to compare heights of humps at $L = 10; 12; 13,5$ and $20; 22; 23,5 a_0$. These thicknesses correspond to the minimum, maximum, minimum of the dependence $W(L)$ for $\{1|Al|5\}$. It turns out that, with the increase of L , the hump height weakly oscillates and decays similarly to the work function, but maxima of the hump height corresponds to minima of the $W(L)$. For the values of L , as given above, these heights are 0,176; 0,148; 0,170 and 0,158; 0,139; 0,156 eV, respectively.

In order to analyze such a behavior of potential profiles, it is necessary to go beyond the isotropic model based on a defined (6) distribution of *homogeneous* positively charged background, i.e. one has to take into account not only the reaction of the electron subsystem, but also the reaction of the ion subsystem to the presence of a dielectric. Spacings between the lattice planes are determined by the balance of forces from the right and left sides for each plane. A simplest realization of this idea is to disregard variations of spacings between the lattice planes and to vary the profile of the ion jellium distribution (6). We found that such a procedure leads to a significant deformation of the well bottom, but does not result to considerable changes of both the spectrum and hump height.

Figs. 6 and 7 show results of our calculations of both the electron work function and surface energy for crystalline sandwiches using expression (23). Horizontal lines correspond to semiinfinite samples. In contrast to the surface energy, size dependences $W(L)$ have deep and pronounced

minima. It is easier to analyze them using a simple model [12]. Amplitudes of largest work function «oscillations» are smaller than 0,5 eV. By considering dependencies for different metals, it is easy to see that all the differences are due to values of r_s . For the Al, which has the smallest r_s , work function oscillations are maximum, while the period is minimum. Positions of both maxima and minima depend weakly on ε of a dielectric and slightly shift towards smaller L with the increase κ .

In contrast to the work function, surface energy oscillations can be approximated by analytical dependences

$$E^S\{\kappa | Me_L | \kappa\} = E^S\{Me_\infty | \varepsilon\} + \Gamma \frac{\sin(2\bar{k}_F L + \varphi)}{L},$$

with Γ and φ . Maxima of function $W(L)$, $\gamma(L)$, correspond to «magic» film thicknesses, which are defined by maximum occupation of a given subband.

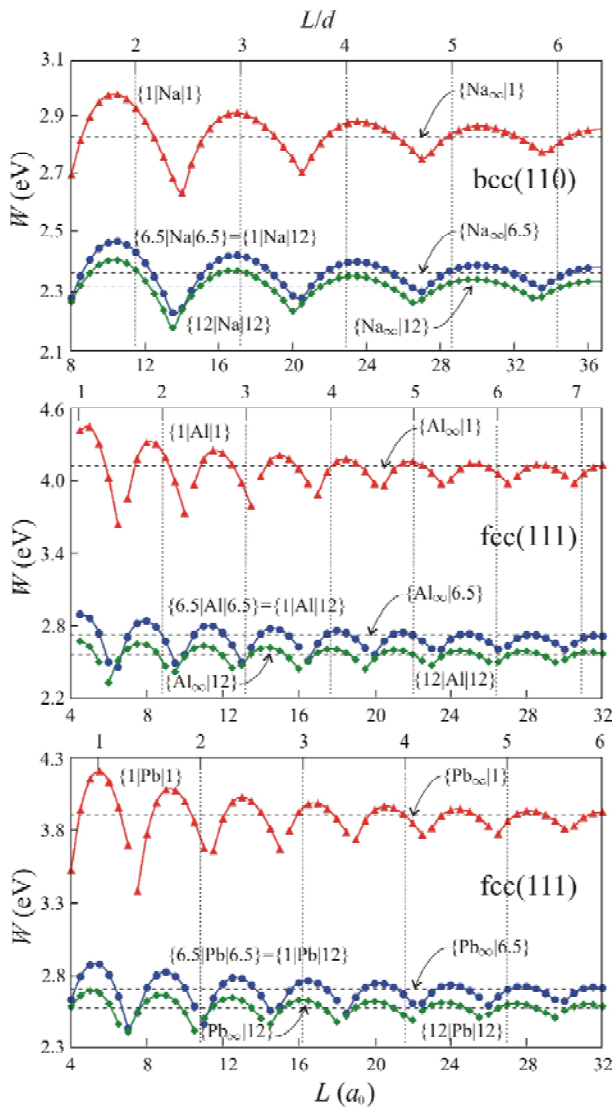


Fig. 6. Work function for crystalline sandwiches $\{\kappa_1 | Me | \kappa_1\}$ and semi-infinite metal covered by a dielectric $\{Me_\infty | \kappa\}$ ($Me \equiv Na, Al, Pb$), $\chi = 0$

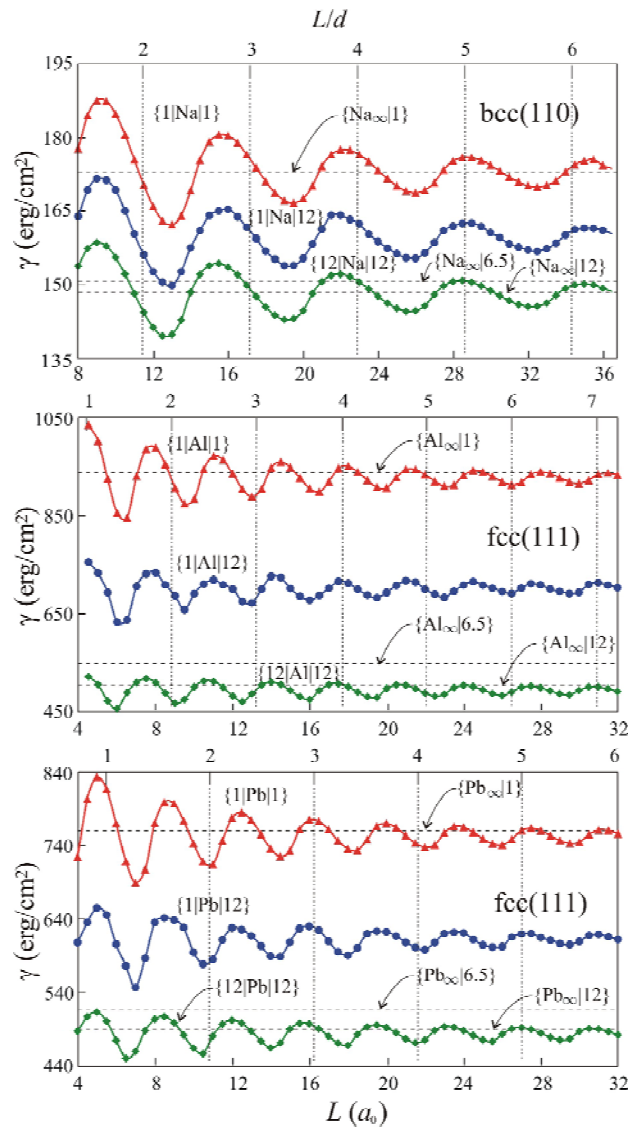


Fig. 7. Energy per unit of area for crystalline sandwiches $\{\varepsilon_1 | Me | \varepsilon_1\}$ and semi-infinite metal covered by a dielectric $\{Me_\infty | \varepsilon\}$ ($Me \equiv Na, Al, Pb$), $\chi = 0$

The unexpected result of self-consistent calculations is a coincidence of dependencies $W(L)$ for sandwiches $\{1|\text{Me}|12\}$ and $\{6,5|\text{Me}|6,5\}$. Computations for $\{1|\text{Me}|5\}$ and $\{3|\text{Me}|3\}$ give a similar result. This means that the electron work function for asymmetric sandwiches $\{\kappa_1|\text{Me}|\kappa_r\}$ coincides with high accuracy with the work function for symmetric sandwiches $\{\langle\kappa\rangle|\text{Me}|\langle\kappa\rangle\}$ with the averaged value $\langle\kappa\rangle = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_r)$.

Work function has both the bulk and surface contributions. Because bulk metal contributions $W(L)$ for sandwiches $\{1|\text{Me}_L|12\}$ (like to vacuum/metal/Si) and $\{6,5|\text{Me}_L|6,5\}$ are the same by definition, also the same are contributions of dipole surface barriers. We here imply the total contribution of both sides of a sandwich, since the work function is an «isotropic» characteristics [37]. A coincidence of work functions is most likely a geometric effect. This feature will be addressed elsewhere.

For surface energies, such a coincidence does not exist. It is not difficult to perform calculations according to formulas (21) and (22), if γ are known.

The results obtained by using the developed iteration procedure enable us to draw a conclusion about its efficiency. Moreover, one can follow the behavior of electron spatial profiles and potentials, as well as calculate a spectrum. The results in $\chi = 0$ and LDA approximation the provide reference data for simplified treatments.

(ii) Let us apply this approach ($\chi \neq 0$) to study an energetics of three samples with «ideal» interfaces: the film Al(111) on SiO_2 and on Al_2O_3 , and the sandwich $\text{SiO}_2/\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3$. For such a structure we use values from Table 1. $\chi^l = 0$ and $\kappa_1 = 1$ and χ^{lr} for vacuum/metal interface. For illustrative purposes, in Fig. 6 we present results of self-consistent calculations of potential profiles.

It turned out that all approaches give the same potential well depth as well as its profile near the bottom. Dependences $v_{xc}(z)$ at the left side of the film (in vacuum) are essentially the same according to approaches (i) and (ii), while for the right side of the plane they differ due to the presence of the conductivity band ($\chi \neq 0$) in the dielectric.

It should be noted that the use of nonlocal exchange-correlation potential in the iterative procedure leads to the essential disappearance of the potential hump in the effective potential (but not in the electrostatic one), which appears at the left side of the film, see Fig. 4.

In Table 2, we decided to present our data, which correspond to the scheme (ii) only. In all the approaches (i) and (ii), ε_F and surface energies differ from each other by

less than 1 percent, while values of matching parameters can be rather different: for instance, $z_0^r = 5,95$ and $\chi^r = 0,998$ for ML = 1 the film Al(111) on SiO_2 of the method (i). As a result, we conclude that our manipulations with the exchange-correlation potential did not lead to any noticeable changes of the Fermi level position, i.e. $\varepsilon_F(\langle\kappa\rangle, \chi^{lr} = 0) \approx \varepsilon_F(\langle\kappa\rangle, \chi^{lr} \neq 0)$.

We also performed computations for infinite-size systems ($L = \infty$): $W_d^r = 2,00$ and $1,48$ eV for Al/ SiO_2 and Al/ Al_2O_3 , respectively. However, in these calculations, it is not taken into account that the vacuum/metal interface exists at the left side of the samples. Therefore, the comparison with the data of Table 2 is not possible, since results do depend on the average dielectric constant of two media $\langle\kappa\rangle$, and not only on κ_r .

Our results point out that it is possible to control the Schottky barrier by tuning the metal film thickness (in the metal-insulator-semiconductor devices the thickness of gate insulating film is a tool to control the current in the channel [40]). For the evaluation of Fowler-Nordheim tunneling current [41], it is necessary to know a spatial profile of the effective potential, which should be added to the external electrostatic potential $\Phi_{\text{ext}}(z)$, starting from points at $z = Z^{l,r}$.

Let us compare our results with experimental data. The calculated work function for the interface Al(111)/vacuum is 4,12 eV; the experimental one $\in (3,11,4,26)$ eV [42]; and 4,28 eV for polycrystalline Al [43]. Recommended $\chi = 3,03$ and 3,3 eV in [44], corresponding for SiO_2 and Al_2O_3 , differ from data in Table 1. The measured Schottky barrier height [44] for Au/ Al_2O_3 equals $3,5 \pm 0,1$ eV. Note that experimental values of work function for Au and Al in Ref. [42] are close to each other, while they differ by almost 1 eV, according to Ref. [43].

On the other hand, the measured Schottky barrier heights in Ref. [45] for Al, Ag and Cu, placed on thick (by thickness 35 nm) film of Al_2O_3 , equal 1,66; 1,72 and 1,80 eV, respectively. It is in accordance with 1,5 eV for Al/ Al_2O_3 [39] and the results from Table 2. As we see, experimental data are rather diverse.

An important question is under which conditions our approach becomes questionable. When $|\varepsilon_F| \leq \chi^{lr}$, our model does not work. In accordance with Fig. 5 and Table 1, values $W_d \in (0,4;0,75)$ eV for Al/Si, Pb/Si [39] and $W_d \in (0,49;0,6)$ eV for thick films of Ti ($L \in (50,90)$ nm) on the Si-substrate [46] should correspond to the regime $|\varepsilon_F| \leq \chi^{lr}$. The efficient approach in this case is the local density formalism pseudopotential method [47, 48, 49, 50]. In our approach, it is also not possible to take into account the role of virtual gap states and defects in metal-dielectric contacts [51]. Nevertheless, we expect that our method provides a correct estimate for the size dependence of

Table 1. The examples of simplest coating and substrates [38, 39]

Material	He	Ne	Ar	Kr	Xe	SiO_2	Al_2O_3	Si
κ	1,10	1,20	1,50	1,65	1,90	4	9	13
χ , eV	-1,0	0,10	0,20	0,45	0,68	1,1	1,35	4,05

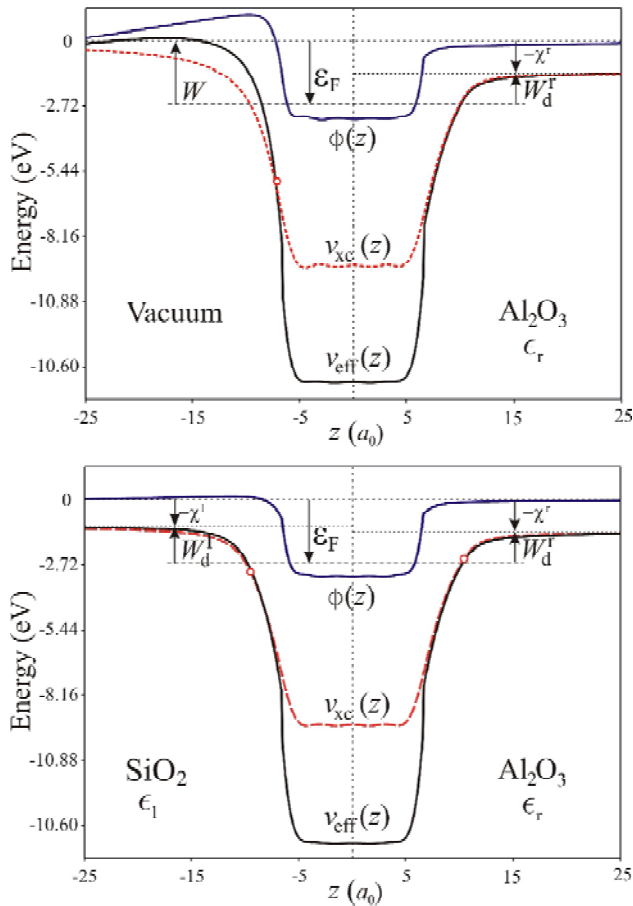


Fig. 8. The self-consistent profiles of electrostatic, exchange-correlation and effective potentials for the sandwiches vacuum/ $\text{Al}(111)/\text{Al}_2\text{O}_3$ and $\text{SiO}_2/\text{Al}(111)/\text{Al}_2\text{O}_3$. The thickness of film $L=3\text{ML}$. $1\text{ML}=4,4a_0$

characteristics of films in contact with dielectrics, for which κ and χ are not large.

The effect of temperature was studied earlier in Ref. [26] when determining ionization potential of metallic cluster. It turns out that the effect is not significant at room temperatures, as it can be expected. For the film-dielectric contact, of importance is the ratio of $-\chi^r$ and the Fermi energy. If these quantities are comparable, the result should be sensitive to the system temperature.

4. SUMMARY AND CONCLUSIONS

We proposed a method for the self-consistent calculations of spectra, electron work function, and surface energy of metal films placed into passive dielectrics. As typical examples, we considered Na, Al, and Pb films.

The effective force acting on the film from the outside is due to the inhomogeneous electron distribution. This force should lead to film stressing in a transverse direction. The effect of the stressing generally becomes more significant with the increase of the film thickness.

In contrast to the surface energy, size dependencies of work function have deep and strongly pronounced minima. The smaller r_s the more difficult the problem of numerical analysis of size dependencies in the vicinities of these minima.

With the increase of film thickness up to few $\bar{\lambda}_F$, size variations of both the work function and surface energy occur near their average values (for symmetric sandwiches, these values correspond to 3D metals and do not contain significant monotonous size contributions). Dielectric environment generally leads to the decrease of electron work function and surface energy.

