

# **Междисциплинарные аспекты нанотехнологий. Компьютерное моделирование наноструктур и наносистем**

Проф., д.т.н. Трубочкина Н.К.

Россия, г. Москва

# Развитие наук (история в образах)

Сначала  
появились  
люди...



# Развитие наук (история в образах)

Им необходимо  
стало считать –  
  
появилась  
математика.



Математика



# Развитие наук (история в образах)

Чтобы объяснить  
как устроен мир,  
понадобилась  
физика.  
Она базировалась  
на математике.





# Развитие наук (история в образах)



Для того, что бы  
понять, как  
«устроены» и  
взаимодействуют  
вещества, уже  
нужна была  
ХИМИЯ.



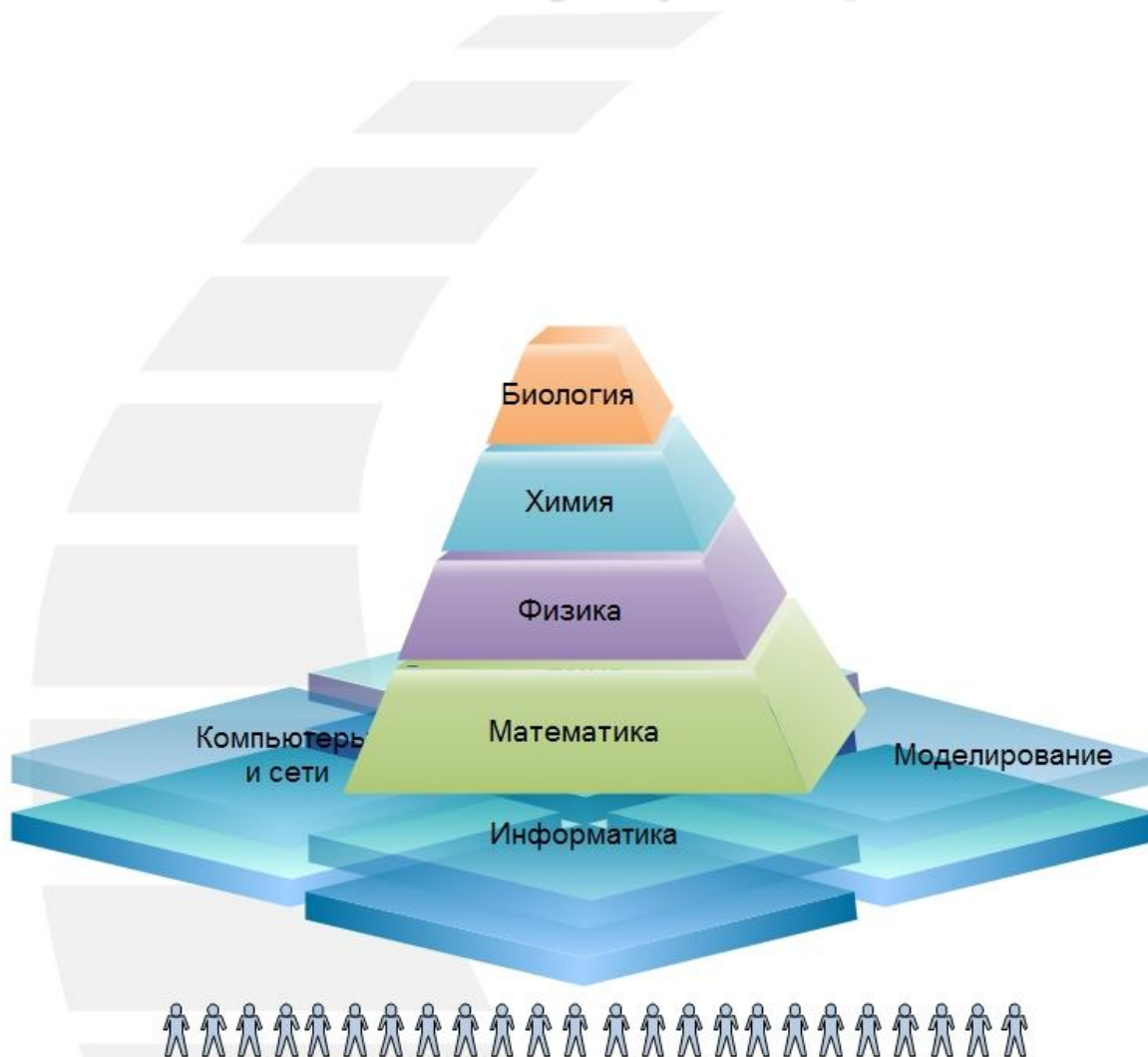
# Развитие наук (история в образах)



А для того, чтобы  
понять, что такое  
жизнь, просто  
необходима была  
биология.



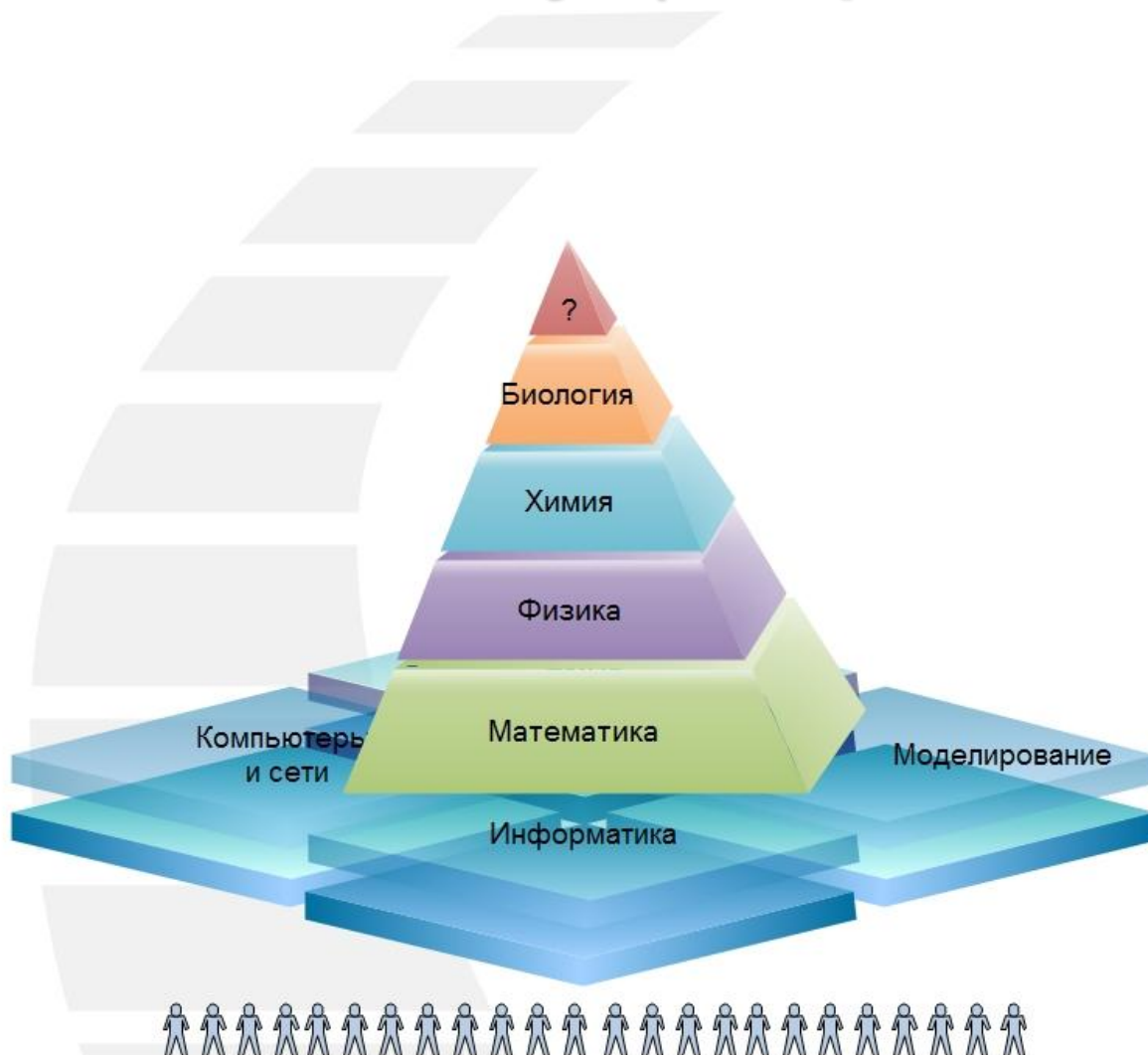
# Развитие наук (история в образах)



