

МОДЕЛЮВАННЯ КРЕМНІЄВИХ ТА ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОПРИЛАДІВ

© Пеленський Р.А., Гамола О.Є., 2010

Досліджено електромагнітні поля у наноприладах. Розкрито механізми впливу поверхневих явищ на електромагнітні процеси у наноплівках.

A study of electromagnetic fields in nanomedia has been conducted. Mechanism of influence of surface phenomena on processes in the nanofilm electromagnetic fields have been revealed.

Постановка проблеми

Наноприлади мають цілу низку властивостей, які не зустрічаються в макрооб'єктах. Це пов'язано з впливом поверхневих явищ, розривами атомних зв'язків на поверхні плівки, приєднанням вільних електронів до атомів і перетворенням їх у стан вільних радикалів та наявністю приповерхневих подвійних електричних та магнітних шарів зарядів. Вся ця сукупність явищ повинна бути відображена в математичних моделях електродинаміки наноплівкових приладів.

Аналіз останніх досліджень

Розвиток нанонауки істотно випереджає створення нанотехнологій. Сьогодні можна окреслити обрії розвитку нанотранзисторної теорії на найближчі роки. У традиційній плоскій кремнієвій електроніці у 2007 році досягнуто розміри 45 нм, у 2011 році – вже 22 нм, у 2020 році провідні фірми (Intel, IBM, AMD) сподіваються досягнути рівня 11 нм.

В останнє десятиліття відкрито і описано цілу низку нових ефектів, властивих наносвіту: магнітні параметри у взаємоперпендикулярних напрямках змінюються в мільйони разів [1, 5], несиметрична система рівнянь електромагнітних процесів у суцільному середовищі трансформується в симетричну під час опису цих явищ у наноплівках.

Задача досліджень

Побудова математичних моделей електромагнітних процесів у наноплівках з усебічним урахуванням поверхневих явищ.

Виклад основного матеріалу

Наноплівки – особливий вид матеріалів. Їхні властивості істотно відрізняються від властивостей нерозривного середовища. Ця обставина зумовлена тим, що велика частина локальних областей наноприладів має несиметричну структуру внаслідок розривів атомних та міжмолекулярних зв'язків, розщеплення симетричних молекул на підсистеми (вільні радикали). Через концентрацію в приповерхневому шарі дефектів та дислокацій і заряджання їх також формується несиметрія локальних приповерхневих областей із захопленням магнітних та електричних зарядів на магнітні поверхневі рівні та електронні поверхневі стани. На поверхні плівки формуються магнітні та електричні листки-моношари магнітних монополів та електричних зарядів. У плівковому середовищі утворюються системи розподілених електричних та магнітних зарядів. Тобто утворюються подвійні шари електричних та магнітних зарядів. Розміри цих шарів у напрямку, перпендикулярному до поверхні плівки одного порядку з товщинами плівок. Внаслідок цього фізичні властивості середовища у двох напрямках різко відрізняються. Повинна бути сформована система знань, що описує, пояснює і передбачає фізико-хімічні властивості нанорозмірних структур.

Принципове значення у розумінні цих явищ мають електромагнітні процеси у плівках. Побудова польових моделей сильно ускладнюється через необхідність врахування значення поверхні.

Головне під час побудови моделей наноприладів – це адекватний опис поверхневих явищ. На поверхні проходять розриви атомних зв'язків. Від цього поверхневий шар наноплівки набуває принципово нових фізико-хімічних властивостей. Від симетрії явищ відбувається перехід до несиметрії. Розриви атомних зв'язків приводять до появи поверхневих рівнів, які захоплюють кванти заряду.

На найвищій електронній орбіті поверхневого шару атомів розташовані два електрони з протилежними спінами, система перебуває у електромагнітній рівновазі, поки цей атомний шар не стає поверхневим. У поверхневому атомному шарі відбудеться розрив атомних зв'язків і збурення спінового континууму. З'являється некомпенсований магнітний момент. Згідно з правилом Хунда поверхневий шар плівки стає ортошаром, у якому спіни мають однаковий знак. Неккомпенсований поверхневий магнітний заряд формується на поверхні.