Table 2. Calculated values for film $\text{Al}(111)$ of thickness L (in monolayers) on SiO_2 (upper numbers), Al_2O_3 (middle numbers), and the sandwich $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ (lower numbers)

L , ML	z_0^l, a_0	z_0^r, a_0	λ^l, a_0	λ^r, a_0	W_d^l, eV	W_d^r, eV	$\gamma, \text{erg/cm}^2$
1	1,05	3,35	0,977	0,706	3,43	2,33	821
	1,00	4,25	0,962	0,518	3,01	1,66	760
	3,30	4,15	0,707	0,519	1,79	1,54	607
2	0,95	2,85	0,946	0,643	3,26	2,16	755
	0,95	3,60	0,945	0,474	2,84	1,49	704
	2,85	3,60	0,640	0,479	1,62	1,37	548
3	0,85	2,60	0,921	0,606	2,94	1,84	734
	0,85	3,50	0,919	0,476	2,63	1,28	696
	2,95	3,80	0,672	0,512	1,56	1,31	562
4	0,90	3,05	0,933	0,683	3,23	2,13	779
	0,95	4,05	0,948	0,531	2,86	1,51	735
	3,10	4,05	0,688	0,535	1,69	1,44	578
5	0,90	2,95	0,932	0,661	3,23	2,13	764
	0,95	3,85	0,948	0,507	2,84	1,49	716
	3,00	3,85	0,671	0,512	1,65	1,40	556
6	0,90	2,85	0,934	0,651	3,13	2,03	751
	0,90	3,65	0,933	0,489	2,73	1,38	705
	2,85	3,65	0,645	0,491	1,54	1,29	550
7	0,90	2,95	0,934	0,669	3,17	2,07	770
	0,90	3,90	0,933	0,520	2,80	1,45	726
	3,05	3,95	0,684	0,527	1,65	1,40	569

We also considered asymmetric metal-dielectric sandwiches characterized by different dielectrics at both sides of the film. One of the examples of such systems is a film on the dielectric substrate. We found that the presence of a dielectric from one side of the film leads to such a «deformation» of electron distribution that there appears a «hump» above the vacuum level both in the electrostatic and effective potentials. The asymmetry of potential profile should lead to an anisotropy of the field emission. In addition to size dependencies, the shift of the work function is generally determined by the average dielectric constants of environments.

We introduced the position of a conductivity band in the dielectric as a parameter in the self-consistency procedure and performed calculations for the aluminum film on SiO₂ and Al₂O₃, using a nonlocal exchange-correlation potential. As a result, profiles of electron concentration, effective potential, and energy spectrum were calculated.

Finally, let us formulate some methodological conclusions:

(i) An introduction of nonlocal potential, as well as the position of conductivity band in dielectric material does not lead to significant changes of Fermi level of a metal film contacting with a dielectric.

(ii) Accounting for the conductivity band in a dielectric and self-consistency condition for the potential well shape, one changes the spectrum (subbands number), as well as the density of states. Therefore, matrix elements of optical transitions are also changed, which leads to the modification of optical absorption coefficient [14]. Equilibrium profile of electrons and electrostatic potential is needed to calculate the field emission of electrons as well as annihilation characteristics of positrons in nanostructures.

We thank W. V. Pogosov for reading the manuscript.

APPENIX: SELF-CONSISTENCY PROCEDURE

The initial approximation $n(z)$ is chosen for solving the Kohn-Sham equations in the form of a one-parametric trial function $n^{(0)}(z) = \bar{n}f(z)$, where

$$f(z) = \begin{cases} -\frac{1}{2}e^{(z-L/2)/\lambda} + \frac{1}{2}e^{(z+L/2)/\lambda}, & z < -L/2, \\ 1 - \frac{1}{2}e^{(z-L/2)/\lambda} - \frac{1}{2}e^{-(z+L/2)/\lambda}, & |z| < L/2, \\ -\frac{1}{2}e^{-(z+L/2)/\lambda} + \frac{1}{2}e^{-(z-L/2)/\lambda}, & z > L/2. \end{cases}$$

λ is the variational parameter, which is found through the minimization of surface energy. Solution by a direct variational method is an independent problem, which is not addressed in this paper (for simple metals λ is closed to $1a_0$). As a result of integration of equation (9), within the initial approximation, we obtain $\phi^{(0)}(z) = -4\pi\bar{n}\lambda^2 f(z)$.

Each wave function $\psi(z)$ is constructed as

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_{\text{left}}(z), & z < z_0, \\ \psi_{\text{right}}(z), & z > z_0, \end{cases}$$

under the condition of continuity of functions $\psi_{\text{left}}(z_0) = \psi_{\text{right}}(z_0)$, as well as of their derivatives $\psi'_{\text{left}}(z_0) = \psi'_{\text{right}}(z_0)$. z_0 is an arbitrary point in the interval $z \in [-L/2; +L/2]$, while $\psi_{\text{left}}(z)$ and $\psi_{\text{right}}(z)$ are functions, which are found by a numerical solution of Eq. (7) by the Numerov's method from $z = z_-$ to $z = z_0$ and from $z = z_+$ to $z = z_0$, respectively. It is sufficient to take values $z_{\mp} = \mp(L + 20)a_0$. In these points, the potential profile $v_{\text{eff}}(z)$ is cut off. The boundary conditions (7) here are determined by the behavior of the wave function ψ under the barrier from the left ($e^{z\sqrt{|k_i|}}$) and right ($e^{-z\sqrt{|k_i|}}$) sides from the slab ($|z| \geq |z_{\mp}|$) respectively. Boundary conditions provide wave function, as well as its derivative at $z = z_{\mp}$. This peculiarity of our computations is due to the fact that errors of the numerical method for the wave function $\psi_{\text{right}}(z)$ and $\psi_{\text{left}}(z)$ near the right and left boundaries of the interval grow, since the round-off errors also increase and lead to the instability of the algorithm under the motion towards the exponential damping.

In order to solve the system of equations (7), (9) and (15) self-consistently, with relatively small number of iteration steps, the Poisson equation (9) should be modified, in particular, by introducing a perturbation [52].

Equation (9) is solved by the Lagrange method in the form

$$\phi^{(j)n} - q^2\phi^{(j-1)} = \phi - \frac{4\pi}{\kappa(z)} [n^{(j)} - \rho] - q^2\phi^{(j-1)} \quad (27)$$

with the boundary conditions

$$\begin{aligned} \phi_{\text{out}}^{(j)}(z) &= \phi_{\text{in}}^{(j)}(z), & \kappa_1\phi_{\text{out}}^{(j)'}(z) &= \phi_{\text{in}}^{(j)'}(z); & z &= -L/2, \\ \phi_{\text{in}}^{(j)}(z) &= \phi_{\text{out}}^{(j)}(z), & \phi_{\text{in}}^{(j)'}(z) &= \kappa_1\phi_{\text{out}}^{(j)'}(z); & z &= L/2, \\ \phi_{\text{out}}^{(j)}(z) &= 0, & \phi_{\text{out}}^{(j)'}(z) &= 0; & z &= \mp\infty. \end{aligned} \quad (28)$$

The term $q^2\phi$ was introduced as a small perturbation; $\phi_{\text{out}}(z)$ and $\phi_{\text{in}}(z)$ are potentials outside and inside the film, respectively. In equation (27), at each step of the iteration $j = 1, 2, 3, \dots$, electrostatic potential profile depends not only on the electronic concentration profile, but also on its own profile at the previous iteration. It is convenient to take q equal to electron wave number at the Fermi sphere $\bar{k}_F = (3\pi^2\bar{n})^{1/3}$ of homogeneous electron liquid.

In view of the multimolecular thicknesses of dielectric coatings on the metal film surfaces and rapid fall of the electron distribution outside of a film (approximately at a distance of 10–15 a_0), we formally neglected the effect of a thickness of the coatings, whose minimum thicknesses must be much greater than that of a monatomic (molecular) layer of a dielectric. The solution of equation (27) for $\Lambda \rightarrow \infty$ has the simple form

$$\phi^{(j)}(z) = \begin{cases} \left(\int_{-\infty}^z \frac{e^{-qz'}}{2q} f_1 dz' + A_1 \right) e^{qz} + \left(- \int_{-\infty}^z \frac{e^{qz'}}{2q} f_1 dz' + B_1 \right) e^{-qz}, & z < -L/2, \\ \left(\int_{-L/2}^z \frac{e^{-qz'}}{2q} f_2 dz' + A_2 \right) e^{qz} + \left(- \int_{-L/2}^z \frac{e^{qz'}}{2q} f_2 dz' + B_2 \right) e^{-qz}, & |z| \leq L/2, \\ \left(- \int_z^{\infty} \frac{e^{-qz'}}{2q} f_3 dz' + A_3 \right) e^{qz} + \left(\int_z^{\infty} \frac{e^{qz'}}{2q} f_3 dz' + B_3 \right) e^{-qz}, & z > L/2, \end{cases} \quad (29)$$

where $f_m(z') = -4\pi[n(z') - \rho(z')]D_m - q^2\phi^{(j-1)}(z')$ and $D_m = \kappa_1^{-1}, 1, \kappa_r^{-1}$ for $m = 1, 2, 3$, respectively. The choice of values $B_1 = 0$ and $A_3 = 0$ immediately follows from the condition of finiteness of potentials far away from the film.

Values of other coefficients A and B are found from the solution of the system of equations (28):

$$A_1 = \frac{2A_2}{1 + \kappa_r} + \frac{1 - \kappa_1}{1 + \kappa_1} \int_{-\infty}^{-L/2} \frac{e^{q(z'+L)}}{2q} f_1 dz' - \int_{-\infty}^{-L/2} \frac{e^{-qz'}}{2q} f_1 dz',$$

$$B_3 = \frac{2B_2}{1 + \kappa_r} - \frac{1}{1 + \kappa_r} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{qz'}}{q} f_2 dz' +$$

$$+ \frac{1 - \kappa_r}{1 + \kappa_r} \int_{L/2}^{\infty} \frac{e^{-q(z'-L)}}{2q} f_3 dz' - \int_{L/2}^{\infty} \frac{e^{qz'}}{2q} f_3 dz'.$$

Let's introduce notation

$$J_{(\pm)} = Y_0 \left[Y_1 2\kappa_1 (1 \mp \kappa_r) \int_{-\infty}^{-L/2} dz' e^{qz'} f_1 + Y_2 (1 \pm \kappa_1) (1 + \kappa_r) \times \right. \\ \left. \times \int_{-L/2}^{L/2} dz' e^{-qz'} f_2 + Y_3 (1 \pm \kappa_1) (1 - \kappa_r) \times \right. \\ \left. \times \int_{L/2}^{\infty} dz' e^{qz'} f_2 + Y_4 2\kappa_r (1 \pm \kappa_1) \int_{L/2}^{\infty} dz' e^{-qz'} f_3 \right], \quad (30)$$

where

$$Y_0 = \{2q[(1 - \kappa_1)(1 - \kappa_r)e^{-qL} - (1 + \kappa_1)(1 + \kappa_r)e^{qL}]\}^{-1}.$$

Then $A_2 = J_{(+)}$ for $Y_{1,3} = 1, Y_{2,4} = e^{qL}$ and $B_2 = J_{(-)}$ for $Y_{2,4} = 1, Y_1 = e^{qL} = Y_3^{-1}$.

In the case of the symmetric sandwich $\kappa_1 = \kappa_r$ the accurateness of calculations is verified by examination the stationarity conditions $n'(z) = 0$ and $\phi_{in}^{(j)}(z) = 0$ in the center of the slab ($z = 0$).

SPISOK LITERATURY

- Otero, R. Observation of preferred heights in Pb nanoislands: A quantum size effect / R. Otero, A. L. Vazquez de Parga and R. Miranda // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 66, № 11. – P. 115401.
- Pagge, J. J. Atomic-layer-resolved quantum oscillations in the work function: Theory and experiment for Ag/Fe(100) / J. J. Pagge, C. M. Wei, M. Y. Chou // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 66, № 23. – P. 115401.
- Buturovich, D. V. Friedel oscillations in ytterbium films deposited on the Si(111) 7 x 7 surface / D. V. Buturovich, M. V. Kuz'min, M. V. Loginov // Physics of the Solid State. – 2006. – V. 48, № 11. – P. 2205–2208.
- Liu, Y. Quantized electronic structure and growth of Pb films on highly oriented pyrolytic graphite / Y. Liu, J. J. Pagge, M. H. Upton, T. Miller and T.-C. Chiang // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 78, № 23. – P. 235437.
- Chiang, T.-C. Quantum physics of thin metal films / Chiang T.-C. // Bulletin of AAPPS. – 2008. – V.81, №2. – P. 2–10.
- Quantum oscillations in surface properties / [Vazquez de Parga A. L., Hinarejos J. J., Calleja F. and other] // Surface Science. – 2009. – V. 603. – P. 1389–1396.
- Vinogradov N.A., Size effects in ultrathin Mg/W(110) films: Quantum electronic states / N. A. Vinogradov, D. E. Marchenko, A. M. Shikin // Phys. Sol. State. – 2009. – V. 51. – P. 179.
- Consonant diminution of lattice and electronic coupling between a film and a substrate: Pb on Ge(100) / Chen P.-W., Lu Y.-H., Chang T.-R., Wang C.-B. // Phys. Rev. B. – 2011. – V.84, № 20 – P. 205401.
- Self-consistent study of electron confinement to metallic thin films on solid surfaces / [Ogando E., Zabala N., Chulkov E. V., Puska M. J.] // Phys. Rev. B. – 2005. – V.71, № 20. – P. 205401.
- Rogers III J. P., Quantum size effects in the fermi energy and electronic density of states in a finite square well thin film model / Rogers III J. P., Cutler P. H., Feuchtwang T. E. // Surface Science. – 1987. – V. 181. – P. 436–456.
- Moskalets, M. V. The quantum size electrostatic potential in two-dimensional point ballistic contacts / M. V. Moskalets // JETP Lett. – 1995. – V. 62. – P. 719–722.
- Pogosov, V. V. Energetics of metal slabs and clusters: The rectangular-box model / V. V. Pogosov, V. P. Kurbatsky, E. V. Vasyutin // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 71, № 19. – P. 195410.
- Han, Y. Quantum size effects in metal nanofilms: Comparison of an electron-gas model and density functional theory calculations / Y. Han, D.-J. Liu // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 80, № 7. – P. 155404.
- Kurbatsky, V. P. Optical conductivity of metal nanofilms and nanowires: The rectangular-box model / V. P. Kurbatsky, V. V. Pogosov // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 81, № 15. – P. 155414.
- Dymnikov, V. D. Fermi energy of electrons in a thin metallic plate / V. D. Dymnikov // Phys. Sol. State. – 2011. – V. 53, № 5 – P. 901–907.