Потом у всей этой конструкции появился мощнейший фундамент – информационные технологии.

# Развитие наук (история в образах)

Что же дальше?

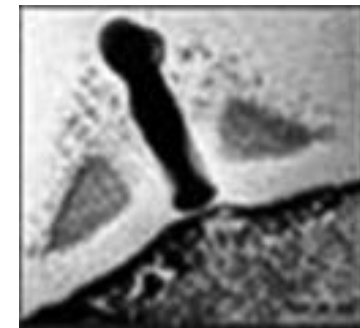
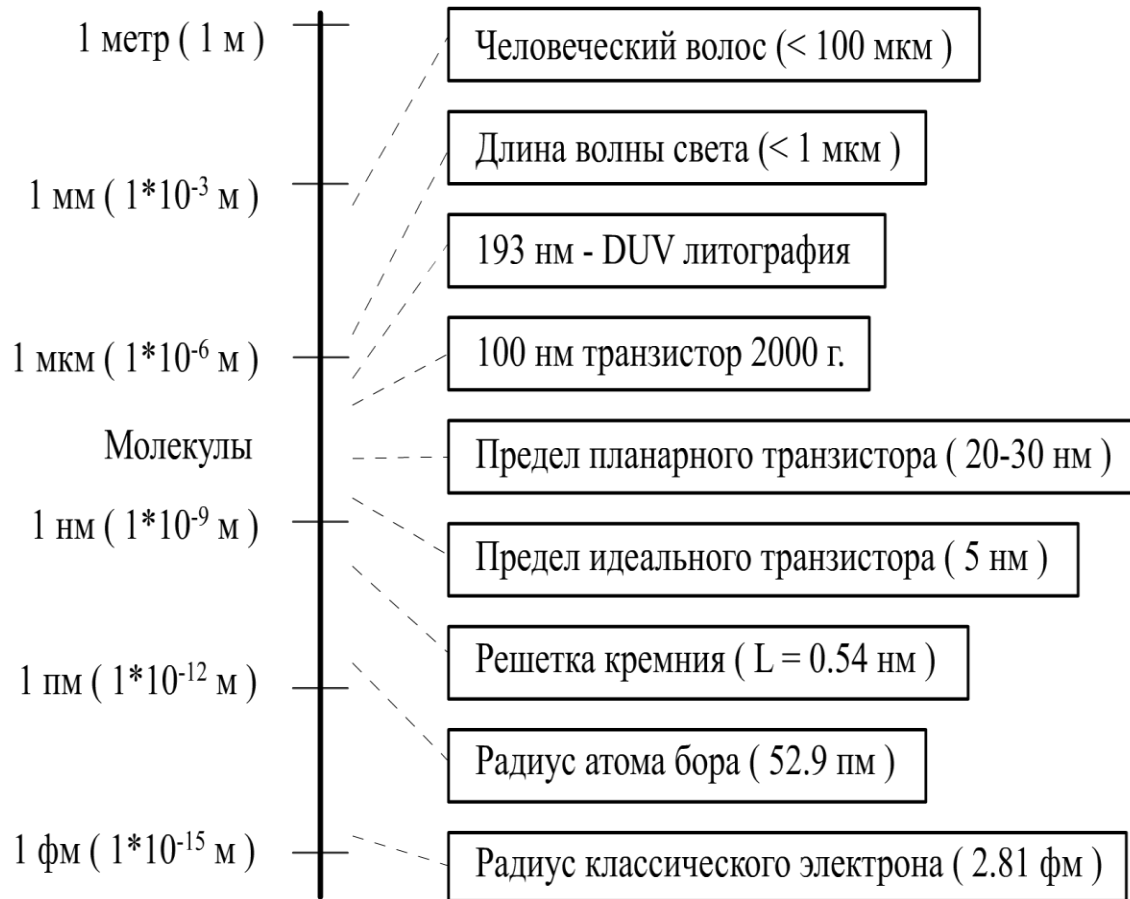


# Развитие наук (история в образах)



Нанотехнологии, вбирающие в себя знания всех естественных наук и информационных технологий.

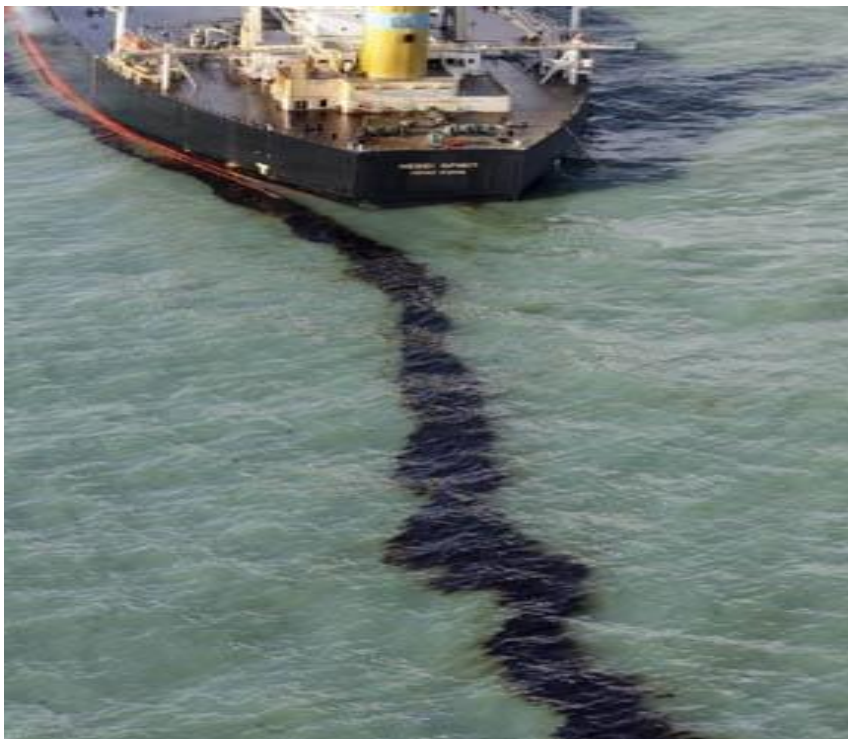
# Что такое нано?



