

УДК 621.382

И. И. Абрамов, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, г. Минск,
Республика Беларусь

ПРОБЛЕМЫ И ПРИНЦИПЫ ФИЗИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ.

Часть I. Основные положения

Выделены и рассмотрены проблемы, принципы и подходы к моделированию физических процессов в приборных структурах на твердом теле. Их анализ в цикле статей проводится для самых разнообразных элементов микро- и наноэлектроники. В данной части работы сформулированы основные положения, необходимые при рассмотрении указанных вопросов с единых позиций для приборных структур как микроэлектроники, так и наноэлектроники.

Введение

Одно из самых сложных в настоящее время изделий промышленности — интегральная схема (ИС). Современная ИС микроэлектроники может содержать более 10^8 элементов на кристалле и среди искусственных объектов наиболее близка по своей организации, структуре и возможностям к человеческому мозгу. В то же время мозг может интерпретироваться в качестве объекта органической гибридной наноэлектроники, созданного Природой. Отметим лишь следующие факты: передача информации в мозгу осуществляется с помощью электрических сигналов; активными структурами, участвующими в этом процессе, являются органические молекулы, т. е. объекты с нанометровыми размерами. В связи с этим речь идет об органической наноэлектронике. Гибридная же она потому, что кроме электрических здесь очень важны, по крайней мере, биохимические процессы. Уровень интеграции мозга человека около 10^{10} нейронов. Ожидается, что ИС твердотельной наноэлектроники будут содержать 10^{10} и более элементов на кристалле. Таким образом, речь идет о создании искусственных интеллектуальных информационных систем, по многим показателям сравнимых и превосходящих мозг, но на твердом теле. Основным же преимуществом систем на твердом теле, судя по всему, останется быстродействие.

Качество таких высокоинтегрированных систем во многом будет определяться активным элементом, или приборной структурой*, т. е. "кирпичиками" системы. Здесь уместна следующая аналогия.

Известно, что из плохого кирпича хорошее надежное здание не построишь.

Для глубокого исследования и анализа элементов ИС необходимо использовать математическое моделирование, причем соответствующие физико-математические модели должны характеризоваться достаточно высокой степенью адекватности. Такие модели, как правило, сложны и реализуются с применением численных методов на высокопроизводительных ЭВМ. Следовательно, здесь целесообразно использование концепции вычислительного эксперимента [1].

Целью предлагаемого цикла статей является выделение и анализ проблем, принципов и подходов к моделированию физических процессов в самых разнообразных приборных структурах микро- и наноэлектроники. В первой статье сформулированы основные положения, которые будут необходимы для рассмотрения указанных вопросов с единых позиций для элементов как микроэлектроники, так и наноэлектроники.

Основные определения. Парадокс

Для облегчения восприятия дальнейшего материала приведем основные определения. В литературе можно встретить более или менее удачные определения в области математического моделирования. В качестве базовых были выбраны книги [1, 2]. Применительно к рассматриваемой области необходимый спектр основных определений был сформулирован в [3, 4]. Следуем именно этим работам.

Определение. Под *математической моделью* (или просто моделью) элемента понимаем набор математических объектов (чисел, переменных, векторов, множеств и т. п.) и математических соотношений, в совокупности отражающих тем или иным образом физические процессы, происходящие в исследуемой приборной структуре.

Таким образом, будем рассматривать только модели физического типа (I тип, физико-математические модели). Заметим, что модели формального типа (II тип, чисто математические модели) могут с успехом использоваться в ряде важных случаев, например, на этапах функционально-логического, архитектурного проектирования ИС. Граница между моделями этих двух типов иногда бывает весьма условной. Так, при более глубоком рассмотрении в наиболее удачных формальных моделях все же устанавливается связь с базовыми физическими закономерностями функционирования исследуемого объекта, например фрагмента ИС [5, 6].

Далее приведем определение основных характеристик модели.

Определение. *Адекватность модели* — это сте-

* Термины *элемент* и *приборная структура* будут эквивалентными в данном цикле статей.