16. *Schulte, F. K.* A theory of thin metal films: electron density, potentials and work function / F. K. Schulte // *Surface Science.* – 1976. – V. 55. – P. 427–444.
17. *Zabala, N.* Electronic structure of cylindrical simple-metal nanowires in the stabilized jellium model / N. Zabala, M. J. Puska, R. M. Nieminen // *Phys. Rev. B.* – 1999. – V. 59, № 19. – P. 12652–12660.
18. *Sarria, I.* Slabs of stabilized jellium: Quantum-size and self-compression effects / I. Sarria, C. Henriques, C. Fiolhais // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 62, № 3. – P. 1699–1705.
19. *Smogunov, A. N.* Electronic structure and polarizability of quantum metallic wires / A. N. Smogunov, L. I. Kurkina, O. V. Farberovich // *Phys. Solid State.* – 2000. – V. 42. – P. 1898–1907.
20. *Horowitz, C. M.* Position-dependent exact-exchange energy for slabs and semi-infinite jellium / C. M. Horowitz, L. A. Constantin, C. R. Proetto // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 80, № 23. – P. 235101.
21. *Feibelman, P. J.* Quantum-size effects in work functions of free-standing and adsorbed thin metal films / P. J. Feibelman // *Phys. Rev. B.* – 1984. – V. 29, № 3. – P. 6463–6467.
22. *Boettger, J. C.* Persistent quantum-size effect in aluminum films up to twelve atoms thick / J. C. Boettger // *Phys. Rev. B.* – 1996. – V. 53, № 19. – P. 13133–13137.
23. *Zhang, Z.* Electronic Growth of Metallic Overlayers on Semiconductor Substrates / Z. Zhang, Q. Niu, C.-K. Shih // *Physical Review Letters.* – 1998. – V. 80, № 24. – P. 5381–5384.
24. *Kiejna, A.* Quantum-size effect in thin Al(110) slabs / A. Kiejna, J. Peisert, P. Scharoch // *Surface Science.* – 1999. – V. 432, № 1–2. – P. 54–60.
25. *Pogosov, V. V.* Sum-rules and energy characteristics of small metal particle / V. V. Pogosov // *Solid State Communications.* – 1990. – V. 75, № 5. – P. 469–472.
26. *Kiejna, A.* On the temperature dependence of the ionization potential of self-compressed solid- and liquid-metallic clusters / A. Kiejna, V. V. Pogosov // *Journal of Physics: Condensed Matter.* – 1996. – V. 8. – № 23. – P. 4245–4257.
27. *Hirabayashi, K.* Dielectric theory of the barrier height at metal-semiconductor and metal-insulator interfaces / K. Hirabayashi // *Phys. Rev. B.* – 1971. – V. 3, № 12. – P. 4023–4025.
28. *Puska, M. J.* Electronic polarisability of small metal spheres / M. J. Puska, R. M. Nieminen, M. Manninen // *Phys. Rev.* – 1985. – B 31. – P. 3486.
29. *Rubio, A.* Dielectric screening effects on the photoabsorption cross section of embedded metallic clusters / A. Rubio, L. Serra // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 48, № 24. – P. 18222–18229.
30. *Perdew, J. P.* Stabilized jellium: Structureless pseudopotential model for the cohesive and surface properties of metals / Perdew J. P., Tran H. Q., Smith E. D. // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – V. 42, № 18. – P. 11627–11636.
31. *Perdew, J. P.* Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems / J. P. Perdew, A. Zunger // *Phys. Rev. B.* – 1981. – V. 23, № 10. – P. 5048–5079.
32. *Babich, A. V.* Effect of dielectric coating on the electron work function and the surface stress of a metal / A. V. Babich, V. V. Pogosov // *Surface Science.* – 2009. – V. 603, № 16. – P. 2393–2397.
33. *Serena, P. A.* Self-consistent image potential in a metal surface / P. A. Serena, J. M. Soler, N. Garcia // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 34. – P. 6767–6769.
34. *Constantin, L. A.* Adiabatic-connection-fluctuation-dissipation approach to long-range behavior of exchange-correlation energy at metal surfaces: A numerical study for jellium slabs / L. A. Constantin, J. M. Pitarke // *Phys. Rev. B.* – 2011. – V. 83. – № 7. – P. 075116.
35. *Lang, N. D.* Theory of Metal Surfaces: Charge Density and Surface Energy / N. D. Lang, W. Kohn // *Phys. Rev. B.* – 1970. – V. 1. – P. 4555.
36. *Pogosov V. V.* On some tenzoemission effects of the small metal particles / V. V. Pogosov // *Chem. Phys. Lett.* – 1993. – V. 193. – P. 129.
37. *Pogosov V. V.* Density-Functional Theory of Elastically Deformed Finite Metallic System: Work Function and Surface Stress / V. V. Pogosov, V. P. Kurbatsky // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* – 2001. – V. 92, № 2 – P. 304–311.
38. *Stampfli P.* Theory for the electron affinity of clusters of rare gas atoms and polar molecules / P. Stampfli // *Phys.Rep.* – 1995. – V. 255 – P. 1–77.
39. *Rhoderick, E. H.* Metal-semiconductor contacts / E. H. Rhoderick. – Clarendon Press, Oxford, 1978. – 252 p.
40. *Lin, L.* Identifying a suitable passivation route for Ge interfaces / L. Lin, H. Li, J. Robertson // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – V. 101 – P. 172907.
41. *Fowler, R. H.* Electron Emission in Intense Electric Fields / R. H. Fowler, L. Nordheim // *Proc. Roy. Soc.* – 1928. – A 119. – 173 p.
42. *Фоменко, В. С.* Эмиссионные свойства материалов / В. С. Фоменко. – К. : Наукова думка, 1981. – 339 с.
43. *Michaelson, H. B.* The work function of the elements and its periodicity / H. B. Michaelson // *J. Appl. Phys.* – 1977. – V. 48. – P. 4729.
44. *Brewer, J. C.* Determination of energy barrier profiles for high-k dielectric materials utilizing bias-dependent internal photoemission / J. C. Brewer, R. J. Walters, L. D. Bell // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – V. 85. – P. 4133.
45. *Singh, K.* Current-Voltage Characteristics and Photoresponse of Metal Metal Devices / K. Singh and S.N.A. Hammond // *Tur. J. of Phys.* – 1998. – V. 22 – № 4 – P. 315.
46. *Jang, Moongyu* Analysis of Schottky Barrier Height in Small Contacts Using a Thermionic-Field Emission Model / Moongyu Jang, Junghwan Lee // *ETRI Journal.* – 2002. – V. 24. – № 6. – P. 455–461.
47. *Louie, S. G.* Electronic structure of a metal-semiconductor interface / S. G. Louie, M. L. Cohen // *Phys. Rev. B.* – 1976. – P. 2461.
48. *Bordier, G.* Electronic structure of a metal-insulator interface: Towards a theory of nonreactive adhesion / G. Bordier, C. Noguera // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V. 44, № 12. – P. 6361–6371.
49. *Zavadinsky, V. G.* Schottky barrier formation in the Au/Si nanoscale system : A local density approximation study / V. G. Zavadinsky, I. A. Kuyanov // *J. Appl. Phys.* – 1997. – V. 81, № 6. – P. 2715–2759.
50. *Peacock, P. W.* Band offsets and Schottky barrier heights of high dielectric constant oxides / P. W. Peacock, J. Robertson // *J. Appl. Phys.* – 2002. – V. 92 – P. 4712–4722.
51. *Munch, W.* Role of virtual gap states and defects in metal-semiconductor contacts / W. Munch // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – V. 58, № 12. – P. 1260–1263.
52. *Arponen, J.* Charge density and positron annihilation at lattice defects in aluminium / J. Arponen, P. Hautajarvi, R. Nieminen // *Journal of Physics F: Metal Physics.* – 1973. – V. 3. – P. 2092.

Стаття надійшла до редакції 14.01.2013.

Після доробки 29.01.2013.

Бабич А. В.¹, Погосов В. В.², Вакула П. В.³

¹Канд. физ.-мат. наук, доцент, Запорожский национальный технический университет, Украина

²Д-р физ.-мат. наук, профессор, Запорожский национальный технический университет, Украина

³Ассистент, Запорожский национальный технический университет, Украина

САМОСОГЛАСОВАННЫЕ РАСЧЕТЫ РАБОТЫ ВЫХОДА, ВЫСОТЫ БАРЬЕРА ШОТТКИ И ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ МАТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОПЛЕНОК В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ОКРУЖЕНИИ

Предложен метод самосогласованных вычислений характеристик металлической пленки в диэлектриках. В рамках модифицированного метода Кона-Шэма и модели стабильного желе рассчитан наиболее интересный (асимметричный) случай металл-диэлектрических сэндвичей: разных диэлектриков по обе стороны пленки. На примере Al и Na впервые вычислены спектр, работа выхода электронов и поверхностная энергия поликристаллических пленок, помещенных в пассивные изоляторы. Диэлектрическое окружение в целом приводит к отрицательному изменению работы выхода электронов и поверхностной энергии. Помимо размерных изменений сдвиг работы выхода определяется среднеарифметическим значением диэлектрических констант окружающих сред. С учетом сил изображения и зоны проводимости диэлектрика выполнены самосогласованные вычисления профилей потенциалов, работ выхода и барьеров Шоттки для нанопленок алюминия с идеальными интерфейсами вакуум/Al(111)/SiO₂, вакуум/Al(111)/Al₂O₃ и сэндвича SiO₂/Al(111)/Al₂O₃.

Ключевые слова: металлические нанопленки, диэлектрик, работа выхода, поверхностная энергия, высота барьера Шоттки.

Бабіч А. В.¹, Погосов В. В.², Вакула П. В.³

¹Канд. фіз.-мат. наук, доцент, Запорізький національний технічний університет, Україна

²Д-р фіз.-мат. наук, професор, Запорізький національний технічний університет, Україна

³Асистент, Запорізький національний технічний університет, Україна

САМОУЗГОДЖЕНІ РОЗРАХУНКИ РОБОТИ ВИХОДУ, ВИСОТИ БАР'ЄРУ ШОТТКІ І ПОВЕРХНЕВОЇ ЕНЕРГІЇ МЕТАЛЕВИХ НАНОПЛІВОК В ДІЕЛЕКТРИЧНОМУ ОТОЧЕННІ

Запропоновано метод самоузгоджених обчислень характеристик металевої плівки в діелектриках. В рамках модифікованого методу Кона-Шема і моделі стабільного желе розрахований найбільш цікавий (асиметричний) випадок метал-діелектричних сендвічів: різних діелектриків по обидві сторони плівки. На прикладі Al і Na вперше розраховані спектр, робота виходу електронів і поверхнева енергія полікристалічних плівок, поміщених в пасивні ізолятори. Діелектричне оточення в цілому призводить до негативної зміни роботи виходу електронів і поверхневої енергії. Крім розмірних змін зсув роботи виходу визначається середньоарифметичним значенням діелектричних констант навколишніх середовищ. З урахуванням сил зображення та зони провідності діелектрика виконані самоузгоджені обчислення профілів потенціалів, робіт виходу і бар'єрів Шоттки для наноплівок алюмінію з ідеальними інтерфейсами вакуум Al(111)/SiO₂, вакуум/Al(111)/Al₂O₃ і сэндвіча SiO₂/Al(111)/Al₂O₃.

Ключові слова: металеві наноплівки, діелектрик, робота виходу, поверхнева енергія, висота бар'єру Шоттки.

REFERENCES

- Otero R., Vazquez de Parga A. L., Miranda R. Observation of preferred heights in Pb nanoislands: A quantum size effect, *Phys. Rev. B.*, 2002, V. 66, No. 11, 115401 p.
- Pagel J. J., Wei C. M., Chou M. Y. Atomic-layer-resolved quantum oscillations in the work function: Theory and experiment for Ag/Fe(100), *Phys. Rev. B.*, 2002, V.66, No. 23, 115401 p.
- Buturovich D. V., Kuz'min M. V., Loginov M. V., Friedel oscillations in ytterbium films deposited on the Si(111) 7 x 7 surface, *Physics of the Solid State*, 2006, V. 48, No. 11, pp. 2205–2208.
- Liu Y., Pagel J. J., Upton M. H., Miller T., Chiang T.-C., Quantized electronic structure and growth of Pb films on highly oriented pyrolytic graphite, *Phys. Rev. B.*, 2008, V. 78, No. 23, 235437 p.
- Chiang T.-C., Quantum physics of thin metal films, *Bulletin of AAPP*, 2008, V. 81, № 2, pp. 2–10.
- Vazquez de Parga A. L., Hinarejos J. J., Calleja F., Camarero J., Otero R., Miranda R., Quantum oscillations in surface properties, *Surface Science*, 2009, V. 603, pp. 1389–1396.
- Vinogradov N. A., Marchenko D. E., Shikin A. M., Size effects in ultrathin Mg/W(110) films: Quantum electronic states, *Phys. Sol. State*, 2009, V. 51, 179 p.
- Chen P.-W., Lu Y.-H., Chang T.-R., Wang C.-B., Consonant diminution of lattice and electronic coupling between a film and a substrate: Pb on Ge(100), *Phys. Rev. B*, 2011, V. 84, No. 20, 205401 p.
- Ogando E., Zabala N., Chulkov E. V., Puska M. J., Self-consistent study of electron confinement to metallic thin films on solid surfaces, *Phys. Rev. B.*, 2005, V. 71, No. 20, 205401 p.
- Rogers III J. P., Cutler P. H., Feuchtwang T. E., Quantum size effects in the fermi energy and electronic density of states in a finite square well thin film model, *Surface Science*, 1987, V. 181, pp. 436–456.
- Moskalets M. V., The quantum size electrostatic potential in two-dimensional point ballistic contacts, *JETP Lett.*, 1995, V. 62, pp. 719–722.
- Pogosov V. V., Kurbatsky V. P., Vasyutin E. V., Energetics of metal slabs and clusters: The rectangular-box model, *Phys. Rev. B.*, 2005, V. 71, No. 19, 195410 p.
- Han Y., Liu D.-J. Quantum size effects in metal nanofilms: Comparison of an electron-gas model and density functional theory calculations, *Phys. Rev. B.*, 2009, V. 80, No. 7, 155404 p.
- Kurbatsky V. P., Pogosov V. V. Optical conductivity of metal nanofilms and nanowires: The rectangular-box model, *Phys. Rev. B.*, 2010, V. 81, No. 15, 155414 p.
- Dymnikov V. D., Fermi energy of electrons in a thin metallic plate, *Phys. Sol. State*, 2011, V. 53, No. 5, pp. 901–907.
- Schulte F. K., A theory of thin metal films: electron density, potentials and work function, *Surface Science*, 1976, V. 55, pp. 427–444.
- Zabala N., Puska M. J., Nieminen R. M. Electronic structure of cylindrical simple-metal nanowires in the stabilized jellium model, *Phys. Rev. B.*, 1999, V. 59, No. 19, pp. 12652–12660.