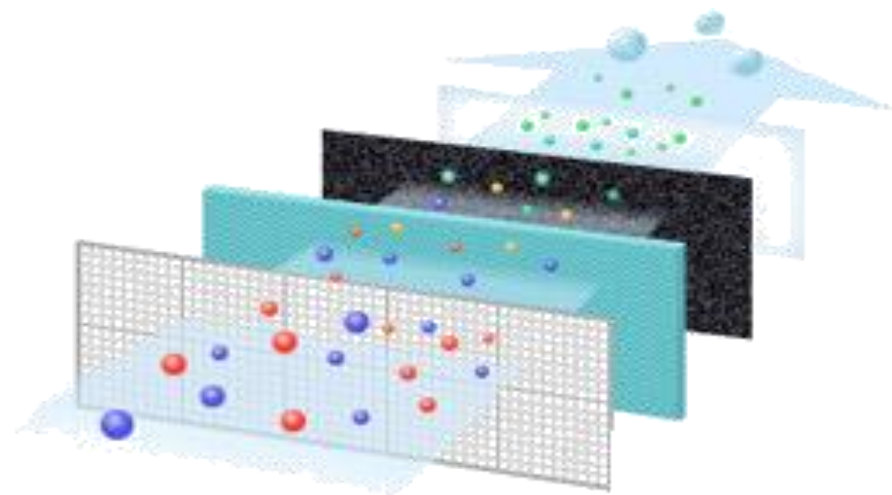
22 нм  
МОП-транзистор



# Примеры использования нанотехнологий. Мембраны очищают воду

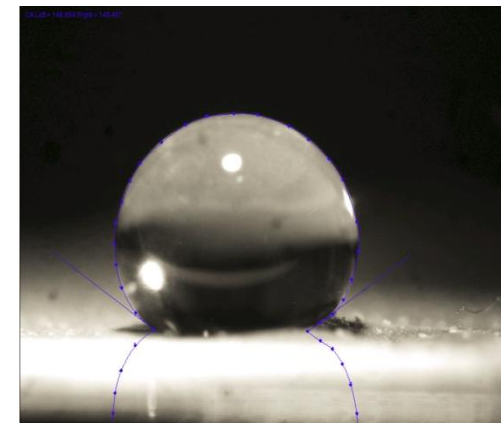
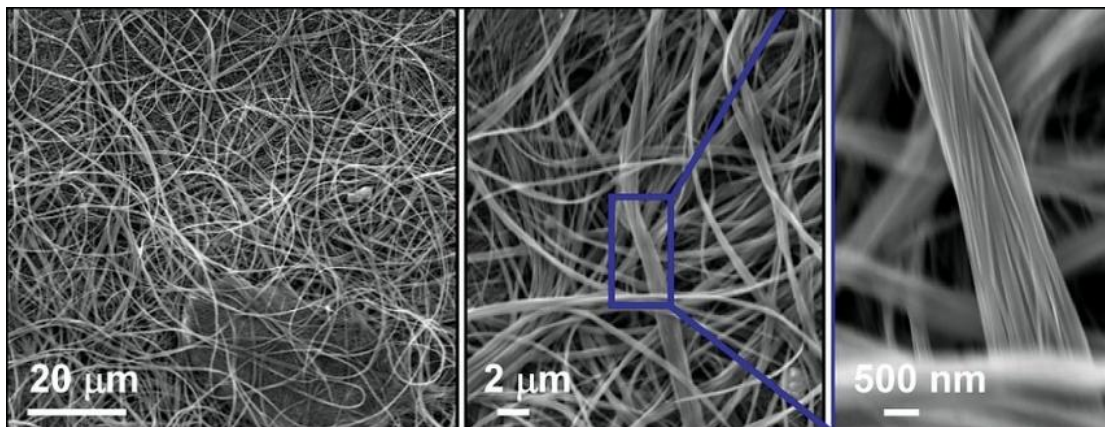


Поглощение нефти



Структура мембран

# Нановолокна в качестве фильтра



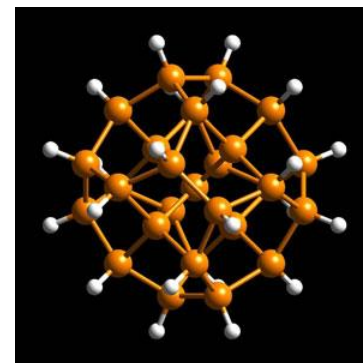
Нановолокно...

не пропускает жидкость

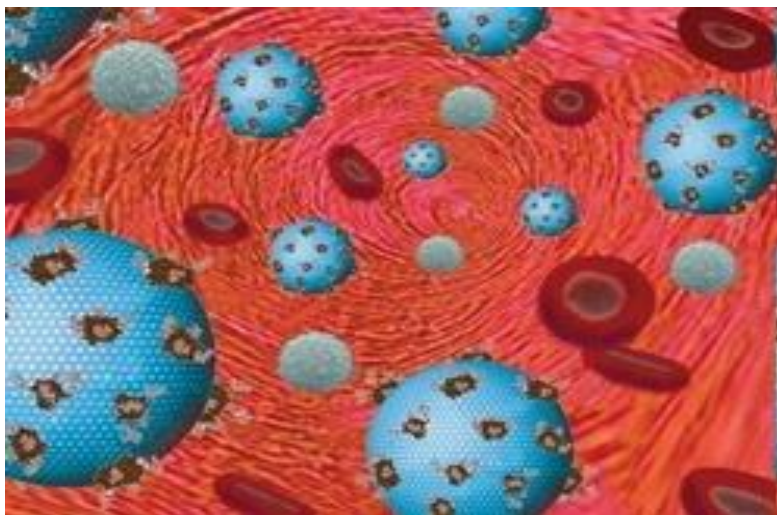




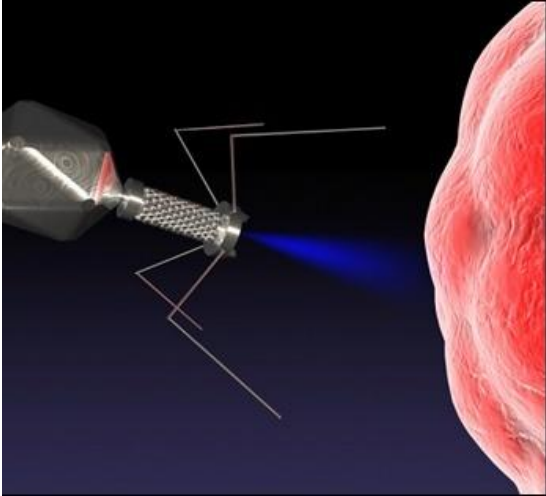
## Полимерные наночастицы



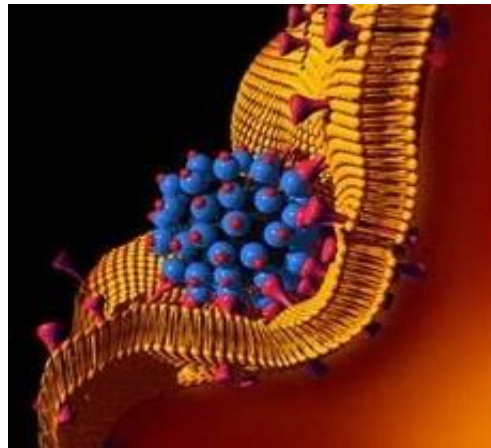
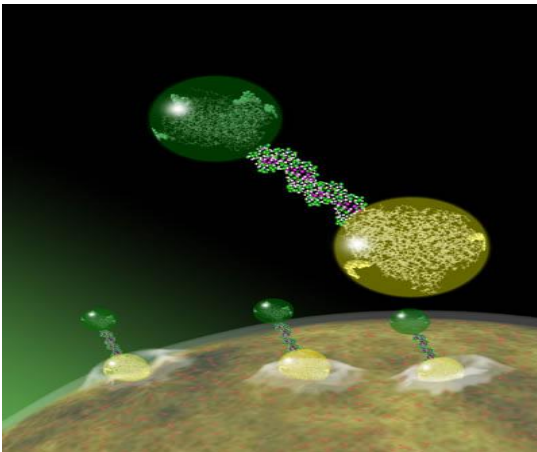
для доставки лекарств через слизистые