пень соответствия (или правильность отображения) физических процессов, описываемых моделью, процессам, реально протекающим в элементе.

Определение. *Точность модели* обычно оценивают по точности описания выходных (интегральных) характеристик элемента относительно экспериментальных данных.

Эти два определения устанавливают принципиальную разницу между адекватностью и точностью модели, которые в работах даже специалистов иногда отождествляются. Приведем пример. Так, часто формально можно описать вольт-амперную характеристику (ВАХ) приборной структуры с высокой точностью полиномами определенной степени, но такая модель в общем случае не будет адекватной, так как никак не вытекает из физической сущности работы элемента.

Определение. *Универсальность* определяется применимостью модели к описанию элементов с необходимой степенью точности в определенном диапазоне управляющих воздействий (токов, напряжений, температур и т. д.).

Определение. *Экономичность модели* характеризуется затратами времени и памяти системы "оборудование (ЭВМ, измерительная установка и т. п.)—человек" для подготовки исходных данных модели, ее реализации и обработки результатов.

Легко заметить противоречивость требования высокой точности, универсальности и экономичности модели. Так как чем выше точность и универсальность модели, тем, как правило, ниже ее экономичность, больше требуемые затраты времени и памяти ЭВМ.

Необходимо отметить, что с диалектической точки зрения *модель не может быть полностью адекватной (соответствовать) самому элементу*, т. е. она всегда лишь приближенно отображает свойства реальных элементов. Этим мы подчеркиваем идеальный характер модели. В дальнейшем мы также убедимся в справедливости основного парадокса моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники, заключающегося в том, что чем меньше носителей заряда непосредственно участвуют в транспорте, тем, как правило, более сложную физико-математическую модель необходимо использовать.

Концепции и подходы физики открытых систем

Анализ литературы показывает, что в современной физике существует целый ряд нерешенных проблем, а квантовая механика, к сожалению, не является панацеей от всех бед. В принципе, в этом нет ничего удивительного, так как квантовая механика является теорией, т. е. основывается на моделях, а следовательно, — идеализациях. Данный взгляд полностью согласуется с теоремой Геделя, в которой утверждается, что не существует конечной

аксиоматической системы, позволяющей разрешить все проблемы. Тем не менее, постулаты квантовой механики привели к созданию одной из самых мощных физических теорий окружающего нас мира.

В настоящее время наметился ряд тенденций в обобщении и дальнейшем развитии квантовой механики. Наиболее успешные подходы, по-видимому, развиваются в рамках физики открытых систем (ФОС) [7—10]. Введем определение открытой системы, следуя И. Пригожину — одному из основателей ФОС.

Определение. *Открытой системой* является система, которая обменивается с окружающей (внешней) средой энергией и массой.

В соответствии с приведенным определением рассматриваемые элементы микро- и нанoeлектроники могут интерпретироваться как объекты ФОС, т. е. открытые системы. К ним же могут быть отнесены и ИС, интегрированные системы, включающие отмеченные приборные структуры.

По изложенным причинам именно в рамках ФОС возможен, с точки зрения автора, единый подход к описанию самых разнообразных приборных структур микроэлектроники и нанoeлектроники.

Рассмотрим основные концепции и подходы, развиваемые в настоящее время в рамках ФОС, которые могут представить практический интерес при исследовании элементов.

Существуют две принципиально различные концепции представления открытых систем на микроуровне, т. е. на "первом шаге" перехода от реального объекта к его описанию в виде строгой модели. В рамках первой концепции описание ФОС изначально основывается на известных обратимых уравнениях квантовой механики, в частности, уравнении Шредингера и его следствиях. Необходимая необратимость при описании ФОС вводится на последующих огрубленных уровнях описания [9, 10]. В рамках второй концепции описания ФОС необратимость по сути дела постулируется на начальном уровне (микроуровне) описания. В одном из подходов, в частности [8], предлагается в связи с этим отказаться от традиционного изначального описания исходя из уравнения Шредингера, т. е. оперирования с величинами в гильбертовом пространстве. С математической точки зрения необходимо перейти к более общим оснащенным гильбертовым пространствам, а исходное уравнение Лиувилля—фон Неймана также постулируется. Итак, и в том и в другом случаях мы начинаем с постулата. Это и есть "первый шаг" — начало идеализации.