18. Sarria I., Henriques C., Fiolhais C., Slabs of stabilized jellium: Quantum-size and self-compression effects, *Phys. Rev. B.*, 2000, V. 62, No. 3, pp. 1699–1705.
19. Smogunov A. N., Kurkina L. I., Farberovich O. V., Electronic structure and polarizability of quantum metallic wires, *Phys. Solid State*, 2000, V. 42, pp. 1898–1907.
20. Horowitz C. M., Constantin L. A., Proetto C. R., Position-dependent exact-exchange energy for slabs and semi-infinite jellium, *Phys. Rev. B.*, 2009, V. 80, No. 23, 235101 p.
21. Feibelman P. J., Hamann D. R. Quantum-size effects in work functions of free-standing and adsorbed thin metal films, *Phys. Rev. B.*, 1984, V. 29, No. 3, pp. 6463–6467.
22. Boettger J. C., Persistent quantum-size effect in aluminum films up to twelve atoms thick, *Phys. Rev. B.*, 1996, V. 53, No. 19, pp. 13133–13137.
23. Zhang Z., Niu Q., Shih C.-K., Electronic Growth of Metallic Overlayers on Semiconductor Substrates, *Physical Review Letters*, 1998, V. 80, No. 24, pp. 5381–5384.
24. Kiejna A., Peisert J., Scharoch P. Quantum-size effect in thin Al(110) slabs, *Surface Science*, 1999, V.432, No. 1–2, pp. 54–60.
25. Pogosov V. V., Sum-rules and energy characteristics of small metal particle, *Solid State Communications*, 1990, V. 75, No. 5, pp. 469–472.
26. Kiejna A., Pogosov V. V. On the temperature dependence of the ionization potential of self-compressed solid- and liquid-metallic clusters, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1996, V. 8, No. 23, pp. 4245–4257.
27. Hirabayashi K., Dielectric theory of the barrier height at metal-semiconductor and metal-insulator interfaces, *Phys. Rev. B.*, 1971, V. 3, No. 12, pp. 4023–4025.
28. Puska M. J., Nieminen R. M., Manninen M., Electronic polarisability of small metal spheres, *Phys. Rev. B.*, V. 31, 1985, 3486 p.
29. Rubio A., Serra L., Dielectric screening effects on the photoabsorption cross section of embedded metallic clusters, *Phys. Rev. B.*, 1993, V. 48, No. 24, pp. 18222–18229.
30. Perdew J. P., Tran H. Q., Smith E. D. Stabilized jellium: Structureless pseudopotential model for the cohesive and surface properties of metals, *Phys. Rev. Lett.*, 1990, V. 42, No. 18, pp. 11627–11636.
31. Perdew J.P., Zunger A., Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B.*, 1981, V. 23, No. 10, pp. 5048–5079.
32. Babich A. V., Pogosov V. V., Effect of dielectric coating on the electron work function and the surface stress of a metal, *Surface Science*, 2009, V. 603, No. 16, pp. 2393–2397.
33. Serena P.A., Soler J.M., Garcia N., Self-consistent image potential in a metal surface, *Phys. Rev. B.*, 1986, V. 34, pp. 6767–6769.
34. Constantin L. A., Pitarke J. M., Adiabatic-connection-fluctuation-dissipation approach to long-range behavior of exchange-correlation energy at metal surfaces: A numerical study for jellium slabs, *Phys. Rev. B.*, 2011, V. 83, No. 7, 075116 p.
35. Lang N. D., Kohn W., Theory of Metal Surfaces: Charge Density and Surface Energy, *Phys. Rev. B.*, 1970, V. 1, 4555 p.
36. Pogosov V. V., On some tenzoemission effects of the small metal particles, *Chem. Phys. Lett.*, 1993, V. 193, 129 p.
37. Pogosov V. V., Kurbatsky V. P., Density-Functional Theory of Elastically Deformed Finite Metallic System: Work Function and Surface Stress, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2001, V. 92, No. 2, pp. 304–311.
38. Stampfli P., Theory for the electron affinity of clusters of rare gas atoms and polar molecules, *Phys.Rep.*, Vol. 255, 1995, pp. 1–77 .
39. Rhoderick E. H., Metal-semiconductor contacts, Clarendon Press, Oxford, 1978, 252 p.
40. Lin L., Li H., Robertson J. Identifying a suitable passivation route for Ge interfaces, *Appl. Phys. Lett.*, 2012, V. 101, 172907 p.
41. Fowler R. H., Nordheim L., Electron Emission in Intense Electric Fields, *Proc. Roy. Soc.*, 1928, A 119, 173 p.
42. Fomenko V. S., Emissionny'e svojstva materialov. Kiev, Naukova dumka, 1981, 339 p.
43. Michaelson H. B., The work function of the elements and its periodicity, *J. Appl. Phys.*, 1977, V. 48, 4729 p.
44. Brewer J. C., Walters R. J., Bell L. D. Determination of energy barrier profiles for high-k dielectric materials utilizing bias-dependent internal photoemission, *Appl. Phys. Lett.*, 2004, V. 85, 4133 p.
45. Singh K., Hammond S.N.A., Current-Voltage Characteristics and Photoresponse of Metal Metal Devices, *Tur. J. of Phys.*, 1998, V. 22. No. 4, 315 p.
46. Moongyu Jang, Junghwan Lee, Analysis of Schottky Barrier Height in Small Contacts Using a Thermionic-Field Emission Model, *ETRI Journal*, 2002, V. 24, No. 6, pp. 455–461.
47. Louie S. G., Cohen M. L., Electronic structure of a metal-semiconductor interface, *Phys. Rev. B*, 1976, 13, 2461 p.
48. Bordier G., Noguera C., Electronic structure of a metal-insulator interface: Towards a theory of nonreactive adhesion, *Phys. Rev. B*, 1991, V. 44, No. 12. pp. 6361–6371.
49. Zavodinsky V. G., Kuyanov I. A., Schottky barrier formation in the Au/Si nanoscale system : A local density approximation study, *J. Appl. Phys.*, 1997, V. 81, No. 6, pp. 2715–2759.
50. Peacock P. W., Robertson J., Band offsets and Schottky barrier heights of high dielectric constant oxides, *J. Appl. Phys.*, 2002, V. 92, pp. 4712–4722.
51. Monch W., Role of virtual gap states and defects in metal-semiconductor contacts, *Phys. Rev. Lett.*, 1987, V. 58, No. 12, pp. 1260–1263.
52. Arponen J., Hautajarvi P., Nieminen R., Charge density and positron annihilation at lattice defects in aluminium, *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1973, V. 3, 2092 p.

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЛИНЕЙНОЙ ФАР С СОГЛАСУЮЩЕЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

В статье представлен электродинамический алгоритм расчета бесконечной линейной волноводной ФАР с согласующей периодической структурой (СПС). Расчет проведен с использованием метода интегрального уравнения на основе выделения пронизывающей области. Из полученных численных результатов следует, что согласование ФАР улучшается при определенных геометрических размерах СПС и ее расположении.

Ключевые слова: интегральное уравнение, фазированная антенная решетка, функция Грина, пронизывающая область.

ВВЕДЕНИЕ

Согласование ФАР с внешним пространством является важной задачей. Существуют различные методы улучшения согласования за счет применения магнитодиэлектрических вставок и слоев, диафрагм [1], индуктивных штырей, импедансных фланцев [2] и т. д. В данной работе рассматривается применение согласующего устройства в виде СПС. СПС представляет собой подрешетку с такими же поперечными размерами, как и у основной антенной решетки, находящуюся на определенном расстоянии над основной решеткой.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

На рис. 1 представлена геометрия центральной ячейки бесконечной линейной волноводной ФАР, сканирующей в Н-плоскости.

Для решения задачи об излучении разобьем всю сложную область определения электромагнитного поля на три области:

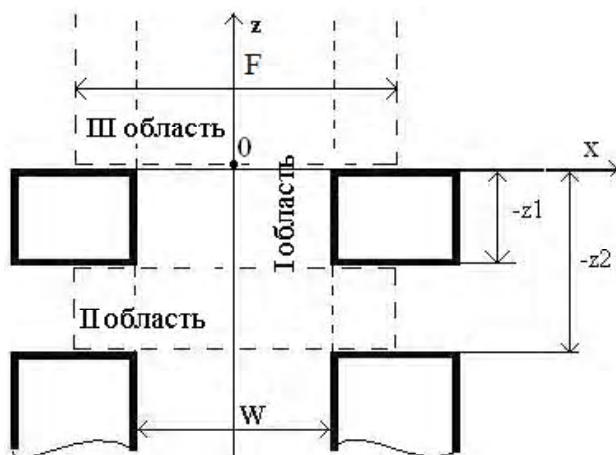


Рис. 1. Геометрия центральной ячейки бесконечной ФАР с согласующей структурой

I пронизывающая область – регулярный волновод, продленный в бесконечность:

$$-\frac{W}{2} \leq x \leq \frac{W}{2}; \quad -\infty < z < +\infty.$$

II частичная область – «канал Флоке» конечной длины:

$$-\frac{F}{2} \leq x \leq \frac{F}{2}; \quad -z2 \leq z \leq -z1.$$

III частичная область – внешнее пространство излучения:

$$-\frac{F}{2} \leq x \leq \frac{F}{2}; \quad 0 \leq z < +\infty.$$

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Используя вторую теорему Грина, получим интегральное представление для полного поля пронизывающей области с учетом равенства полей в общих областях пересечения [3]:

$$E_y^I(x, z) = E_{y_{exc}}^I(x, z) + \int_{-z2}^{-z1} \left\{ E_y^{II}(x', z') \frac{\partial G^I(x, z; x', z')}{\partial x'} \Big|_{x'=-\frac{W}{2}} \Big|_{x'=\frac{W}{2}} - E_y^{II}(x', z') \frac{\partial G^I(x, z; x', z')}{\partial x'} \Big|_{x'=\frac{W}{2}} \Big|_{x'=-\frac{W}{2}} \right\} dz' + \int_0^{\infty} \left\{ E_y^{III}(x', z') \frac{\partial G^I(x, z; x', z')}{\partial x'} \Big|_{x'=-\frac{W}{2}} \Big|_{x'=\frac{W}{2}} - E_y^{III}(x', z') \frac{\partial G^I(x, z; x', z')}{\partial x'} \Big|_{x'=\frac{W}{2}} \Big|_{x'=-\frac{W}{2}} \right\} dz', \quad (1)$$

$$x \in \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2} \right]; \quad x' = \pm \frac{W}{2}; \quad z' \in [-z1, z2] \cup [0, +\infty).$$

В приведенном интегральном представлении тангенциальные составляющие напряженности электрического поля во II и III области могут быть представлены в виде рядов Фурье:

$$E_{y'}^{II}(x, z) = \sum_{MF=-\infty}^{\infty} (T2_{MF} e^{-CJ \cdot CFL_{MF} \cdot (z+z1)} + R2_{MF} e^{CJ \cdot CFL_{MF} \cdot (z+z1)}) \cdot FD_{MF}(x),$$

$$E_{y'}^{III}(x, z) = \sum_{MF=-\infty}^{\infty} T3_{MF} e^{-CJ \cdot CFL_{MF} \cdot z} \cdot FD_{MF}(x).$$

где $T2_{MF}, R2_{MF}, T3_{MF}$ – комплексные амплитудные коэффициенты, подлежащие определению; $FD_{MF}(x)$ – ортонормированные поперечные собственные функции «канала Флоке», CFL_{MF} – постоянная распространения волны в области излучения:

$$CFL_{MF} = \begin{cases} \sqrt{4 \cdot \pi^2 - \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot F \cdot \sin(\theta) + 2 \cdot MF \cdot \pi}{F} \right)^2}, & 4 \cdot \pi^2 \geq \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot F \cdot \sin(\theta) + 2 \cdot MF \cdot \pi}{F} \right)^2 \\ -CJ \sqrt{\left(\frac{2 \cdot \pi \cdot F \cdot \sin(\theta) + 2 \cdot MF \cdot \pi}{F} \right)^2 - 4 \cdot \pi^2}, & 4 \cdot \pi^2 < \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot F \cdot \sin(\theta) + 2 \cdot MF \cdot \pi}{F} \right)^2 \end{cases}$$

где $CJ \rightarrow \sqrt{-1}$, θ – угол сканирования.

Поле стороннего источника с фазовой плоскостью отсчета, расположенной при $z=-z2$, следующее:

$$E_{y_{exc}}^I(x, z) = 1 \cdot WD_1(x) \cdot e^{-CJ \cdot CWL_1 \cdot (z+z2)}.$$

Функция Грина в «истокообразной» форме имеет следующий вид:

$$G^1(x, z; x', z') = \sum_{MG=1}^{\infty} WD_{MG}(x) \cdot WD_{MG}(x') \cdot f_{MG}(z, z'),$$

где $WD_{MG}(x), WD_{MG}(x')$ – поперечные собственные функции прямоугольного волновода, удовлетворяющие граничным условиям Дирихле, $f_{MG}(z, z')$ – продольная компонента для соответствующей подобласти функции Грина первой области, CWL_{MG} – постоянная распространения волны в волноводном канале:

$$CWL_{MWG} = \begin{cases} \sqrt{4 \cdot P^2 - \left(\frac{MWG \cdot \pi}{W} \right)^2}; & 4 \cdot \pi^2 \geq \left(\frac{MWG \cdot \pi}{W} \right)^2 \\ -CJ \sqrt{\left(\frac{MWG \cdot \pi}{W} \right)^2 - 4 \cdot \pi^2}; & 4 \cdot \pi^2 < \left(\frac{MWG \cdot \pi}{W} \right)^2 \end{cases}$$

Подставляя в интегральное представление (1) выражения для функции Грина, источника стороннего поля и напряженности электрического поля во II и III областях, а также фиксируя последовательно в обеих частях (1) точки наблюдения при $z=-z2; -z1; 0$, получим систему интегральных уравнений относительно трех неизвестных

$T2_{MF}, R2_{MF}, T3_{MF}$. Применив процедуру Галеркина, получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

Решив полученную СЛАУ, определим коэффициент отражения для волны H_{10} при использовании равенства тангенциальных компонент электрического поля при $z=-z2$.

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты численного расчета представлены на рис. 2–6. Определение оптимального размера $z2/\lambda$ с точки зрения минимально возможного коэффициента отражения проводилось для каждого фиксированного значения $z1/\lambda$ (с шагом 0,05). Кривые приведены для значе-

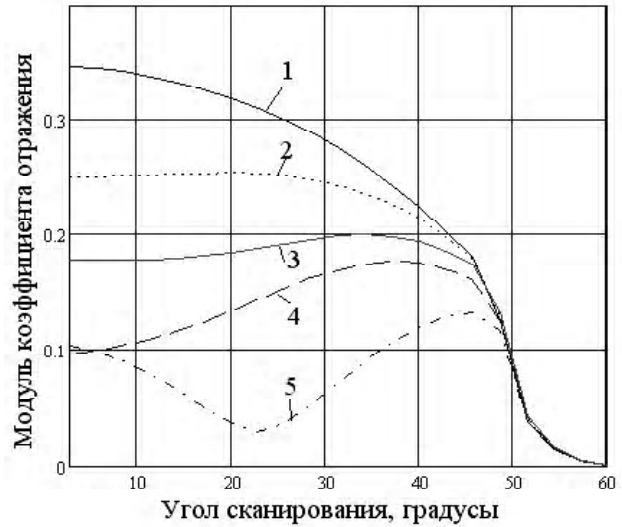


Рис. 2. Зависимость модуля коэффициента отражения от угла сканирования

- $F = 0,5714\lambda, W = F$: 1. $z1 = z2 = 0$;
- 2. $z1 = 0,2\lambda, z2 = 0,2\lambda$; 3. $z1 = 0,15\lambda, z2 = 0,3\lambda$;
- 4. $z1 = 0,1\lambda, z2 = 0,25\lambda$ 5. $z1 = 0,05\lambda, z2 = 0,25\lambda$

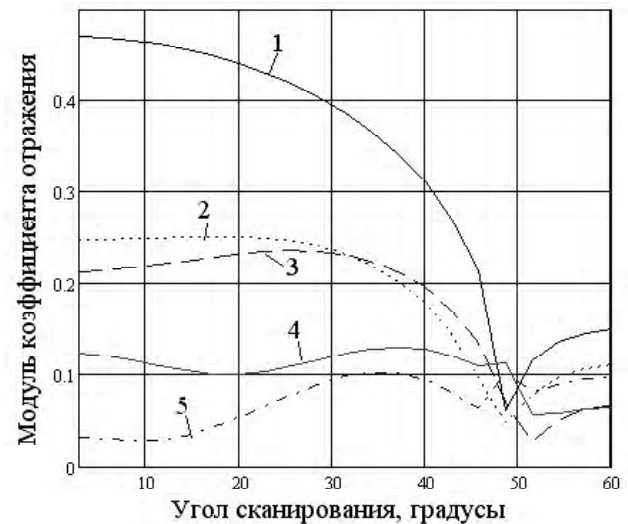


Рис. 3. Зависимость модуля коэффициента отражения от угла сканирования $F = 0,5714\lambda, W = 0,937 \cdot F$: 1. $z1 = z2 = 0$;

- 2. $z1 = 0,05\lambda, z2 = 0,2\lambda$; 3. $z1 = 0,15\lambda, z2 = 0,3\lambda$;
- 4. $z1 = 0,1\lambda, z2 = 0,3\lambda$; 5. $z1 = 0,05\lambda, z2 = 0,25\lambda$

ний z_1/λ , при которых наблюдается уменьшение коэффициента отражения падающей волны. Как видно из рисунков 2–6 малое значение $z_1/\lambda=0,05$ обеспечивает наименьший коэффициент отражения, за исключением кривых на рис. 5. При больших значениях z_2/λ возникает большое отражение падающей волны.

