

**ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ
КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
СВОЙСТВ ПЕРСПЕКТИВНЫХ
МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ МИКРО- И
НАНОЭЛЕКТРОНИКИ**



Научно-исследовательская лаборатория
Компьютерное проектирование
микро- и нанoeлектронных систем



Направления научных и прикладных исследований

- Компьютерное проектирование технологии/прибора/схемы/системы
 - Квантово-динамическое и молекулярно-динамическое моделирование свойств перспективных материалов и структур
 - Моделирование и оптимизация технологических процессов (микробиология)
 - Информационные и интернет технологии в образовании и научных исследованиях
-



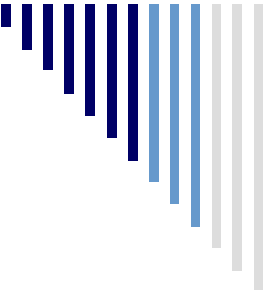
Используемые программные средства

- Silvaco, Cadence
 - VASP, HyperChem, NwChem, Ecce
 - Python (PyQT, NumPy, SciPy),
Scilab, Mathematica
 - Php, MySQL, JavaScript, SCORM
-



Расчеты из первых принципов (*ab-initio*)

- Использование фундаментальных законов физики
 - Набор "принятых" приближений для численного решения соответствующих уравнений
 - Отсутствие эмпирических приближений
-



Моделирование атомных конфигураций

Основные подходы:

- моделируемый объект (твердое тело) представляется как механическая система – методы молекулярной динамики и молекулярной механики;
 - моделируемый объект твердое тело представляется как квантово-химическая система – методы квантовой химии.
-



Моделирование физических свойств кристаллов из первых принципов

Описание кристалла
(атомные номера атомов и их позиции)

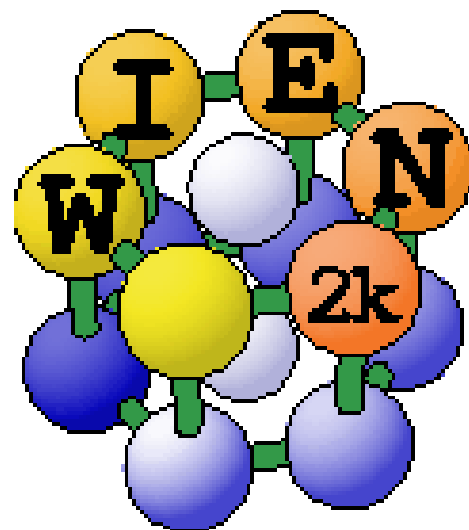


Расчет функционала
плотности (DFT)



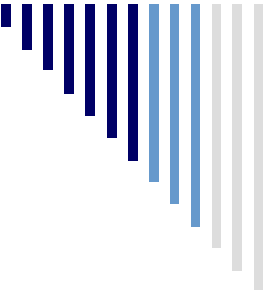
Точно прогнозируемые
структурные
и динамические
свойства материала

Программные средства
моделирования физических свойств
кристаллов из первых принципов



abinit

HyperChem[®]



1. Квантовые эффекты в биомолекулярных структурах родопсин – ретинал

Области применения:

- квантовые вычисления
- квантовый детектор

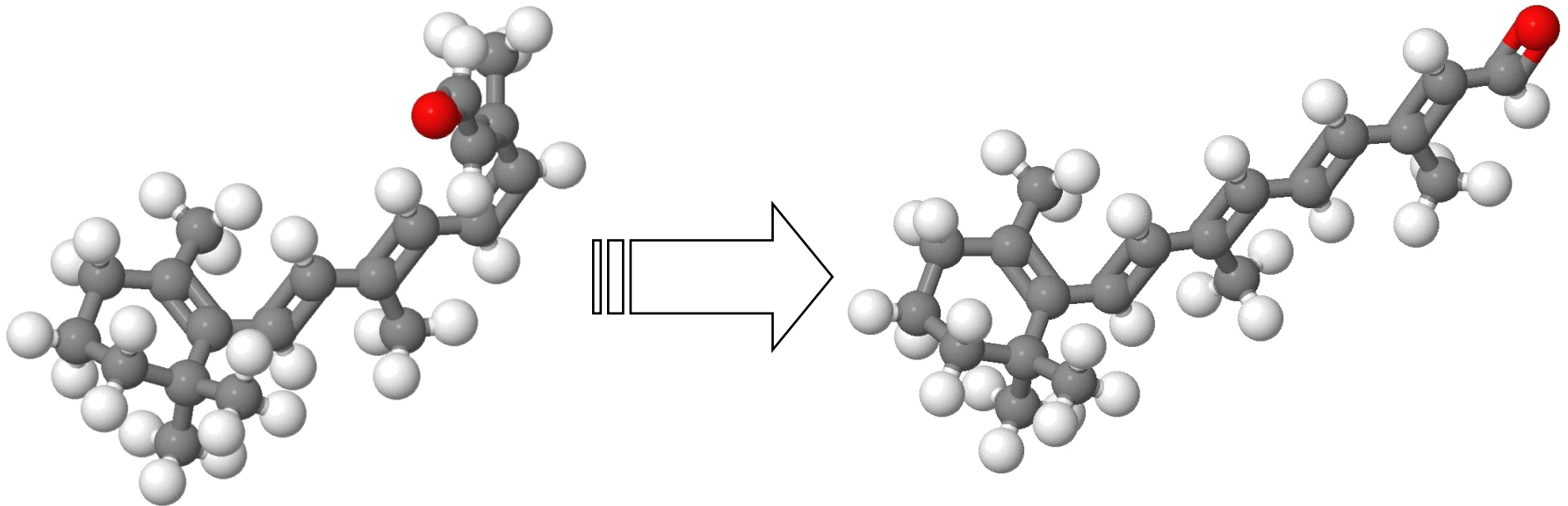
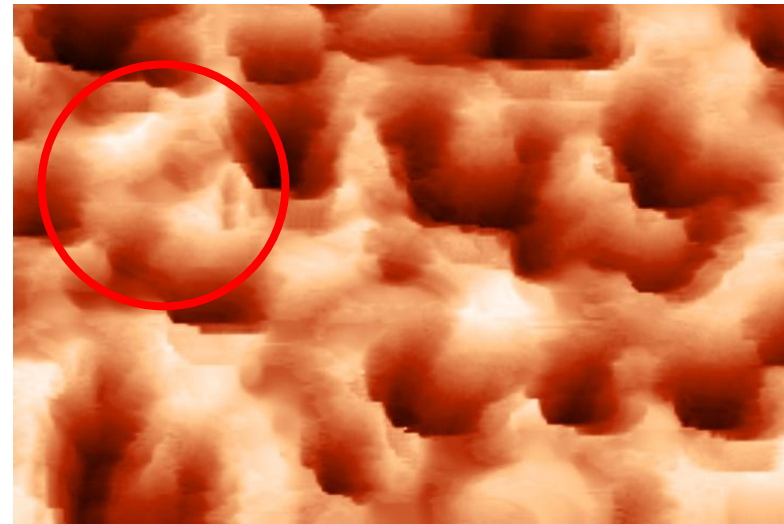


Фото-изомеризация ретинала

Моделирование взаимодействия фрагмента клеточной стенки бактерии с поверхностью кремния

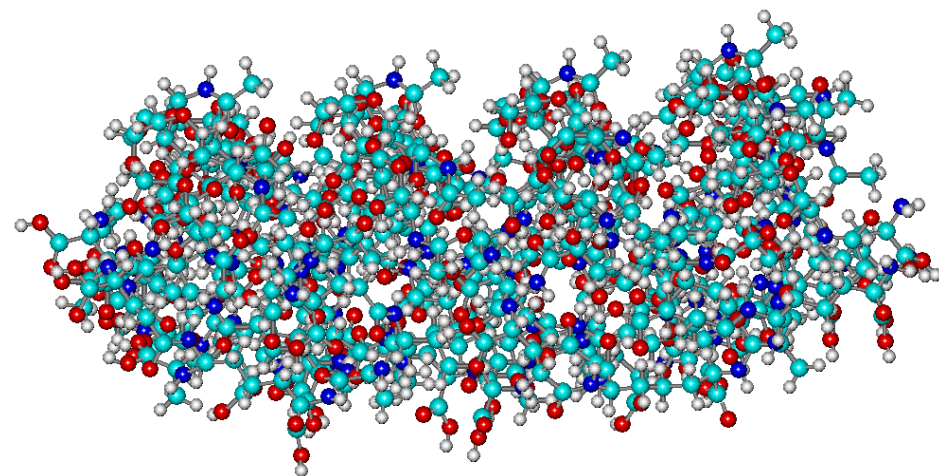
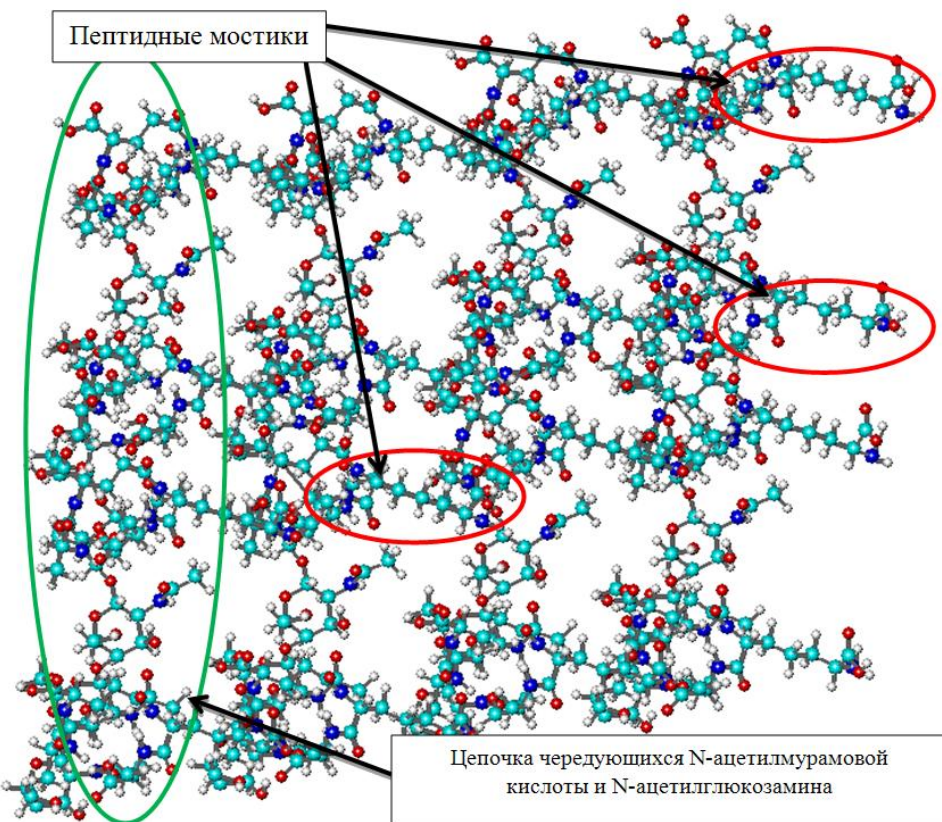
- Экспериментальные исследования показали: внесение в питательную среду порошкообразного пористого кремния в концентрациях 0,001-0,1% приводит к увеличению концентрации клеток бактерий на 32-56% и спор – на 38-88%, не оказывая влияния на их антимикробную активность; при использовании пористых материалов в качестве носителей для посевного материала, концентрация спор полученного указанным способом биопрепарата составляет $1,3 \times 10^9$ /мл, что на 32% выше, чем с обычным посевным материалом.



Бактерии *Bacillus subtilis* на поверхности пористого кремния (изображение получено АСМ)

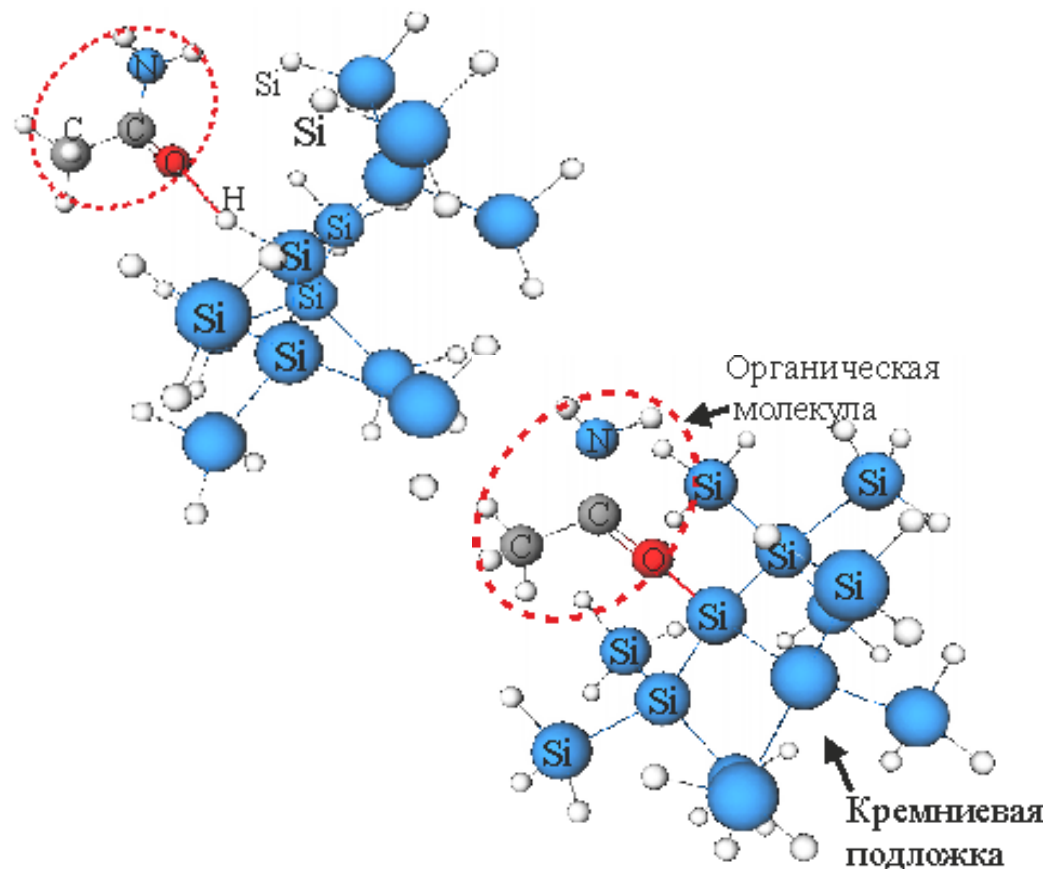
Моделирование взаимодействия фрагмента клеточной стенки бактерии с поверхностью кремния

- Построена сетчатая структура однослойного муреина 4×4 (16 молекул пептидогликана). При расчете минимума энергии слой изогнулся под небольшим углом, что свидетельствует о пластичности слоя.