Здесь, действительно, возникает очень сложная проблема — проблема "первого шага". И она часто связывается в известными парадоксами и проблемами квантовой механики, хотя, по-видимому, является более философской. Основной вопрос, ин-

интересный для нас по сути дела, следующий: возможно ли описать систему точно? Ясно, что на практике для сложных систем это, как правило, невозможно. А возможно ли в принципе? Оставим этот вопрос без ответа по двум причинам. Первая причина уже была пояснена и следует из описанного выше общепризнанного взгляда на модель — *это всегда идеализация*, если речь идет об относительно сложных системах. Такими, в частности, и являются элементы. В связи с этим уместно вспомнить слова А. Эйнштейна, который отметил, что "доказать "сверхчеловеческую" объективность научной истины не удастся никогда". Вторая причина связана с указанным выше ответом на более важный вопрос — на практике полное описание невозможно. Таким образом, мы с вами изначально постулируем, что *любая модель приборной структуры микроэлектроники и нанoeлектроники на любом уровне описания является приближенной, т. е. содержит погрешности в описании*.

Рассмотрим основные подходы к описанию открытых систем, которые приводят к положительным результатам или являются продуктивными. Эти подходы основаны на следующих моделях:

- модель системы (на различных уровнях строгости описания), которая включает основную систему, ее окружение и взаимодействие между ними;
- модель, в основе которой лежит уравнение для матрицы плотности системы и получить которое можно после суммирования по степеням свободы окружения;
- модель, включающая ограниченные интегралы по траекториям (квантовые коридоры), на основе фейнмановской формулировки квантовой механики;
- модель на основе уравнения Шредингера с комплексным гамильтонианом;
- модель на основе уравнения для матрицы плотности в оснащенных гильбертовых пространствах;
- модель на основе стохастического уравнения Шредингера.

Указанные известные подходы имеют достоинства и недостатки. В целом, они, хотя и могут приводить к различным уравнениям модели, однако часто устанавливается их эквивалентность. Например, показано [10], что модель на основе ограниченных интегралов по траекториям может быть сведена к модели на основе уравнения Шредингера с комплексным гамильтонианом. Данное замечание имеет важное значение, так как позволяет нам не углубляться в отмеченную ранее философскую проблему "первого шага".

В связи с этим в качестве базовой выберем общую методологию вывода основных уравнений моделей последующих иерархических уровней в результате физических допущений с огрублениями по пространству, времени и статистическому ус-

реднения. Данный подход в свое время с успехом использовался Н. Боголюбовым [11] при выводе необратимых кинетических уравнений исходя из обратимого уравнения Лиувилля и был обобщен впоследствии на квантовомеханический случай [12]. Подход оказался эффективным и при получении моделей различных иерархических уровней, в частности, гидродинамических [12], причем в различных областях физики. В последнее время данный классический и традиционный подход для открытых систем наиболее последовательно развивался в работах Ю. Климонтовича [9]. С точки зрения автора, подход особенно эффективен при выводе уравнений моделей последующих иерархических уровней, т. е. после "первого шага".

Таким образом, *описание открытых систем эффективно проводить на основе построения уравнений модели путем введения дополнительных физических предположений с дальнейшим огрублением по пространству, времени и статистическим усреднением на каждом последующем иерархическом уровне описания*. Отличие от работ Ю. Климонтовича состоит в том, что в данной формулировке исключена проблема "первого шага" вследствие изложенного выше.

Следуя [9], введение дополнительных источников диссипации возможно путем огрубления по пространству и времени. В ряде случаев целесообразно введение источников Ланжевена, так как бывает очень сложно описать некоторые воздействия на открытую систему и некоторые процессы в самой системе. Возможно также введение дополнительных источников диссипации через граничные условия.

