делировании молекулярной динамики поток тепла дан следующими уравнениями

$$\begin{split} \mathfrak{R} &= \sum_{i} \vec{r}_{i} h_{i}, \quad \ \ (3) \\ H &= \sum_{i} h_{i}, \quad \ \ (4) \\ \vec{J}_{q} &= \frac{d}{dt} \mathfrak{R}. \end{split}$$

где h_i – полная энергия *i*-го атома, которая включает кинетические и потенциальные энергии.

$$h_i = \frac{m\vec{v}_i^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{ij}V_{ij},\quad(6)$$

где \vec{V}_i – скорость *i*-го атома;

m – масса атома;

V_{ii} – энергия группы атомов в *i*-й шаг

Воспользуемся флуктуационно-диссипативной теоремой, чтобы обеспечить связь между энергетическим рассеянием в необратимых процессах и тепловыми колебаниями в равновесии. В этом случае тензор теплопроводности может быть выражен с точки зрения текущих функций корреляции тепла.

$$\Lambda = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty dt C_J^q(t), \qquad (6)$$
$$C_J^q(t) = \left\langle \bar{J}_q(t), \bar{J}_q(0) \right\rangle, \qquad (7)$$

где *k*_{*B*} – постоянная Больцмана;

T – температура;

C^{*q*}_{*J*} – классическая корреляционная функция. Тепловой поток определяется формулой

$$\vec{J}(t) = \sum_{i} \vec{v}_{i} h_{i} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \vec{r}_{ij} \vec{F}_{ij} \vec{v}_{i}, \quad (8)$$

где \vec{r}_{ii} – расстояние между *i*-м и *j*-м атомами;

 \vec{F}_{ii} – сила между *i*-м и *j*-м атомами.

График зависимости коэффициента теплопроводности от частоты.



Рисунок 2 – Зависимость коэффициента теплопроводности от частоты

Из графика видно, что статическая теплопроводность соответствующая нулевой частоте оказывается равной 0,2 кВт/(м*К).

- J.C.Phillips, R.Braun, W.Wang, J.Gumbart, E.Tajkhorshid, E.Villa, C. Chipot, R.D.Skeel, L. Kale, and K.Schulten. Scalable molecular dynamics with NAMD. – USA: J Comput Chem 26, 2005. – p.1781-1802.
- J. Che, T. Cagin, W. Deng and W.A. Goddard III. Thermal conductivity of diamond and related materials from molecular dynamics simulations // Journal of chemical physics. – Num. 16, – 22 October 2000, – p.6888 – 6900.

УДК 544.6; 537.312; 621.316.849

КОЭФФИЦИЕНТ СТАРЕНИЯ НАНОСТРУКТУРНЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ РЕЗИСТОРОВ НА ОСНОВЕ АНОДИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ AL/TA

Плиговка А.Н., Крупко А.О.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники Минск, Республика Беларусь

Одной из важнейших характеристик конструктивных материалов РЭА является их коэффициент старения, определяющий временную стабильность электрофизических параметров [1]. Все конструктивные элементы РЭА, в том числе и резисторы, должны обладать хорошими показателями по временной стабильности своих параметров и обеспечивать их сохранение в пределах допуска на протяжении всего эксплуатационного срока. В случае существенного отклонения таких параметров от номинального значения с течением времени, ухудшается точность работы и долговечность всего прибора в целом. Поэтому, при создании или модификации любого конструктивного материал, особенно на основе тонких пленок, важно иметь результаты исследования его временной стабильности и расчеты коэффициента старения [2]. В данной работе были проведены исследования временной стабильности резистивных параметров наноструктурных тонкопленочных резисторов $(T\Pi P)$ на основе двухслойной системы Al/Ta и рассчитан их коэффициент старения.