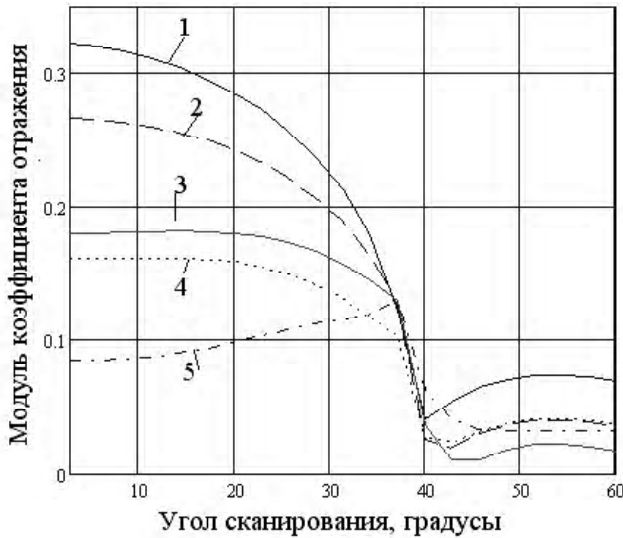


Рис. 4. Зависимость модуля коэффициента отражения от угла сканирования

- $F=0,6205\lambda, W=0,937 \cdot F$: 1. $z_1=z_2=0$;
 2. $z_1=0,15\lambda, z_2=0,25\lambda$; 3. $z_1=0,1\lambda, z_2=0,25\lambda$;
 4. $z_1=0,05\lambda, z_2=0,2\lambda$; 5. $z_1=0,05\lambda, z_2=0,25\lambda$

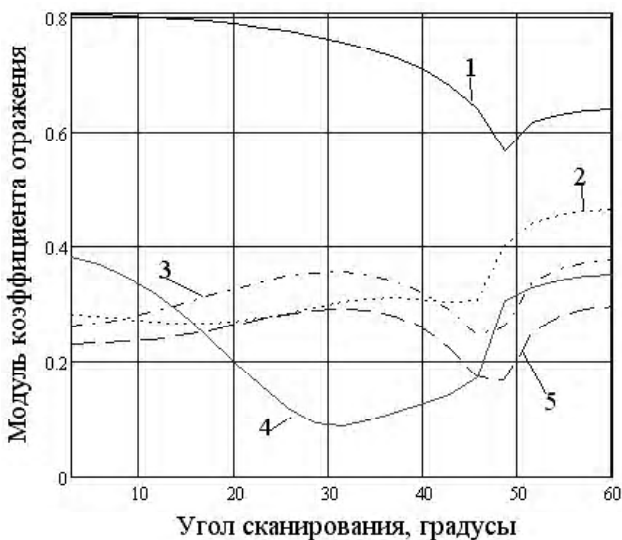


Рис. 5. Зависимость модуля коэффициента отражения от угла сканирования $F=0,5714\lambda, W=0,88 \cdot F$: 1. $z_1=z_2=0$;

2. $z_1=0,15\lambda, z_2=0,35\lambda$; 3. $z_1=0,25\lambda, z_2=0,45\lambda$;
 4. $z_1=0,35\lambda, z_2=0,5\lambda$; 5. $z_1=0,45\lambda, z_2=0,6\lambda$

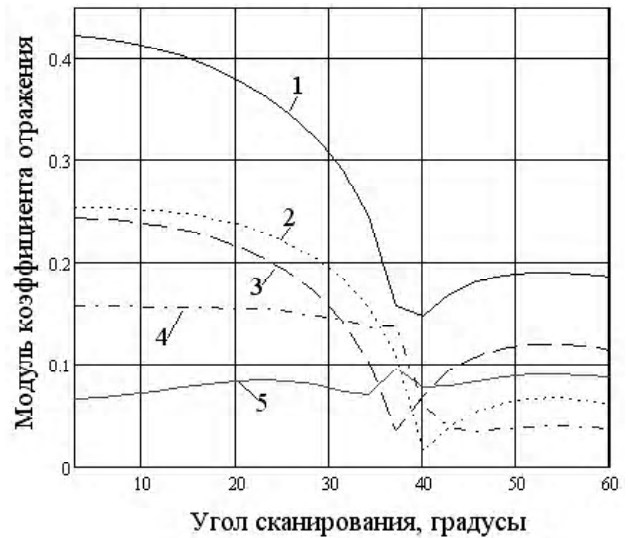


Рис. 6. Зависимость модуля коэффициента отражения от угла сканирования

- $F=0,6205\lambda, W=0,88 \cdot F$: 1. $z_1=z_2=0$; 2. $z_1=0,25\lambda, z_2=0,35\lambda$; 3. $z_1=0,15\lambda, z_2=0,3\lambda$; 4. $z_1=0,1\lambda, z_2=0,3\lambda$;
 5. $z_1=0,05\lambda, z_2=0,25\lambda$

Для указанных относительных толщин стенок волноводов получены оптимальные размеры промежуточной области $z_1/\lambda=0,05; z_2/\lambda=0,25$. Для случая: $WX=0,5028/\lambda, PX=0,5714/\lambda$ наилучшее согласование наблюдается при $z_1/\lambda=0,45; z_2/\lambda=0,6$.

ВЫВОДЫ

Численное исследование согласования ФАР с внешним пространством показало, что при определенных размерах СПС и ее расположении, определяемых в результате электродинамического расчета, использование этого согласующего устройства становится эффективным. Для рассмотренных входных параметров ФАР (нормированных к длине волны геометрических размеров) были численно определены параметры СПС, обеспечивающие согласование. В среднем коэффициент отражения при использовании СПС уменьшается в 3–4 раза в диапазоне углов сканирования от 0° до 60° .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Амיתей, Р. Теория и анализ фазированных антенных решеток (пер. с англ.). / Р. Амיתей, В. Галиндо, Ч. Ву. – М.: Мир, 1974. – 455 с.
2. Гостюхин, В. Л. Вопросы проектирования активных ФАР с использованием ЭВМ / В. Л. Гостюхин, К. И. Гринева, В. Н. Трусов; под ред. В. Л. Гостюхина. – М.: Радио и связь, 1983. – 248 с.
3. Морозов, В. М. Применение метода интегрального уравнения для решения трехмерных дифракционных задач / В. М. Морозов, В. И. Магро, С. В. Марченко // Электродинамика и физика СВЧ. – 2006. – С. 56–61.

Стаття надійшла до редакції 24.09.2012.
 Після доробки 24.01.2013.

Марченко С. В.¹, Морозов В. М.²

¹Старший викладач, Дніпродзержинський державний технічний університет, Україна

²Канд. фіз.-мат. наук, доцент Дніпропетровський національний університет, Україна

ЕЛЕКТРОДИНАМІЧНИЙ РОЗРАХУНОК ЛІНІЙНОЇ ФАР З УЗГОДЖУЮЧОЮ ПЕРІОДИЧНОЮ СТРУКТУРОЮ

В статті представлено електродинамічний алгоритм розрахунку нескінченної лінійної хвилеводної ФАР з узгоджуючою періодичною структурою (УПС). Розрахунок проведено з використанням методу інтегрального рівняння на основі виділення пронизуючої області. З отриманих чисельних результатів витікає, що узгодження ФАР поліпшується при певних геометричних розмірах УПС та її розташуванні.

Ключові слова: інтегральне рівняння, фазована антени решітка, функція Гріна, пронизуюча область.

Marchenko S. V.¹, Morozov V. M.²

¹Senior teacher, Dniprodzerzhinsk State Technical University, Ukraine

²Candidat of physics and mathematics sciences, Dnipropetrovsk National University, Ukraine

ELECTRODYNAMICS CALCULATION OF LINEAR PAA WITH MATCHING PERIODICAL STRUCTURE

Matching of PAA with external space is an important problem. There are various methods of improvement of matching by usage of magnito-dielectric inserts and layers, diaphragms [1], inductive irises, impedance flanges [2], etc. In this work use of the matching device in the matching periodical structure (MPS) is considered. The MPS represents a subarray with the same cross sizes as the main antenna array ones, being at a certain distance over the main antennas. Calculation is carried out with integral equation method based on splitting of penetrating area.

Numerical research of matching of PAA with external space showed that MPS improve matching at defined sizes and its arrangement. The parameters of MPS providing matching were numerically determined. On average the reflection coefficient when using MPS decreases by 3–4 times in the range of angles of scan from 0° to 60°.

Keywords: integral equation, phased array antenna, the Green's function, permeates the area.

REFERENCES

1. Amitey R., Galindo V., Wu Ch. *Theoria and analys fasiovannyh antennyh reshotok* (transl. from Engl.). Moscow, Mir, 1974, 455 p.
2. Gostyuhin V. L., Grinev K. I., Trusov V. N. *Voprosy proektirovaniia aktivnyh FAR s ispol'zovaniem EVM/ ed.* by Gostyuhin V. L. Moscow, Radio i svyaz', 1983, 248 p.
3. Morozov V. M., Magro V. I., Marchenko V. M. *Primenenie metoda integral'nogo uravneniia dlia resheniia trehmernyh difraktsionnyh zadach, Elektrodinamika i fizika SVCH*, 2006, No.1, pp. 56–61.

РАДИОЕЛЕКТРОНИКА ТА ТЕЛЕКОМУНІКАЦІЇ

РАДИОЕЛЕКТРОНИКА ТА ТЕЛЕКОММУНІКАЦІИ

RADIO ELECTRONICS AND TELECOMMUNICATIONS

УДК 519.6, 621.396.96

Величко Е. В.

Канд. физ.-мат. наук, доцент, Таврический государственный агротехнологический университет, Украина,
E-mail: velichko_ev@i.ua

ЛОКАЦИЯ В ДВУХСЛОЙНОЙ СРЕДЕ ПРИ ПОМОЩИ УПРОЩЕННЫХ ДАТЧИКОВ

В статье в двумерной постановке изучается процесс движения фронта волны, создаваемой точечным источником. Источник расположен в одном из слоев двухслойной среды с прямолинейной границей раздела сред. Целью является определение положения источника излучения и времени начала излучения по данным датчиков, расположенных во второй среде на одной прямой, параллельной границе раздела сред. При отношении скоростей распространения сигнала в слоях, близком к 0,75, задача сводится к решению системы линейных уравнений. Приведен пример расчета.

Ключевые слова: задача локации, двухслойная среда, аппроксимация, фронт волны, упрощенный датчик.

ВВЕДЕНИЕ

Проблемам определения положения объекта по результатам данных, полученных многопозиционными измерительными системами, посвящено немало исследований. Это объясняется их широким применением в различных областях: радиолокации, сейсмологии, акустике, гидроакустики, физики элементарных частиц, астрономии и других [1]. Многопозиционная радиолокационная станция – это любая система радиолокационных станций или отдельных позиций, разнесенных в пространстве, в которой совместно обрабатывается получаемая информация об объекте наблюдения. Именно благодаря совместной обработке информации о каждой цели, достигаются основные преимущества многопозиционной радиолокационной станции.

В случае пассивной локации обычно изучаются случаи, когда датчики определяют или расстояние до цели, или направление на источник сигнала, или и то и другое [2–5]. При наличии границы раздела сред между источником излучения и датчиком задача становится намного сложнее [1, 8].

Одним из способов снизить стоимость локационных систем и увеличить их надежность является применение

более простых датчиков. В представленной работе рассматривается случай, когда датчики фиксируют только время прихода фронта волны, причем время, когда начал распространяться сигнал, считается неизвестным. Подобные задачи для однородных сред рассматривались в работах [6, 7]. Для многослойных сред публикации, описывающие способы решения поставленной задачи автору неизвестны.

Наиболее близко к тематике статьи примыкает публикация [9], в которой авторы сводили задачу локации в двухслойной среде при помощи упрощенных датчиков к численной нелинейной оптимизации с выбором нулевого приближения в виде решения для однородной среды. При этом, что существенно, считалось, что часть датчиков расположена в той же среде, где и источник сигнала.

ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим плоскость, разделенную прямой на две полуплоскости, которые отличаются скоростями распространения сигнала (например, акустического). В определенный момент времени в некоторой точке включается источник, от которого во все стороны начинает распространяться круговая волна. На линии раздела сред

волна меняет форму в силу закона Снелиуса. Во второй среде на одной прямой расположены датчики, которые фиксируют время прихода волны. Ставится задача определения источника излучения и времени, когда сигнал начинает распространяться. Количество датчиков $n \geq 3$.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Линия $y = 0$ является линией раздела сред, причем в области $y < 0$ скорость волны равна v_2 . Рассмотрим волну, которая в момент времени $t = T_0$ начинает распространяться с точки $A(r, h)$ ($h > 0$) со скоростью v_1 . В области $y < 0$ в точках, $M_i(x_i, y_i)$, $i = \overline{1, n}$, находятся датчики. В данной статье ограничимся случаем, когда датчики находятся на прямой $y = \omega$, то есть $y_i = \omega$ при $i = \overline{1, n}$. Обычно датчики определяют сдвиг частоты принятого и исходного сигналов, на основании чего делается вывод о расстоянии, пройденном сигналом. В данной статье мы рассматриваем упрощенные датчики, которые определяют только момент времени t_i прохождения фронта волны. Необходимо по известным величинам x_i, y_i, t_i найти координаты источника $A(r, h)$ и время T_0 . При решении задачи считаем, что имеет место закон Снелиуса:

$$\delta = \frac{v_2}{v_1} = \frac{\sin \psi}{\sin \varphi}.$$

Построим параметрическое уравнение фронта волны, который находится в нижней полуплоскости. Введем следующие обозначения: φ – угол падения волны на границу раздела слоев, ψ – угол преломления луча, l_1 (l_2) – длина пути луча в верхнем (нижнем) слое, t_i – время, за которое точка фронта волны преодолевает путь l_i , B – точка преломления луча, p – проекция вектора \overline{AB} на ось абсцисс, $C(x, y)$ – положение текущей точки фронта волны в момент времени $t = t_1 + t_2 + T_0$. На рис. 1 приведены соответствующие отношения.

С учетом введенных обозначений можем записать следующие равенства:

$$l_1 = v_1 t_1, p = l_1 \sin \varphi = h \cdot \operatorname{tg} \varphi, l_1 = h / \cos \varphi, \sin \psi = \delta \sin \varphi,$$

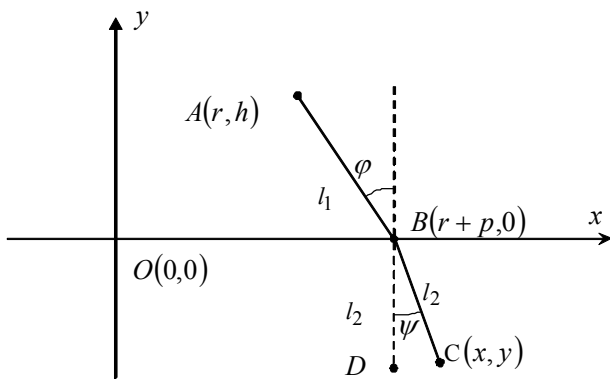


Рис. 1. Схематическое расположение источника сигнала и положение точки фронта волны в некоторый момент времени после преломления

$$\cos \psi = \cos(\arcsin(\delta \sin \varphi)) = \sqrt{1 - \delta^2 \sin^2 \varphi}, l_2 = v_2 t_2, t_2 = t - t_1 - T_0 = t - \frac{l_1}{v_1} - T_0 = t - \frac{h}{v_1 \cos \varphi} - T_0.$$

Рассмотрим вспомогательную точку $D(r + p, -l_2)$. Вектор \overline{BC} можно получить из вектора $\overline{BD}(0, -l_2)$ поворотом на угол ψ , а, следовательно, его координаты

$$\overline{BC} = (l_2 \sin \psi, -l_2 \cos \psi).$$

Из равенства $\overline{OC} = \overline{OB} + \overline{BC}$, получим, что $C(r + p + l_2 \sin \psi, -l_2 \cos \psi)$.

Возьмем в качестве параметра угол φ и выразим все величины, которые входят в выражение координат точки C . В результате получим параметрическое уравнение фронта волны в нижней на полуплоскости:

$$\begin{cases} x = r + h \cdot \operatorname{tg} \varphi + v_2 \left(t - T_0 - \frac{h}{v_1 \cos \varphi} \right) \delta \cdot \sin \varphi, \\ y = -v_2 \left(t - T_0 - \frac{h}{v_1 \cos \varphi} \right) \sqrt{1 - \delta^2 \sin^2 \varphi}. \end{cases} \quad (1)$$

Поскольку фронт волны достигает нижней среды в момент времени $t = h/v_1 + T_0$, то в формуле (1) необходимо брать $t > T_0 + h/v_1$.

Если $v_1 > v_2$, то все лучи, которые достигнут линии раздела сред, перейдут в нижнюю среду. В момент времени t до границы раздела сред дойдет сигнал, который прошел путь $l_1 = (t - T_0) \cdot v_1$, и он будет отвечать максимальному углу падения φ_{\max} , который можно найти из соотношения $l_1 \cos \varphi_{\max} = h$. Таким образом, делаем вывод, что

$$\varphi \in \left(-\arccos \frac{h}{(t - T_0)v_1}, \arccos \frac{h}{(t - T_0)v_1} \right).$$

Заметим, что в этом случае $x_{\max, \min} = r \pm \sqrt{(t - T_0)^2 v_1^2 - h^2}$, а полуширина фронта волны достигает $\sqrt{(t - T_0)^2 v_1^2 - h^2}$.

Если $v_1 < v_2$, то для этих двух сред будет существовать угол полного отражения $\bar{\varphi}$, такой, что при $\varphi > \bar{\varphi}$ соответствующие лучи остаются в первой среде. Этот угол можно найти из соотношения $\delta \sin \bar{\varphi} = 1$. Равенство $\bar{\varphi} = \varphi_{\max}$ будет достигаться, если имеет место соотношение

$$\left(\frac{h}{tv_1} \right)^2 + \left(\frac{v_1}{v_2} \right)^2 = 1, \text{ то есть при}$$

$$t - T_0 = \bar{t} = \frac{\delta \cdot h}{\sqrt{v_2^2 - v_1^2}}.$$

Таким образом, в этом случае

$$\varphi \in \begin{cases} \left(-\arccos \frac{h}{tv_1}, \arccos \frac{h}{tv_1} \right) & \text{при } T_0 + \frac{h}{v_1} < t < \bar{t} + T_0, \\ \left(-\arcsin \frac{v_1}{v_2}, \arcsin \frac{v_1}{v_2} \right) & \text{при } t > \bar{t} + T_0. \end{cases}$$

При $T_0 + \frac{h}{v_1} < t < \bar{t} + T_0$ полуширина фронта волны равна $\sqrt{(t-T_0)^2 v_1^2 - h^2}$, а при $t > \bar{t} + T_0$ она равна $v_2(t-T_0) - h\sqrt{\delta^2 - 1}$.