Проведенное рассмотрение приводит к выводу, что серьезной проблемой теоретического исследования объектов ФОС, в частности, приборных структур микро- и нанoeлектроники, является *проблема неполноты описания модели*. Возникает она, начиная с "первого шага", и, к сожалению, неизбежна для моделирования. Для нас также принципиально важно подчеркнуть, что в рамках той и другой концепций описания открытых систем исходные уравнения первого (иерархического) уровня постулируются.

Подходы к описанию явлений переноса и синтезу моделей элементов

Выделяются два общих подхода к описанию явлений переноса в приборных структурах микро- и нанoeлектроники, а именно [13–16]: *полуклассический и квантовомеханический*.

Первый служит в качестве основы моделей структур, когда электронно-дырочная плазма (ЭДП) является классической системой, а сам подход основывается на статистической физике и некоторых квантовомеханических представлениях, в частности, о полупроводниках. Второй общий подход не-

обходимо применять при существенном влиянии квантовомеханических эффектов на процессы переноса, наблюдаемые при соизмеримости длины волны де Бройля носителей заряда λ_B с характерической длиной прибора или размерами технологических неоднородностей $L_{\text{хар}}$, т. е. когда ЭДП является квантовомеханической системой.

Анализ известных моделей полупроводниковых приборов и элементов ИС физического типа в рамках отмеченных двух подходов позволил выделить *три общих метода синтеза [15, 16], в основе которых лежат: первого — физические допущения с огрублениями по пространству, времени и в результате статистического усреднения; второго — использование различных модельных зависимостей для параметров моделей; третьего — аппроксимации о характере поведения исходных функций.* Первый подход является наиболее кардинальным и, как уже отмечалось, лежит в основе построения иерархии уравнений ФОС. В работах [3, 4] было показано, что в сочетании с двумя другими подходами он приводит к синтезу практически всех известных моделей элементов кремниевых ИС физического типа, т. е. не формальных.

Впоследствии будет показано, что *отмеченные два общих подхода к описанию явлений переноса и три основных метода синтеза достаточны для того, чтобы построить практически любую модель приборной структуры как микроэлектроники, так и нанозлектроники физического типа.* Кроме того, дальнейшее рассмотрение будет проводиться в соответствии с основными положениями данной статьи.

Список литературы

1. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
2. Системы автоматизированного проектирования в радиоэлектронике: Справочник / Под ред. И. П. Норенкова. М.: Радио и связь, 1986. 368 с.
3. Абрамов И. И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пособие. Мн.: БГУ, 1999. 92 с.
4. Абрамов И. И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
5. Носов Ю. Р., Петросяц К. О., Шилин В. А. Математические модели элементов интегральной электроники. М.: Советское радио, 1976. 304 с.
6. Чахмахсазян Е. А., Мозговой Г. П., Силян В. Д. Математическое моделирование и макромоделирование биполярных элементов электронных схем. М.: Радио и связь, 1985. 144 с.
7. Пригожин Н. Введение в термодинамику необратимых процессов. М.: Изд. иностр. лит., 1960. 127 с.
8. Пригожин Н., Стенгерс И. Время, хаос, квант. К решению парадокса времени. М.: Эдиториал УРСС, 2001. 240 с.
9. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем. Т. 3. Физика квантовых открытых систем. М.: Янус — К, 2001. 508 с.
10. Менский М. Б. Квантовые измерения и декогеренция. М.: Физматлит, 2001. 232 с.
11. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л.: Гостехиздат, 1946. 120 с.
12. Гуров К. П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.
13. Barker J. R., Ferry D. K. On the physics and modeling of small semiconductor devices // Solid-State Electron. 1980. V. 23. N 6. P. 519—549.
14. Рыжий В. И., Баннов Н. А. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральных схем: состояние и проблемы // Микроэлектроника. 1987. Т. 16. № 6. С. 484—496.
15. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 5. С. 3—9.
16. Абрамов И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн.: БГУ, 1999. 189 с.