# Нанотехнологии в биомедицине

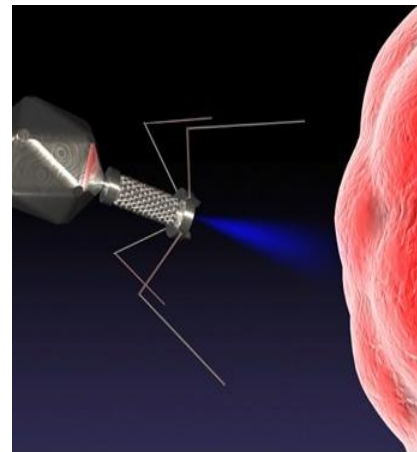
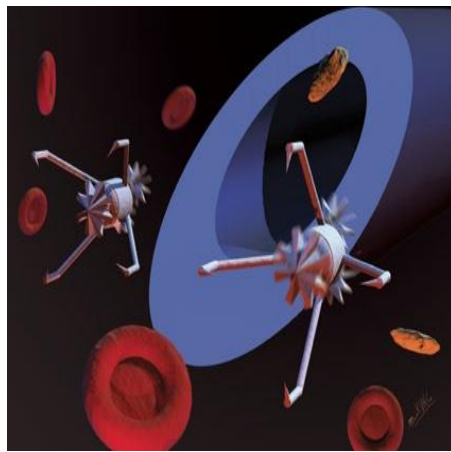
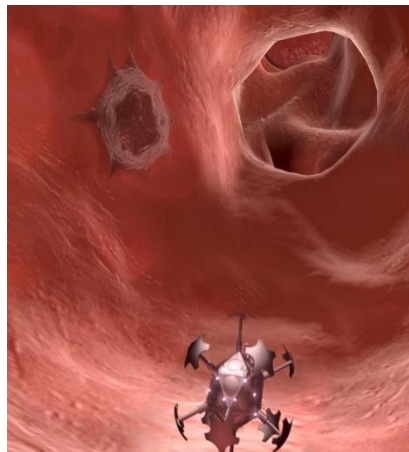


Наноустройства



Биосенсоры

# Нанороботы-лекари и диагносты



Примеры наноустройств

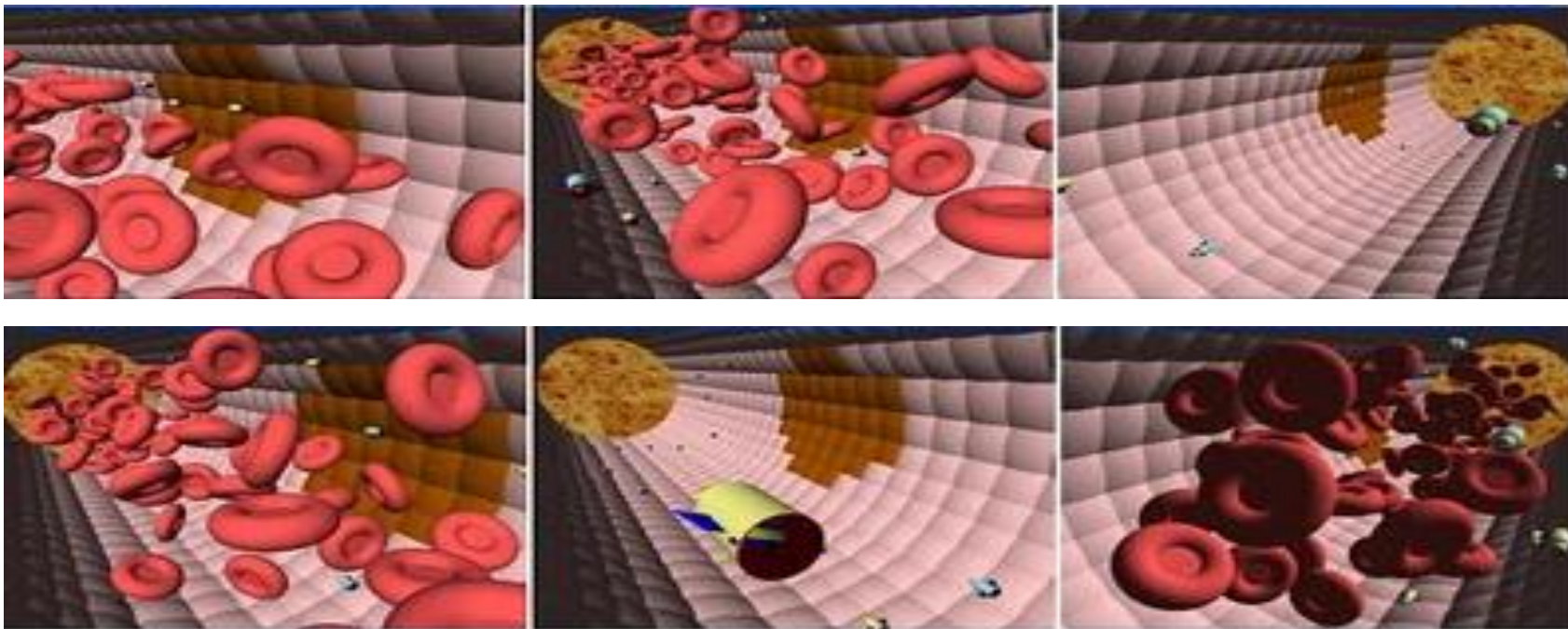


# Структура кровяного наноробота для доставки лекарства



- Микрокамера – глаз устройства;
- доставляемое вещество – для лечения;
- емкость – для хранения энергии;
- плавники – для организации движения.

# Разбивание тромба нанороботом

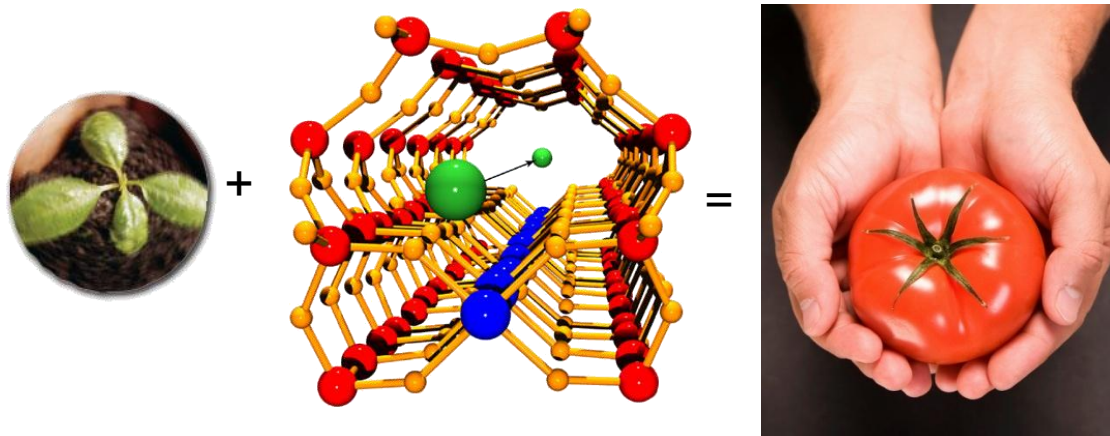


Медицина. Лечение сосудов.  
Разбивание тромба нанороботом.  
Этапы процесса.

