УДК 004.94:621.382

БАЗА ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАМ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ ХАРАКТЕРИСТИКАМ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Т.В. Стольникова, магистр, К.Ю. Колыбанов доцент,
**В.В. Арбенина, доцент*
кафедра Информационных технологий
**кафедра Материалов микро-,опто- и наноэлектроники*
МИТХТ им. М.В. Ломоносова

Разработана структура базы данных, объединяющей сведения о свойствах материалов на основе полупроводниковых фаз с одновременной их систематизацией и необходимые для материаловедов и технологов данные об условиях получения этих материалов. Создан удобный для пользователя интерфейс, составлены шаблоны для отчетов, работоспособность базы данных проверена на примере полупроводниковых соединений типа A^3B^5 и A^2B^6.

База данных рекомендована к внедрению в учебный процесс при подготовке бакалавров по направлению 551600 «Материаловедение и технология новых материалов».

Ключевые слова: *база данных, интерфейс, архитектура, материаловедение, полупроводниковые материалы.*

Современный научно-технический прогресс неразрывно связан с разработкой и освоением новых материалов. Именно материалы стали ключевым звеном, определяющим успех многих областей науки и техники. Поэтому изучению материалов в вузах отводится значительное место. В МИТХТ осуществляется подготовка студентов по направлению 551600 «Материаловедение и технология новых материалов» (факультеты Т и П), где профилирующими являются дисциплины материаловедческого и технологического профиля.

Для проведения аудиторных занятий (семинаров, лабораторных и практических работ) по этим дисциплинам требуется большой объем информации о материалах, которые применяются в той или иной области. Электронная база данных (БД), в которой собраны разнообразные сведения, находящиеся в оперативном доступе, является удобной формой предоставления справочных данных на аудиторных занятиях. Для пользования такой БД достаточно иметь в аудитории 1-2 компьютера. БД позволит студенту самостоятельно получить информацию, которая нужна для решения поставленной задачи.

При наличии локальной компьютерной сети, организованной в компьютерном классе, преподаватель с сервера может следить за тем, какие данные и в каком объеме использует конкретный студент для выполнения поставленной перед ним задачи, что позволит более объективно оценивать знание студентом теоретического материала и его подготовку к текущим занятиям.

ОБЩАЯ КОНЦЕПЦИЯ БД

Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов широко используются во всех промышленно развитых странах мира, но, как правило, ориентированы на определенную группу свойств (см. рис.1) [1].

Современное производство предъявляет все более жесткие и разнообразные требования не только к конкретному свойству материала, но и к сочетанию свойств. Соответственно растет количество и номенклатура материалов, например, число наименований материалов, применяемых в электронной технике, к настоящему времени составляет несколько тысяч.

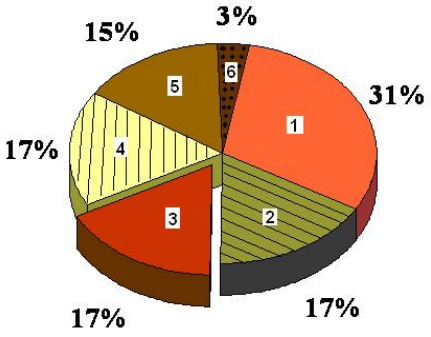

Рис. 1. Распределение БД по ориентации на различные группы свойств материалов: 1 – термодинамические и термохимические, 2 – технические и технологические, 3 – химические и физико-химические, 4 – кристаллографические и кристаллохимиические, 5 – физические (электрические, оптические, магнитные и др.), 6 – другие свойства..

Как правило, при решении инженерных задач выбор материала для конкретного применения осуществляется на основе компромисса, базирующегося на знании комплекса свойств, характеризующих материал, его строении и данных по фазовым диаграммам. Например, при необходимости обладать конкретным значением электрической проводимости материал одновременно должен быть механически прочным, коррозионно-устойчивыми и термостабильным. Информацию о совокупности физических (электрические), механических (прочность), физико-химических (коррозионная стойкость), тепловых (термостабильность) свойств, а также данные по строению и характеру поведения материала при изменении состава удобнее получать из одного источника. В настоящее время информацию приходится искать по различным справочникам или БД, ориентированным только на определенную группу свойств.

