

## Моделирование тепловых и электронных процессов в наноструктурах

*В.И. Белько, Л.Ф. Макаренко*

*Научно-исследовательский институт прикладных проблем математики  
и информатики, Минск, Беларусь*

*e-mail: [belko@bsu.by](mailto:belko@bsu.by), [makarenko@bsu.by](mailto:makarenko@bsu.by)*

Уменьшение размеров полупроводниковых приборов ведет к изменению физических принципов, определяющих их функционирование. Возрастает необходимость все более широкого использования принципов микрофизики (законов квантовой физики и детального учета атомного строения вещества). Это приводит к необходимости разработки новых способов моделирования наноэлектронных приборов для последующего их использования при создании новых пакетов автоматизированного проектирования полупроводниковых приборов и интегральных схем.

Одной из проблем, требующих решения, является задача адекватного моделирования тепловых процессов в наноструктурах. Высокая степень компоновки современных электронных устройств и чрезвычайно высокая плотность тока в них приводит к существенному нагреванию отдельных элементов и целых интегральных схем. Проблема высокой температуры в интегральных схемах становится одной из важнейших для наноразмерной электроники и будет еще более важной в связи с внедрением новых трехмерных схем. Есть ряд эффектов, которые являются характерными для теплопереноса в наноструктурах. Во-первых, эффективная тепловая проводимость тонких кремниевых слоев намного ниже, чем проводимость сплошного кремния. Во-вторых, если в электронном устройстве появляется горячая локальная зона размером порядка десяти нанометров, распределение температуры имеет резкий скачок на границе этой зоны. Третий важный эффект – контактное тепловое сопротивление на стыке разнородных слоев. Традиционные методы численного моделирования, которые используются для макроскопических объектов, не могут быть непосредственно применены при моделировании наноразмерных устройств. Например, при моделировании теплопереноса главная трудность заключается в том, что доминирующий механизм переноса тепла основан на образовании и движении фононов. У фононов, которые являются волнами атомных колебаний, есть широкий спектр длин волн, и этот спектр зависит от состава, геометрии и других свойств данного устройства. Коротковолновые фононы легко образуются в электронных устройствах во время переноса электронов, в то время как фононы с большой длиной волн являются наиболее эффективными для переноса тепла.

Метод молекулярной динамики идеально подходит для моделирования тепловых эффектов в наноразмерных структурах. Наибольший интерес представляет моделирование теплового потока через тонкие слои кремния и изолятора толщиной в несколько миллимикрон, что является типичной

ситуацией для затворов в кремниевых КМОП-устройствах.

В данной работе выполнен молекулярно-динамический расчет параметров теплопроводности в кремниевых наноструктурах с использованием неравновесного прямого метода. Рассмотрим образец модельного кристалла кремния в виде прямоугольного параллелепипеда. Для данной задачи параллелепипед должен быть вытянут в направлении  $x$ , вдоль которого будет искусственно формироваться температурный градиент следующим образом. В области параллелепипеда, прилегающей к его правому концу, генерируем входящий тепловой поток (увеличивая скорости частиц в соответствии с требуемой величиной потока), а на левом конце – аналогичным образом порождаем сток тепла. Предварительно модельный кристалл должен быть приведен в равновесие при заданной температуре в течение достаточно долгого времени. После продолжительного процесса моделирования с фиксированными потоками тепла в образце формируется температурный градиент. В результате можно оценить коэффициент теплопроводности на основании закона Фурье.

Результаты данной работы для случая тонкого слоя кремния (7.6 нм и 15.2 нм, соответственно) показывают рост коэффициента теплопроводности в зависимости от толщины слоя. При этом полученные значения существенно меньше, чем экспериментально измеренные в сплошном кремнии. Результат для нанопроволоки (образец со свободными по всем направлениям граничными условиями) сопоставим с результатом работы [1], где время релаксации при формировании температурного градиента было значительно больше и получено значение коэффициента теплопроводности порядка 1 Вт/м·К. Полученное значение коэффициента для образца с периодическими по всем направлениям граничными условиями (сплошной кремний) соответствует величине 5 Вт/м·К из работы [2], где время релаксации также было значительно больше.

Пакет молекулярной динамики LAMMPS позволяет во всех случаях использовать ускорение расчетов за счет параллельного выполнения на многопроцессорных системах. Более того, управляющие команды позволяют задать входящий и выходящий тепловые потоки без модификации кода. Однако выбрать параметры моделирования так, чтобы получить температурный градиент и не разрушить при этом динамику системы, достаточно сложно. Таким образом, при наличии опыта удачного использования названных опций, использование пакета LAMMPS является вполне оправданным.

Еще один тип задач возникает при анализе работа одноатомного транзистора. В настоящее время одними из наиболее перспективных физических объектов для реализации квантовых вычислений и квантовых средств связи являются одиночные атомы мелких примесей, размещенные вблизи поверхности полупроводника. Примером такого объекта является квантовый процессор на основе примесных атомов фосфора в кремниевой матрице, который был предложен Кейном [3]. Одним из важных элементов этой реализации является возможность управления процессом ионизации одиночного донора, расположенного вблизи поверхности раздела сред, с помощью электрического поля. Проблема управлением волновыми функциями

и энергетическим спектра донорного электрона приводит к необходимости совместного решения краевых задач для уравнения Лапласа и стационарного уравнения Шредингера.

Нами было проведено моделирование свойств зарядового кубита в кремнии с использованием метода конечных элементов. Было проведено исследование зависимости относительной погрешности от диаметра разбиения ( $h$ ). Погрешность в собственных значениях было оценено как  $Ch^2$ , и рассчитанные в работе зависимости позволяют приближенно определить константу  $C$ . Были получены зависимости критического потенциала ионизации донора от диаметра затвора, создающего электрическое поле, а также от расстояния между донором и затвором. Проведено сравнение энергетических уровней в случае конечного размера затвора и в случае однородного внешнего поля. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании наноразмерных электронных устройств.

### Список использованных источников

1. Yang, X. *Anomalous heat conduction behavior in thin finite-size silicon nanowires* / X. Yang, A. To, R. Tian // *Nanotechnology*. 2010. Vol.21. P.155704.
2. Srinivasan, S. *On parallel NEMD simulations of heat conduction in heterogeneous materials with three-body potentials: Si/Ge superlattice* / S. Srinivasan, R.S. Miller // *Numerical Heat Transfer*. 2007. Vol. B52. P. 2971998.
3. B.E. Kane. *Nature (London)*. 1998. Vol.393. P.133.