# Нанотехнологии в сельском хозяйстве. «Наноеда»



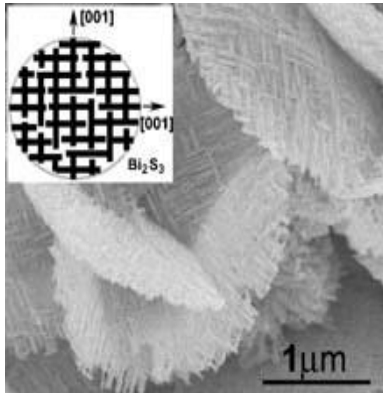
Нанотрубки помогают выращивать с/х продукцию в условиях малого количества воды



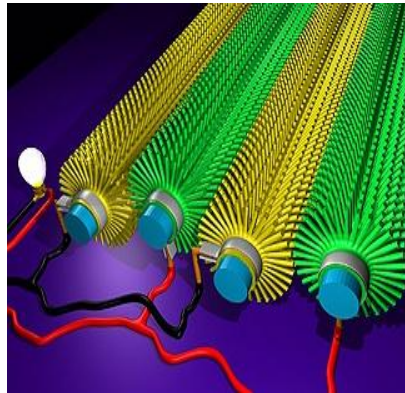
Нанотрубки, имплантированные в растения томатов, усиливают водную адсорбцию и соответственно их рост



## Другие возможные применения в будущем



<http://www3.interscience.wiley.com/journal/118859172/issue>



<http://gtresearchnews.gatech.edu/newsrelease/power-shirt.htm>



<http://i.ytimg.com/vi/bt-lv6IJPxc/0.jpg>

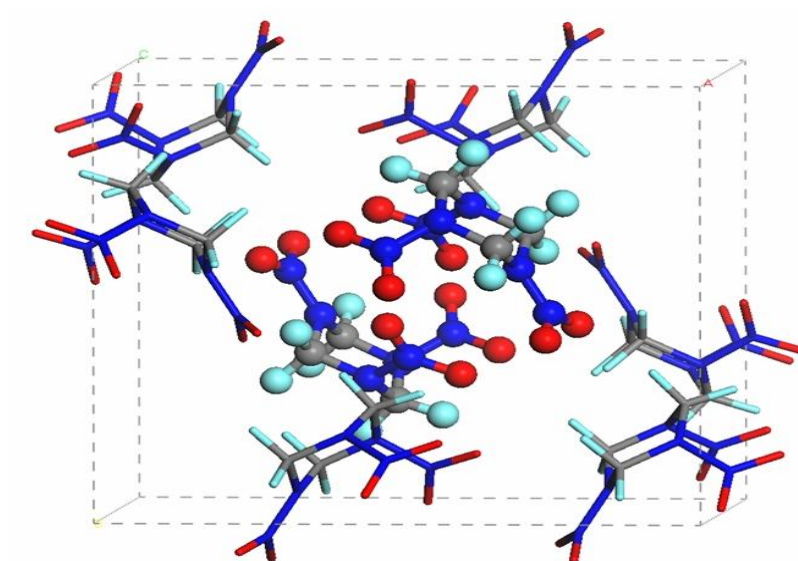
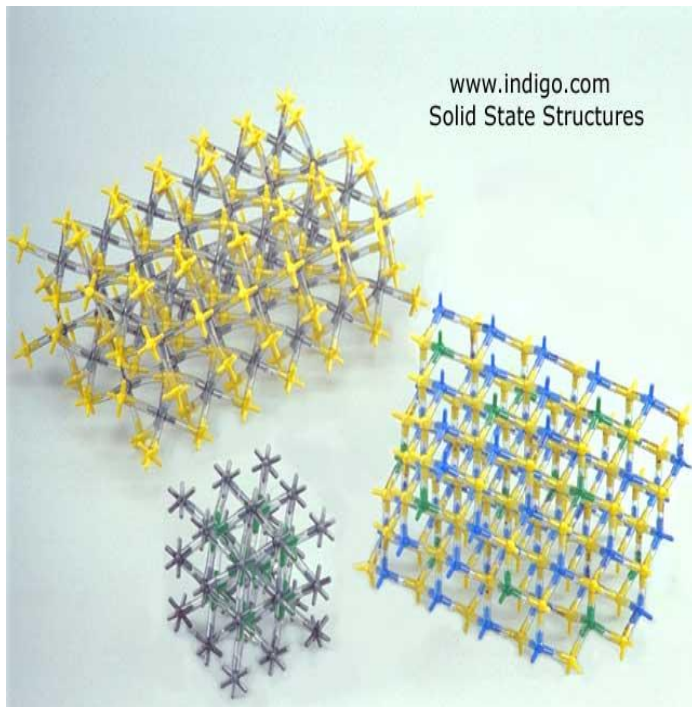


<http://www.treehugger.com/files/2008/05/nano-vent-skin.php>

- Герметичные, противоаллергенные покрытия (спецодежда («наноодежда»)),
- «Дышащие» покрытия («кожа»),
- Покрытия с микро и нано-генераторами энергии (гибкие солнечные батареи)
- Бумага с видео-изображением на коже
- Использование в строительстве



