

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА ШИРИНУ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ Nb₂O₅

Д. Б. Мигас, А. Б. Филонов, В. Е. Борисенко

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
migas@bsuir.by*

ВВЕДЕНИЕ

Пентаоксид ниобия (Nb₂O₅) характеризуется различными полиморфными модификациями (около 20), которые в основном характеризуются моноклинной и тетрагональной структурой [1]. Nb₂O₅ получают различными методами, включая золь-гель метод, ионное распыление, электронно-лучевое напыление, химическое осаждение из газовой фазы, электрохимическое анодирование и другие. В зависимости от метода синтеза, а также последующего отжига формируются различные полиморфные модификации Nb₂O₅, причём происходят необратимые фазовые переходы [1]. В большинстве случаев значение ширины запрещённой зоны Nb₂O₅, определённое с помощью измерений коэффициента оптического поглощения, оказалось равным 3,4 – 3,7 эВ [2], что ограничивает использование этого материала для фотокаталитических приложений, так как не поглощается солнечное излучение в видимой области. Тем не менее, существенно меньшее значение ширины запрещённой зоны около 2,4 эВ получено в [3], что указывает на существование полиморфных модификаций с меньшими значениями ширины запрещённой зоны. До сих пор нет экспериментальной идентификации различных фаз этого оксида по ширине запрещённой зоны и теоретических исследований зонной структуры полиморфных модификаций Nb₂O₅.

ДЕТАЛИ РАСЧЕТА

Для проведения полной оптимизации кристаллической структуры с последующим расчетом зонных спектров различных фаз Nb₂O₅ был применен первопринципный метод псевдопотенциала с базисным набором плоских волн (пакета VASP) [4]. Учет обмена и корреляции проводился путем использования обобщенного градиентного приближения. Минимизация полной энергии системы была получена путем вычисления сил Хеллмана-Фейнмана и тензора напряжений. В оптимизации параметров решетки и релаксации атомных позиций использовался сопряженный метод градиента. Сходимость по полной энергии в элементарной ячейке для всех рассматриваемых фаз была лучше, чем 1 мэВ/атом, используя ограничение энергии до 450 эВ. Был проведен анализ сходимости результатов по отношению к количеству k-точек в неприводимой части зоны. Зонные структуры рассчитывались на основании самосогласованной плотности заряда, при этом для каждого сегмента направления соответствующей зоны Бриллюэна использовалось по 30 точек.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Согласно экспериментальным данным, только для нескольких фаз Nb₂O₅ известны атомные позиции и параметры решеток [1]. Сравнение экспериментальных данных из литературы и теоретически оптимизированных параметров решеток указыва-

ет на то, что полная структурная оптимизация не приводит к существенным изменениям параметров решеток.

На рисунке 1 представлены соответствующие зонные диаграммы различных фаз Nb_2O_5 , построенные вдоль линий высокой симметрии моноклинной или тетрагональной зон Бриллюэна. Обнаружено, что все рассмотренные фазы являются непрямозонными полупроводниками и характеризуются наличием запрещенной зоны с различной шириной. Более того, зонные диаграммы отличаются дисперсией верхних по энергии валентных зон и нижних по энергии зон проводимости за исключением $h\text{-Nb}_2\text{O}_5$ и $\text{Ht-Nb}_2\text{O}_5$, которые обладают практически одинаковой дисперсией зон, лежащих около запрещенной зоны.