МЕТОД ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ

Для приближенного решения задачи локации при фиксированном значении времени t аппроксимируем кривую, заданную уравнением (1) параболой. Параболу будем строить по трем точкам: двум точкам пересечения кривой с осью OY и точкой, которая соответствует углу $\varphi = 0$. Эти точки имеют координаты:

$$\left(r - \sqrt{(t-T_0)^2 v_1^2 - h^2}; 0 \right), \left(r + \sqrt{(t-T_0)^2 v_1^2 - h^2}; 0 \right), \left(r; -v_2 \left(t - T_0 - \frac{h}{v_1} \right) \right).$$

Уравнение соответствующей параболы имеет вид

$$y = \frac{v_2 x^2}{v_1((t-T_0)v_1 + h)} - \frac{2v_2 x r}{v_1((t-T_0)v_1 + h)} + \frac{v_2(r^2 + h^2 - (t-T_0)^2 v_1^2)}{v_1((t-T_0)v_1 + h)}. \tag{2}$$

Для проверки точности аппроксимации были проведены численные эксперименты. Их результаты показали, что такая аппроксимация будет хорошей, если δ близко к 0,75 (рис. 2).

Подставляя в (2) координаты приемников и время получения сигнала, получим систему

$$\omega = \frac{v_2 x_i^2}{v_1((t_i - t_o)v_1 + h)} - \frac{2v_2 x_i r}{v_1((t_i - t_o)v_1 + h)} + \frac{v_2(r^2 + h^2 - (t_i - t_o)^2 v_1^2)}{v_1((t_i - t_o)v_1 + h)}, i = \overline{1, n} \tag{3}$$

для определения неизвестных. Так как неизвестных три, то уравнений (а, следовательно, и количество приемников) должно быть не менее трех. На практике для повышения точности применяют более трех приемников. В этом случае в связи с неточностями измерений система (3) будет, скорее всего, несовместной.

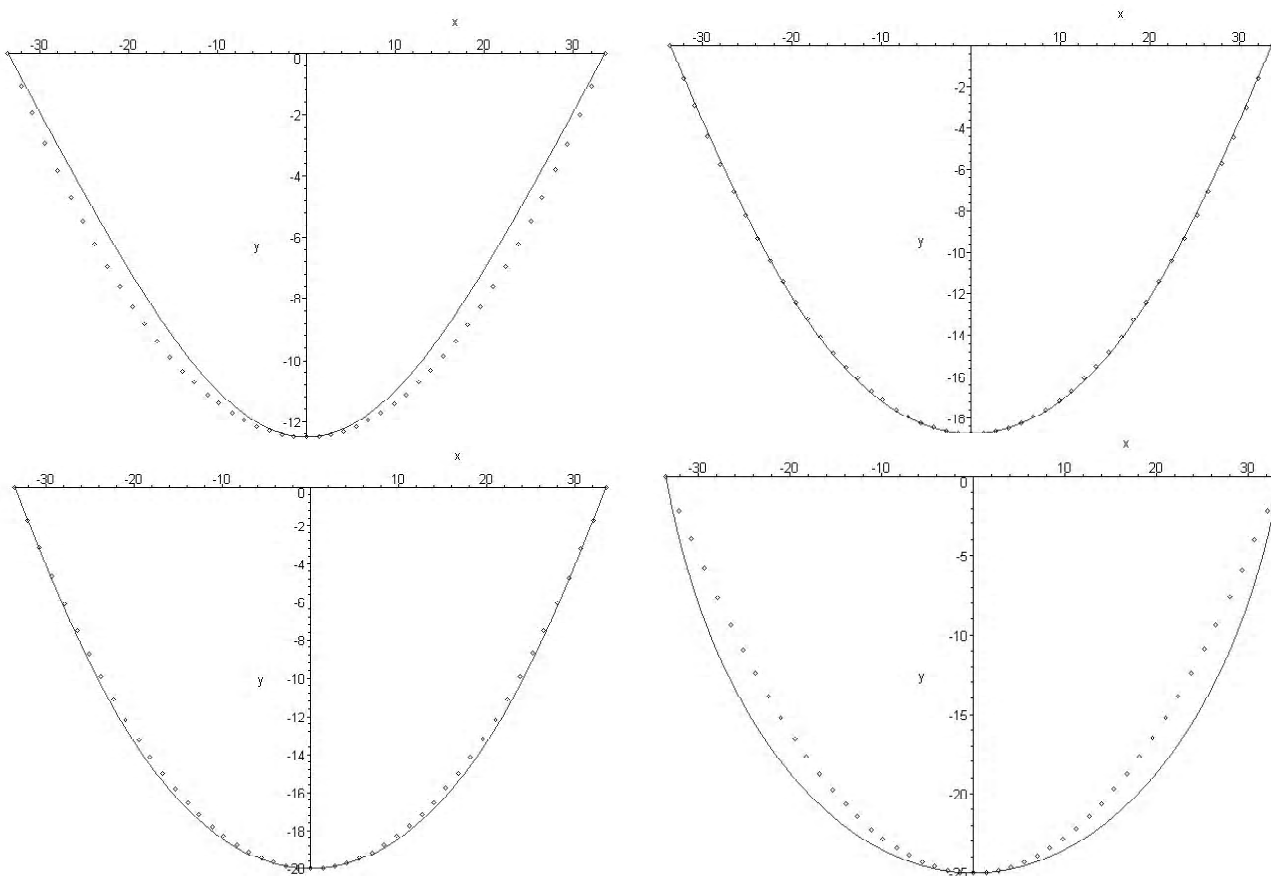


Рис. 2. Сравнение фронта волны во второй среде с параболой для случаев $\delta = 0,5; 0,75; 0,8; 1$ соответственно

Введем в рассмотрение третью ось, по которой будем откладывать время t , и рассмотрим геометрическое место точек, которые в этом пространстве образуют фронт волны. Это множество описывается уравнением

$$\omega v_1((t - T_0)v_1 + h) = v_2 x^2 - 2v_2 x r + v_2(r^2 + h^2 - (t - T_0)^2 v_1^2). \quad (4)$$

Перепишем его в виде

$$\alpha x + \beta t + \gamma = v_2 x^2 - v_2 v_1^2 t^2 - \omega v_1^2 t, \quad (5)$$

где

$$\alpha = 2v_2 r, \beta = -2v_2 v_1^2 T_0,$$

$$\gamma = h\omega v_1 - T_0 \omega v_1^2 - v_2(r^2 + h^2 - T_0^2 v_1^2) \quad (6)$$

Для определения параметров α, β, γ составим функцию невязки

$$G(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\alpha x_i + \beta t_i + \gamma - v_2 x_i^2 + v_2 v_1^2 t_i^2 + \omega v_1^2 t_i)^2 \rightarrow \min.$$

Находя частные производные и приравнявая их к нулю, получим систему линейных уравнений

$$\begin{cases} \alpha \sum_{i=1}^n x_i^2 + \beta \sum_{i=1}^n t_i x_i + \gamma \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n v_2 x_i^3 - x_i t_i^2 v_1^2 v_2 - \omega v_1^2 t_i x_i, \\ \alpha \sum_{i=1}^n t_i x_i + \beta \sum_{i=1}^n t_i^2 + \gamma \sum_{i=1}^n t_i + \delta \sum_{i=1}^n t_i = \sum_{i=1}^n v_2 x_i^2 t_i - t_i^3 v_1^2 v_2 - \omega v_1^2 t_i^2, \\ \alpha \sum_{i=1}^n x_i + \beta \sum_{i=1}^n t_i + \gamma \cdot n = \sum_{i=1}^n v_2 x_i^2 - t_i^2 v_1^2 v_2 - \omega v_1^2 t_i. \end{cases} \quad (7)$$

Решив ее, найдем искомые величины r, h, T_0 по формулам

$$r = \frac{\alpha}{2v_2}, \quad T_0 = \frac{\beta}{-2v_2 v_1^2},$$

$$h = \frac{v_1 \omega + \sqrt{v_1^2 \omega^2 - 4v_2(-v_2 T_0^2 v_1^2 + \gamma + T_0 \omega v_1^2 + v_2 r^2)}}{2v_2}, \quad (8)$$

которые есть следствиями соотношений (6).

ПРИМЕР РАСЧЕТА

Приведем пример решения модельной задачи. Пусть имеется двухслойная среда, линия раздела которой есть прямая $y = 0$. В момент времени $T_0 = 0$ источник, который находится в точке с координатами $r = 0, h = 10$, генерирует волну. Скорость движения в среде $y > 0$ равна $v_1 = 5$, а в среде $y < 0$ равна $v_2 = 3,76$. На прямой $y = \omega = -4$ находятся пять датчиков, которые фиксируют время прихода волны с точностью до 0,001. Зададим углы падения

$$\varphi_1 = \frac{\pi}{30}, \varphi_2 = \frac{\pi}{20}, \varphi_3 = \frac{\pi}{10}, \varphi_4 = -\frac{\pi}{15}, \varphi_5 = -\frac{\pi}{25}.$$

Из соотношений (1) найдем t_i, x_i для каждого из пяти датчиков:

$$t_i = \frac{4}{v_2 \sqrt{1 - \frac{v_2^2 \sin^2(\varphi_i)}{v_1^2}}} + T_0 + \frac{h}{v_1 \cos(\varphi_i)},$$

$$t_1 \approx 3,079, t_2 \approx 3,095, t_3 \approx 3,198, t_4 \approx 3,121, t_5 \approx 3,085,$$

$$x_i = x_0 + y_0 \operatorname{tg}(\alpha_i) + v_2 \left(t_i - t_0 - \frac{y_0}{v_1 \cos(\alpha_i)} \right) \frac{v_2}{v_1} \sin(\alpha_i),$$

$$x_1 \approx 1,366, x_2 \approx 2,058, x_3 \approx 4,206, x_4 \approx -2,759, x_5 \approx -1,643.$$

После подстановки числовых данных система (7) приобретает вид

$$\begin{cases} 34,103286\alpha + 10,346718\beta + 3,228\gamma = -2683,917198, \\ 10,346718\alpha + 48,544336\beta + 15,578\gamma = -12845,27950, \\ 3,228\alpha + 15,578\beta + 5\gamma = -4122,669751. \end{cases}$$

Ее решение $\alpha = -0,05793, \beta = -70,684, \gamma = -604,272$. Воспользовавшись соотношениями (3.20), находим искомое время генерации сигнала $T_0 = 0,3760388800$ и координаты источника $r = -0,00770469, h = 10,80661270$. Сравнивая с заданными величинами видим, что достигается удовлетворительное совпадение.

Для увеличения точности локации нужно или увеличивать количество датчиков, либо повысить их точность. Так, если в рассматриваемой задаче увеличить точность датчиков до 0,0001, то после вычислений получим такие результаты $T_0 = 0,3634145200, r = -0,001222270000, h = 10,85892864$.

Если точность оставить равной 0,001, но добавить датчик в точке, которая соответствует углу $\varphi_6 = \frac{\pi}{35}$ ($t_6 \approx 3,0744, x_6 \approx 1,1702$), то получим следующее решение $T_0 = 0,3643721200, r = -0,000933660000, h = 10,85497575$.

Для случаев, когда датчики расположены не на одной прямой, данный метод локации, основанный на аппроксимации фронта волны во второй среде параболой, можно обобщить, что и планируется авторами в дальнейшем. Для случаев, когда коэффициент преломления существенно отличается от 0,75, по всей видимости, нужно применять другие аппроксимации.

ВЫВОДЫ

В статье в двумерной постановке изучается процесс движения фронта волны, создаваемой точечным источником. Источник расположен в одном из слоев двухслойной среды с прямолинейной границей раздела сред. Целью является определение положения источника излучения и времени начала излучения по данным датчиков, расположенных во второй среде на одной прямой, параллельной границе раздела сред. Считается, что датчики позволяют определить только время прихода сигнала.

При отношении скоростей распространения сигнала в слоях, близком к 0,75, показано, что фронт волны можно хорошо аппроксимировать параболой. Предлагается способ идентификации параметров, определяющих эту параболу, который сводится к решению системы линейных уравнений. По этим характеристикам восстанавливается положение источника и время излучения. Указывается, что датчиков может быть произвольное количество, но не менее трех.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Бреховских, Л. М. Акустика слоистых сред / Л. М. Бреховских, О. А. Годин. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. – 1989. – 416 с.
2. Бузуверов, Г. В. Алгоритмы пассивной локации в распределенной сети датчиков по разностно-дальномерному методу / Г. В. Бузуверов, О. И. Герасимов // Информационно-измерительные и управляющие системы. – 2008. – № 5. – С. 12–24.
3. Горицкий, Ю. А. Разнесенные измерительные системы: локация групповых объектов/ Горицкий Ю. А. // *Exponenta Pro. Математика в приложениях.* – 2003. – № 2. – С. 47–57.

Величко О. В.

Канд. фіз.-мат. наук, доцент, Таврійський державний агротехнологічний університет, Україна

ЛОКАЦІЯ В ДВОШАРОВОМУ СЕРЕДОВИЩІ ЗА ДОПОМОГОЮ СПРОЩЕНИХ ДАТЧИКІВ

В статті в двовимірній постановці вивчається процес руху фронту хвилі, яка генерується точковим джерелом. Джерело розташовано в одному із шарів двошарового середовища з прямолінійною межею розділу середовищ. Метою є визначення положення джерела випромінювання та часу початку випромінювання за даними датчиків, розташованих в другому середовищі на одній прямій, яка паралельна межі розділу. При відношенні швидкостей близькому до 0,75, задача зведена до розв'язування системи лінійних рівнянь. Наведено приклад розрахунку.

Ключові слова: задача локації, двошарове середовище, апроксимація, фронт хвилі, спрощений датчик.

Velichko H. V.

Candidate of Physico-mathematical Sciences, PhD Associate Professor, Taurida State University of Agrotechnological, Ukraine

LOCATION IN THE TWO-LAYER MEDIUM WITH THE HELPOF SIMPLIFIED DETECTORS

The article deals with the process of the wave front motion in two dimensions. The point source, which creates the wave, is situated in one of the layers of two-layer medium with the straight-line boundary between the mediums. The objects of the article are the location of the emitting source and the determination of the starting time of the emission, with the help of the data, given by the detectors. The detectors are situated in the second medium on the straight-line, which is parallel to the boundary between mediums. It is assumed that the detectors determine only the time of arrival. For the case when the ratio between the signal propagation speeds in the layers is approximately equal to 0,75, it is shown that the wave front can be approximated by the parabola. The proposed technique of the identification of the parameters, which define the parabola, reduces itself to the solution of the system of the linear equations. The position of the source and the time of the emission are determined with the help of these characteristics. It is assumed that one may use any number of the detectors, but not less than three. The numerical example has been given.

Keywords: location problem, two-layer medium, approximation, wave front, simplified detector.

REFERENCES

1. Brehovskih L. M., Godin O. A. Akustika sloistyh sred. Moscow, Nauka, Gl. red. fiz.-mat. lit, 1989, 416 p.
2. Buzuverov G. V., Gerasimov O. I. Algoritmy passivnoj lokacii v raspredelennoj seti datchikov po raznostno-dal'nomernomu metodu. *Informacionno-izmeritel'nye i upravljajushhie sistemy*, 2008, No. 5, pp. 12–24.
3. Gorickij Ju. A. Raznesennye izmeritel'nye sistemy: lokacija gruppovyh ob'ektov. *Exponenta Pro. Matematika v prilozhenijah*, 2003, No. 2, pp. 47–57.
4. Karavaev V. V., Sazonov V. V. Statisticheskaja teorija passivnoj lokacii [Tekst]. Moscow, Radio i svjaz', 1987, 237 p.
5. Chernjak V. S. Mnogopozicionnaja radiolokacija. Moscow, Radio i svjaz', 1993, 416 p.