Исходные образцы представляли собой последовательно напыленные в вакууме на стеклянные подложки методом магнетронного напыления тонкие пленки Та и А1 с толщинами 22 нм и 1500 нм соответственно (Рисунок 1а), на основе которых формировали тестовые ТПР, разрезая их на узкие полоски размером 3×40 мм, и формируя по краям контактные площадки размером 3×5 мм пассивацией слоем плотного анодного оксида алюминия (АОА). В качестве резистивного слоя использовали наноструктурированную пленку, приготовленную по следующей методике: сначала анодировали верхний слой алюминия в 0,2 М водном растворе щавелевой кислоты при величине анодного напряжения 53,0 В до получения пористого АОА (Рисунок 1б), а затем через поры АОА анодировали подслой тантала, в результате чего образовывались периодические наноразмерные диэлектрические неоднородности (островки), окруженные самоорганизованной тонкой металлической сеткой (Рисунок 1в); дальнейшее окисление пленки тантала осуществлялось с помощью ступенчатого реанодирования (Рисунок 1г) до более высокого напряжения в 1% водном растворе лимонной кислоты [3]. Практическое анодирование проводили в специально разработанной двухэлектродной электрохимической ячейке, состоящей из стеклянного стакана и фторопластовой крышки, к которой крепились катод и анод с токоподводящими контактами. В качестве катода использовали электрод прямоугольной формы, изготовленный из толстой алюминиевой фольги, анод представлял из себя медный держатель крокодилообразной формы с закрепленным экспериментальным образцом. Перемешивание и поддержание температуры электролита осуществляли с помощью термостатированной магнитной мешалки. В качестве источника тока использовали модернизированный потенциостат П-5827М. По окончании анодирования образцы промывали в проточной дистиллированной воде, сушили на центрифуге и в термостате при 323 К.



Рисунок 1. Схематическое представление процесса изготовления резистивного слоя тестового тонкопленочного резистора: (а) исходная структура; (б) анодирование верхнего слоя алюминия; (в) анодирование подслоя тантала через поры анодного оксида алюминия; (г) реанодирование подслоя тантала через поры анодного оксида алюминия.

Для определения предельных рабочих напряжений и токов такого ТПР с целью вычисления максимальной мощности рассеяния на тестовые ТПР подавалось напряжение с шагом 1 В, снимая показания тока. Развертка была прекращен, когда, в силу разрушения структуры резистора, отклонение действительного значения сопротивления от номинального значения составило более 20%. Для определения временной стабильности ТПР под нагрузкой и без был разработан макет, состоящий из источника постоянного напряжения, светодиодного индикатора, разъемов для подключения омметра, вольтметра и амперметра, в который были помещены тестовые ТПР под нагрузкой $\rho 1 = 151,3$ Ом/ \Box и без $\rho 2 = 150,4$ Ом/П. На образец под нагрузкой было подано напряжение питания 5,1 В, напряжение питание было выбрано таким, чтобы напряжение на ТПР под нагрузкой составило 10% от предельного рабочего напряжения. Затем в течение 1000 часов проводилось регистрирование резистивных параметров: сопротивление тестовых ТПР под нагрузкой и без, напряжение и ток ТПР под нагрузкой [4]. По итогам проведенных измерений были получены зависимости удельного поверхностного сопротивления (УПС) тестовых ТПР под нагрузкой и без неё от времени, которые представлены на Рисунок 2.

Из Рисунок 2 видно, что УПС с течением времени для тестовых ТПР под нагрузкой и без ведет себя одинаково – прямые параллельны, их несовпадение связано с различным начальным сопротивлением ТПР – погрешностью формирования, что можно объяснить несовершенством экспериментальной оснастки и качеством изготовления самих образцов в лабораторных условиях.

На основании полученных результатов были проведены расчеты относительного отклонения УПС δ и коэффициента старения $K_{\rm cr}$.