Особливо перспективними є технології на основі вуглецевих наноплівок. Ці технології забезпечують подальше зменшення розмірів. Розміри, виготовлених з атомів вуглецю наноприладів, зменшуються до 1 нм. Тоді як у кремнієвих нанoeлементях розміри на порядок більші.

З вуглецю можна виготовити нанотрубки особливої форми, наприклад, Y-подібної форми. У такому вигляді ця трубка має властивості польового транзистора.

Отже, дослідники нанопроцесів зазнавали два діаметрально протилежні явища – явище зменшення від'ємного заряду локальних областей поверхні наноплівки і явище збільшення концентрації від'ємного заряду. Очевидно, ці явища відображаються на властивостях наносередовища. Насамперед такі процеси впливають на електромагнітний імпульс середовища.

Вільні мікрочастинки у наноплівці можна охарактеризувати квазіімпульсом \vec{P} , зв'язаним з квазіхвильовим вектором \vec{k}

$$\vec{P} = \hbar \vec{k}, \quad (1)$$

де \hbar – стала Планка.

У наносвіті крім звичайних правоорієнтованих середовищ (рис. 1, а), властивих суцільним структурам, можливі лівоорієнтовані (рис. 1, б), коли квазіхвильовий вектор має напрям, протилежний до вектора Пойнтинга $\vec{\Pi}$.

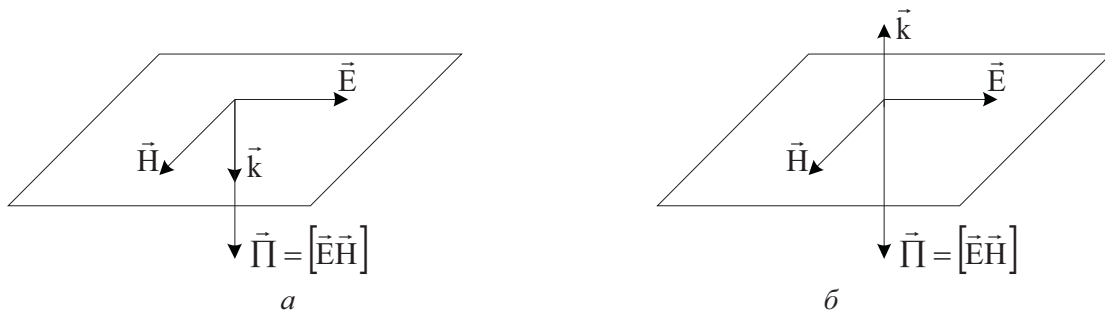


Рис. 1. Розташування векторів:
а – праворуч орієнтовані середовища; б – ліворуч орієнтовані середовища

У наносвіті змінюється зонна структура речовини. Відстані між енергетичними рівнями у валентній зоні зменшуються, що впливає з розв'язку рівняння Шредінгера, враховуючи квантові поверхневі ефекти. Ширина забороненої зони в приповерхневих шарах також зменшується.

До опису електромагнітних процесів у наносередовищах придатна електрична система рівнянь електродинаміки збагачена процесами дифузії заряджених частинок з вищих енергетичних рівнів одного середовища на нижчі енергетичні рівні у другому. Завдяки цьому створюється модель запірного шару на межі p- та n- областей провідності.

Систему граничних умов класичної електродинаміки потрібно доповнити граничними умовами для дифузійних напруженостей континуумів дірок N_p та континуумів електронів N_n [1]:

$$d_{n1}N_{n1} + d_{n2}N_{n2} = -u_k \quad (2)$$

$$d_{p1}N_{p1} + d_{p2}N_{p2} = -u_k \quad (3)$$

де d_n та d_p – характеристичні довжини електронів та дірок в середовищах 1 та 2; u_k – контактна різниця потенціалів, що визначається заляганням рівнів Фермі в середовищах до обміну носіями зарядів між середовищами.