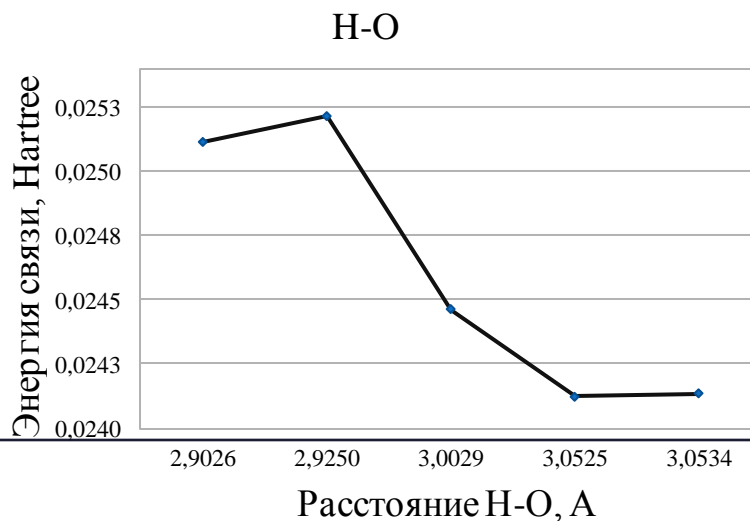
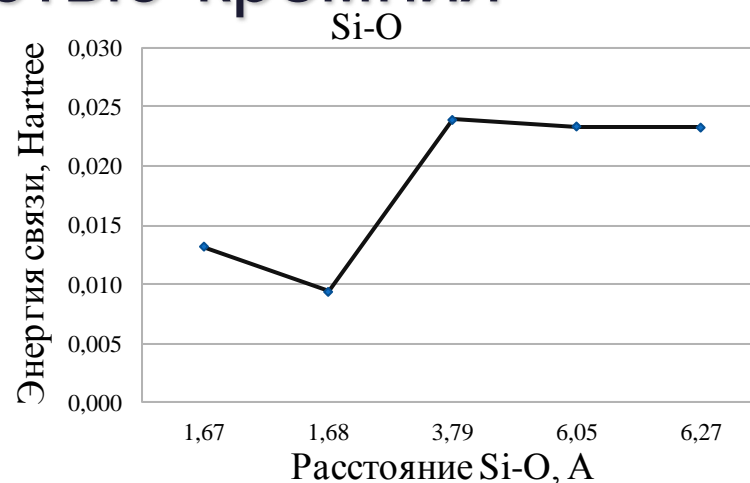
Моделирование взаимодействия фрагмента клеточной стенки бактерии с поверхностью кремния

- Рассмотрены два механизма образования новой связи кислорода с подложкой: C-O-H-Si и C-O-Si, причем в первом случае вероятно образование водородной связи;
- Моделирование в программе NWChem осуществлялось с использованием метода SCF.
- Для атомов, участвующих во взаимодействиях использовался базис 6-31G*, для остальных – 3-21G.

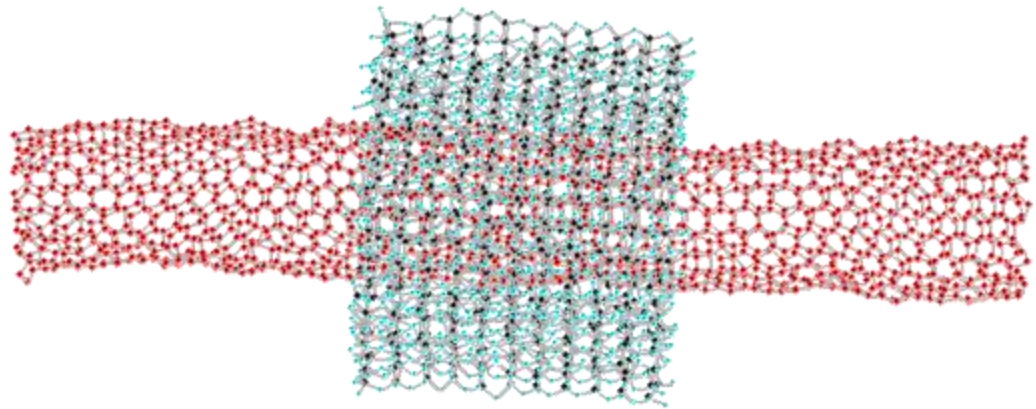
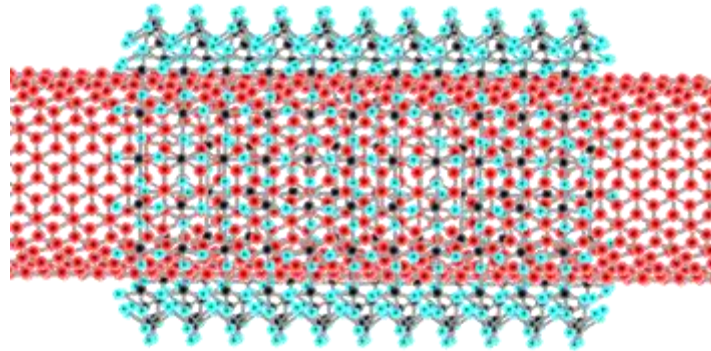
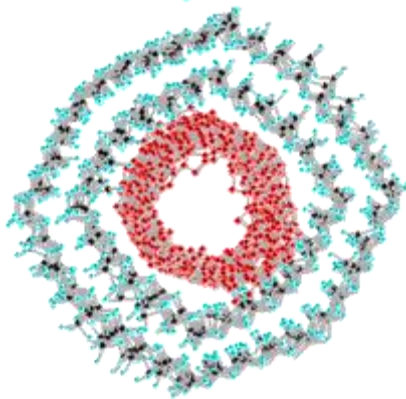
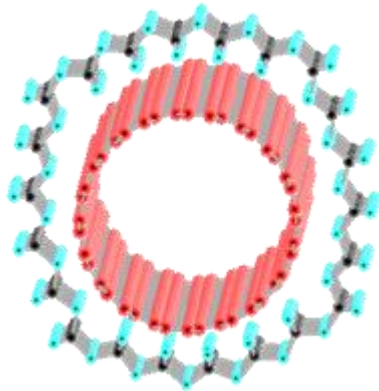


Моделирование взаимодействия фрагмента клеточной стенки бактерии с поверхностью кремния

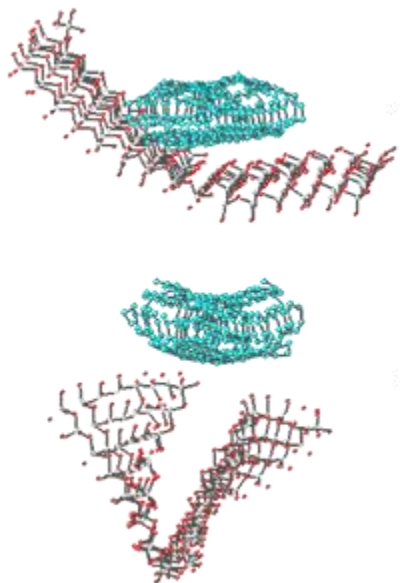
- Результаты вычислений показали, что при взаимодействии клеточной фрагмента стенки с поверхностью кремния по механизму C-O-Si, как и предсказывалось, может образовываться ковалентная связь Si-O, длиной ~ 0.17 нм;
- Взаимодействие по механизму C-O-H-Si не приводит ни к образованию ковалентной связи, ни к образованию водородной связи;
- Из полученных результатов можно сделать вывод, что бактерия будет иммобилизоваться посредством образования химических связей на кремниевой подложке, поверхность которой очищена от водорода.



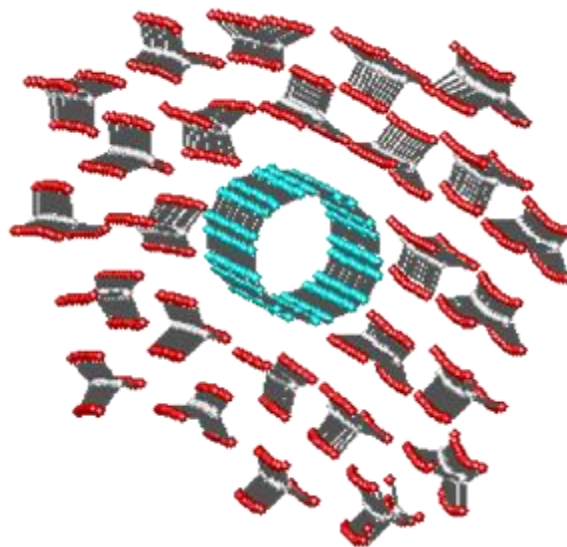
2. Система SiO_2 на углеродной нанотрубке (УНТ) как элемент нано МОП-транзистора



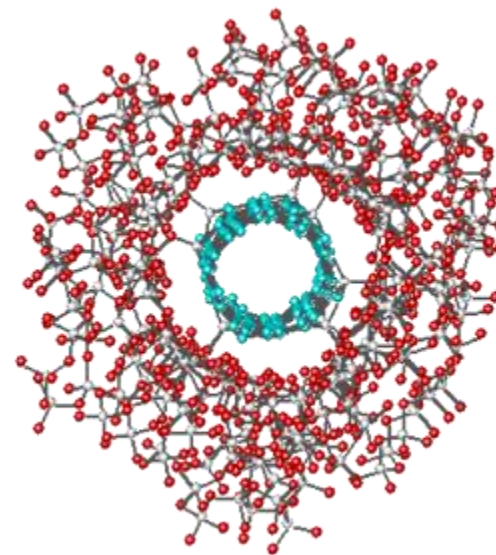
Система SiO_2 на углеродной нанотрубке (УНТ) как элемент нано МОП-транзистора



Взаимодействие между углеродной нанотрубкой и монослоем SiO_2

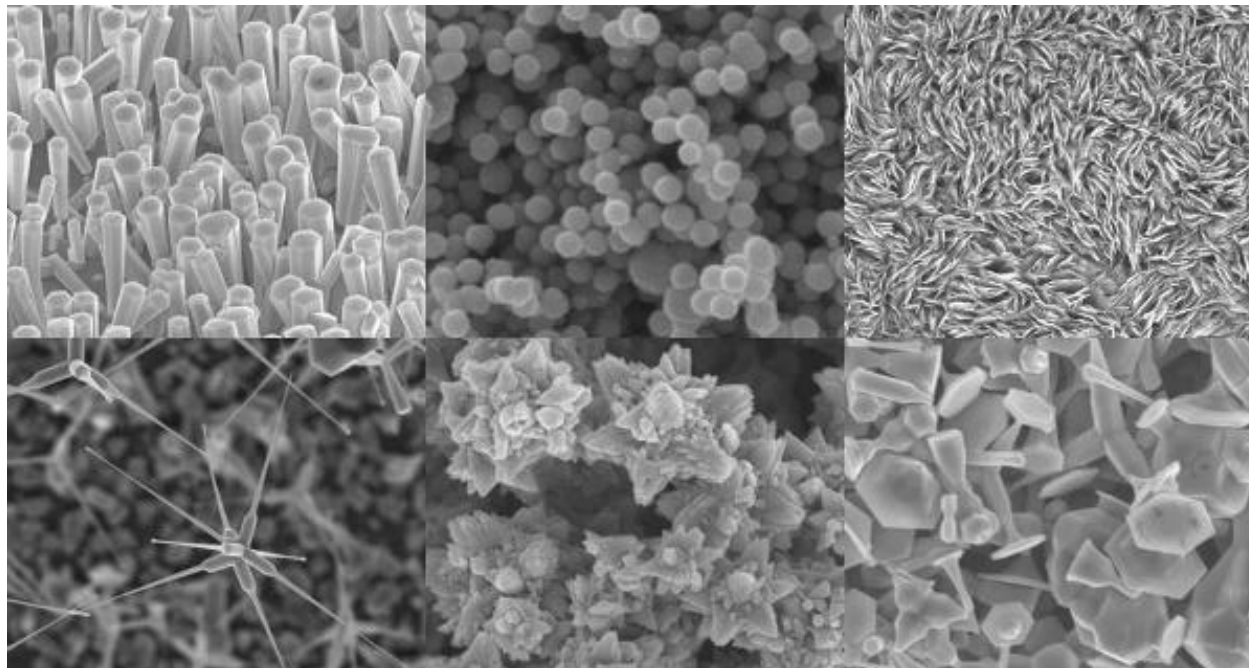


Цепочки Si_nO_{3n} и углеродная нанотрубка



Облако колец Si_6O_{18} вокруг углеродной нанотрубки

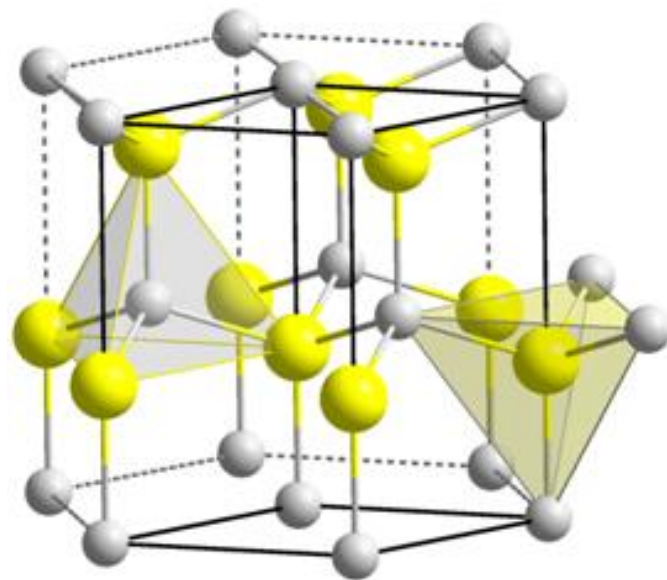
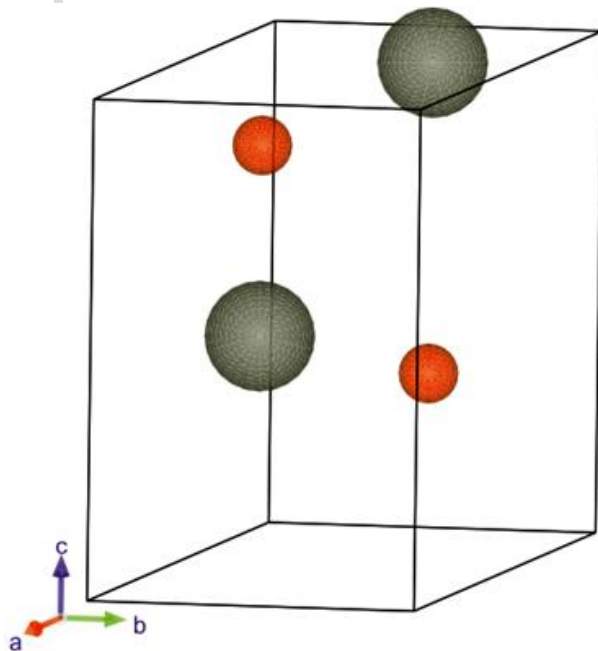
Моделирование электронных и магнитных свойств ZnO



- Наностержни
- Сферические наночастицы
- Пластинки

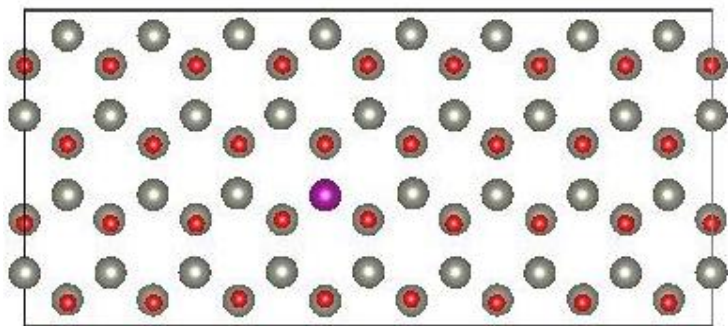
- Тетраподы
- Цветкообразные структуры
- Гексогональные пластинки