4. *Karavaev, V. V.* Статистическая теория пассивной локации [Текст] / В.В. Караваев, В.В. Сазонов. – М.: Радио и связь, 1987. – 237 с.
5. *Черняк, В. С.* Многопозиционная радиолокация/ Виктор Соломонович Черняк. – М.: Радио и связь, 1993. – 416 с.
6. *Величко, О. В.* Розв'язок задачі локації в області з прямолінійною частиною межі / О. В. Величко, А. Г. Кривохата // *Вісник ТДТУ.* – 2009. – Т. 14. – № 4. – С. 127–131.
7. *Матковский, А. П.* Вычисление координат излучателя по измеренным временным задержкам // *Методы и средства анализа пространственно-временных полей: сб. науч. тр.* – Львов: ВНИИМИУС, 1987. – С. 89–92.
8. *Давидович, М. В.* Обнаружение объектов в многослойной среде методом волноводного зонда // *Биомедицинская радиоэлектроника. Биомедицинские технологии и радиоэлектроника.* – 2009. – №6. – С. 69–77.
9. *Яскевич, С. В.* Локация событий с одновременным уточнением параметров модели двухслойной среды, для случая, когда расстановка приемников пересекает границу / С. В. Яскевич, Ф. Андерссон, А. А. Дучков // *Интерэкспо гео-сибирь.* – 2011. – Т.2. – № 1. – С. 54–58.

Стаття надійшла до редакції 14.01.2012.

Після доробки 28.01.2012.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ ДЛЯ ИМС С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ИЗОЛЯЦИЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ

В работе оптимизированы процессы селективной эпитаксии слоев кремния на структурах Si-SiO₂-Si*, процессы формирования диэлектрической изоляции и диффузионных областей комплементарных биполярных транзисторных структур. При формировании диэлектрической изоляции элементов ИМС проводится окисление границы между эпитаксиальными слоями эпитаксиального Si и эпитаксиального Si*, расположенной под углом 55° к поверхности. В этом случае градиент механических напряжений направлен или к краевой области объема моно-Si или в объем слоя эпитаксиального Si* и образование механических напряжений достаточных для генерации дефектов в слое эпитаксиального Si не происходит. При толщине эпитаксиальной пленки 3,0–4,0 мкм характеристики комплементарных транзисторов составили величины $U_{ке} > 20$ В и $\beta \geq 60$.

Ключевые слова: комплементарные биполярные транзисторы, диэлектрическая изоляция, селективная эпитаксия, ток утечки.

В настоящее время количество полупроводниковых приборов и интегральных схем, изготавливаемых на структурах кремния на изоляторе (КНИ) увеличивается по степенной зависимости. Для изготовления структур КНИ применяют различные технологические маршруты. При этом используются такие процессы как рекристаллизация слоя кремния, формирование изолирующего слоя с помощью окисления пористого кремния, молекулярно-лучевая эпитаксия на пористом кремнии, имплантация ионов кислорода (азота) в кремниевую подложку, сращивание кремниевых пластин с формированием тонкого изолированного слоя кремния. Smart-cut технология, например, включает такие технологические процессы как имплантация ионов водорода (приборная пластина), активация поверхности и сращивания приборной и опорной пластин кремния, отжиг кремниевых пластин при температуре 450°C, стимулирующий образование структурных нарушений, по слою которых производится скалывание и полирование кремния.

В статье рассматривается метод изготовления структур КНИ, который, не получив широкого распространения, тем не менее является интересным для разработки и изготовления специализированных схем, микромеханических устройств и датчиков [1–5].

Необходимость получения малых значений величин токов утечки ИМС $I_0 < 10 \dots 100$ мкА, высокой частоты обмена сигналами информации, высоких коэффициентов усиления ($\beta \geq 60$) сигналов разной полярности и больших импульсных токов коллектора ($I_k = 0,5$ А) биполярных транзисторов в активном режиме обуславливает необходимость разработки конструкции и технологии формирования комплементарных вертикальных транзисторов с обеспечением указанных характеристик.

При разработке радиационно-стойких ИМС с малыми токами утечек возможно применение кремниевых структур с диэлектрической изоляцией (КСДИ). Технология формирования КСДИ с использованием толстых пленок Si* из-за образования механических напряжений

ограничена использованием подложек диаметром 76 мм. По такой технологии достаточно сложно получить транзисторные структуры ИМС в слоях кремния толщиной 2–4 мкм. Возможность технологического формирования и использование слоев кремния с определенными параметрами и толщиной в 2–4 мкм при отсутствии многократной перекомпенсации примесей было достигнуто за счет объединения технологии КСДИ с технологией «ЛОКОС» [1]. При этом за счет точного управления процессом эпитаксии на пластинах КСДИ формировались слои монокристаллического эпитаксиального кремния необходимой толщины. Создание указанных структур позволило разработать ИМС на основе комплементарных вертикальных транзисторных структур с диэлектрической изоляцией с требуемыми частотными и вольт-амперными характеристиками. Оптимизация маршрута изготовления структур, рассмотренных в работе [1], позволила улучшить параметры комплементарных транзисторов и разрабатываемых на их основе ИМС.

Целью данной работы является оптимизация технологии и конструкции комплементарных транзисторов с диэлектрической изоляцией с $U_{ке} \geq 20$ В, импульсными токами в прямом направлении питания 0,5 А через один из транзисторов, с токами утечки ИМС менее 100 мкА при температуре 125°C.

Основная часть исследований. Технология изготовления структур с вертикальными комплементарными транзисторами опробовалась при изготовлении ИМС передатчика и 2-канального дифференциального приемника сигналов в коде «с возвращением к нулю» (RZ по отраслевому стандарту «ARNIC-429»).

Назначение предложенной системы передачи сигналов – реализация физического уровня межприборного интерфейса бортового пилотажно-навигационного комплекса. Система обеспечивает обмен цифровой информацией в широком диапазоне скоростей передачи с восстановлением на приемном конце импульсов синхронизации. В качестве линейного кода выбран код RZ, что

обеспечивает восстановление импульсов синхронизации непосредственно из входного информационного потока. Разновидность кода – двухфазный с передачей по физической линии «витая пара в экране» с волновым сопротивлением 400 Ом. Свойства трехуровневого кода с возвращением к нулю в варианте двухфазного передатчика, который работает на симметричную линию «витая пара в экране», и дифференциального приемника, разрешают решить многие проблемы, которые возникают при применении других кодов. Для уменьшения уровня приведенных напряжений в других цепях при общей прокладке коммуникаций на борту информационные импульсы имеют симметричную трапецевидную форму, при этом уменьшаются как емкостные наводки на другие цепи, так и электромагнитные поля, которые возникают при передаче информационных импульсов. Соответственно, уменьшается уровень наводок в линии от внешних электромагнитных полей, что и определяет повышенную помехоустойчивость систем передачи информации, построенных по данной идеологии. Так, например, в ходе испытаний на надежность разработанных микросхем неоднократно подтверждалась величина вероятности ошибок менее чем 10^{-9} в условиях имитации реальных условий работы на борту (от параметров сети энергоснабжения и электромагнитной обстановки). Высокую оценку получили и такие свойства систем, как стойкость при влиянии грозных разрядов.

Подготовка структур к эпитаксии. На исходных пластинах Si(100) p-типа проводимости листовым легированием формировались области p^{+}_{cc1} скрытого слоя p-n-p-транзисторов. КСДИ получали путем травления в горячей щелочи KOH канавок на глубину 14–15 мкм, окисления структур, осаждения пленки поликристаллического кремния толщиной 270 мкм, полирования монокристаллического кремния до вскрытия канавок. На поверхнос-

ти КСДИ формируют скрытые слои p^{+}_{cc2} и n^{+}_{cc} . Скрытый слой p^{+}_{cc2} формируют диффузией бора в областях глубокого коллектора p-n-p-транзисторов, а n^{+}_{cc} формируют диффузией или ионным легированием сурьмы.

Исследование процессов эпитаксии. При разработке ИМС проводилось исследование процессов локальной эпитаксии монокристаллического кремния с формированием локальной изоляции «ЛОКОС», которая соединяется с диэлектрической изоляцией КСДИ. Эпитаксия монокристаллического кремния проходит селективно в областях монокристаллического кремния Si. В процессе локальной эпитаксии [1] формировалась пленка монокристаллического кремния n-типа проводимости, легированная примесями фосфора с удельным сопротивлением 2 Ом·см. Эволюция рельефа поверхности в различных областях КСДИ изучалась при помощи растровой электронной микроскопии [1]. На рис. 1 показаны схемы структур ИМС после эпитаксии и формирования локальной боковой изоляции, которая срастается с объемной изоляцией КСДИ. В областях над карманами из монокристаллического кремния Si (100) формируется эпитаксиальный монокристаллический кремний (эпи-Si). Над областями из Si^{*} и SiO_2 изоляции первого уровня осаждается эпитаксиальный поликристаллический кремний эпи- Si^{*} . При температуре эпитаксии 1050°C толщина эпи- Si^{*} представляет величину от $H_0/2$ до $2H_0/3$, где H_0 толщина эпи-Si. Уменьшение толщины Si^{*} наблюдается на границе с монокристаллическим кремнием и в областях с большой плотностью монокристаллического эпи-Si, что можно объяснить концентрационными отличиями газовых потоков вследствие преобладающей скорости роста эпи-Si в направлении [100]. Толщина эпитаксиального кремния над областями окисла кремния изоляции подложки КСДИ составляет $\sim 1/3H_0$ толщины эпитаксиального монокристаллического кремния. Исследования кинетики селектив-

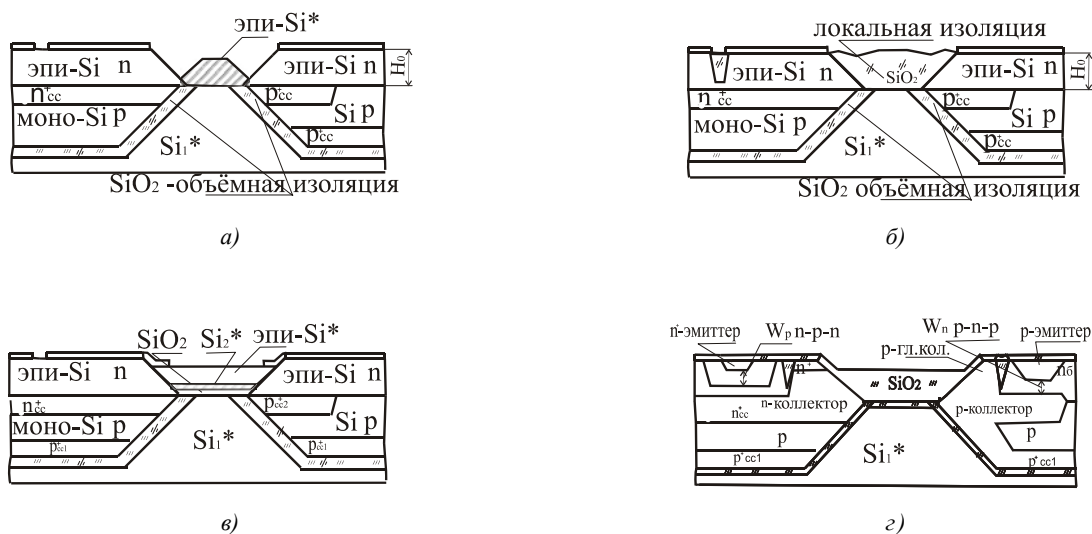


Рис. 1. Схема структур: а) формирование эпитаксиальных пленок поликристаллического кремния с W-подобным рельефом; б) формирование локальной изоляции; в) формирование эпитаксиальных пленок поликристаллического кремния с дополнительными пленками SiO_2 и Si_2^{*} ; г) структура комплементарных транзисторов

ных процессов осаждения эпитаксиального кремния на структурах КСДИ в зависимости от температуры и состава рабочей смеси приведены в работе [1] на основании которых выбран режим эпитаксии при 1050°C. Скорость роста пленки составляет 100 нм/мин.

При температуре эпитаксии в 1050°C формирование эпитаксиального кремния на поверхности SiO₂ объемной изоляции происходит в основном за счет роста и увеличения объема от соседних боковых поверхностей поликристаллического кремния с одной стороны и монокристаллического кремния с противоположной стороны (рис. 1, а). Вследствие наличия двух областей SiO₂, разграниченных Si* и кинетических отличий роста пленок эпитаксиального поликристаллического кремния Si* над разными материалами в области изоляции КСДИ структур, при эпитаксии формируется W-подобный рельеф поверхности [1–3]. Впадины W-подобного рельефа формируются над областями SiO₂ (рис. 1). Такой рельеф при толщине пленки ≤ 2 мкм позволяет проводить процесс окисления и формирования SiO₂ локальной изоляции без дополнительного формирования углублений.

Количество создаваемых дефектов, как при эпитаксии и формировании локальной изоляции, так и при формировании транзисторных структур является минимальным по сравнению с другими известными методами формирования КНИ структур, которые рассмотрены в табл. 1.

При локальном эпитаксиальном росте монокристаллического кремния образующаяся развитая граница карманов является геттером, который поглощает имеющиеся или зарождающиеся кристаллографические дефекты. В дальнейшем планируется применение разработанных технологий на структурах, на которых устраняется или значительно уменьшается образование механических напряжений, что позволит снять ограничения по диаметру подложек.

В разработанной технологии эпитаксиальный рост областей монокристаллического кремния происходит локально и с наклоном в 55°, а рост областей поликристаллического кремния происходит путем встраивания частиц эпитаксиального кремния (эпимоно-Si), что обеспечивает формирование области сращивания с относительно малыми механическими напряжениями. Последующее окисление границы раздела пленок эпимоно-Si и эпитаксиального кремния при формировании локальной боковой изоляции элементов и ее сращивание с объемной изоляцией основания из КСДИ позволяет формировать

полную изоляцию элементов в тонкой эпитаксиальной пленке. Окисляемая граница эпимоно-Si и эпитаксиального кремния расположена под углом и градиент механических напряжений направлен или к поверхности или в объем пленки эпитаксиального кремния. При этом релаксация механических напряжений происходит в менее прочной и более быстро окисляемой пленке эпитаксиального кремния. Это позволяет уменьшить величину механических напряжений, возникающих при росте локальной пленки термического окисла кремния, и устранить на этом этапе генерацию кристаллографических дефектов. При росте эпитаксиальной пленки также отсутствует образование дефектов с глубокими энергетическими уровнями в запрещенной зоне.

Технология формирования ИМС с диэлектрической изоляцией, полученная за счет объединения разных технологий, позволила достигнуть величины токов утечки ИМС на уровне или менее единицы микроампера. Малый уровень токов утечки обеспечивается малой концентрацией исходных дефектов после эпитаксии и наличием условий, которые приводят к уменьшению генерации дефектов, которые обычно образуются во время формирования локальной изоляции из окисла кремния.

С целью расширения технологических и конструктивных возможностей создавались структуры с увеличенной толщиной слоя эпитаксии до 2,8–4,0 мкм. Перед эпитаксией в области изоляции создавались дополнительные пленки окисла кремния и поликристаллического кремния как это показано на рис. 1, в [1]. Защита поликристаллическим кремнием поверхности пленки SiO₂ позволяет проводить осаждение эпитаксиальной пленки более равномерно. При толщине пленки эпитаксиального кремния 2,0 мкм проводят ее травление на глубину в 1,0 мкм. Травление канавок эпитаксиального кремния осуществляют в КОН. Травление селективно по отношению к боковым поверхностям эпимоно-Si. Одновременно формируют канавки под спейсеры, отделяющие области глубокого коллектора и базы транзисторов на поверхности эпимоно-Si, что позволяло уменьшить поверхностные междоэлементные расстояния и площадь кристалла в целом. При травлении и окислении используют маску из пленок нитрида и окисла кремния, причем маска может закрывать края областей эпитаксиального кремния на толщину окисления.

Формирование локальной изоляции проводилось на установке «Термоком» при температуре 1000°C и давлении 10 атм, при этом учитывалось, что скорость окисления эпитаксиального кремния превышает скорость окисления эпимоно-Si. Формирование в области локальной изоляции перед

Таблица 1. Сравнение дефектности КСДИ структур, формируемых разными технологиями

Параметры	Simox (имплантация кислорода, формирование скрытой изоляции SiO ₂)	Smart-cut (имплантация протонов, сращивание, термообработка и скалывание Si)	Eltran (сращивание пластин Si)	Эпитаксия на КСДИ, локальное окисление слоя эпитаксиального кремния
Плотность дефектов, см ⁻² : – в приборном слое; – в слое изоляции.	10 ⁴ –10 ⁶ >10 ¹	< 10 ² <0,1	< 10 ² <0,1	<10 <0,1
Максимальный диаметр, мм	100–300	100–300	100–300	76

эпитаксией пленки SiO₂ и Si* позволяет за счет выбора необходимой толщины дополнительной пленки SiO₂ корректировать уровень поверхности локального SiO₂ изоляции ИС относительно уровня поверхности эпи-Si [4].