Кроме того, очень часто материаловедам и технологам необходимы знания о закономерностях поведения материалов в различных условиях эксплуатации. Такую задачу можно решить, имея данные о свойствах материалов при различных температурах (77 и 300 К) и давлениях, которые может содержать БД в численной форме или в виде различных зависимостей с установленными экспериментально коэффициентами. При решении более сложных задач, когда требуется не просто подобрать материал, а предложить схему получения материала с заранее заданными свойствами, необходимыми для практического применения, возникает необходимость:

1) иметь сведения о внутреннем строении материала на микроскопическом уровне, его кристаллической структуре и полиморфных модификациях;

2) иметь данные о том, как происходит взаимодействие материала с другими веществами при различных внешних условиях, т.е. обладать информацией, которая отражена в диаграммах фазовых равновесий систем, содержащих два и большее число компонентов.

Во всех перечисленных случаях использование баз данных, ориентированных на определенные группы свойств и построенных по различным принципам, содержащим различные поисковые системы и выдающие информацию в разных форматах, существенно осложняет работу, требует много времени и дополнительных знаний о принципах работы программных продуктов.

Целью работы являлось создание программного продукта – многофункциональной БД, интегрирующей в себе широкий круг справочных данных о свойствах материалов и их состоянии при различных условиях, систематизированных и упорядоченных согласно требованиям предметной области, которая предоставляла бы студентам возможность выполнять практические и лабораторные работы по материаловедческим курсам, а также могла быть использована в исследовательской деятельности и при написании квалификационных работ.

Задачами разработки такой БД являлись:

1) создание модели предметной области с целью систематизации данных, выявления их достаточной детализации; определение функциональных возможностей программы в предметной области,

2) разработка структуры БД в среде Access,

3) разработка интерфейса пользователя в виде экранных форм, удобных для первичного ввода данных, поиска по выбранным критериям, просмотра графической или текстовой информации с учетом технологии разделения данных и печати,

4) разработка шаблонов основных выходных документов в виде отчетов,

5) создание модуля расчета и построения диаграмм состояния (линий ликвидуса) по полиномиальным уравнениям,

6) создание модуля расчета и построения диаграмм «состав – свойство» по математическим зависимостям для материалов переменного состава.

ОПИСАНИЕ БД

В качестве среды программирования выбрана функционально полная реляционная СУБД - Microsoft Access, которая позволяет быстро и эффективно разрабатывать новые приложения, может работать как автономная система на одном персональном компьютере или как многопользовательская система в сети [2-7].

БД имеет *трехуровневую архитектуру,* которая охватывает внешний, концептуальный уровень, данные на котором воспринимаются пользователем, и два внутренних – логический и физический, данные на которых воспринимаются СУБД и операционной системой с целью отделения пользовательского представления базы данных от ее физического представления. Структура таблиц соответствует требованиям нормализации, связи обеспечивают поддержку целостности данных.

В области специального материаловедения, как правило, оперируют материалами различных типов: наряду с простыми веществами и соединениями, все шире применяются многокомпонентные фазы, которые представляют собой либо твердые растворы, либо сплавы, а также композиционные материалы. Поэтому в БД заложена первичная классификация материалов по типу фаз в твердом состоянии. Такое деление дает возможность легко перейти к диаграммам фазовых равновесий, характеризующих взаимодействие компонентов с образованием фаз сложного состава (соединений, твердых растворов, сплавов) и отражающих многообразную информацию о них. Свойства, вводимые в БД, классифицируются следующим образом: физико-химические, физические (электрические, оптические, магнитные), тепловые, термодинамические, кристаллохимические.