Розрахунок характеристик напівпровідникових приладів здійснюється на основі рівнянь неперервності для електронів і дірок, рівняння Пуассона та рівняння Шредінгера:

$$\operatorname{div} \bar{J}_n - eR - e \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

$$\operatorname{div} \bar{J}_p + eR + e \frac{\partial p}{\partial t} = 0, \quad (5)$$

$$\Delta \varphi = -\frac{e}{\varepsilon_a} (p - n + N_d - N_a), \quad (6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x^2} + U(x)\psi_i = E_i \psi_i, \quad (7)$$

де \bar{J}_n та \bar{J}_p – вектори густин електронного та діркового струмів, e – заряд електрона; R – швидкість генераційно-рекомбінаційних процесів; n та p – концентрації електронів та дірок, φ – електричний потенціал; N_d та N_a – концентрації донорної та акцепторної домішок; $\hbar = h/(2\pi)$ – стала Планка; ψ_i – хвильова функція електрона на i -му рівні квантування; $U(x)$ – потенціальна енергія; m – маса електрона; E_i – енергія i -го рівня квантування.

Досвід показує, що найменша трудомісткість реалізації розрахунку досягається в системі координат – квазірівні Фермі електронів Φ_n та дірок Φ_p і електричний потенціал φ у середовищі.

Зв'язок потоків і сил доцільно записати на основі співвідношень між густинами зарядів і градієнтами квазіпотенціалів Φ_n та Φ_p електронного та діркового газів

$$\bar{J}_n = -e\mu_n n \Delta \Phi_n, \quad (8)$$

$$\bar{J}_p = -e\mu_p p \Delta \Phi_p, \quad (9)$$

де μ_n та μ_p – рухливості електронів та дірок.

Квазіпотенціали Фермі зв'язані з електричним та дифузійним потенціалом

$$\varphi - \Phi_n + \chi_n = 0, \quad (10)$$

$$\varphi - \Phi_p + \chi_p = 0, \quad (11)$$

де χ_n та χ_p – дифузійні потенціали континууму електронів і дірок відповідно. Зв'язок між концентраціями електронів і дірок з відповідними дифузійними потенціалами подано у вигляді

$$n = n_0 \exp\left(-\frac{\chi_n}{\varphi_t}\right), \quad (12)$$

$$p = p_0 \exp\left(\frac{\chi_p}{\varphi_t}\right), \quad (13)$$

де $\varphi_t = \frac{kT}{e}$ – температурний потенціал.

Початкові умови, необхідні для формування крайової задачі, беремо з розв'язку математичної моделі контактуючих областей пристрою в неробочому стані, тобто до прикладання зовнішніх напруг.

Форма потенціального бар'єру $U(x)$ зумовлена полем р-п переходу. Тунельні переходи електронів між заповненими і вільними станами, які відокремлені потенціальним бар'єром, відбуваються тоді, коли геометрична ширина потенціального бар'єру близька до дебройлівської довжини хвилі $\lambda_D = 2\pi\hbar/(mv)$. Тоді квантово-механічний розгляд тунельних переходів зарядів здійснюють шляхом самоузгодженого розв'язування рівняння Пуассона та рівняння Шредінгера. Причому в зоні потенціального бар'єра рівняння Шредінгера розглядають у такому вигляді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x^2} + U(x)\psi_i = E_i \psi_i, \quad (14)$$

а за межами потенціального бар'єру ліворуч і праворуч – в іншому вигляді

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x^2} + E_i \psi_i = 0. \quad (15)$$

Граничні умови для хвильової функції задають на краях потенціального бар'єру

$$\frac{d\psi_i}{dx}(x = -x_d) = 1, \quad \psi_i(x = -x_d) = \frac{1}{\sqrt{-E_i}}, \quad \frac{d\psi_i}{dx}(x = x_d) = -\sqrt{-E_i} \psi_i(x = x_d) \quad (16)$$

де $\pm x_d$ – координати країв потенціального бар'єру.