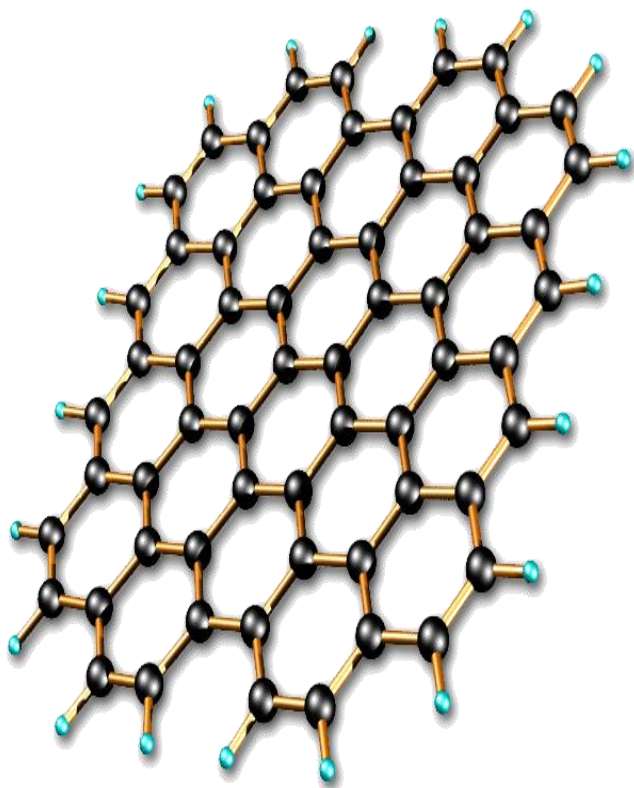
# Нанотехнологии в твердотельной химии



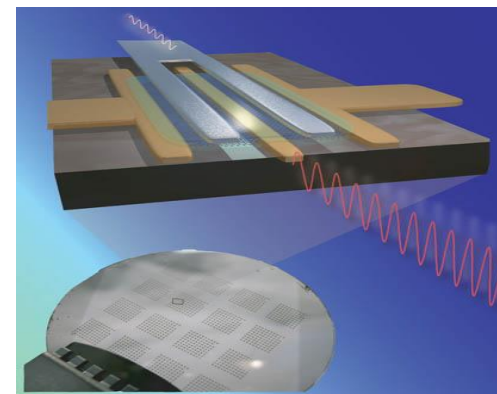
Наноструктуры с различными свойствами



# Особенно о графене

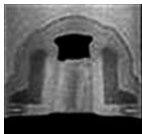
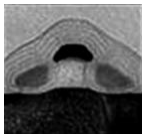
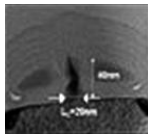
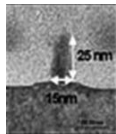
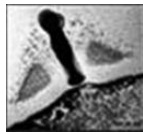


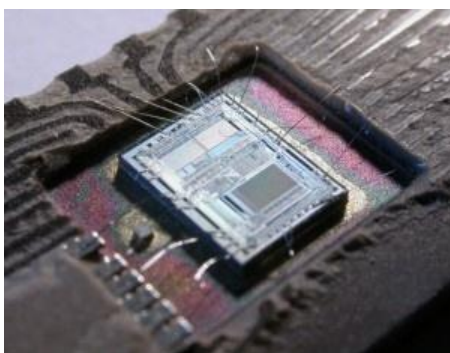
Структура графена



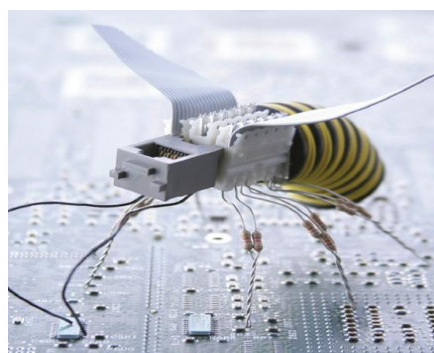
Наноприбор с  
использованием  
графена

# Нанотехнологии в компьютерной схемотехнике и наноэлектронике

Год	2003	2005	2007	2009	2011	2013	2015	2017
Технология	90 нм	65 нм	45 нм	32 нм	22 нм	16 нм	11 нм	8 нм
МОП-транзистор								



Чип

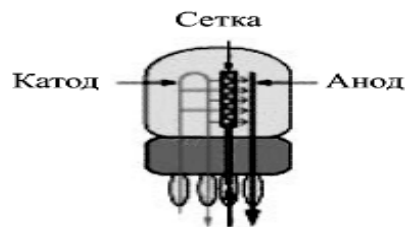


Интеллектуальная система

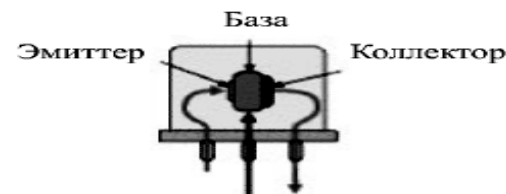
# Прошлое и настоящее элементной базы компьютеров



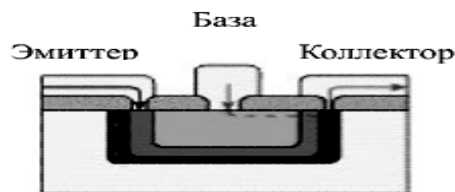
Механический  
ключ



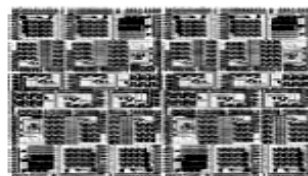
Вакуумная  
электронная лампа



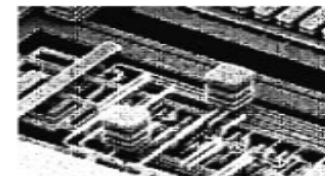
Дискретный  
полупроводниковый  
транзистор



Интегральный  
полупроводниковый  
транзистор



Планарные  
БИС и СБИС

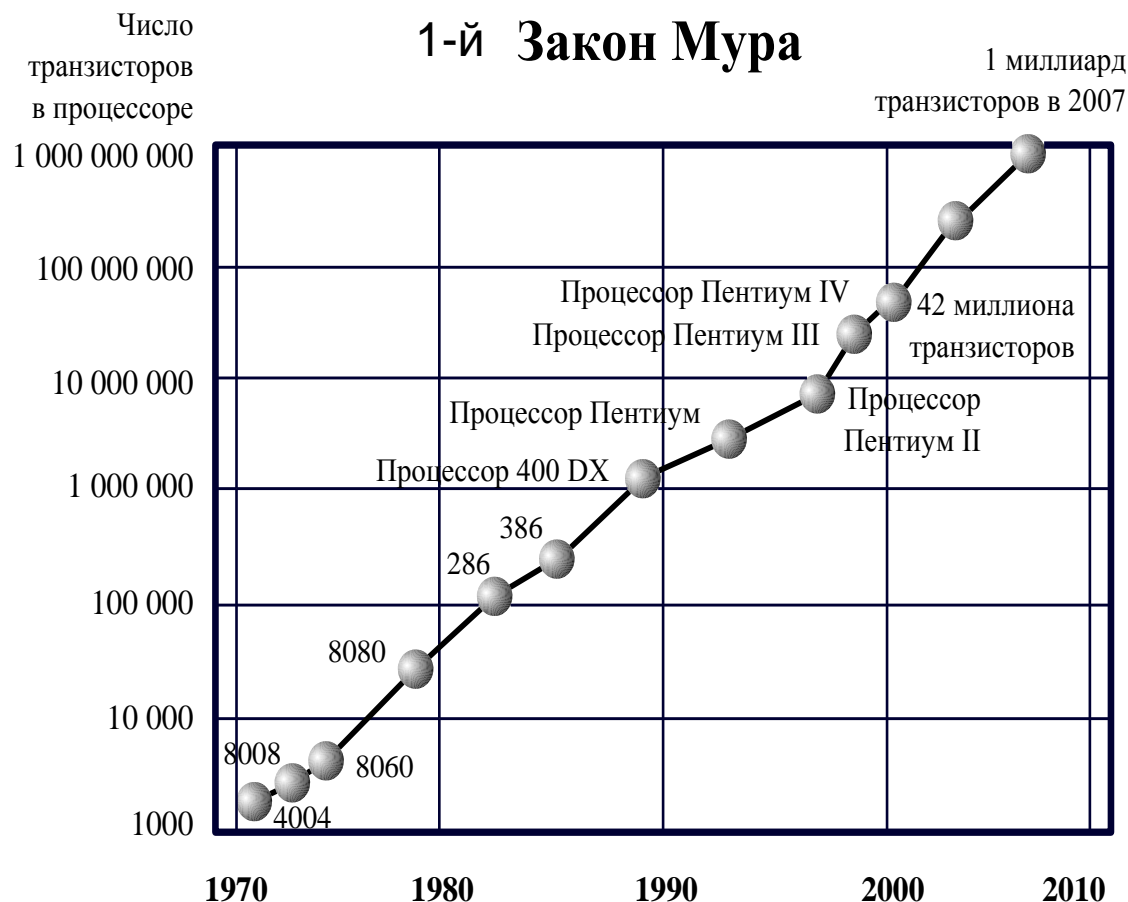


Трехмерные  
СБИС

Этапы развития элементной базы компьютеров:  
от механического ключа  
до 3D интегральных схем