Инфологическая модель системы создана при помощи языка моделирования в виде графических представлений сущностей и их атрибутов, на основе которой составлена даталогическая модель данных, предназначенная для преобразования концептуального представления в логическую структуру базы данных, включая проектирование отношений.

На рис. 2 представлена даталогическая модель, которая отражает основные категории объектов БД и логические связи между ними в рабочей схеме данных с учетом выбранного типа СУБД – реляционной модели. Даталогическая модель построена при помощи языка *ER-диаграмм* (от англ. Entity-Relationship, т.е. сущность-связь): шестиугольником обозначены ассоциативные сущности, которые осуществляют связь «многие-ко-многим» (M:M), прямоугольником – стержневые сущности, являющиеся независимыми, параллелограммом – обозначающие сущности, которые служат для описания или уточнения других и осуществляют связь «один-ко-многим» (1:M) или «один-к-одному» (1:1) [5].

Из диаграммы (рис. 2) видно, что каждый материал имеет тип (в соответствии с принятой классификацией); описание состава и формулу, свойства и их значения в разных системах единиц измерения. Конкретное свойство может иметь несколько значений, в зависимости, во-первых, от условий, при которых получен материал, во-вторых, от использованных литературных источников, т.е. метода, которым проводилось его изучение/измерение [8, 9]. Для конкретной системы в БД может храниться несколько диаграмм состояния, взятых из разных источников и/или приводимых с различной степенью детализации [10, 11].

