

Предсказание новых кристаллических твердых тел с низкой диэлектрической  
проницаемостью.

Ю.Н.Фомичева, В.В. Ройзен

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время микропроцессоры используются в качестве вычислительного элемента во всём, от мельчайших встраиваемых систем и мобильных устройств до огромных мейнфреймов и суперкомпьютеров. Их важнейшей характеристикой является тактовая частота (МГц). Она характеризует быстродействие компьютера и указывает, сколько элементарных операций выполняет микропроцессор за одну секунду. Повышение производительности интегральных схем (ИС) в течение последних нескольких десятилетий, по большей части, было достигнуто за счет увеличения скорости транзистора, уменьшения его размера и упаковки большего количества транзисторов на одном чипе (рис. 1). Фактор, который нарушает эту тенденцию - скорость замедления распространения сигнала в чипе. Задержки сигнала увеличиваются с каждым поколением масштабирования и ограничивают общую производительность интегральной схемы.

Диэлектрики с низкой диэлектрической проницаемостью [1-3] нужны для снижения взаимных емкостей проводников внутри чипа, уменьшая постоянную времени резистивно-емкостных цепочек и способствуя улучшению быстродействия и снижению энергопотребления. Целью данного исследования, осуществляемого методами компьютерного дизайна, являлось предсказание новых материалов с диэлектрической проницаемостью ниже, чем у используемого в настоящее время диоксида кремния  $\text{SiO}_2$  ( $\epsilon = 4,0$ ).

В настоящей работе были исследованы системы на основе  $\text{BeF}_2$ ,  $(\text{BeF}_2)_x(\text{SiO}_2)_y$ ,  $(\text{B}_2\text{O}_3)_x(\text{SiO}_2)_y$ . С помощью алгоритма USPEX в сочетании с квантово-химическим пакетом для расчётов VASP были предсказаны кристаллические структуры, обладающие наименьшей диэлектрической проницаемостью. Для этого использовался метод «переменного состава», позволяющий найти наиболее оптимальную стехиометрию многокомпонентного соединения. Число атомов в элементарной ячейке варьировалось от 9 до 18. Первое поколение в каждом расчёте генерировалось с помощью алгоритма случайной симметрии, структуры второго поколения генерировались с помощью эволюционных операторов и алгоритма случайной симметрии в следующих пропорциях:

оператор наследственности (50%), оператор софтмутации (10%), мутация с перестановкой (10%), случайная генерация структур (30%). В последующих поколениях соотношение операторов подбиралось самим алгоритмом USPEX. Расчёты локальной оптимизации производились с помощью теории функционала плотности [4]. Взаимодействие между ионами и валентными электронами описывалось волновыми функционалами с максимальной энергий 550 эВ. В зоне Бриллюэна строилась равномерная сетка с центром в Г-точке с максимальным разрешением  $2\pi \times 0.085 \text{ \AA}$ .

Из каждого расчёта были отобраны структуры с наименьшей диэлектрической проницаемостью, после чего рассчитывалась их твёрдость, а также оценивались термическая стабильность и коэффициент теплового расширения. Далее, путём сравнения энтальпии структуры с энтальпией её компонент определялась энергетическая устойчивость данных соединений. По итогам работы был составлен список твёрдых и энергетически стабильных структур. Результатом исследования стало предсказание новых материалов с низкой диэлектрической проницаемостью, которые могут быть успешно применены в микро- и нанoeлектронике.

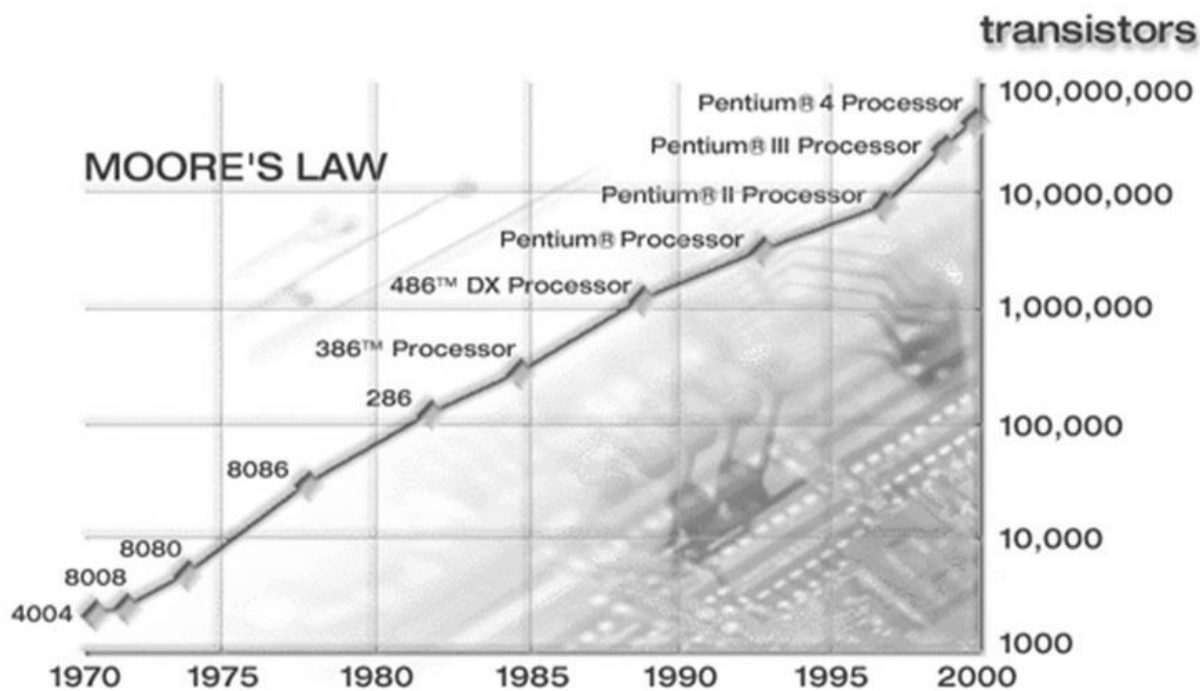


Рис.1. Закон Мура

## Литература

1. *Terence K.S. Wong*. Time Dependent Dielectric Breakdown in Copper Low-k Interconnects: Mechanisms and Reliability Models. – *Materials*. - 2012. - №5. – P. 1602 – 1625.
2. *Shamiryan D., Abell T., Lacopi F., Maex K.* Low-K dielectric materials. – *Materials Today*. – 2004. – P. 34-39.
3. *Singh R., Ulrich R. K.* High and Low Dielectric Constant Materials. – *J. Electrochem. Soc.* – 1999. – P. 26-30
4. *Parr R, Yang W.* Density functional theory of atoms and molecules – New York: Oxford University Press, 1989. – 336 с.