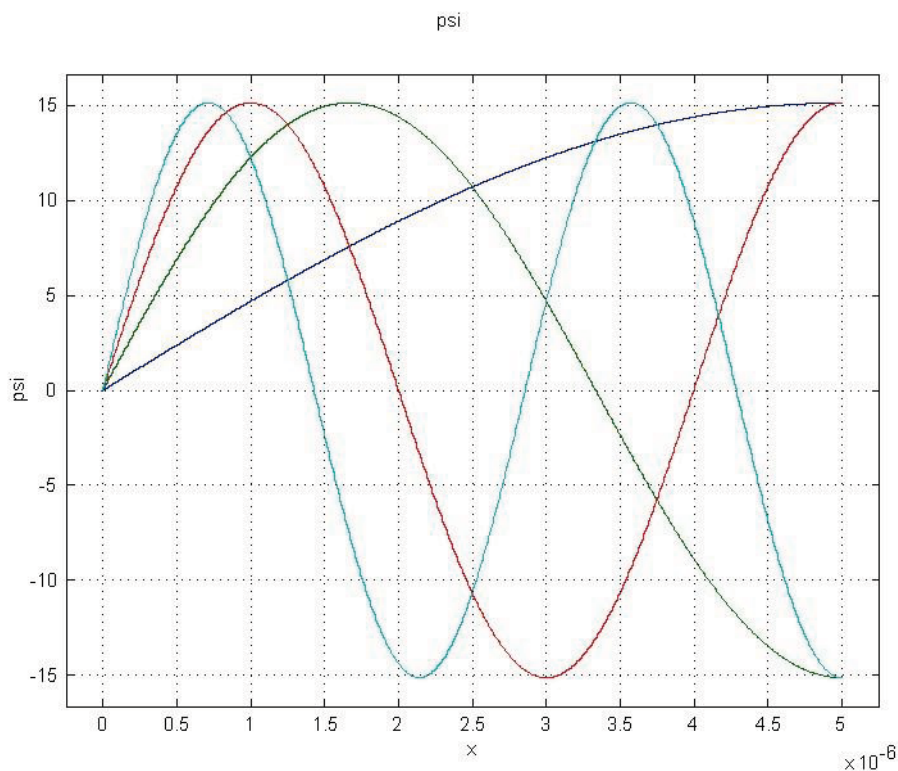


Рис. 2. Графік хвильової функції для чотирьох рівнів квантування енергії електрона

Локальна концентрація основних носіїв заряду в області потенціальної ями, яка використовується в рівнянні Пуассона, знаходиться за виразом

$$n(x) = \frac{mkT}{\pi\hbar} \sum_i \ln \left(n \left(1 + e^{\frac{E_F - E_i}{kT}} \right) |\psi_i(x)|^2 \right). \quad (17)$$

З математичного погляду описані моделі зводяться до такої переважно двовимірної крайової задачі:

а) система диференціальних рівнянь складається з параболічних рівнянь

$$d \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u) + au = f, \quad (18)$$

та еліптичних рівнянь

$$-\nabla \cdot (c\nabla u) + au = f, \quad (19)$$

б) граничні умов двох типів

$$\begin{array}{ll} \text{Діріхле} & hu = r \\ \text{і Неймана} & \vec{n} \cdot (c\nabla u) + qu = g, \end{array} \quad (20)$$

де u – невідома величина; d , c , a – скалярні коефіцієнти диференціальних рівнянь в часткових похідних; f – права частина диференційного рівняння, що відображає внутрішні джерела поля в середовищі.

в) початкові умови задаються на підставі розв’язку усталеного режиму роботи пристрою при нульових значеннях прикладених напруг.

Окрім цього треба враховувати, що розв’язування рівняння Шредінгера – це розв’язок крайової задачі на власні значення, тобто коли права частина диференційного рівняння залежить від одного або декількох параметрів, які теж є невідомими.

Для розв’язання отриманої системи диференціальних рівнянь, досліджувану двовимірну область розбиваємо на скінченне число підобластей у формі трикутників, надалі елементів (рис. 3). Неперервна невідома величина u апроксимується на кожному елементі многочленом, який визначається за допомогою вузлових значень цієї величини

$$\bar{u} = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y, \quad (21)$$

де \bar{u} – наближений розв’язок невідомої величини; $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ – коефіцієнти, що визначаються з

$$\text{рівняння } \begin{bmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_i \\ u_j \\ u_k \end{bmatrix}; \quad u_i, u_j, u_k - \text{значення невідомої величини у вузлах } i, j, k$$

трикутного елемента; $x_i, y_i, x_j, y_j, x_k, y_k$ – координати вузлів i, j, k відповідно.