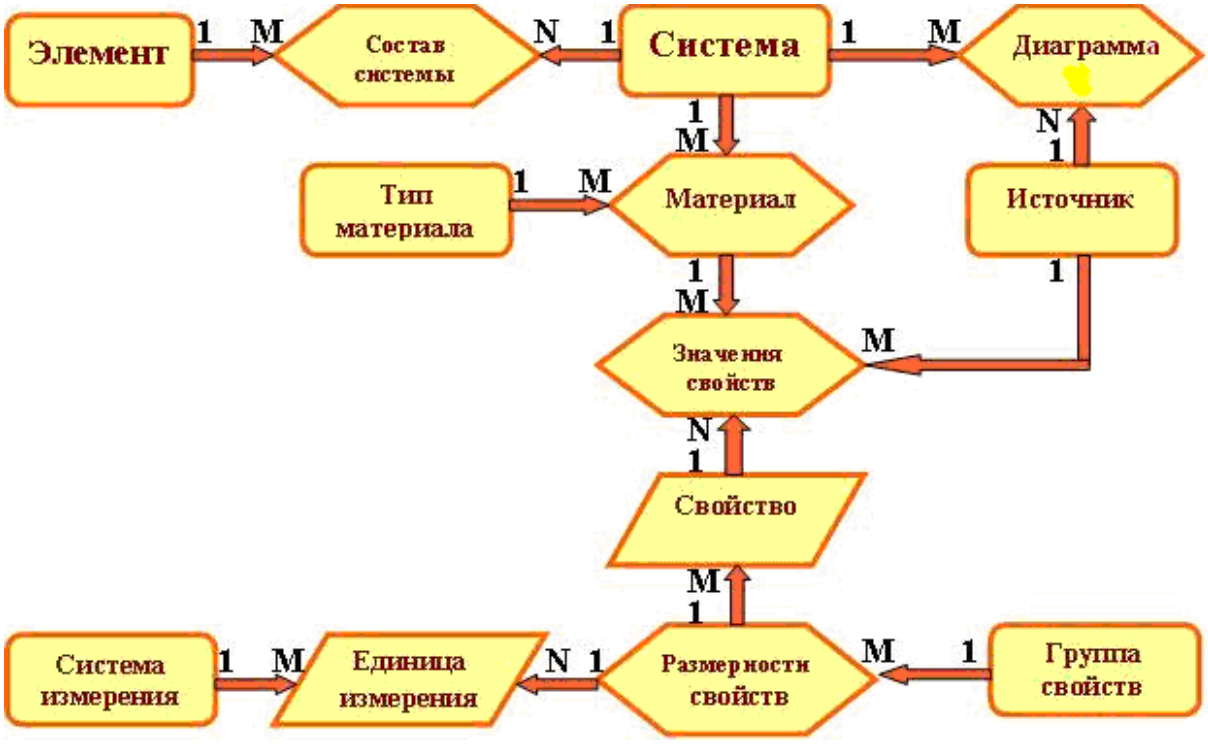

Рис. 2. Даталогическая модель предметной области.

Базовыми сущностями, поддерживающими связи 1:M, 1:1, являются: «Элементы», «Системы», «Тип материала», «Источники» (библиография), «Системы (единиц) измерения», «Свойства» «Размерности свойств». Связующими сущностями, поддерживающими связь M:M, – являются: «Состав системы», «Материалы», «Диаграммы», «Значения свойств», «Единица измерения».

Так, например, таблица «Материал» является связующей между различными составами и типами материала: в системе GaAs может существовать как соединение GaAs, так и твердый раствор на основе этого соединения или сплав, представляющий собой гетерогенную систему. Таблица «Состав системы» осуществляет связь (M:M) между таблицами «Элемент» и «Система». Таким образом, каждая система (набор элементов, образующих формулу) может состоять из многих элементов, и наоборот, каждый элемент может входить в состав многих систем. Таблица «Значения свойств» объединяет в себе информацию о значениях свойств конкретного материала с учетом условий получения и литературного (библиографического) источника, откуда взята справочная информация. Таблица «Единица измерения» показывает, что каждое значение свойства может быть приведено в различных единицах измерения в соответствии с выбранной системой единиц измерения.

ИНТЕРФЕЙС ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ. ОСНОВНЫЕ ФОРМЫ.

На рис. 3 представлена форма ввода данных: тип и формула конкретного материала, его свойства, тип кристаллической структуры и вид диаграммы состояния. Ввод свойств, характеризующих данный материал, может осуществляться двумя путями:

- всех свойств подряд из одного или разных справочных источников,

- конкретного свойства материала (сначала выбирается свойство, затем его обозначение и в конце вводится само значение свойства), причем это свойство можно вводить поочередно для многих материалов, изменяя только параметры в верхней части формы.