Результаты моделирования (Вюрцит)

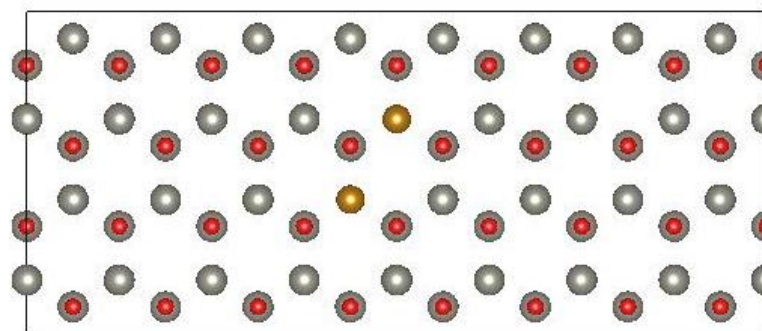


Соединение	Постоянная решетки		
	a, Å	b, Å	c, Å
ZnO	3,249	3,249	5,207

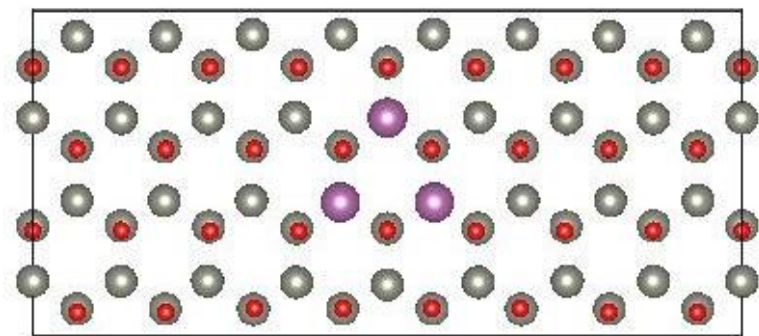
Результаты – суперячейки с дефектами замещения



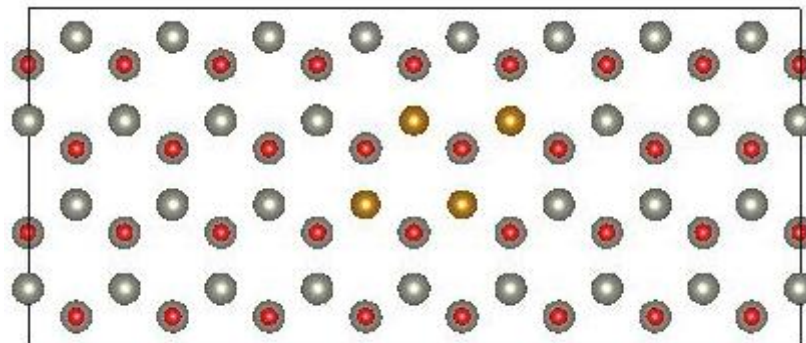
$\text{ZnO:X}_{0,78}$



$\text{ZnO:X}_{1,56}$

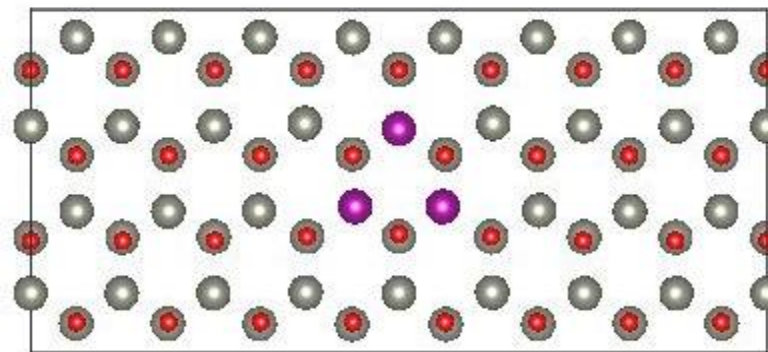
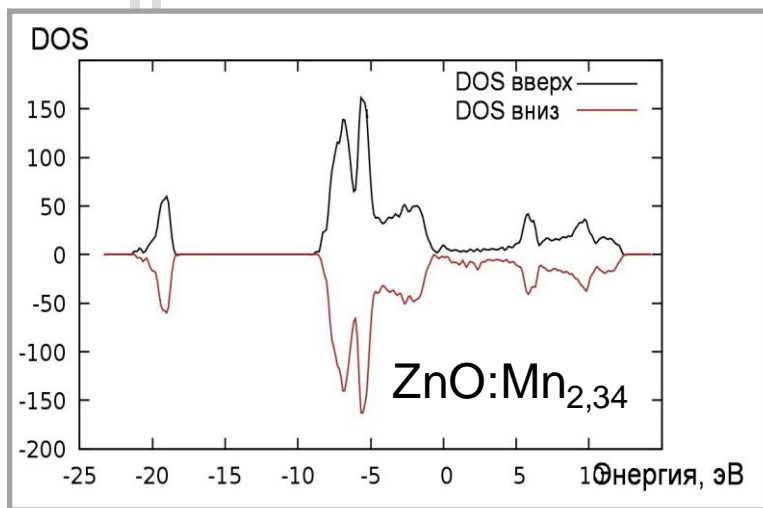


$\text{ZnO:X}_{2,34}$

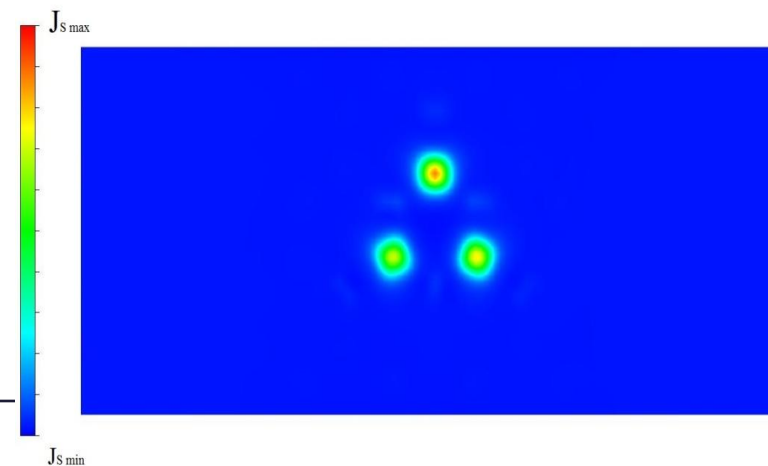
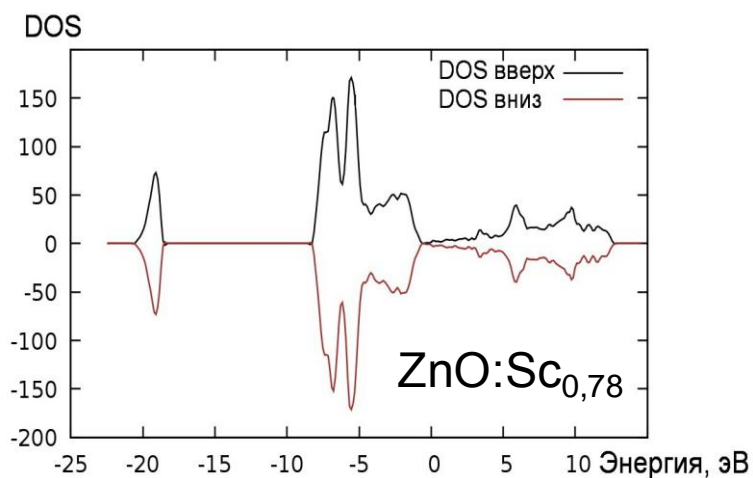


$\text{ZnO:X}_{3,13}$

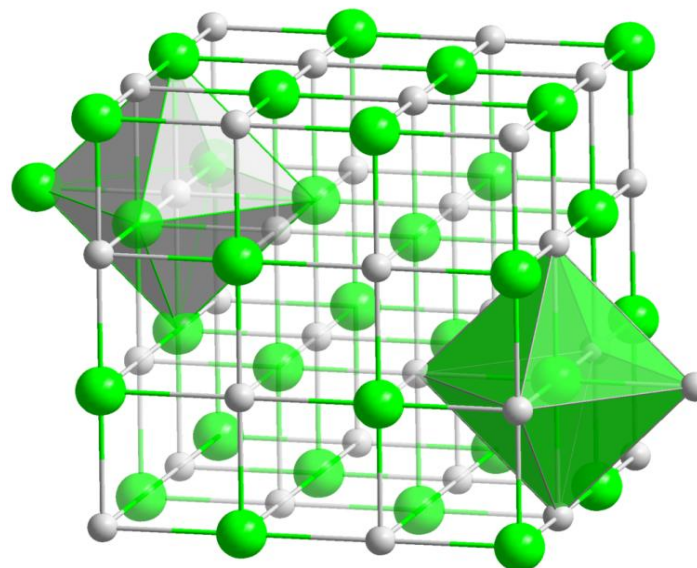
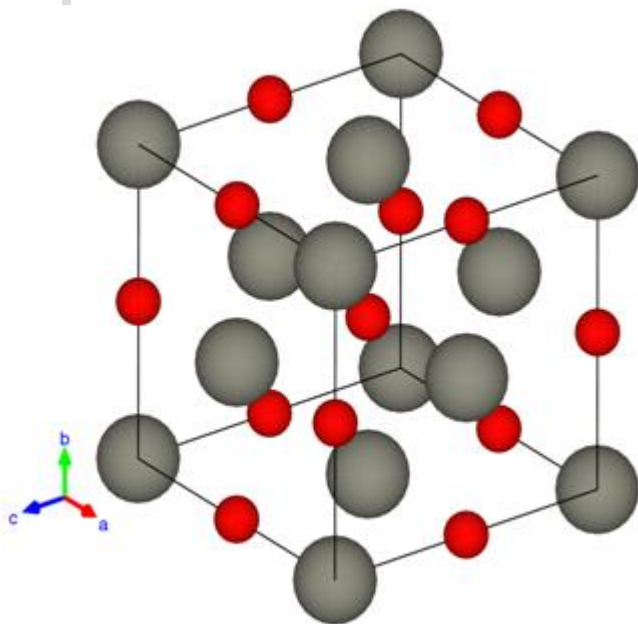
Результаты – распределения электронной плотности и намагниченности насыщения



ZnO:Mn_{2,34}



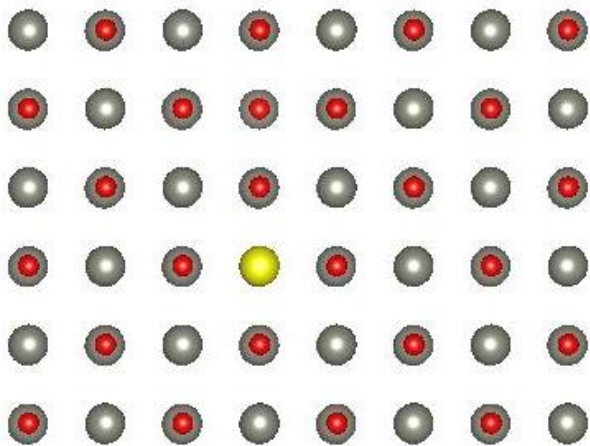
Результаты моделирования (каменная соль)



Соединение	Постоянная решетки		
	a, Å	b, Å	c, Å
ZnO	4,288	4,288	4,288

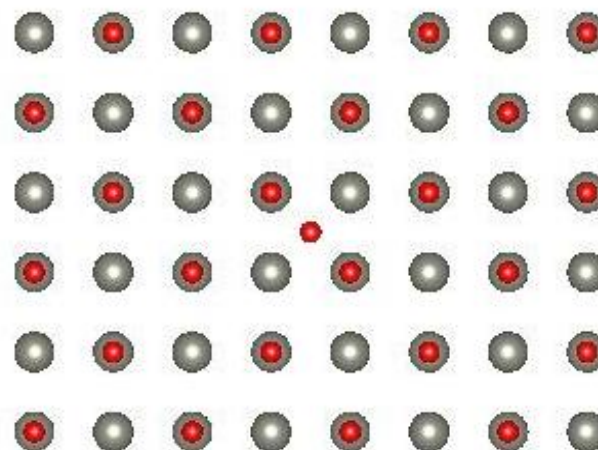
Результаты – структура суперячеек и распределения электронной плотности

Вакансия цинка

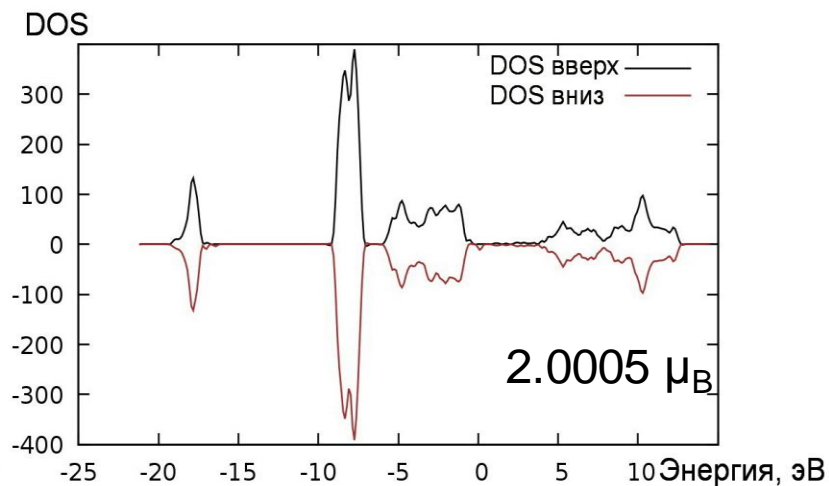
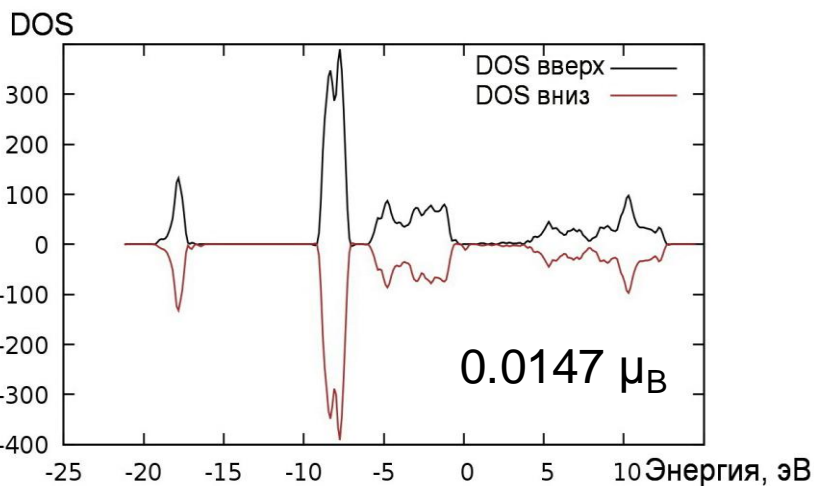