# Законы Мура

## 1-й Закон Мура



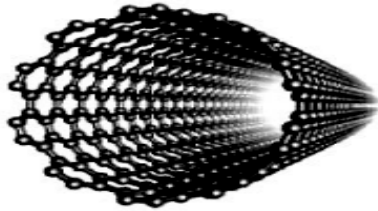
## 1 закон

Емкость микросхем удваивается каждые полтора года

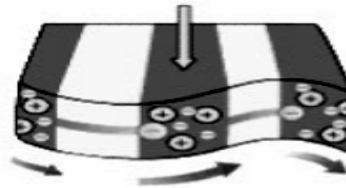
## 2 закон

Уменьшение размеров структур влечет за собой увеличение стоимости производственного процесса

# Настоящее и будущее схемотехники



Нанотрубки



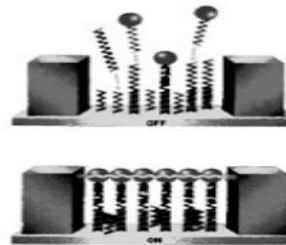
Одноэлектронный транзистор



Атомные переключающие структуры



ДНК -  
углеродная схема



Биочипы



Нанофабрики

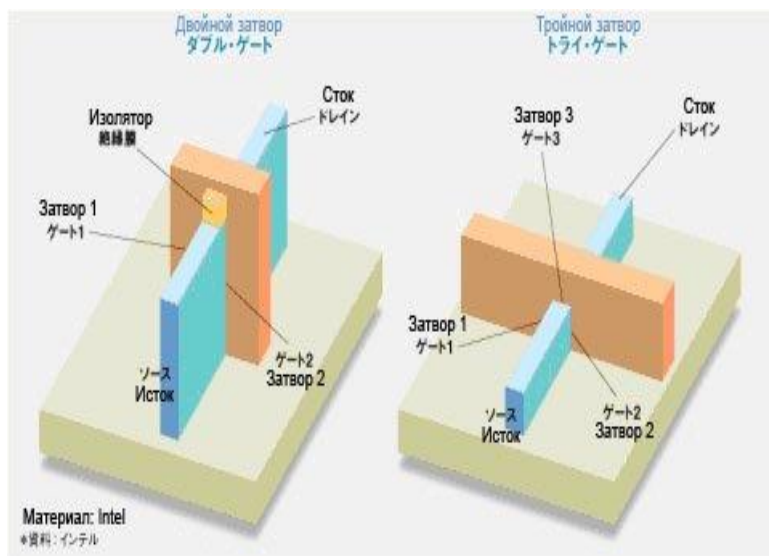
Направления научных исследований  
и разработок

# Направления научного поиска

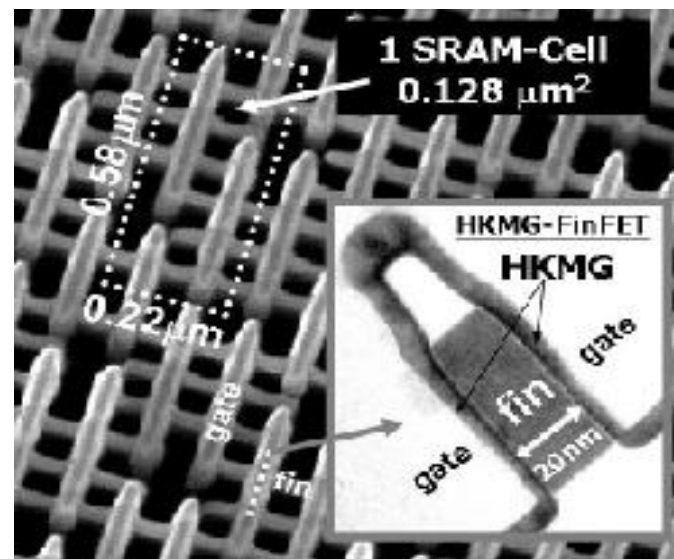




## Поиск оптимального компонента (1)



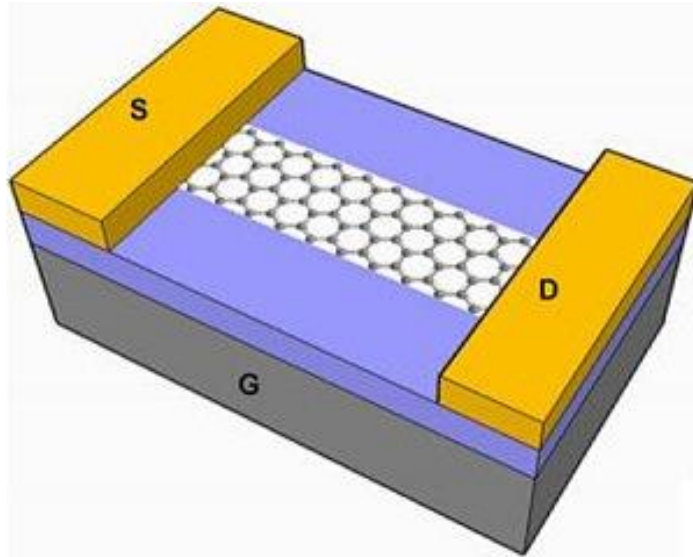
3D МОП транзистор



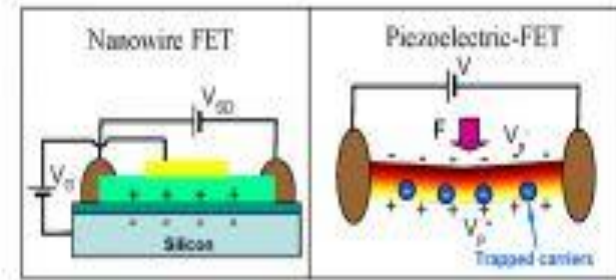
FinFET-транзистор

Использование третьего измерения.  
Уход от планарных схем

## Поиск оптимального компонента (2)



Полевой транзистор  
на основе графеновой наноленты.  
S – исток, D – сток,  
G – затвор.