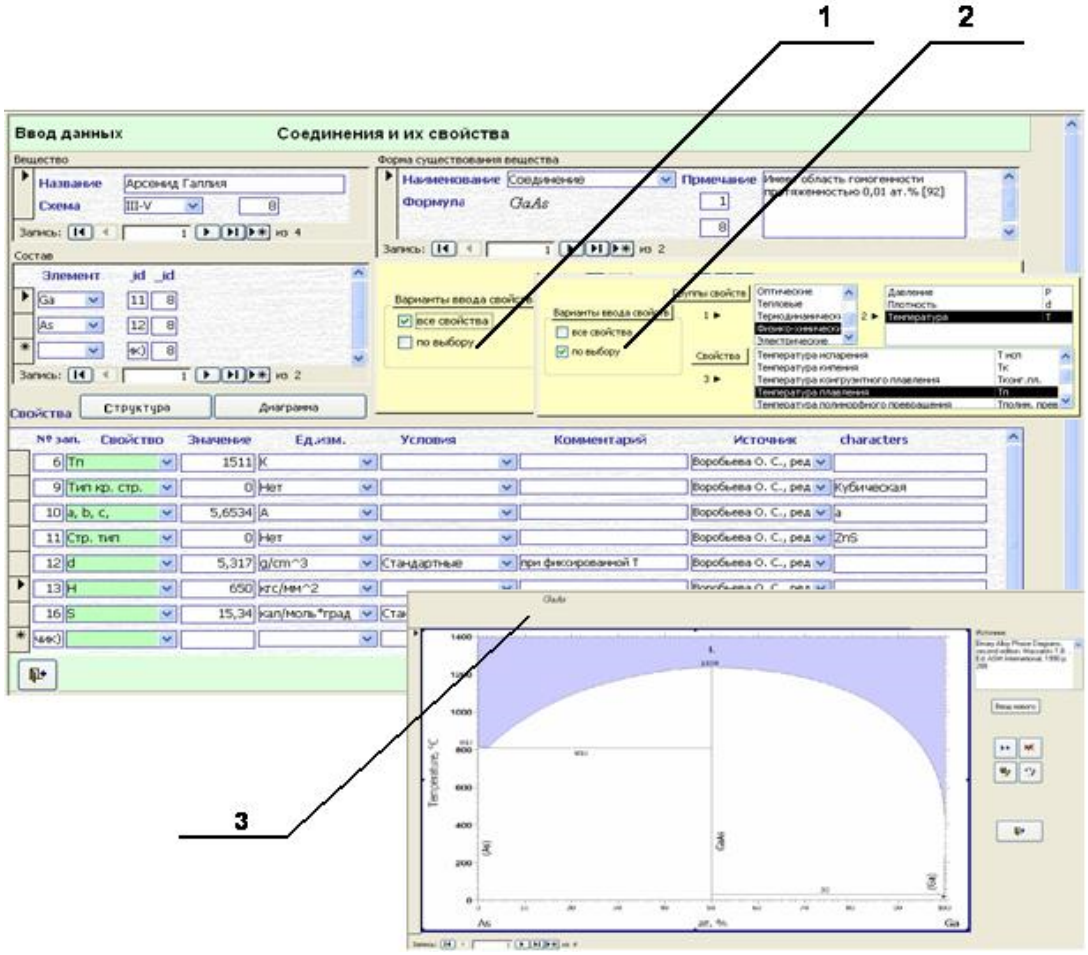

Рис. 3. Форма для ввода данных: 1 – ввод всех свойств, 2 – ввод конкретного свойства, 3 – форма для ввода диаграммы состояния в графическом виде.

Для ввода графического материала существуют кнопки «Диаграмма» и «Структура», открывающие соответствующие формы ввода. Так в форме ввода «Диаграмма» можно ввести диаграмму состояния системы в графическом виде (файлы с расширением *.jpq или *.bmp), указав литературный источник путем выбора его из библиографического списка. Аналогичным образом осуществляется ввод рисунков кристаллической структуры и/или фотографии микроструктуры материала.

В форме просмотра данных (рис. 4) можно получать информацию о свойствах (численные данные), диаграмме состояния и кристаллической структуре (графические данные) выбранного материала. Поиск осуществляется как по типу материала, так и по числу компонентов с указанием схемы (групп ПСЭ, элементы которых входят в состав материала). При выборе интересующего материала в данной форме раскрывается полный список его свойств, а с помощью кнопок «Структура» и «Диаграмма» можно просмотреть соответствующую информацию, каждую в отдельном окне.

Пользователь имеет возможность не только получить информацию о свойствах интересующих его материалов, но и затребовать необходимые сведения об образующих этот материал элементах. Предусмотрены формы для ввода и просмотра справочных данных: характеристики элементов ПСЭ, типы материалов, единицы измерения, системы единиц измерения.