вакансия

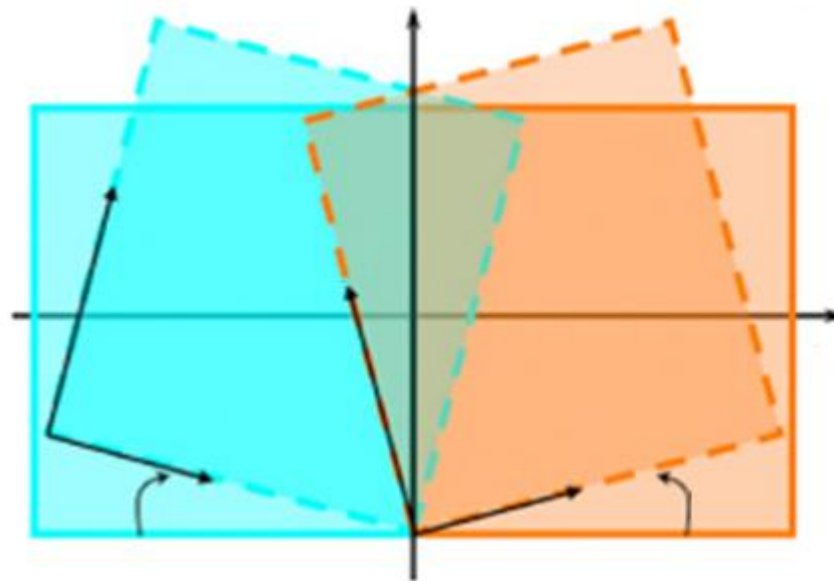
Внедрение кислорода



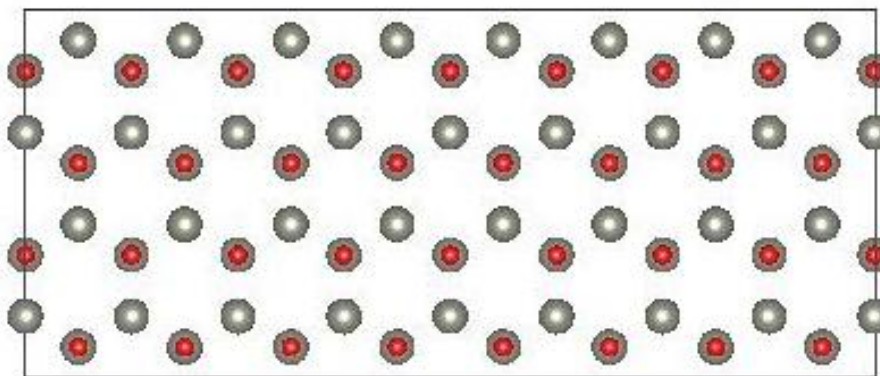
внедрение



Построение модели границы зерна

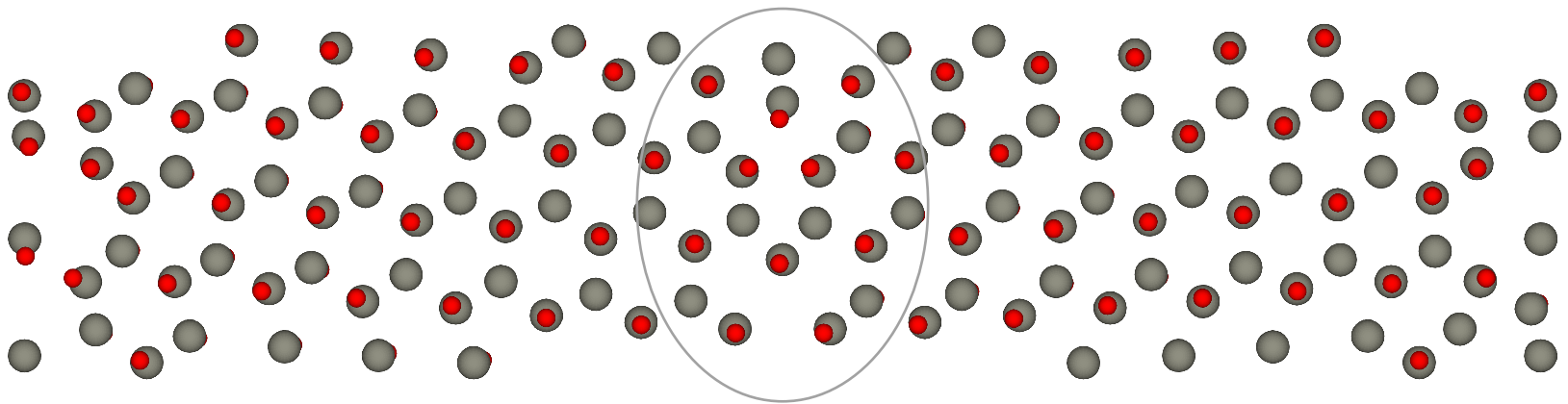


Супер-ячейка



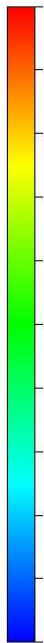
Результаты моделирования границы зерна

Модель границы зерна после процесса релаксации

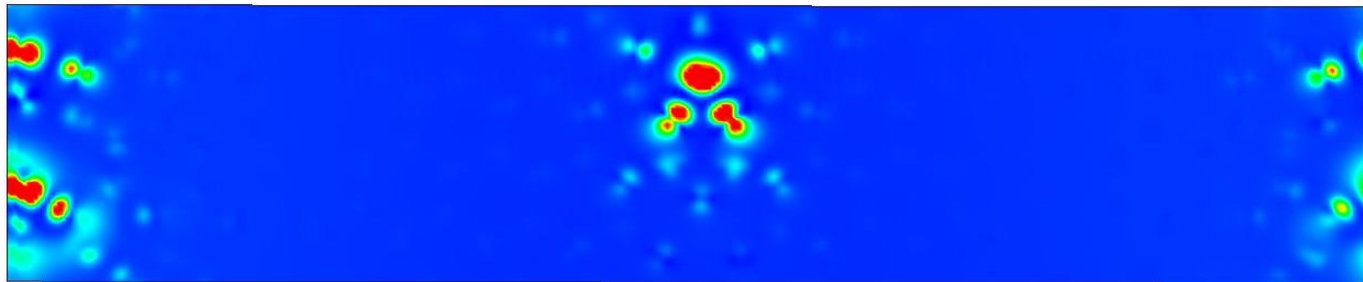


Результаты – распределение намагниченности насыщения

Js (max)



Магнитный момент (10 градусов разориентации) - $2 \mu_B$

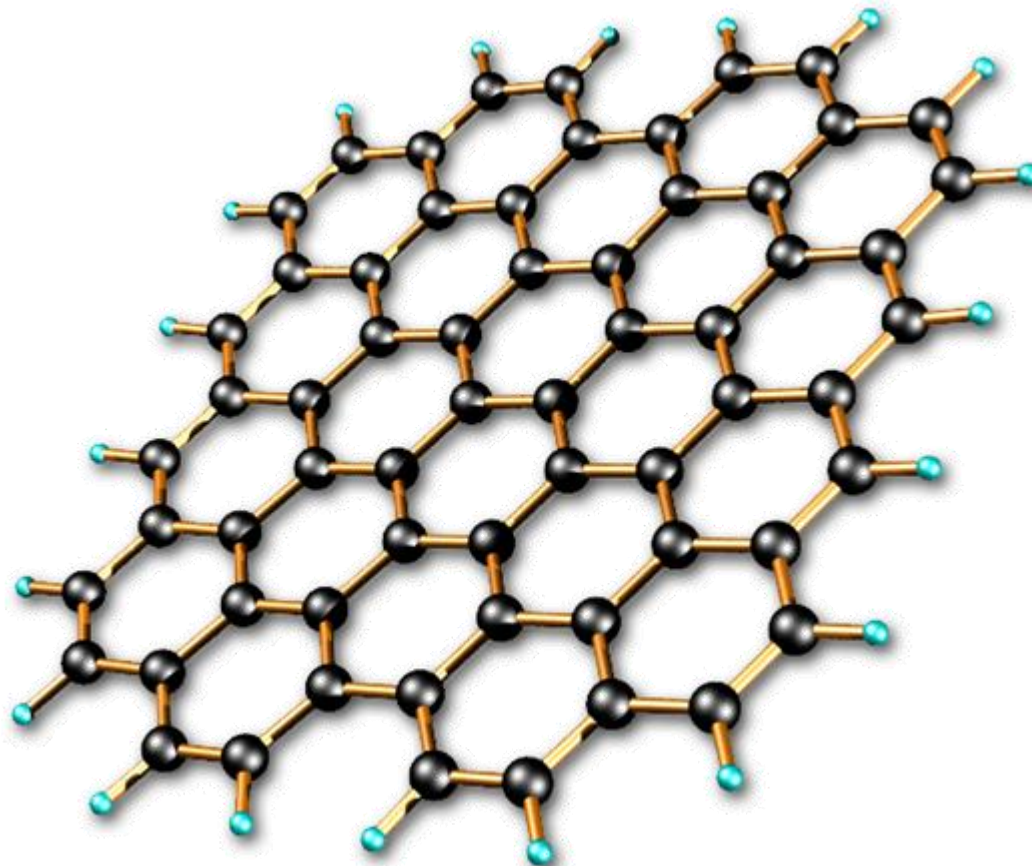


Js (min)

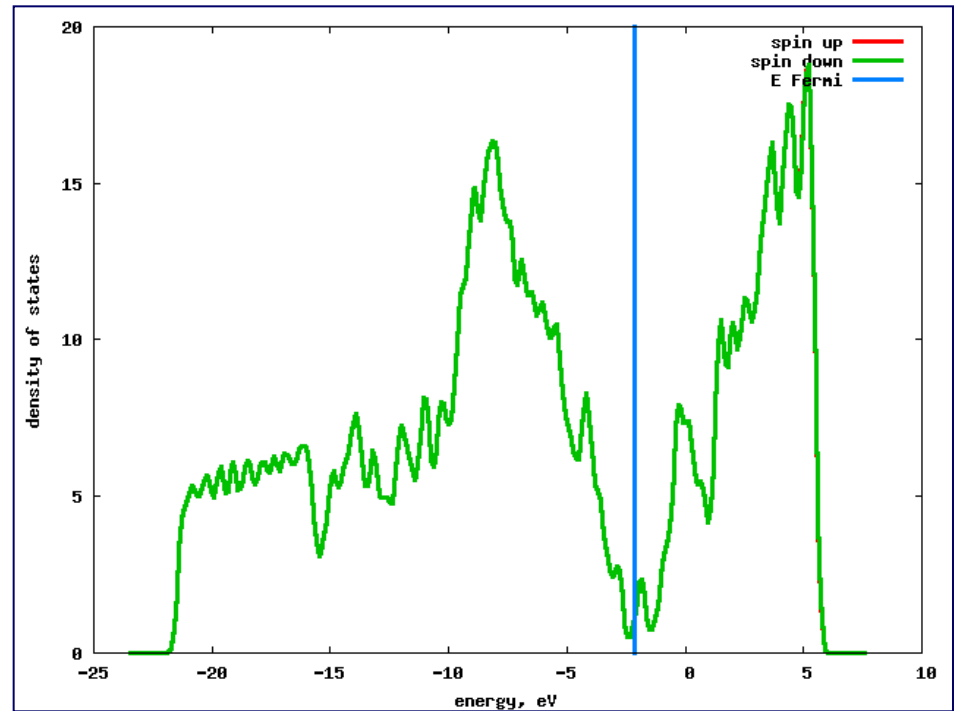
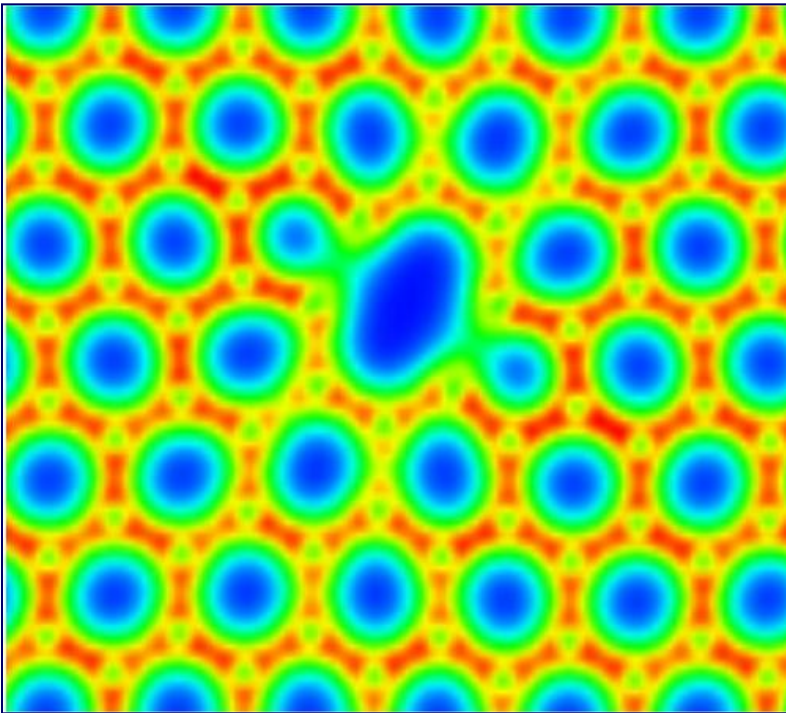
Для малоугловых границ зерен очевидной зависимости от градуса разориентации не наблюдается. Количественно магнитный момент зависит от конфигураций дефектов сложившихся случайным образом на границе зерна.

