

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ПРОЕКТИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

*А.М. Боровик, М.С. Зеленина, О.А. Козлова,
И.Ю. Ловшенко, В.А. Скачкова, В.Р. Стемпицкий*
**Учреждение образования «Белорусский государственный
университет информатики и радиоэлектроники»**
e-mail: vstem@bsuir.by

Компьютерное моделирование прочно заняло «предэкспериментальную» нишу в продолжительном процессе по освоению новых материалов. Для проведения эксперимента по исследованию свойств наноструктурных объектов требуется дорогостоящая аппаратура, значительные энергетические и временные затраты. Моделирование из первых принципов позволяет предсказать структурные, электронные магнитные, оптические свойства материалов.

Многими исследователями, в том числе и нами, для *ab initio* исследования привлекается мощный, хорошо зарекомендовавший себя программный пакет VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), реализующий метод функционала электронной плотности, который позволяет получить ценную информацию о кристаллических структурах.

Целевыми функциями являются электронный энергетический спектр, собственные функции и плотность электронных состояний изолированного кластера при фиксированном положении ядер, потенциальная энергия системы с учетом электронно-ядерных подсистем.

Один из выполняемых лабораторией проектов, финансируемый Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований, посвящен исследованию из первых принципов структурных, электронных и магнитных свойств дефектных соединений ZnO и ZnSnAs₂, легированных переходными металлами. Выявлены физические особенности свойств исследуемых кристаллов ZnO посредством *ab initio* моделирования для целенаправленного поиска условий и параметров оптимальной технологии создания материалов с требуемыми функциональными свойствами.

Помимо структурных и электронных свойств, особое внимание уделялось выявлению магнитных характеристик. В серии компьютерных расчетов были получены результаты, отражающие влияние собственных точечных дефектов, дефектов типа «граница зерна», примесных атомов переходных металлов, совокупности дефектов (вакансия и атом переходного металла), упругой деформации на электронные спин-зависимые свойства кристалла.

Полученные в рамках выполнения проекта результаты актуальны для научно-технических отраслей Республики Беларусь, поскольку могут служить основой для прикладных исследований в самых современных физико-технологических направлениях. Изучаемые соединения могут эффективно применяться при создании элементов сенсорной нанотехники, развитии

отраслей наноэлектроники, тонкопленочного материаловедения, порошковой металлургии, компьютерного моделирования, расширения знаний о физике МОП- и других наносистем. В дальнейшем возможно изучение на практике физических свойств тонкопленочных диэлектрических материалов на основе оксидов ванадия, цинка и соединений редкоземельных элементов, которые весьма перспективны для применения в наносенсорике.

Разработка современных микро- и нанoeлектронных устройств требует использования методов моделирования, позволяющих посредством численных экспериментов устанавливать количественные зависимости между электрофизическими, топологическими и эксплуатационными параметрами интегральных структур с учетом сложных взаимодействий в конкретных интегральных микросхемах (ИМС).

Актуальными являются задачи интеграции и унификации средств компьютерного моделирования, применяемых на всех этапах проектирования и экспериментальной отработки технологических процессов, приборных структур, схемотехнических решений, а также оптимизации и адаптации параметров используемых физико-математических моделей. Решение указанных задач обеспечит реализацию иерархического подхода к проектированию ИМС посредством организации взаимодействия используемых программных средств на всех уровнях моделирования.

Уменьшение технологических норм изготовления ИМС приводит к возникновению новых физических, в том числе квантовых эффектов в наноразмерных МОП-транзисторах, для учета которых необходимо создавать усовершенствованные физико-математические модели. В связи с чем серьезной проблемой становится значительное (на порядок) снижение быстродействия средств моделирования.

Стандартные программные средства моделирования электрических характеристик МОП-транзисторов используют «встроенные» модели переноса носителей заряда в приборных структурах. Использование же стандартных процессов моделирования и проектирования в других производственных условиях и с другими технологическими нормами может привести к «неадекватным» результатам.

Таким образом, актуальной становится задача разработки методов адаптации физико-математических моделей, описывающих перенос носителей заряда, реализованных в комплексах компьютерного проектирования изделий микроэлектроники, для моделирования полупроводниковых приборов, изготовленных с использованием нанометровых проектных норм.

Прикладные исследования по представленной выше тематике позволят обеспечить повышение эффективности проектирования новых изделий микроэлектроники, отработки технологических процессов, повысить точность и прогнозируемость результатов моделирования, снизить временные и материальные затраты, что в конечном итоге позволит увеличить выход годных изделий.