Относительного отклонения УПС для тестовых ТПР под нагрузкой и без, соответственно: δ₁=(465,0–453,9)·100 %/453,9=2,45 %,

 $\delta_2 = (494, 0 - 481, 2) \cdot 100 \% / 481, 2 = 2,66 \%,$

Коэффициента старения для тестовых ТПР под нагрузкой и без, соответственно:

 $K_{ct 1}=2,45\cdot10^{-5}$ Ом/час, $K_{ct 2}=2,66\cdot10^{-5}$ Ом/час,



Рисунок 2. График зависимости удельного поверхностного сопротивления от времени, под нагрузкой (а) и без (б), тестовых наноструктурированных тонкопленочных резисторов на основе анодированной системы AI/Ta.

Таким образом, мы видим, что резистивные параметры, исследуемых наноструктурных ТПР на основе анодированной системы Al/Ta, обладают приемлемыми показателями временной стабильности, а рассчитанный коэффициент старения не уступает таким современным и технологичным материалам как Нихром Х20Н80, Хром, Кермет К-50С, Тантал ТВЧ, Сплав МЛТ-3, Сплав РС-3001, для которых δ колеблется в пределах 0,5 – 2,5% [5]. Опираясь на результаты предыдущих работ [6,7] можно предположить, что изменение УПС тестовых ТПР может быть связано с частичным нарушение проводящей наноразмерной танталовой сетки и даже обрывом её наноразмерных проводников, особенно, на границе раздела резистивный слой/контактная площадка, а также, возможно, с некими пока неизученными явлениями и механизмами, проходящими на границе раздела нанопроводник/оксидный островок и в самих островках, имеющих сложный состав, уникальный в своем роде [3]. Очевидно, что помимо металлической проводимости нанопроводников танталовой сетки свой вклад в общую проводимость вносят и оксидные островки, способны проводить электрический ток благодаря своему сложному составу, такая проводимость по своей природе напоминает полупроводниковую. А в результате несовершенства структуры с течением времени часть островков может быть пробита или нарушена в результате диффузионных процессов под воздействием окружающей среды, что также вносит свой вклад в нестабильность УПС всей структуры в целом.

Однако, несмотря на всю сложность процессов и механизмов протекающих в таких наностразмерные материалах, они имеют большую перспективу по применению в будущем за счет своей простоты и экологичности изготовления, высокой технологичности и совместимости с большинством существующих процессов изготовления дискретной и интегральной электроники.

- 1. Arun, P. Ageing Effect of Sb2Te3 thin films // Physica B. 2001.– № 307. P. 105-110.
- Koch, C. C. Nanostructured materials: processing, properties and applications. – Wiliam Andrew Publishing, 2007. – 670 p.
- Mozalev, A. Growth of multioxide planar film with the nanoscale inner structure via anodizing Al/Ta layers on Si // Electrochimica Acta. – 2009. – № 54. – P. 935-945.
- Pranchov, R.B. Model for reliability prediction of thick film resistors // Electrocomponent Science and Technology. – 1984. – № 11. – P. 185–190.
- 5. Wissmann, P., Finzel, H.–U. Electrical resistivity of thin metal films. Springer, 2007. 126 p.
- 6. Mozalev, A. Anodic process for forming nanostructured metal-oxide coatings for large-value precise microfilm resistor fabrication // Electro-chimica Acta. 1999. № 44. P. 3891–3898.
- Mozalev, A.The growth and electrical transport properties of self-organized metal/oxide nanostructures formed by anodizing Ta-Al thin-film bilayers // Journal of materials science. – 2005. – № 40. – P. 6399–6407.

УДК 621.865.8

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ДАТЧИКОВ ХОЛЛА, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР N-INSB_{1-х}BI_x–I–GAAS

¹Прокошин В.И., ²Ярмолович В.А., Драпезо А.П.

¹Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований ²ГО НПЦ НАН Беларуси по материаловедению Минск, Республика Беларусь

Разработан метод получения высокостабильных монокристаллических слоев твердых растворов InSb-InBi на полуизолирующем арсениде галлия без использования уникальной и дорогостоящей аппаратуры, который позволяет синтезировать гетероструктуры высокого качества. Этот метод реализуется в три стадии, а именно: на первой стадии термическим напылением в вакууме изготавлива-