5. Графен (G) с вакансионным кластером (nV)

Область применения:
- приборы спинтроники

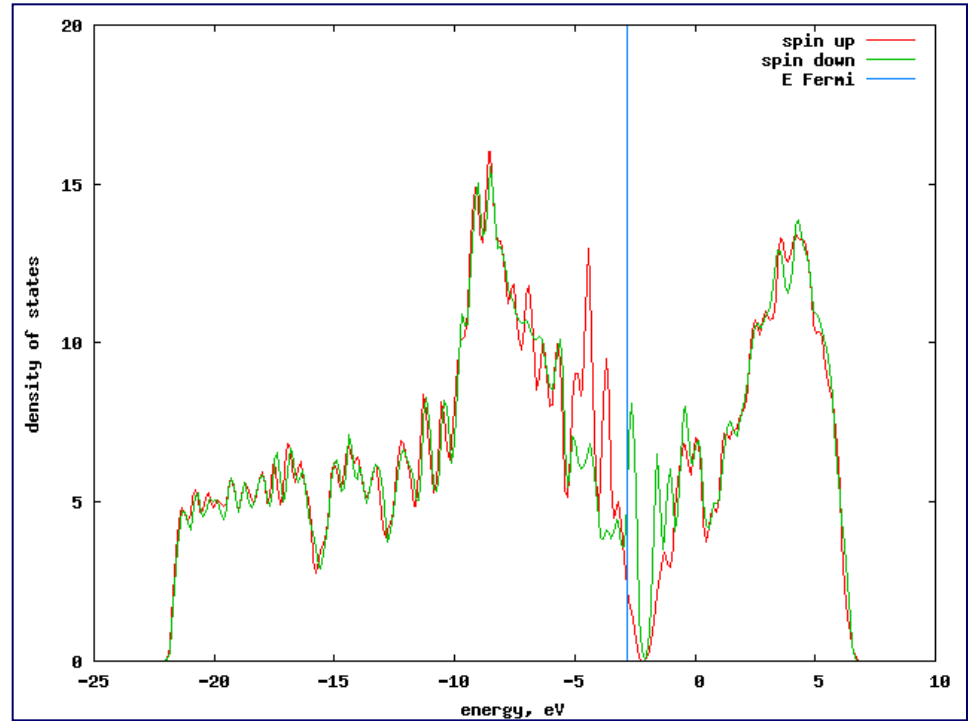
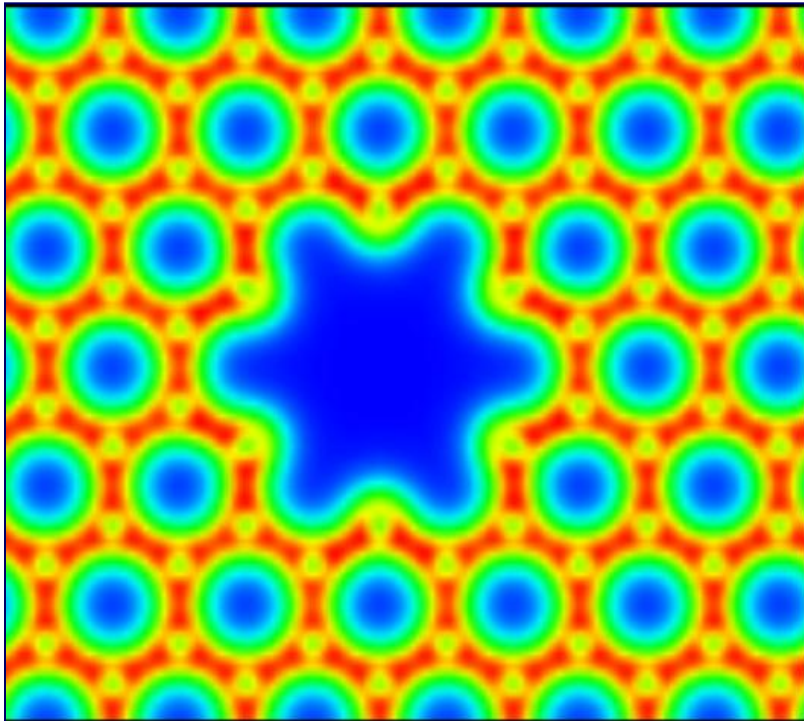


Графен (G) с вакансионным кластером (nV). Результаты моделирования

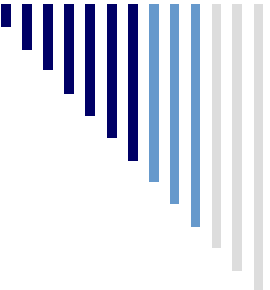


Зарядовые плотности и плотности электронных состояний для комплекса (G+2V)

Графен (G) с вакансионным кластером (nV). Результаты моделирования

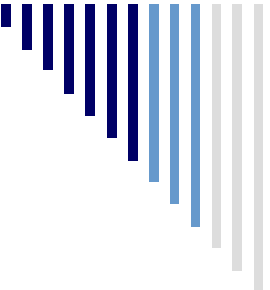


Зарядовые плотности и плотности электронных состояний для комплекса (G+6V)



Графен (G) с вакансионным кластером (nV)

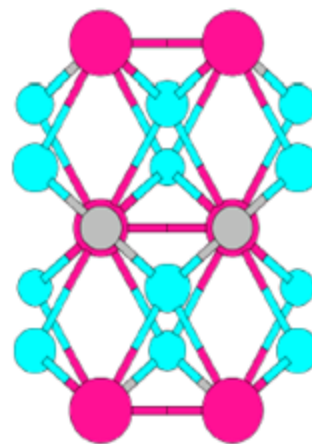
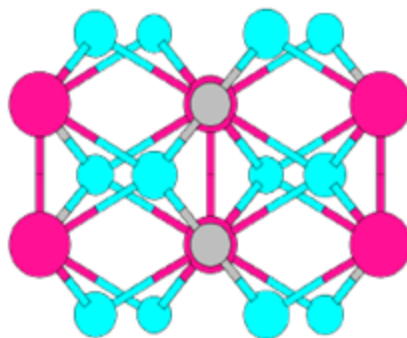
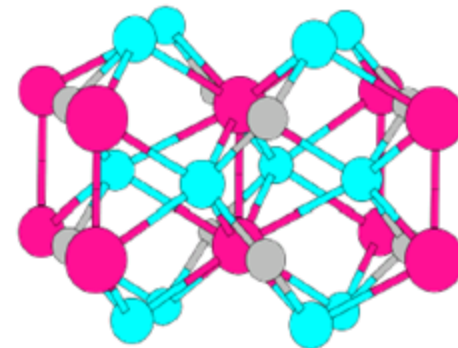
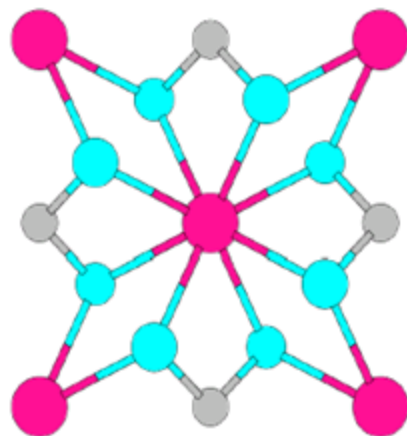
Тип вакансионного кластера	Число вакансий в кластере	Наличие магнитного момента	Магнитный момент, μB
V2	2	–	0
V3	3	+	1.05
V4_1	4	+	2.02
V4_2	4	+	1.98
V4_3	4	–	0
V5	5	+	3.28
V6_1 (зародыш дислокации вакансионного кластера)	6	+	4.50
V6_2	6	+	5.49



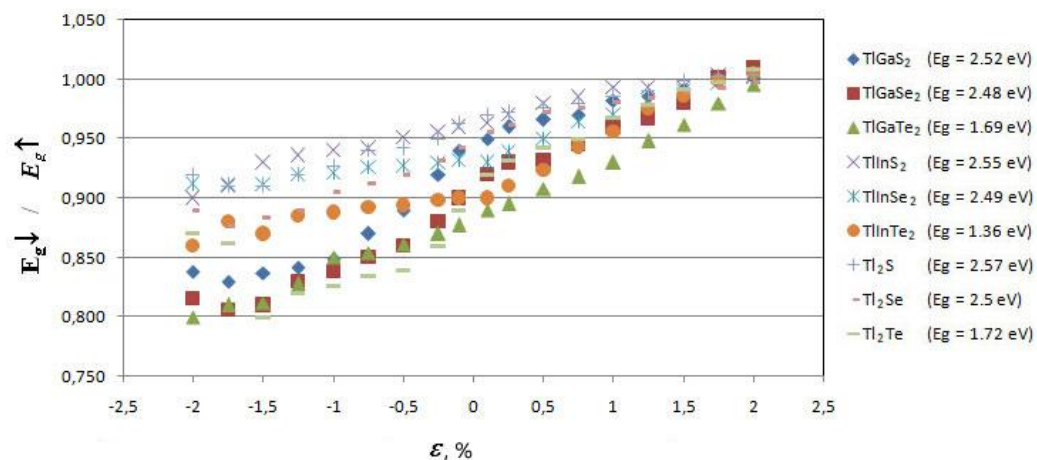
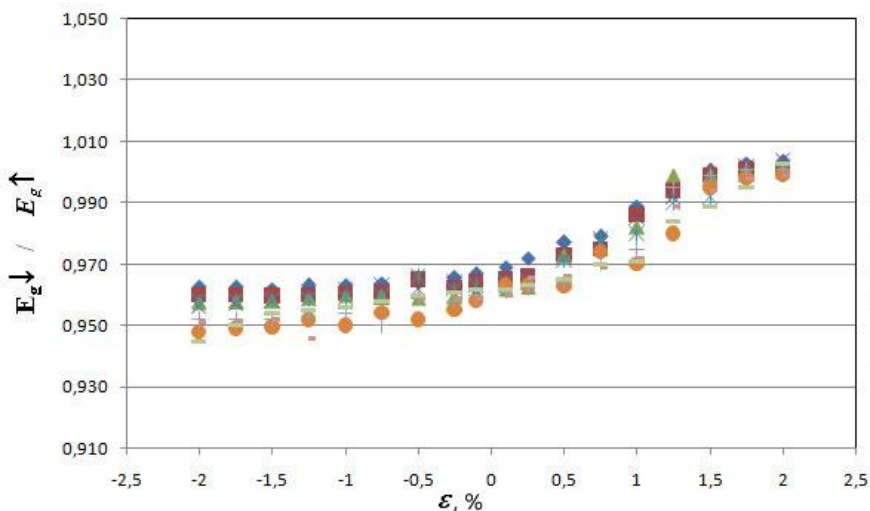
Соединения $TlMeX_2$ ($Me=In, Ga$; $X= S, Se, Te$)

Области применения:

- MEMS,
- солнечные элементы,
- сенсоры,
- датчики.



Электромеханические свойства системы $TMeX_2$ (Me=In,Ga; X= S, Se, Te)



Зависимость спиновой поляризации от деформации сжатия и растяжения вдоль оси X или Y (слева), при всестороннем сжатии и растяжении (справа) для соединений $TMeX_2$

Халькогениды переходных металлов V группы

- Переходные металлы IV– V группы
- Халькоген – S, Se, Te

Свойства:

- Полупроводники и полуметаллы
- Магнетизм (в полуметаллах)
- Волна зарядовой плотности
- Суперпроводимость

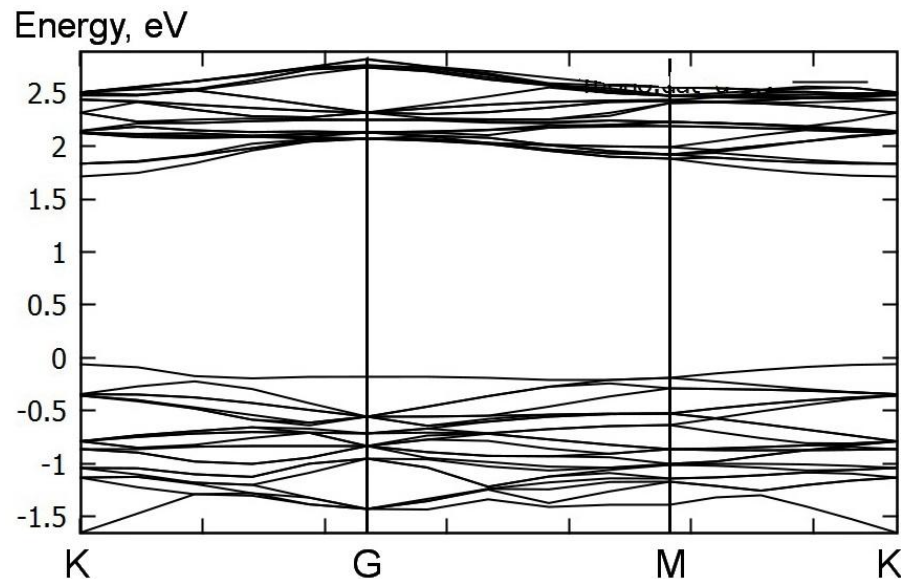
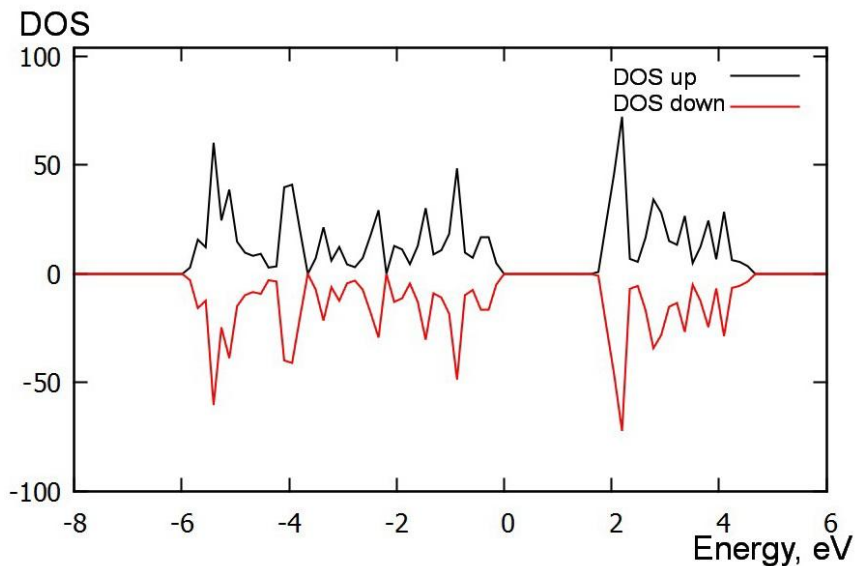
Получение:

- Гидротермальный синтез
- Низкотемпературный синтез в среде алканов
- Механическое отшелушивание
- Химическое осаждение газовой фазы

MX₂
M = Transition metal
X = Chalcogen

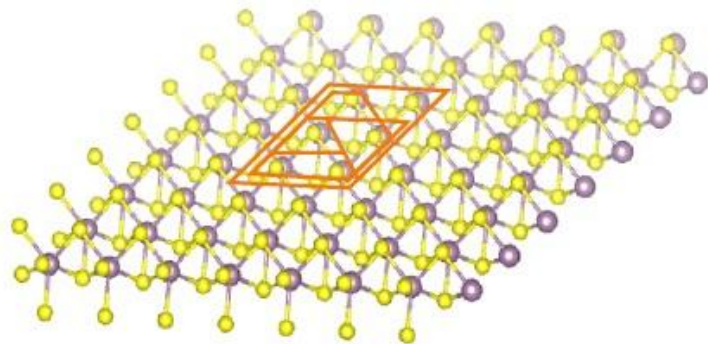
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac-Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	F1	Uup	Lv	Uus	Uuo

Результаты моделирования MoS₂



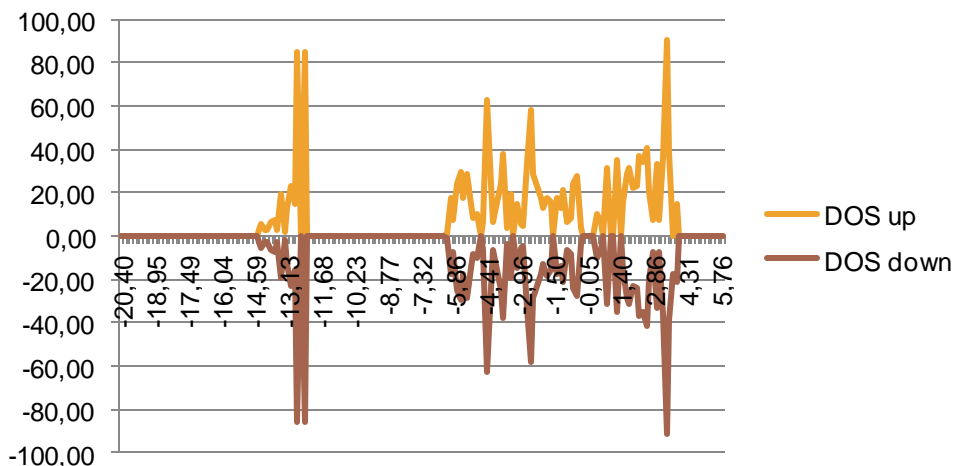
- Ширина запрещенной зоны 1,72 эВ
- Наличие прямозонного перехода
- Отсутствие магнитных свойств