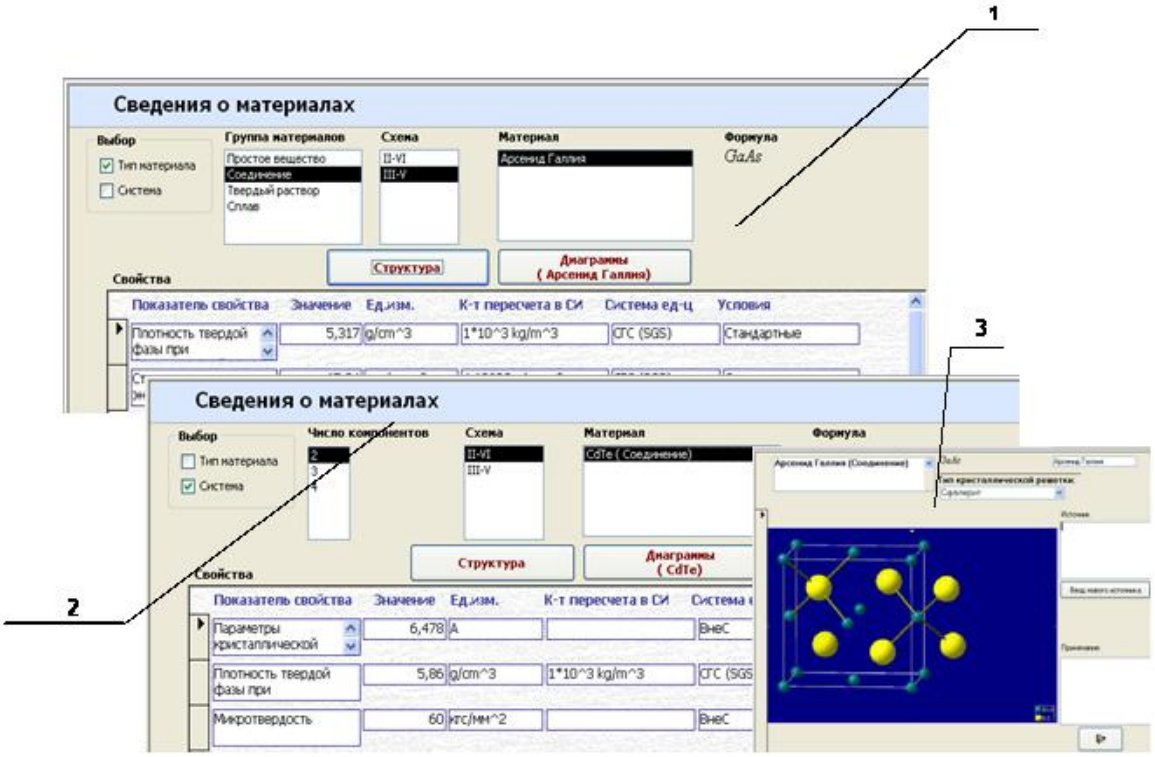

Рис. 4. Форма для просмотра данных: 1 – по типу материала, 2 – по числу компонентов и схеме, 3 – форма для ознакомления с типом кристаллической структуры материала.

Для детализации диаграммы состояния используется вариант оцифровки экспериментально установленной линии ликвидус и сделан выбор аппроксимирующего алгебраического уравнения для ее представления в БД. Для построения графического изображения линии ликвидус разработана следующая технология:

- по экспериментально установленной линии ликвидус в конкретной системе производится подбор полиномов, одного или нескольких на отдельных участках диаграммы состояния,
- математическая зависимость и соответствующие коэффициенты вводятся в специально разработанную форму ввода,
- производится расчет значений для всего диапазона составов (специально созданный модуль расчета)
- производится построение кривой ликвидуса в отдельной форме (рис. 5).

Расчет ряда свойств материалов переменного состава выполняется по той же технологии подбора полиномов. Для некоторых свойств (например, для ширины запрещенной зоны Eg) в справочниках уже имеются уравнения, которые для одного и того же материала могут отличаться коэффициентами в зависимости от библиографического источника, в котором приводятся.