Після перетворень наближений розв’язок невідомої величини шукатимемо у вигляді

$$\bar{u} = \sum \vec{N}_m \bar{u}_m^t, \quad (22)$$

де $\vec{N}_m = (N_i, N_j, N_k)$ – вектор-рядок функції форми трикутного елемента; $\bar{u}_m^t = (u_i, u_j, u_k)^t$ – вектор-стовпець значень невідомої величини у вузлах i, j, k трикутного елемента.

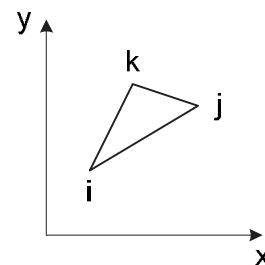
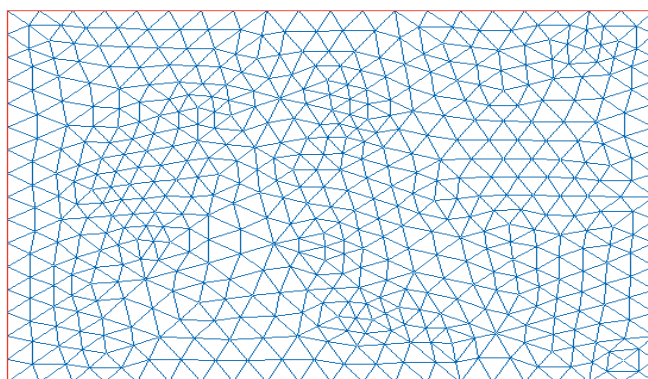


Рис. 3. Досліджувана область у вигляді сукупності трикутних елементів (а); трикутний елемент з вузлами i, j, k (б)

Розв’язувані диференціальні рівняння можна подати у вигляді

$$\mathbf{L}u - \mathbf{f} = 0, \quad (23)$$

де \mathbf{L} – диференціальний оператор; \mathbf{f} – функція, що описує розподіл внутрішніх джерел досліджуваного поля.

Після підстановки в нього наближеного розв'язку $\bar{\mathbf{u}}$ отримаємо нев'язку $\mathbf{L}\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{f} = \boldsymbol{\varepsilon}$, яку необхідно мінімізувати. Для цього застосуємо метод Гальоркіна, в якому це досягається за допомогою співвідношень ортогональності

$$\int_V \bar{\mathbf{N}}_m^t (\mathbf{L}\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{f}) dV = 0, \quad (24)$$

для кожної з базових функцій $\bar{\mathbf{N}}_m$. Після відповідних перетворень отримуємо систему алгебричних рівнянь щодо вузлових значень невідомої величини, яку розв'язуємо методом подвійної факторизації. Числову реалізацію математичної моделі здійснюємо за допомогою програмного пакета MATLAB чи FEMLAB.

Висновки

Моделювання кремнієвих та вуглецевих наноприладів необхідно виконувати на базі рівнянь класичної електродинаміки в поєднанні з описом процесів на підставі квантово-механічних уявлень. Вплив приповерхневих властивостей наноприладів враховується в граничних умовах, які в кожному окремому випадку матимуть свої особливості. Запропонований підхід до моделювання наноприладів дасть змогу ефективніше здійснювати розроблення фізико-топологічної структури цих приладів.

1. Пеленський Р.А. Симетрична система рівнянь електродинаміки // Вісн. Нац. ун-ту "Львівська політехніка". – 2007. – № 587. – С. 75–80. 2. Пеленський Р.А. К учету контактных явлений в уравнениях электродинамики // ЖТФ. – 1979. – 49, № 4. 3. Мулярчик С.Г. Численное моделирование микроэлектронных структур. – Минск: Изд-во "Университетское", 1989. – 368. 4. Бубенников А.Н., Садовников А.Д. Физико-топологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС. – М.: Радио и связь, 1991. – 280 с. 5. Щука А.А. Нанoeлектроника. – М.: Физматкнига, 2007. – 464 с. 6. Борисенко В.Е., Воробьева А.И., Уткина Е.А. Нанoeлектроника. Бином // Лаборатория знаний. – 2009. – 223 с.