Результаты моделирования MoS_2



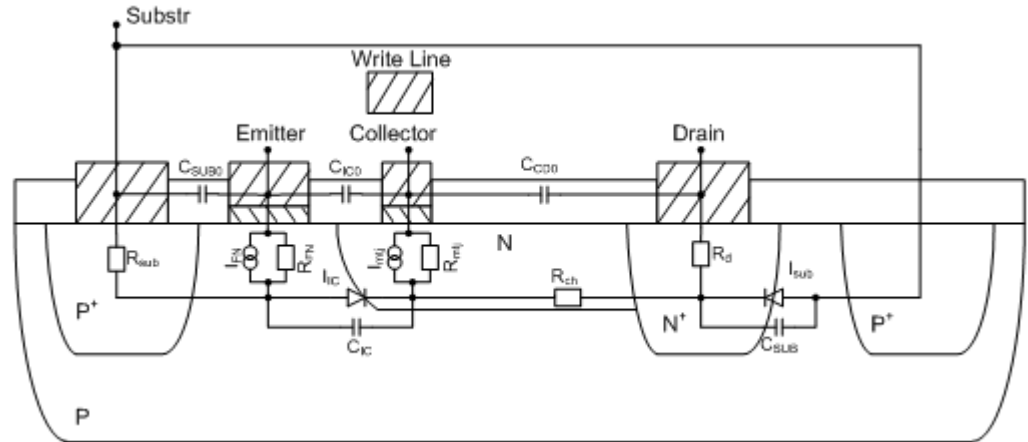
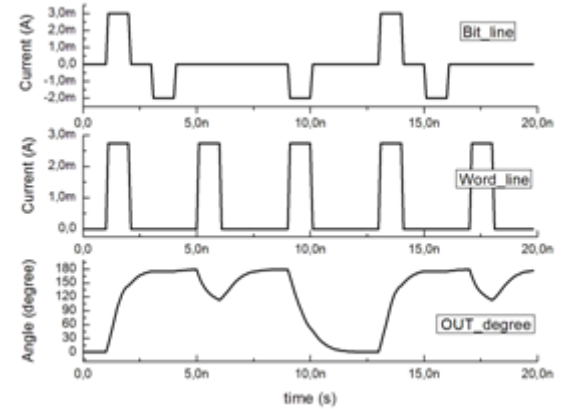
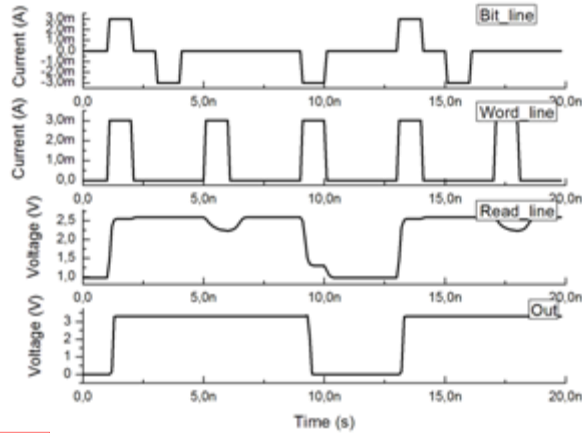
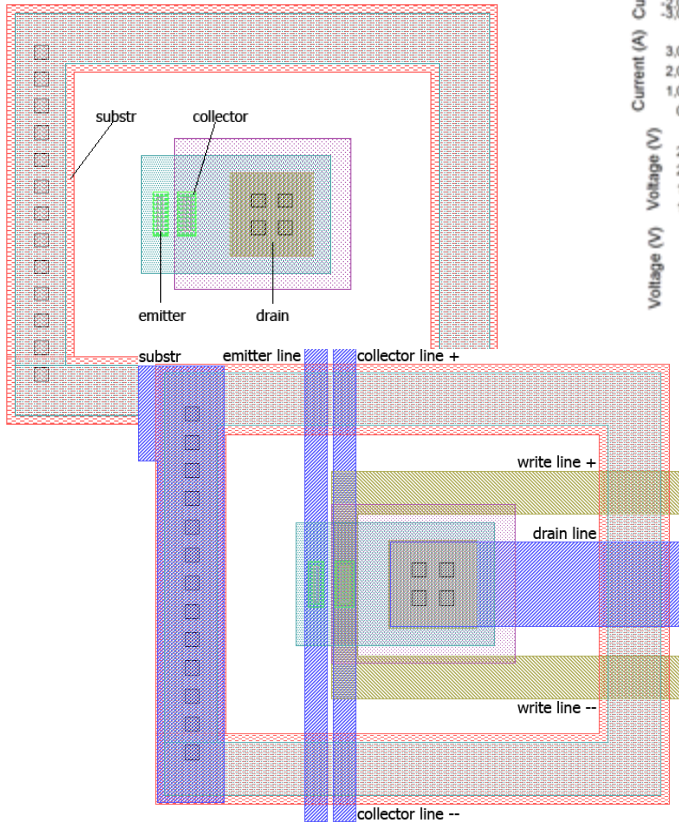
Проекция кристаллографической структуры TiGaS_2 с вакансионным кластером

DOS соединения MoS_2 с 3 вакансиями

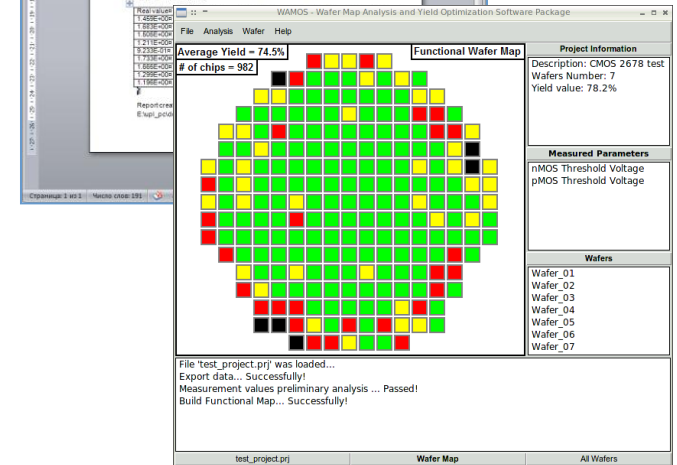
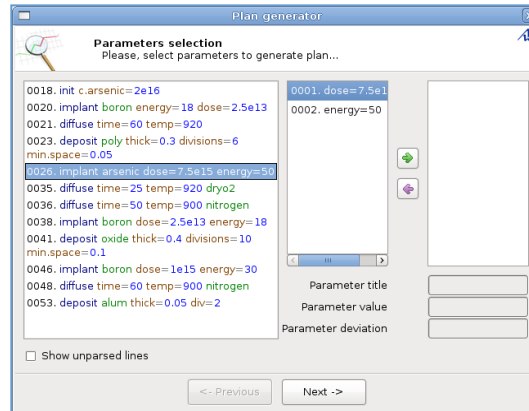
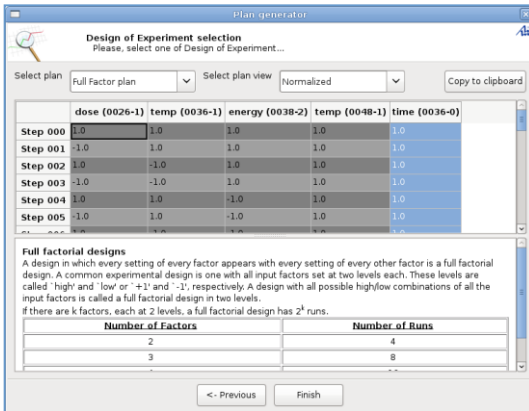
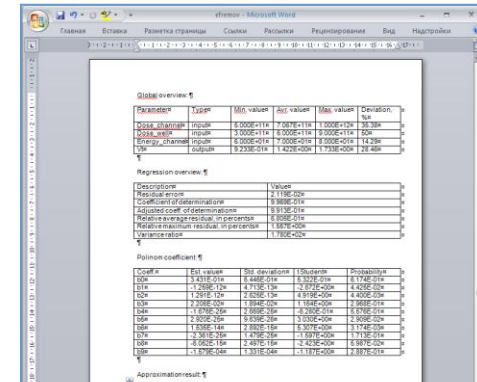
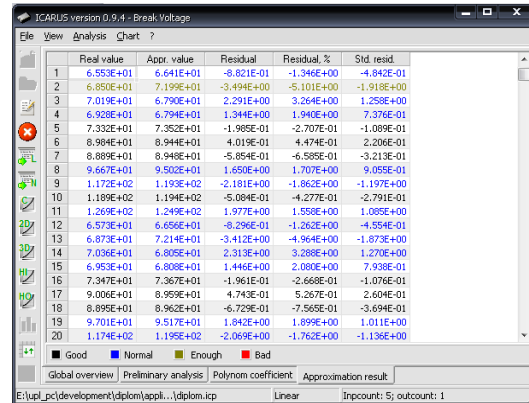
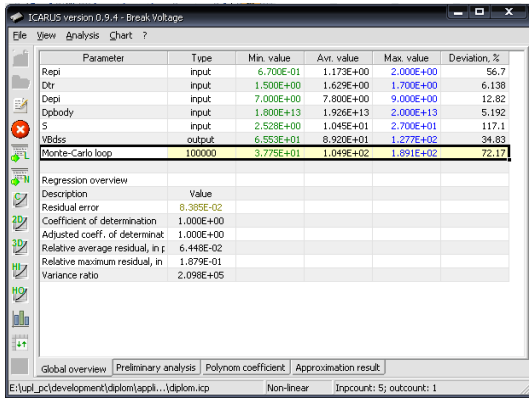


Размер вакансионного кластера, кол-во атомов	E_g , эВ	$E_{\text{спин}}$, %
1	1.581	3.455
2	1.580	3.456
3	1.586	3.456
4	1.586	6.911
5	1.574	10.366
6	1.612	12.093

Magnetic Random Access Memory (MRAM)

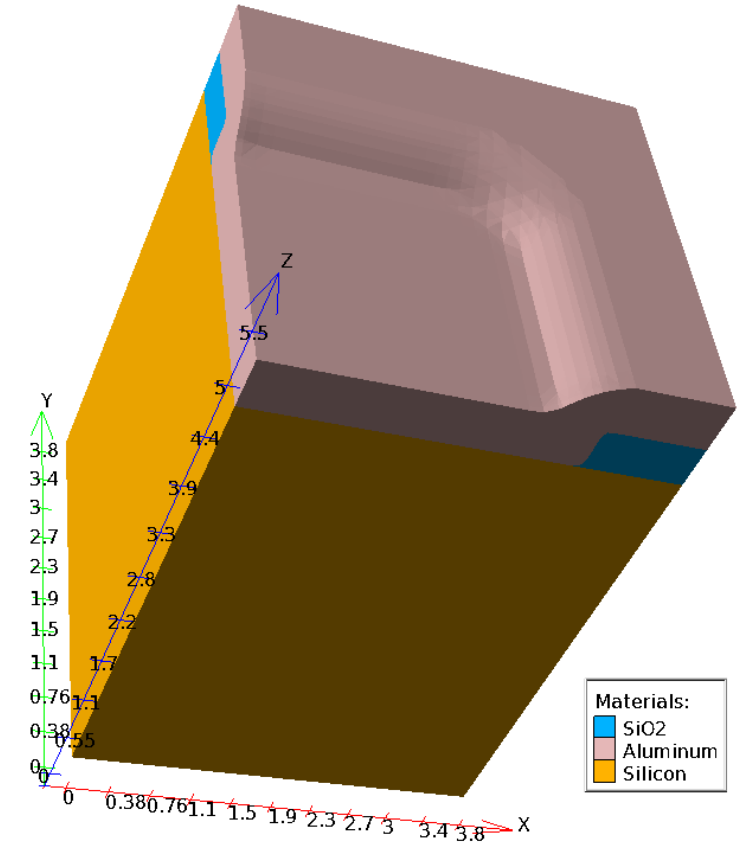
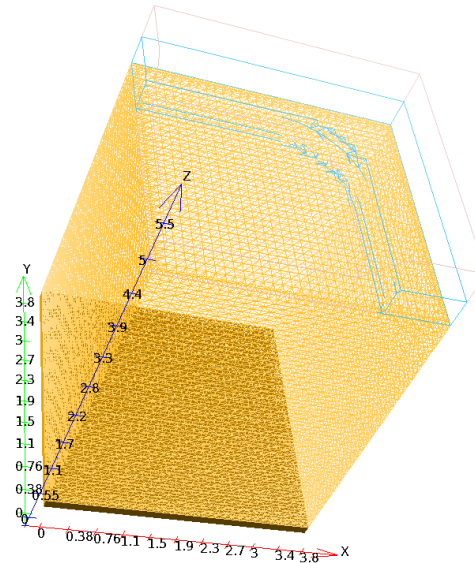
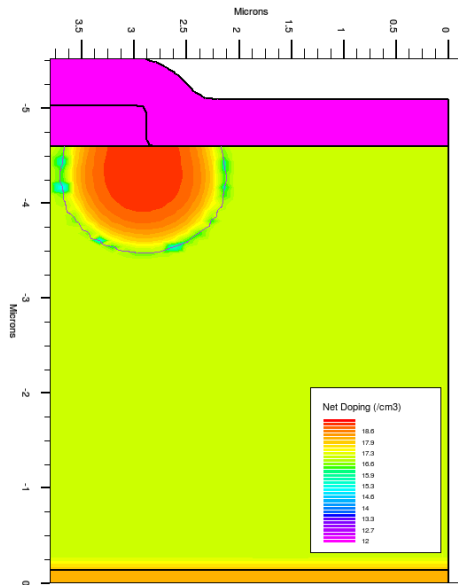


ICARUS (IC Technology Statistical Analysis based on RSM Methodology and ManUfacturability DeSign)

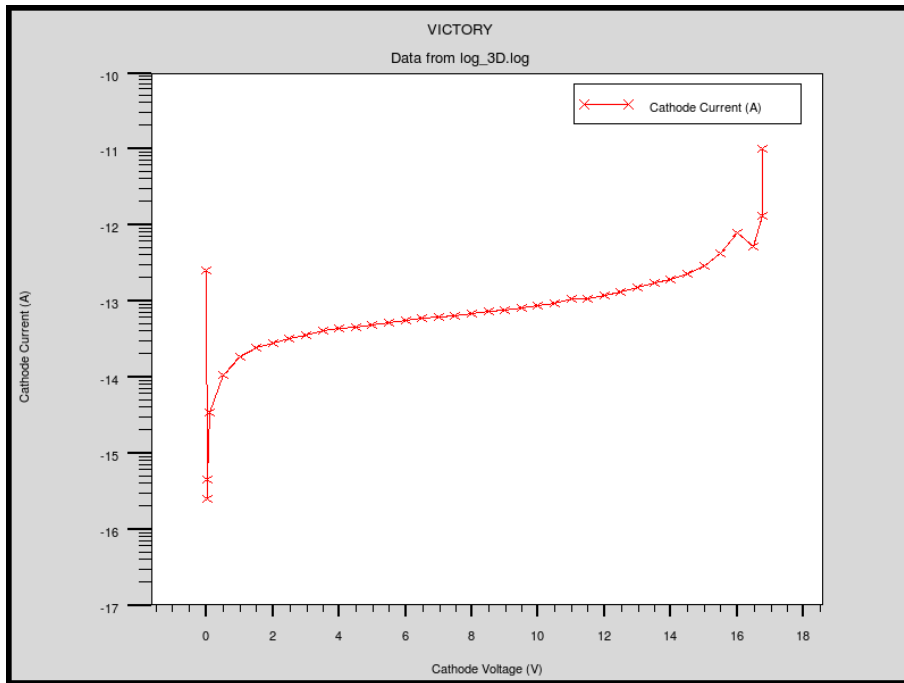


Высокотемпературный диод Шоттки

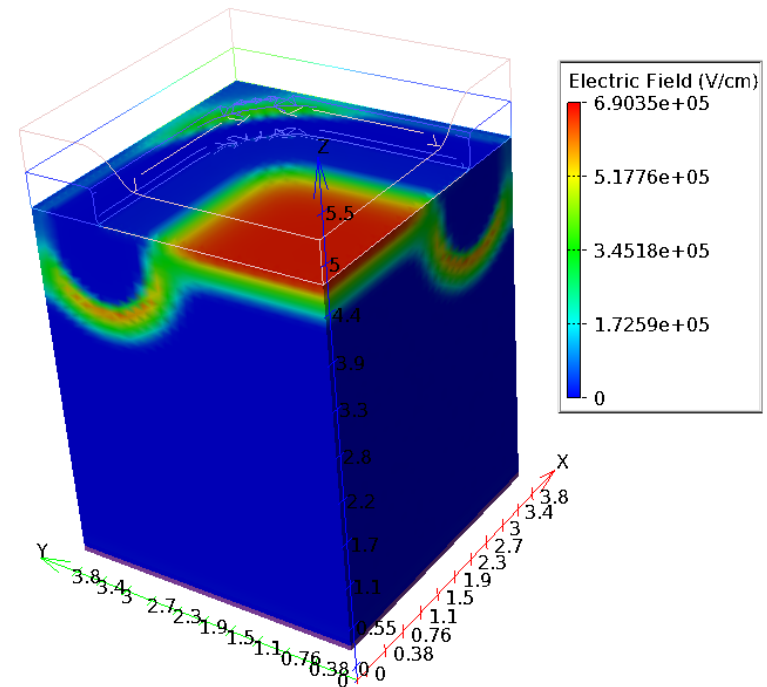
- Определение границ тепловой устойчивости диода Шоттки в диапазоне указанных параметров эпитаксиального слоя и высоты барьера Шоттки при номинальном обратном напряжении.