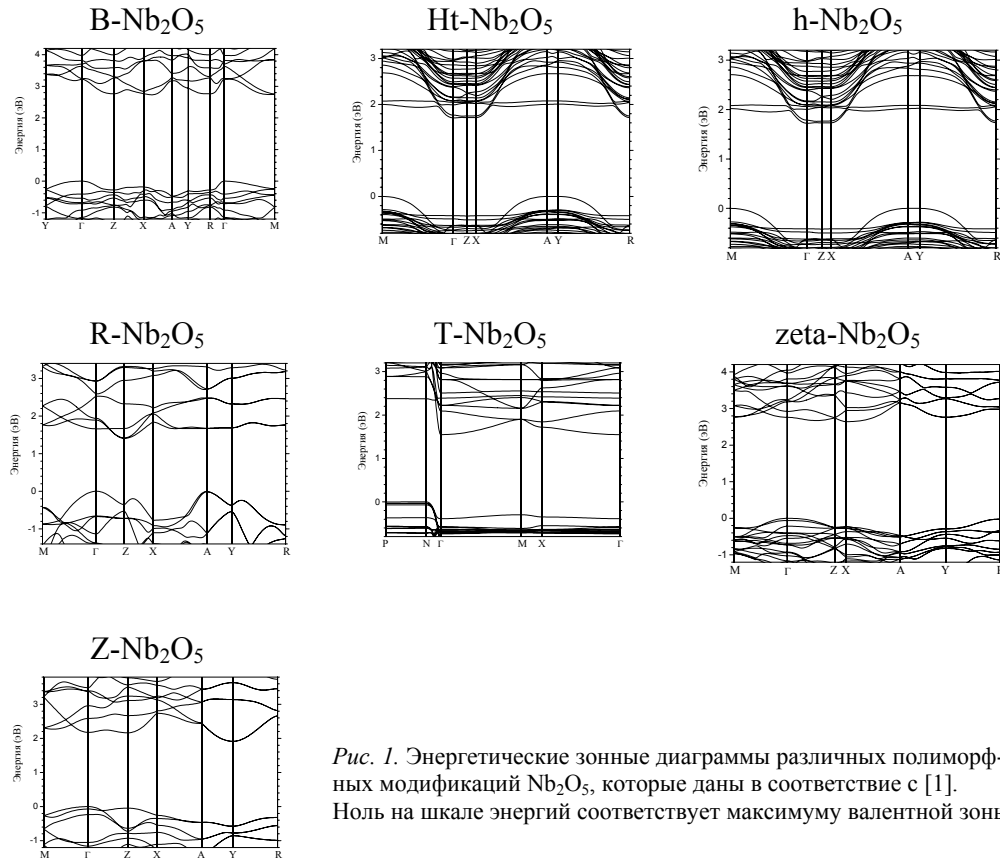


Рис. 1. Энергетические зонные диаграммы различных полиморфных модификаций Nb_2O_5 , которые даны в соответствии с [1]. Ноль на шкале энергий соответствует максимуму валентной зоны

Анализ значений ширины запрещенной зоны различных фаз Nb_2O_5 показал, что наибольшее значение (2,73 эВ) имеет $\text{B-Nb}_2\text{O}_5$, а наименьшее (1,40 эВ) – $\text{R-Nb}_2\text{O}_5$. Таким образом, подтвердилось предположение, что различные фазы пентаоксида ниобия действительно могут характеризоваться различной шириной запрещенной зоны. Так как для методов функционала электронной плотности присуще значительное занижение расчетной ширины запрещенной зоны, то экспериментальное значение 2,4 эВ, обнаруженное в работе [3], можно считать не случайным и рассматривать его как одно из минимальных значений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shafer, H.* The modifications of niobium pentoxide / H. Shafer, R. Gruenh, F. Schulte // *Angew. Chem. internat. Edit.* – 1966. – Vol. 5, № 1. – P. 40–52.
2. *Fihlo, D.A.B.* Niobia films: surface morphology, surface analysis, photoelectrochemical properties and crystallization process / D. de A. B. Fihlo [et al.] // *J. Mater. Sci.* – 1998. – Vol. 33, № 2. – P. 2607–2616.
3. Properties of spray deposited niobium oxide thin films / P.S. Patil [et al.] // *J. Mater. Sci. Mater. Electronics* – 2005. – Vol. 33, № 2. – P. 2607–2616.
4. *Kresse, G.* Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmuller // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54, № 16. – P. 11169–11186.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ТЕПЛОВОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ДМОП-ТРАНЗИСТОРОВ НЕРАЗРУШАЮЩИМ МЕТОДОМ ТРДС

**В. С. Нисс¹, О. С. Васьков¹, В. К. Кононенко², А. С. Турцевич³,
И. И. Рубцевич³, Я. А. Соловьев³, А. Ф. Керенцев³**

¹Белорусский национальный технический университет,

²Белорусский государственный университет,

³ОАО «ИНТЕГРАЛ»; niss@metolit.by; AKerentsev@integral.by

Эксплуатационная надежность мощных транзисторов определяется, главным образом, их теплоэлектрическим состоянием, которое формируется на стадии присоединения кристаллов в корпус. В процессе эксплуатации, в условиях воздействия внешних дестабилизирующих факторов, надежность таких изделий резко снижается. Поэтому при изготовлении мощных полупроводниковых приборов осуществляется сплошной контроль электрических и тепловых параметров и, в первую очередь, интегральной величины теплового сопротивления переход-корпус.

На производстве мощных ДМОП-транзисторов (вертикальных транзисторов металл-окисел-полупроводник с двойной диффузией) контроль теплового сопротивления осуществляется косвенным методом по термозависимому параметру – прямому напряжению перехода сток–исток. Этот метод не позволяет однозначно выявить элемент многослойной структуры, ответственный за повышенный уровень теплового сопротивления.

Актуальность данной работы обусловлена необходимостью повышения эффективности контроля теплового сопротивления на стадии производства мощных полупроводниковых приборов. Цель работы – исследование структуры теплового сопротивления многослойной системы мощных транзисторов КП723Г и КП7128 в металлокерамическом корпусе КТ-97В [1].

Методом тепловой релаксационной дифференциальной спектроскопии (ТРДС) с использованием релаксационного импеданс-спектрометра, разработанного в Белорусском национальном техническом университете (БНТУ), исследована структура теплового сопротивления ДМОП-транзисторов. Определены тепловые постоянные элементов металлокерамического корпуса и структура теплового сопротивления в виде дискретного и непрерывного спектра. Дифференциальный спектр рассчитан на основе производных высшего порядка динамического теплового импеданса и соответствует модели Фостера, а дискретный – модели Кауера [2].