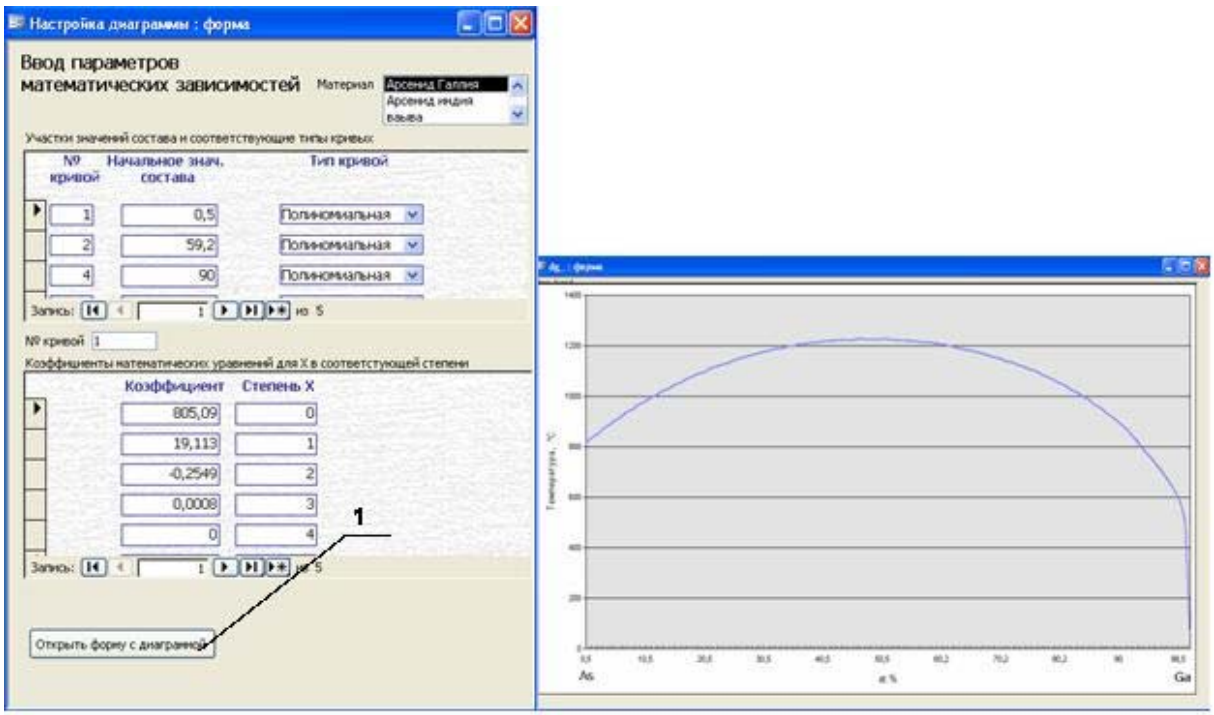

Рис. 5. Окно для построения графического изображения линии ликвидус: 1 – кнопка построения линии ликвидус по заданным полиномам (графическая форма).