Высокотемпературный диод Шоттки

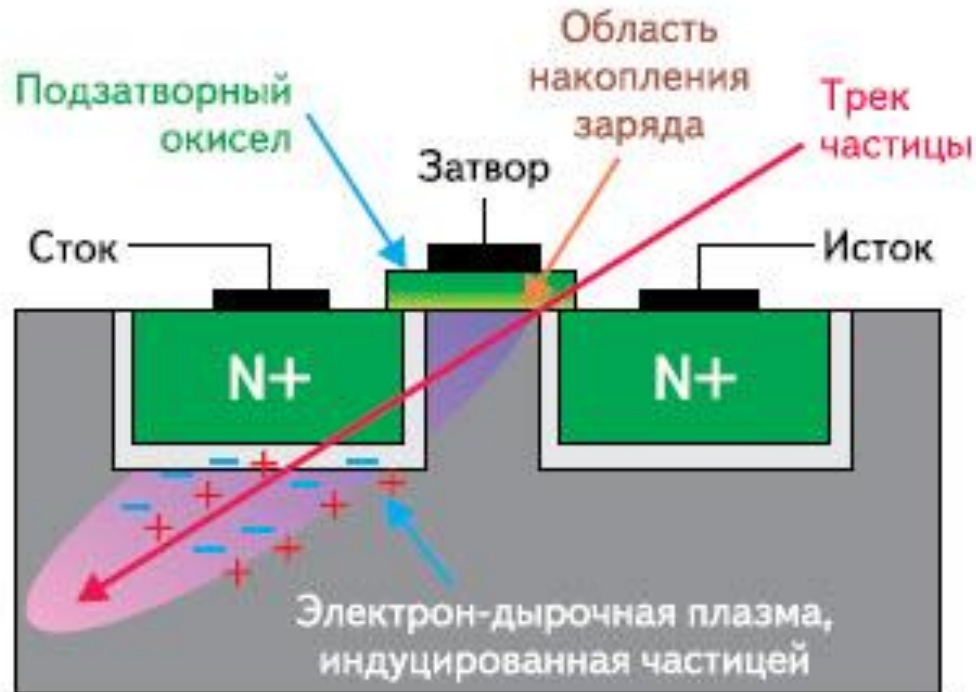


ВАХ диода Шоттки
при температуре 27 °C



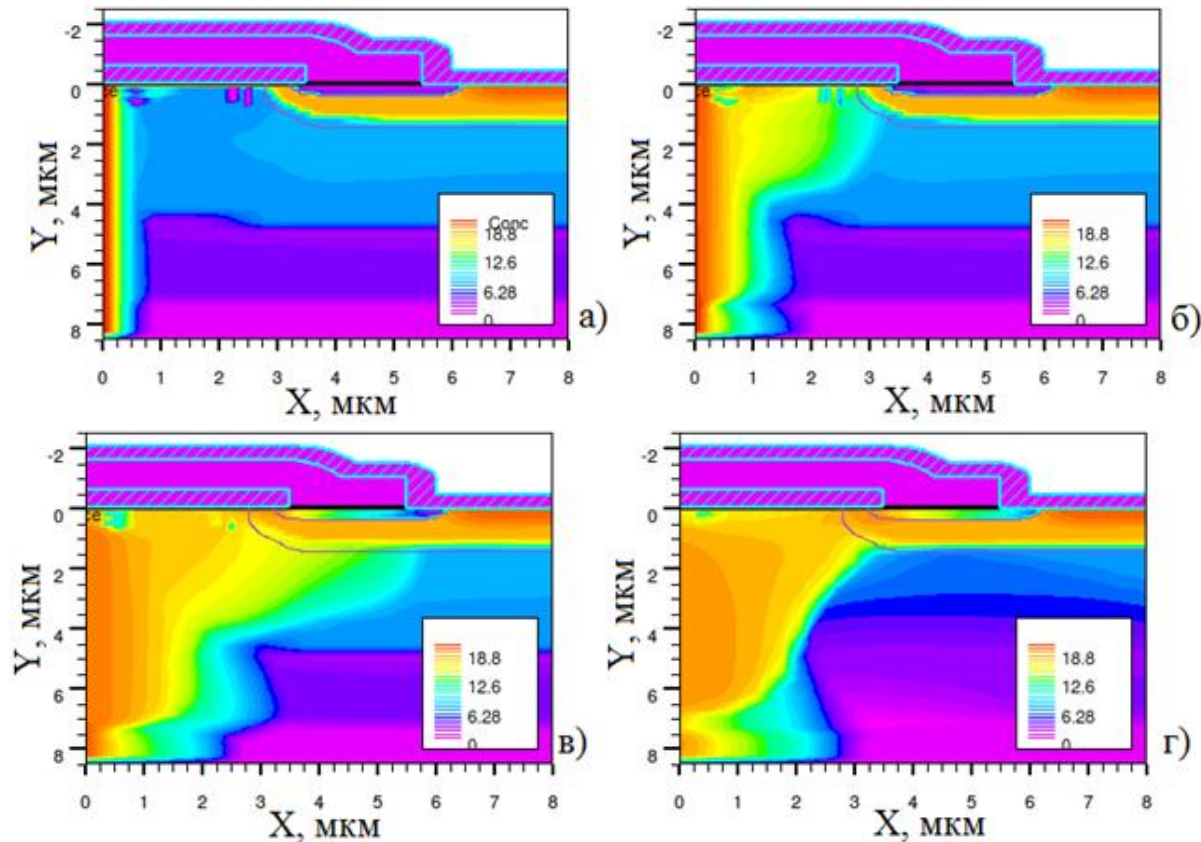
Распределение напряженности
электрического поля в структуре
диода Шоттки при напряжении
на катоде 18 В

Моделирование воздействия ионизирующего излучения на характеристики МОП-транзистора



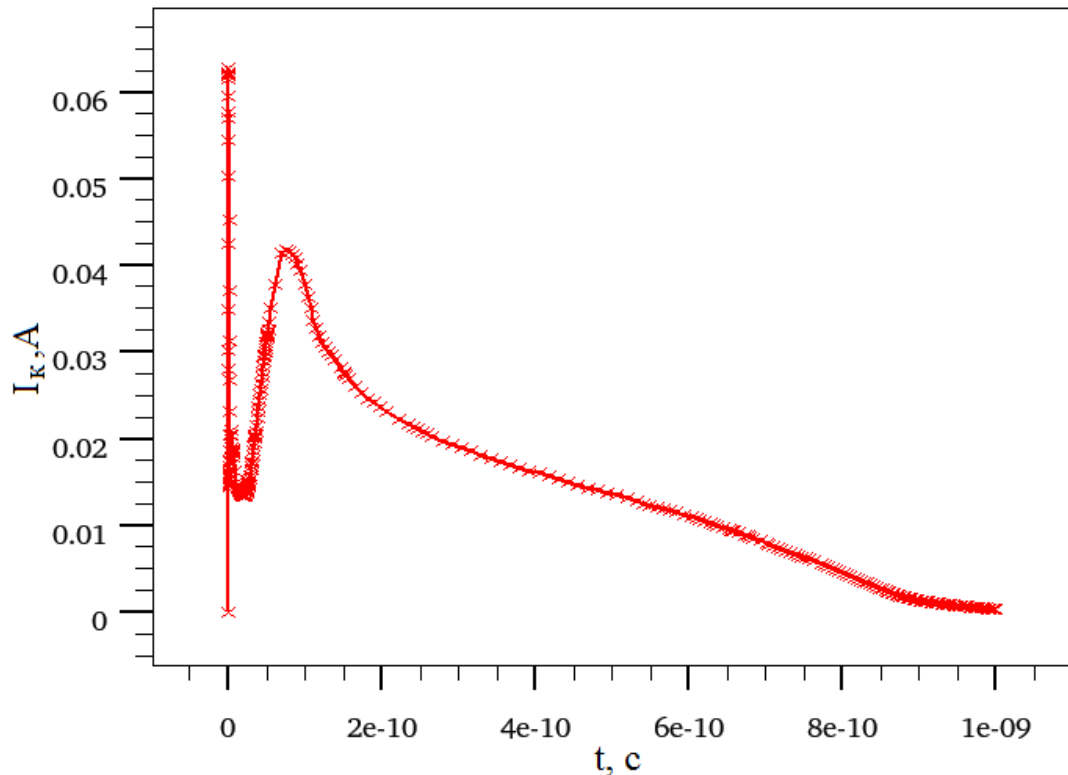
Полевой транзистор под воздействием отдельной ядерной частицы

Моделирование воздействия ионизирующего излучения на характеристики МОП-транзистора



Распределение концентрации дырок в структуре мощного МОП-транзистора в момент времени $t = 0$ с (а), $t = 5 \cdot 10^{-12}$ с (б), $t = 50 \cdot 10^{-12}$ с (в), $t = 150 \cdot 10^{-12}$ с (г)

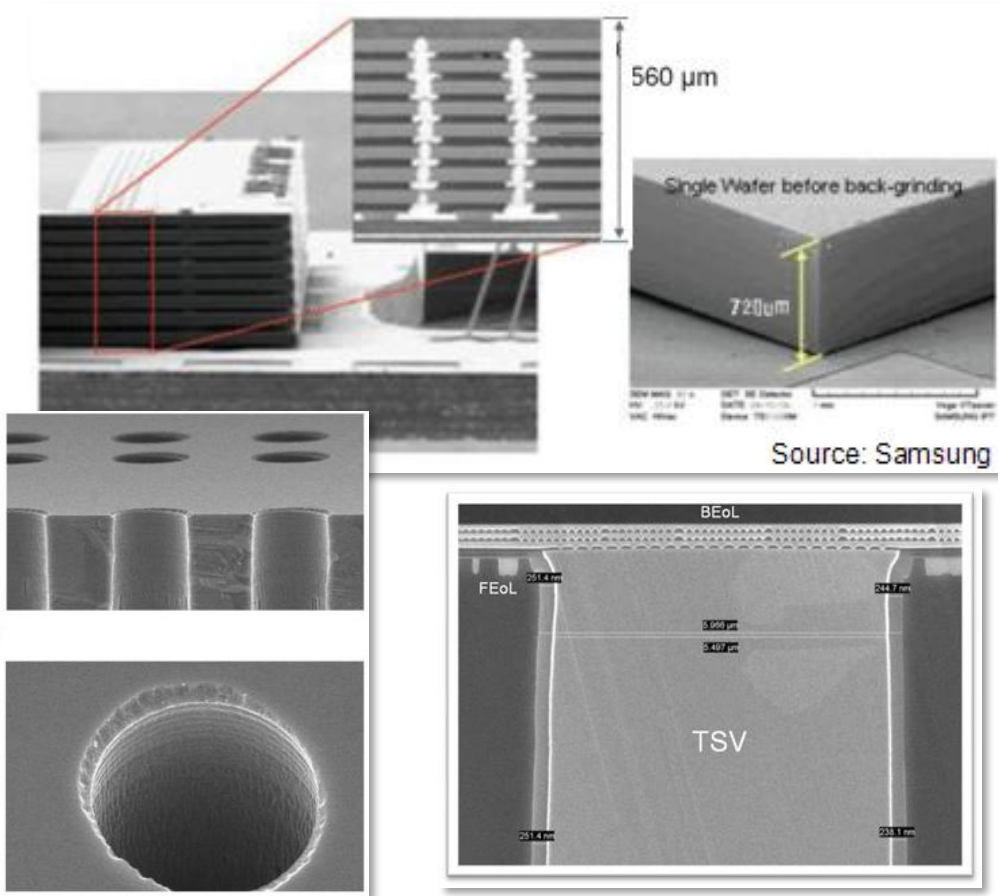
Моделирование воздействия ионизирующего излучения на характеристики МОП-транзистора



Динамика изменения тока стока при воздействии частицы с линейной передачей энергии равной $37,2 \text{ МэВ} \cdot \text{см}^2/\text{мг}$, проходящей в центре устройства ($x = 0$).

В момент удара напряжение на затворе равно $-13,9 \text{ В}$, на коллекторе 30 В .

Моделирование TSV-структур



Динамика изменения тока стока при воздействии частицы с линейной передачей энергии равной $37,2 \text{ МэВ} \cdot \text{см}^2/\text{мг}$, проходящей в центре устройства ($x = 0$).

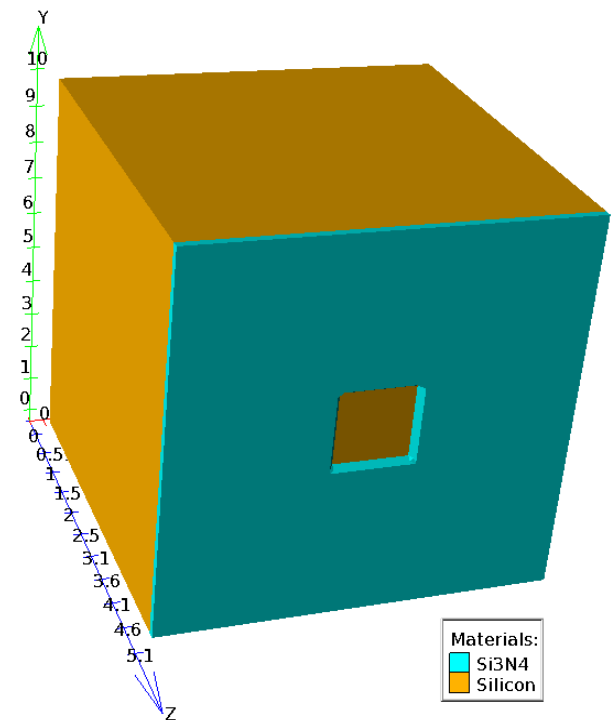
В момент удара напряжение на затворе равно $-13,9 \text{ В}$, на коллекторе 30 В .