В ходе эпитаксиального роста кремния рассматривались процессы автолегирования и обратной диффузии примеси, которые определяют итоговую толщину слаболегированной пленки и влияют на значение напряжения $U_{ке}$. Для рассматриваемых удельных сопротивлений структур для р-п-р-транзисторов в незначительной степени характерны процессы обратной диффузии фосфора, что вместе с возможностью формирования углубленного скрытого слоя p^{+}_{cc1} позволяет формировать структуры со значительной величиной $U_{ке}$. Процессы автолегирования имеют важное значение для получения $U_{ке}$ n-р-п-транзисторов. Эти значения $U_{ке}$ можно улучшить путем корректировки распределения легирующей примеси скрытого слоя, например, для процессов ионного легирования сурьмой с энергией ионов $E \geq 150$ кэВ.

При разработке и оптимизации процесса эпитаксии были определены следующие параметры эпитаксиальной пленки и технологического процесса: толщина 3,0–4,0 мкм, удельное сопротивление 2,0 Ом·см, температура процесса 1050°C, скорость роста 100 нм/мин.

Формирование комплементарных транзисторов. На рис. 2 показана конструкция р-п-р- транзистора, а на рис. 3 показана конструкция n-р-п- транзистора.

Конструкция вертикальных транзисторов (рис. 1–3) предусматривает формирование для р-п-р-транзисторов глубоких коллекторов, диффузионные области которых формируют автолегированием примеси бора из скрытого слоя p^{+}_{cc2} и поверхностного легирования эпитаксиального кремния из газовой фазы. Для уменьшения сопротивления и времени диффузии возможно использование приповерхностных боковых поверхностей области эпимоно-Si [4].

Конструкция р-п-р-транзисторов предусматривает формирование базы в слое кремния эпитаксиальной пленки, а для формирования базы n-р-п- транзисторов используется более низкоомные области легированного бором кремния. Временное моделирование высокотемпературных технологических процессов осуществлялось таким образом, чтобы к окончанию разгонки эмиттеров транзисторов происходило соединение примеси исходного скрытого p^{+} -слоя с примесью поверхностного p^{+} -слоя, которые совместно создают область глубокого коллектора р-п-р-транзистора. Концентрации примесей, геометрические размеры базовых областей и эмиттеров транзисторов обеспечивали необходимые пробивные, усилительные и мощностные характеристики транзисторов.

Формирование эмиттерных областей необходимо проводить с максимально высокой концентрацией легирующих примесей для обеспечения максимальных значений коэффициентов инжекции, что позволяет получить высокие значения коэффициентов усиления. Для получения высокой концентрации легирующей примеси бора при формировании эмиттеров р-п-р-транзисторов исследовались различные процессы загонки и раз-

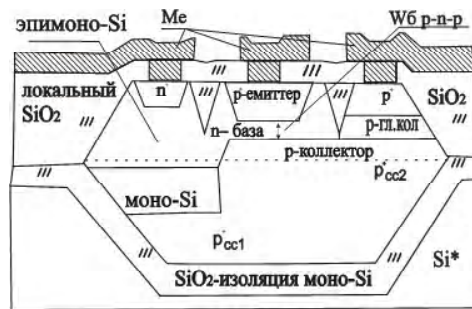


Рис. 2. Схема расположения слоев р-п-р- транзистора

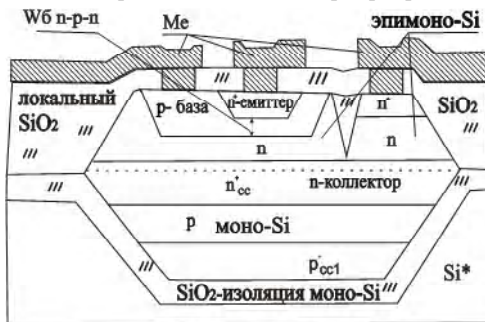


Рис. 3. Схема расположения слоев n-р-п- транзистора

гонки примеси. Опробовались различные газообразные борсодержащие диффузенты, твердые источники диффундирующей примеси в виде пластин нитрида бора, а также применялись процессы ионного легирования. Хорошие результаты были получены для процессов диффузии из трехфтористого бора и из твердых источников. Наиболее воспроизводимые и в то же время высокие значения коэффициентов усиления р-п-р-транзисторов были получены для структур с ионным легированием. Подобная оптимизация технологических процессов проводилась и при диффузии примеси фосфора для процессов формирования эмиттеров n-р-п- транзисторов. В этом случае хорошая воспроизводимость и необходимые коэффициенты усиления достигнуты для технологии диффузии с применением треххлористого фосфора.

При формировании ИМС применялись процессы ионного легирования р- эмиттеров ионами бора дозой в 1400 мкКл/см² на образец. При разгонке бора получены коэффициенты усиления р-п-р-транзисторов $\beta_{p-n-p} = 60$ и пробивные напряжения $U_{ке} \geq 25$ В. Применение ионного легирования р-эмиттеров позволило улучшить характеристики транзисторов, рассматривавшихся ранее в работе [1]. При формировании эмиттера n-р-п-транзистора применялся отжиг при температуре 950°C в течение 10 минут. После этого проводилось вскрытие контактных окон и последующие операции для формирования металлизации и ее защиты.

Основными критериями при оптимизации технологии изготовления транзисторов являлись значения пробивного напряжения коллектор-эмиттер $U_{ке}$ не менее 20 В. По результатам оптимизации технологического маршрута с учетом описанных выше технологических особенностей были получены следующие характерис-

тики транзисторів: для p-n-p-транзистора: $U_{ке} \geq 25$ В, $\beta \geq 100$; для p-n-p-транзистора: $U_{ке} \geq 25$ В, $\beta \geq 60$.

Выводы. В результате оптимизации разработанной технологии получены ИМС с диэлектрической изоляцией где величины пробивных напряжений и коэффициентов усиления при толщине эпитаксиальной пленки 3,0–4,0 мкм для p-n-p- и n-p-n-транзисторов составили $U_{ке} > 20$ В и $\beta \geq 60$. При максимальном импульсном коллекторном токе 0,5 А получены величины токов утечки функционирующих ИМС на уровне единицы микроампера при температуре 125°C.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Горбань, А. Н. Разработка конструкции и технологии комбинированных транзисторов для радиационноустойчивых ИС / А. Н. Горбань, В. В. Кравчина // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – № 3. – 2011. – С. 23–27.
2. Способ изготовления кремниевых структур с диэлектрической изоляцией: а.с. № 1616445 СССР, МКИ H01L 21/76 / Липко В. А., Макаренко Л. В., Трещун А. П.,

Горбань А. Н.¹, Кравчина В. В.²

¹Д-р фіз.-мат. наук, професор, Класичний приватний університет, Україна

²Канд. техн. наук, доцент Запорізька державна інженерна академія, Україна

ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ КОМПЛЕМЕНТАРНИХ ТРАНЗИСТОРІВ ДЛЯ ІМС З ДІЕЛЕКТРИЧНОЮ ІЗОЛЯЦІЄЮ ЕЛЕМЕНТІВ

У роботі оптимізовані процеси селективної епітаксії шарів кремнію на структурах Si-SiO₂-Si*, процеси формування діелектричної ізоляції і дифузійних областей комплементарних біполярних транзисторних структур. При формуванні повної діелектричної ізоляції елементів ІМС проводиться окислювання межі між епітаксійними шарами епімоно-Si і епі-Si*, розташованої під кутом 55° до поверхні. У цьому випадку градієнт механічних напруг спрямований або до крайової області об'єму моно-Si або до об'єму шару епі-Si і утворення механічних напруг достатніх для генерації дефектів у шарі епімоно-Si не відбувається. При товщині епітаксійної плівки 3,0–4,0 мкм характеристики комплементарних транзисторів склали величини $U_{ке} > 20$ В і $\beta \geq 60$.

Ключові слова: комплементарні біполярні транзистори, діелектрична ізоляція, селективна епітаксія, струм просочування.

Gorban A. N.¹, Kravchina V. V.²

¹Doctor of science, professor Classical private university, Ukraine

²Associate professor the chair of FBME, doctor of science, Zaporozhye state engineering academy, Ukraine

FEATURES OF FORMATION OF BIPOLAR TRANSISTOR FOR IC WITH DIELECTRIC ISOLATION OF ELEMENTS

The processes of a selective epitaxy of silicon layers on the structures Si-SiO₂-Si*, formation of dielectric isolation and diffusive areas of complementary bipolar transistor structures are optimized in the work. Complete dielectric isolation of elements IC in episilicon is reached at the expense technology of the structures Si-SiO₂-Si* association with the LOCOS technology. Oxidation of the border between layers epimono-Si and epi-Si* is formatted of complete dielectric isolation of elements IC. In this case the border is located at an angle 55° to the surface. In this case the gradient of mechanical tension is directed either to regional area of volume epimono-Si or to layer volume epi-Si* and appearance of mechanical tension, sufficient for emergence of defects in a layer epimono-Si doesn't happen. Processes of emitter-region diffusion are optimized, which increased the factor of injection of p-n-p-transistors and improved similarity of characteristics of complementary transistors. Epitaxy layers being 3,0–4,0 mcm thick, breakdown tension $U_{ce} \geq 20$ V and $\beta \geq 60$.

Keywords: complementary bipolar transistor, dielectric isolation, leak current, selective epitaxy.

REFERENCES

1. Gorban A. N., Kravchina V. V. Razrabotka konstrukcii i tekhnologii komplementarny'x tranzistorov dlia radionnostojkix IMS. *Tekhnologija i konstruirovanie v elektronnoj apparature*, 2011, No. 3. pp. 23–27.
2. Lipko V. A., Makarenko L. V., Treshun A. P., Kravchina V. V., Sineokij V. N. Sposob izgotovleniia kremnievy'x struktur s dielektricheskoi izoliaciej: patent № 1616445, Zaiavitel' i sobstvennik patenta OKB E2 Imis. zaiavl. 1988. opubl. 1990. biul. № 15, 1990.
3. Kostenko V. O., Kravchina V. V., Gomolskij D. M. Sposob izgotovleniia kremnievy'x struktur s kombinirovanoj dielektricheskoi izoliaciej komplementarny'x tranzistorov: patent na poleznuju model' № 1261524. Ukraina: MPK H01L 21/

Kravchina V. V., Sineokij V. N.; Zaiavitel' i sobstvennik patenta: OKB «Элмис». – заявл. 26.09.1988. опубл. 22.08.1990. бюл. №. 15. – 1990.

3. Способ изготовления кремниевых структур с комбинированной диэлектрической изоляцией комплементарных транзисторов: патент на полезную модель №27068, Украина, МКИ H01L 21/70 / Костенко В. О., Кравчина В. В., Гомольский Д. М.; заявитель и собственник патента: Запорожский национальный университет; заявл. 2006. опубл. 2007, бюл. № 16. – 2007.
4. Способ изготовления интегральных микросхем с комплементарными транзисторами Декларационный пат. 29594А Украина, H01L 21/76 / Горбань А. Н., Кравчина В. В., Костенко В. О.; Заявитель и собственник патента: Запорожский национальный технический университет. – заявл. 2003. опубл. 2004. бюл. № 8. – 2004.
5. Горбань, А. Н. Формирование полупроводниковых приборов на КНИ структурах / А. Н. Горбань, В. В. Кравчина // Матеріали І Міжнародної науково-практичної конференції «Актуальні проблеми прикладної фізики», АППФ-2012, 24–28 вересня, Севастополь, Україна. – С. 61–62.

Стаття надійшла до редакції 16.11.2012.

Після доробки 24.01.2013.

Дзензерский В. А.¹, Беда М. А.², Житник Н. Е.³, Плаксин С. В.⁴¹Д-р. техн. наук, директор, Институт транспортных систем и технологий НАН Украины «Трансмаг», Украина²Инженер I кат., Институт транспортных систем и технологий НАН Украины «Трансмаг», Украина,
E-mail: beda@westa-inter.com³Научный сотрудник, Институт транспортных систем и технологий НАН Украины «Трансмаг», Украина⁴Д-р. физ.-мат. наук, зав. отд., Институт транспортных систем и технологий НАН Украины «Трансмаг», Украина

МЕТОД ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ ОТКЛИКА ХИМИЧЕСКОГО ИСТОЧНИКА ТОКА НА ИМПУЛЬСНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

Предложен метод компьютерной обработки сигнала отклика химического источника тока на токовый импульс, в основе которого лежит нахождение координат точек, содержащих информацию о кинетике процесса, на предварительно сглаженном сигнале отклика и определение характеристических параметров химического источника тока.

Ключевые слова: химический источник тока, импульс, сигнал отклика, информационные точки, алгоритм сглаживания, фильтрация.

ВВЕДЕНИЕ

Импульсные методы диагностики и контроля технического состояния химических источников тока (ХИТ) получают дальнейшее развитие в связи с высокой информативностью и сравнительной простотой реализации [1]. Немаловажное значение имеет возможность совмещения функций нестационарных методов зарядки ХИТ с импульсными методами контроля их состояния, что упрощает реализацию адаптивного режима зарядки, который наиболее полно отвечает требованиям эксплуатации ХИТ [2].

В [3, 4] обоснована возможность определения параметров химического источника путем анализа сигнала отклика ХИТ на импульсное воздействие. Однако, обработка и анализ результатов измерений ручным методом очень трудоемки и не позволяют автоматизировать процесс контроля состояния ХИТ.

Задачей работы является разработка методов компьютерной обработки сигналов отклика химического источника тока на импульсное воздействие для обеспечения автоматизированного контроля технического состояния ХИТ в реальном масштабе времени.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ ОТКЛИКА И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сигнал отклика (СО) химического источника тока на импульсное воздействие, который в [2–4] именуется как «хронопотенциограмма», представляет собой функциональную зависимость напряжения на клеммах ХИТ от времени при постоянном значении величины тока. Форма сигнала отклика содержит обширную и достаточно объективную информацию о кинетике электрохимического процесса, которая оказывает непосредственное влияние на параметры ХИТ. Совокупность параметров, полученных путем анализа сигнала отклика, может быть использована в качестве информационных параметров для реализации адаптивной зарядки ХИТ [5], а также для контроля текущего состояния химического источника тока.

В зависимости от вида контролируемых параметров ХИТ используются как зарядные, так и разрядные тестовые импульсы.

Графическая форма реального сигнала отклика ХИТ на зарядный токовый импульс, отображающая кинетику электрохимического процесса, приведена на рис. 1.

Из рисунка видно, что при анализе сигнала отклика можно получить следующие параметры: U_{pc} – напряжение разомкнутой цепи; U_{a1} , U_{a2} – падение напряжения на активном внутреннем сопротивлении ХИТ в момент подачи и снятия импульса, соответственно; U_{II} – напряжение поляризации; t_{II} – длительность импульса тока.

Определение параметров связано с нахождением координат информационных точек, обозначенных на рис. 1, ограничивающих участки СО, которые соответствуют определенным стадиям электрохимического процесса. Координаты точек являются информационными признаками и их определение, как видно из рисунка, в большинстве случаев затруднено наличием шумов как электрохимической природы, сопровождающих процессы в ХИТ, так и вносимых измерительной аппаратурой. Оптимальными методами анализа параметров, измеренных в условиях шумов различных уровней, могут быть математические методы обработки сигналов.

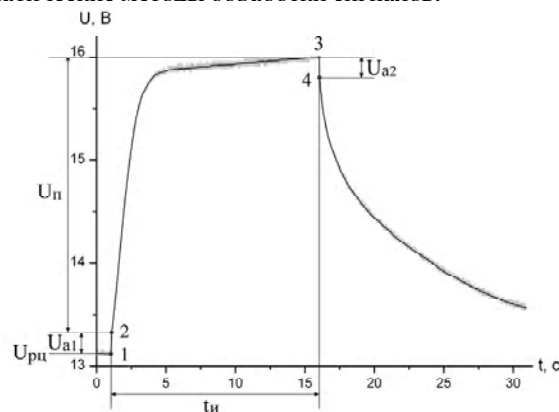


Рис. 1. Сигнал отклика свинцово-кислотной аккумуляторной батареи на зарядный импульс тока