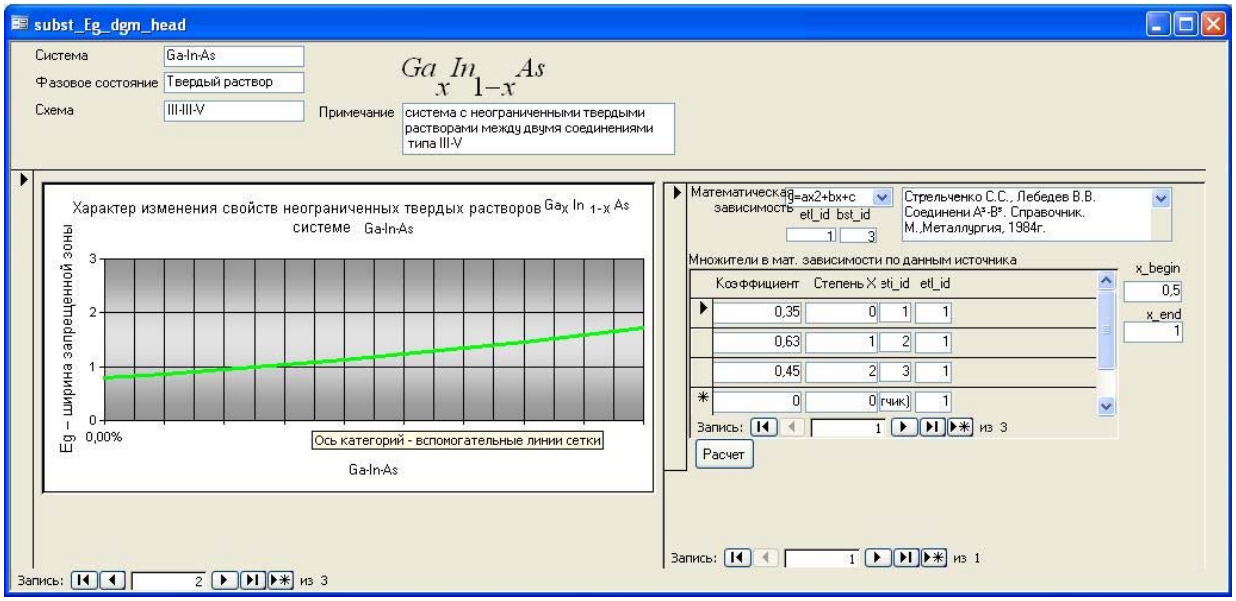

Рис. 6. Окно для расчета свойств материалов переменного состава.

Разработана специальная форма, которая позволяет ввести коэффициенты уравнения и указать источник, откуда это уравнение взято. Специальный модуль рассчитывает значения свойства и производит построение диаграммы «состав-свойство».

На рис. 6 представлена зависимость Eg = f (x) для твердого раствора между полупроводниковыми соединениями GaAs и InAs.

ВЫВОДЫ

Разработана база данных, объединяющая свойства и технологические характеристики широкого круга наиболее важных полупроводниковых материалов с одновременной их систематизацией для предметной области Материаловедение полупроводников. Создан удобный интерфейс пользователя, составлены шаблоны отчетов и инструкция для пользователя. Разработанная база данных используется на кафедре Материалы микро-, опто- и наноэлектроники для проведения учебных занятий по ряду дисциплин.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Киселёва, Н. Н. Компьютерное конструирование неорганических соединений: использование баз данных и методов искусственного интеллекта / Н. Н. Киселёва. – М. : Наука, 2005. – 286 с.

2. Кузнецов, С. Д. Основы современных баз данных / С. Д. Кузнецов // Информационно-аналитические материалы Центра Информационных Технологий. – Режим доступа: http://www.unix.org.ua/osbd/ contents.htm

3. Connolly, Thomas M. Database systems. A practical approach to design, Implementation, and management / Thomas M. Connolly, Carolyn E. Begg. – М. : ИД «Вильямс», 2003. – 1440 с.

4. Дейт, К. Дж. Введение в системы баз данных / К. Дж. Дейт. – М. : ИД «Вильямс», 2002. – 1072 с.

5. В.В. Кириллов. Основы проектирования реляционных баз данных. – Режим доступа: http://www.citforum.ru/database/dbguide/index.shtml

6. http://www.hist.msu.ru/Labs/HisLab/BOOKS/p4_Access.pdf

7. Дженнингс, Роджер. Использование Microsoft Access 2002 / Роджер Дженнингс. – М. : ИД «Вильямс», 2002. – 1007 с.

8. Физико-химические свойства полупроводниковых веществ / Под ред. Л. Н. Новоселовой, В. Б. Лазарева. – М. : Наука, 1979. – 338 с.

9. Лебедев, С. С. Соединения A_3B_5 / С. С. Лебедев, В. В. Стрельченко. – М. : Металлургия, 1991. – 350 с.

10. Хансен, М. Структуры двойных сплавов / М. Хансен, К. Андерко. – М. : Металлургиздат, 1962. – Т. I. – 608 с., Т. II. – 1488 с.

11. http://www.BD.com

12. http://www.nsc.ru/win/docs/db/rdbms/5-1.html