Моделирование TSV-структур

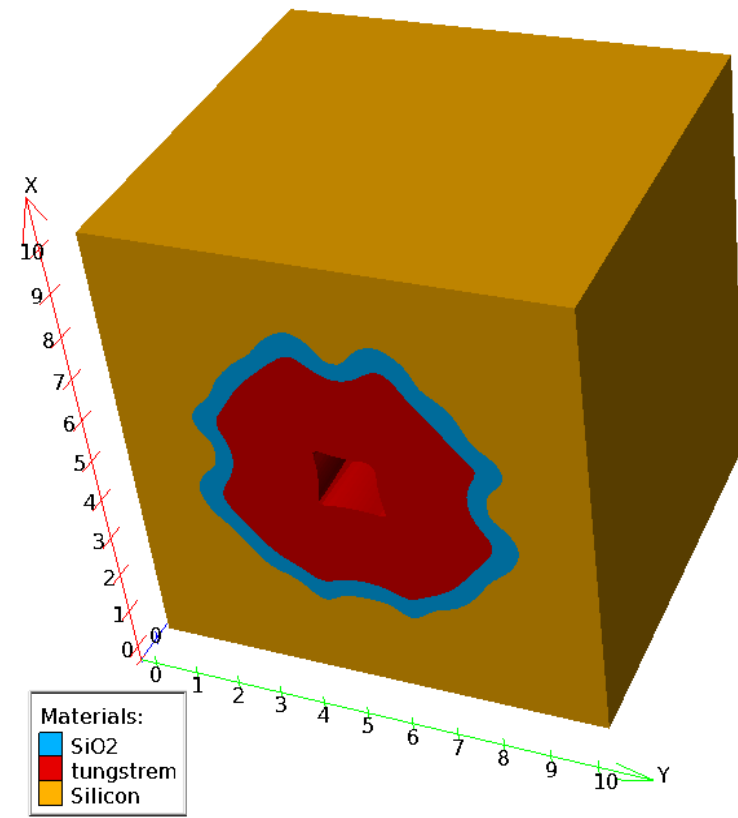
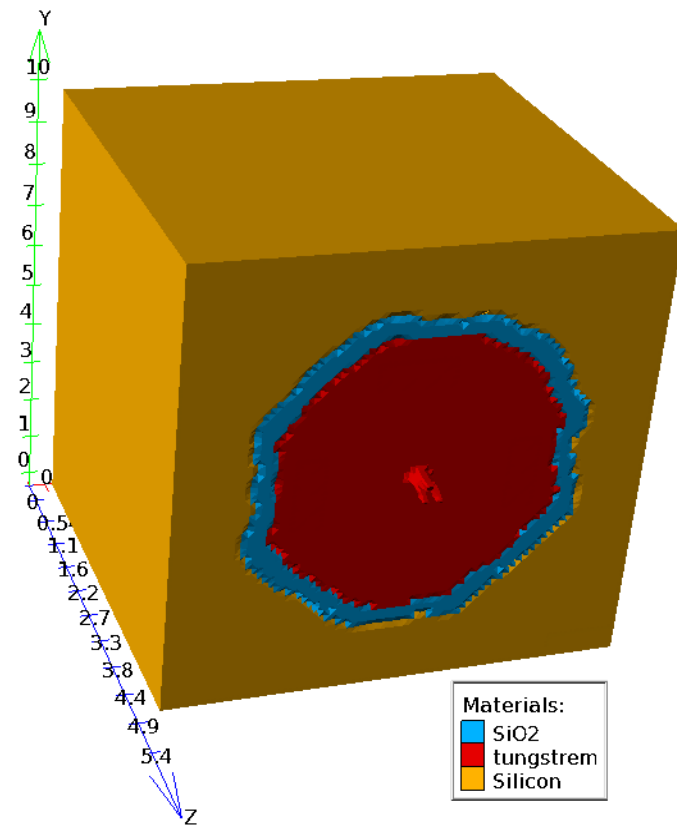
TSV формировались в объеме кремния размерами 10 мкм x 10 мкм x 5 мкм.

На подложку осаждался нитрид кремния толщиной 0,1 мкм.

В осажденном слое нитрида кремния создается маска для последующей операции травления.

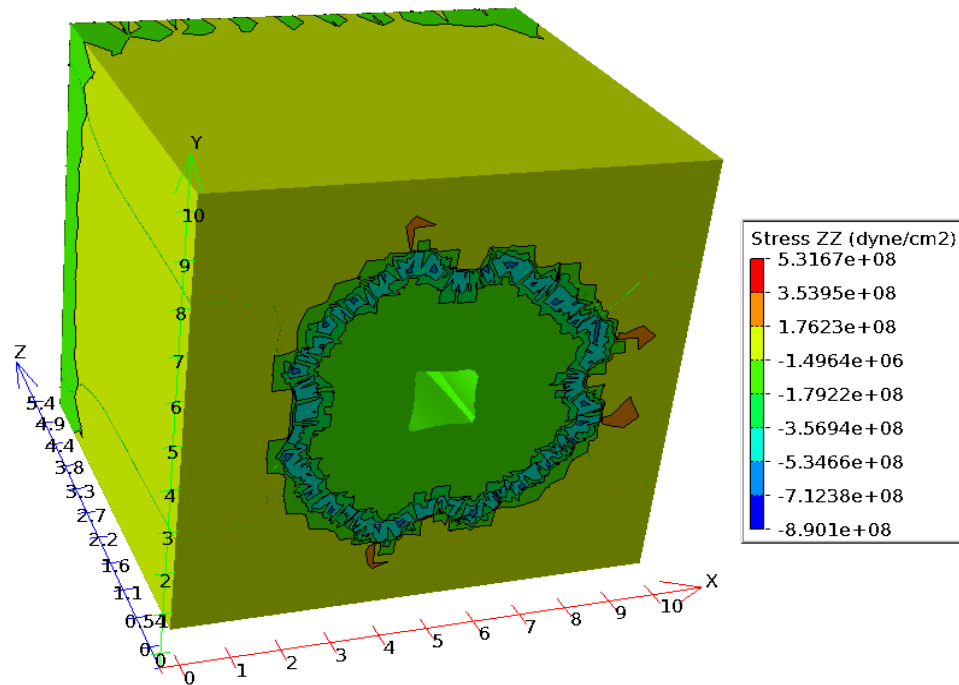
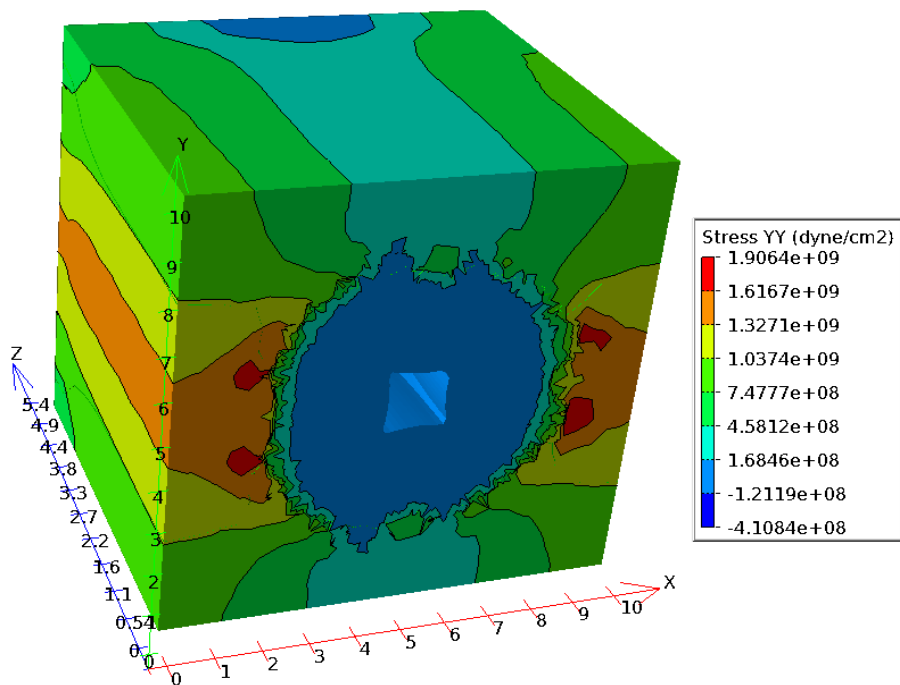


Моделирование TSV-структур



Моделирование TSV-структур

Механические напряжения в структуре
при изменении температуры от 27 °C до 200 °C



Образовательные модули на основе технологии SCORM

Рисунок 2.2.6 – Реальные работы автономного силового инверсора.

а) неправильное свариование б) обдувание образа

На рисунке 2.2.7 в качестве примера показаны атомарные ступени на поверхности монокристаллического кремния

Результаты тестирования

Вопрос	Текст	Ответ	Проверка
1	Что такое углеродная нанотрубка?	Саморганизованная наноструктура в виде трубки, состоящей из атомов углерода с заполненными связями	верно
2	Что такое графен?	Искусственный графит	не верно
3	Каковы свойстваи могут обладать углеродные нанотрубки?	диэлектрическими	не верно
4	Каковы основные типы структуры одностенных углеродных нанотрубок?	кресельная тетрагональная	верно не верно
5	Какого порядка диаметр одностенных нанотрубок?	1,2-1,4 нм	верно
6	Какого порядка ширина запрещенной зоны в одностенных углеродных нанотрубках?	0,7 – 1,0 эВ	не верно
7	Выберите методы, подходящие для синтеза углеродных нанотрубок.	Дуговой разряд между углеродными электродами Химическое осаждение из газовой фазы	верно

Ваш результат: 43 %

Назначение и основные функции файловых систем

за пределами диска в безопасной зоне, где исключён их штатный контакт с поверхностью дисков (рис. 2).

Рисунок 2 – Расположение считывающих головок вблизи пластин жесткого диска

Операционные системы семейства UNIX

Общая характеристика операционных систем семейства UNIX. Стандарты UNIX

История развития операционной системы UNIX

Влияние UNIX на развитие операционных систем и информационных технологий. Коммерческие реализации UNIX

Вопрос для самопроверки №1

Вопрос для самопроверки №2

Вопрос для самопроверки №3

Timeline of UNIX systems: BSD (Berkeley Software Distribution), SunOS (Stanford), Solaris (SUN), NextStep, Darwin, Mac OS, Linux, FreeBSD, NetBSD, OpenBSD, IRIX (IBM), AIX (IBM), HP-UX (Hewlett-Packard), Tru64 UNIX (Digital Equipment Corporation), IRIX (SGS), Linux (Linus Torvalds), Unix (Ken Thompson, Dennis Ritchie, C Language), BSD (Bill Joy), Solaris (Richard Stallman), Linux (Linus Torvalds), Unix (Andrew S. Tanenbaum).

E-RUDIT (Educational RUDder via Internet Technology)

[ГЛАВНАЯ](#)
[НОВОСТИ](#)
[БЛОГ](#)
[О СИСТЕМЕ](#)
[КОНТАКТЫ](#)

E-RUDIT

«Интернет-среда для организации и контроля качества учебного процесса»

О системе
 Программно-аппаратный комплекс
 E-RUDIT (Educational RUDder via Internet Technology)
 «Интернет-среда для организации и контроля качества учебного процесса»
 Комплекс предназначен:

Вход на сайт
 Ваш логин: _____
 Ваш пароль: _____

ROOT
профиль | выход

[СОДЕРЖАНИЕ САЙТА](#)
[КУРСЫ](#)
[РАСПИСАНИЕ](#)
[КОНТРОЛЬ](#)
[БЛОГ](#)
[ПОЛЬЗОВАТЕЛИ](#)
[ДОСТУП](#)
[НАСТРОЙКИ](#)

КАЛЕНДАРЬ РАСПИСАНИЕ

МЕНЮ	ДЕНЬ	НЕДЕЛЯ 1	НЕДЕЛЯ 2	НЕДЕЛЯ 3	НЕДЕЛЯ 4
Преподаватель: Стемплицкий В. Р.	ПОНЕДЕЛЬНИК	8:00-9:35 - ИТАТИМ (Лекции) Группы: 740301, 740302 Аудитория: 119-1			
<input type="button" value="ДОБАВИТЬ"/>	ВТОРНИК	11:40-13:15 - ИТАТИМ (Тракторские) Группы: 542701			
		13:25-16:00 - ИТАТИМ (Тракторские) Группы: 542701			

ROOT
профиль | выход

[СОДЕРЖАНИЕ САЙТА](#)
[КУРСЫ](#)
[РАСПИСАНИЕ](#)
[КОНТРОЛЬ](#)
[БЛОГ](#)
[ПОЛЬЗОВАТЕЛИ](#)
[ДОСТУП](#)
[НАСТРОЙКИ](#)

СТРУКТУРА ВРЕМЯ ЗАНЯТИЙ

МЕНЮ	ТИП	НАЗВАНИЕ	СОКР.	КОД	РЕД.	УДАЛИТЬ
<input type="button" value="ДОБАВИТЬ СПЕЦИАЛЬНОСТЬ"/>	<input type="checkbox"/>	Начало / Радиоэлектроники / Микро- и наноэлектроники				
	<input type="checkbox"/>	Специальность Квантовые Информационные Системы	КИС	270		
<input type="button" value="ПОИСК"/>	<input type="checkbox"/>	Специальность Микро- и наноэлектроники	МНЭ	030		

2 из 2

© 2010, Попов А.С.
кафедра микро- и наноэлектроники
Руководитель: Напеев В.В.

ROOT
профиль | выход

[СОДЕРЖАНИЕ САЙТА](#)
[КУРСЫ](#)
[РАСПИСАНИЕ](#)
[КОНТРОЛЬ](#)
[БЛОГ](#)
[ПОЛЬЗОВАТЕЛИ](#)
[ДОСТУП](#)
[НАСТРОЙКИ](#)

МЕНЮ	ТИП	ВСЕ	НАЗВАНИЕ	ПРЕПОДАВАТЕЛИ	ГРУППЫ	ЧАСЫ	ФАЙЛЫ	РЕД.	УДАЛИТЬ
<input type="button" value="НОВЫЙ"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Лекции	Информационные технологии в проектировании интегральных микросхем	Стемплицкий В. Р., Напеев В. В.	740301 740302	50		
<input type="button" value="ДОБАВИТЬ"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Лабораторные	Информационные технологии в проектировании интегральных микросхем	Стемплицкий В. Р.	742701 740301	12		
<input type="button" value="УДАЛИТЬ"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Практические	Информационные технологии в проектировании интегральных микросхем	Стемплицкий В. Р., Напеев В. В.	740301 542701	16		

3 из 3

© 2010, Попов А.С.
кафедра микро- и наноэлектроники
Руководитель: Напеев В.В.



Контактная информация

- 220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, ауд. 119
 - Стемпицкий Виктор Романович
 - e-mail: *vstem@bsuir.by*
 - Web: *http://bsuir.by*
 - Телефон: +375 (17) 293-88-90
-