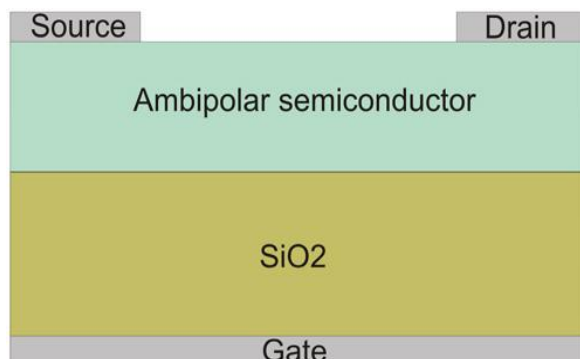


Обычный  
МОП-  
транзистор

Пьезотранзистор –  
использует не  
электрическое  
управление на  
затворе

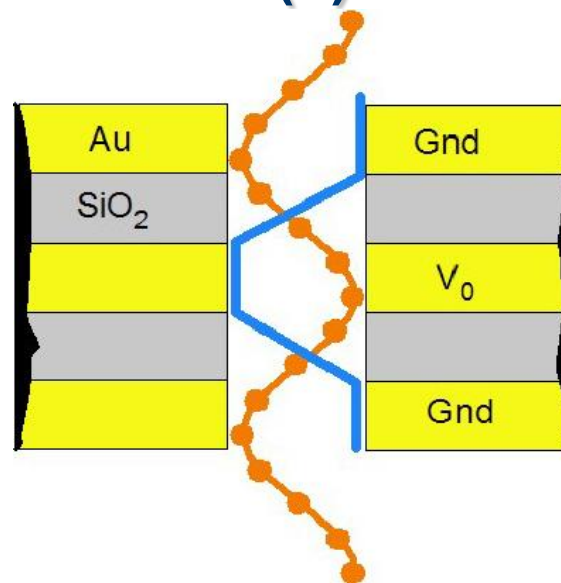


## Поиск оптимального компонента (3)



Органический  
светоизлучающий  
полевой транзистор

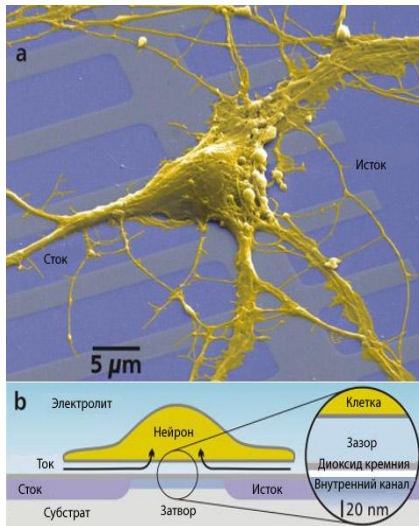
Толщина слоя оксида кремния — 100 нм, и активный слой толщиной 60 нм. Исток и сток размещены в границах  $x < 1$  мкм и  $x > 9$  мкм, соответственно.



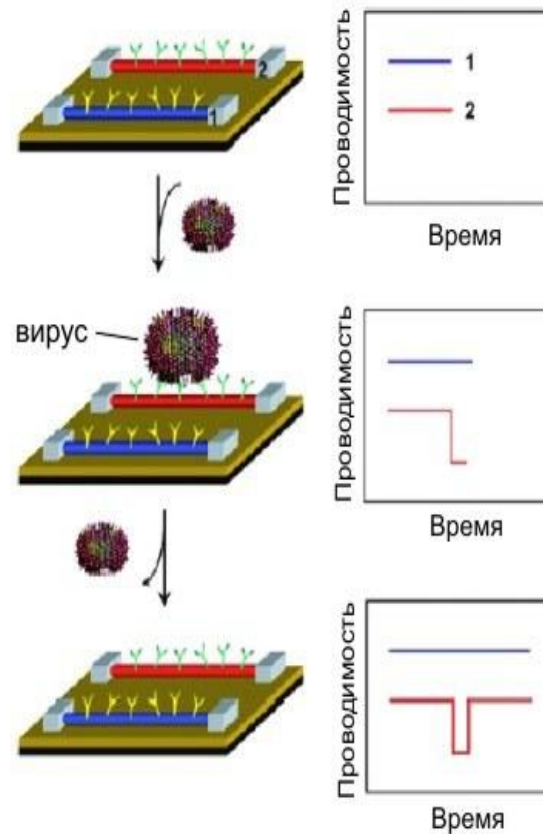
ДНК-  
транзистор

Новый подход в схемотехнике —  
сочетание в компоненте неживой  
и живой форм

# Поиск альтернативных макросхем



Нейроны +  
кремниевая  
электроника



Биочипы

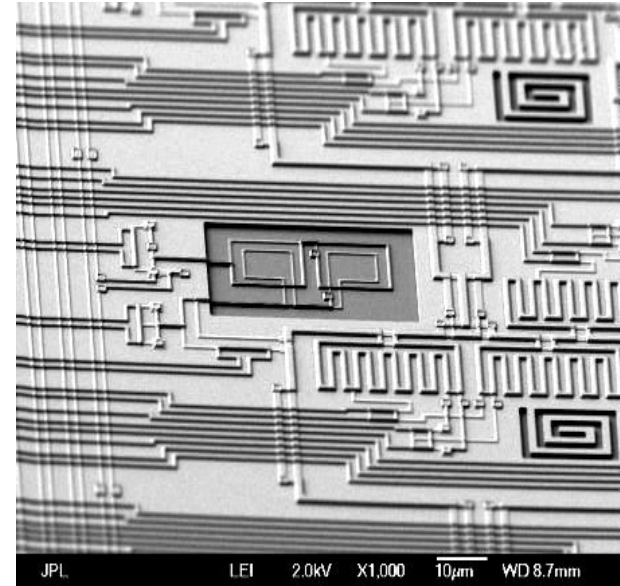


Углеродные  
наносети

## Поиск альтернативных компьютеров (1)



D-Wave Orion: первый  
квантовый компьютер



Чип квантового компьютера

## Поиск альтернативных компьютеров (2)

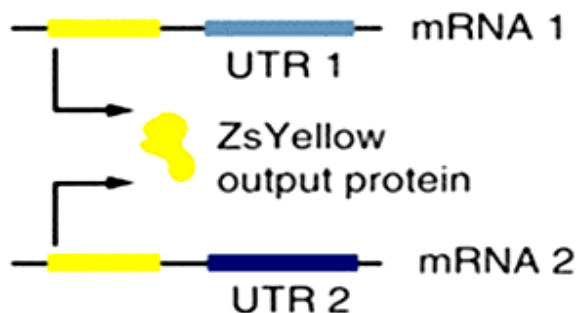


Схема вентиля  
логического сложения  
(OR) для  
молекулярного  
биокомпьютера

mRNA 1 ↑	mRNA 2 ↑	Output	mRNA 1 ↑ OR mRNA 2 ↑
False	False	–	False
True	False	+	True
False	True	+	True
True	True	+	True

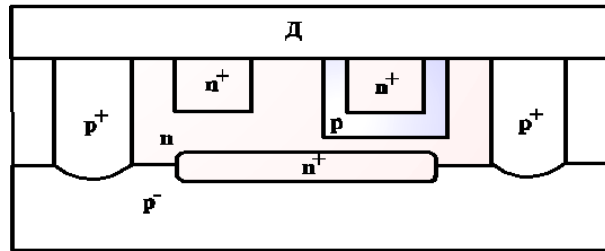
Таблица истинности

False – «Ложь»  
True – «Истина»  
Output - выход

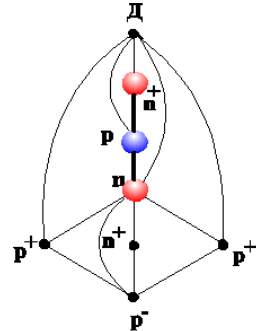
В таблице истинности стрелки вверх указывают на присутствие мРНК (mRNA).

Применение : оценка влияния потенциальных лекарственных препаратов на человеческие клетки в культуре и в медицине – для диагностики различных болезней

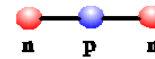
# Пример использования системы наук – поиск оптимальной схемотехники для компьютеров



а)



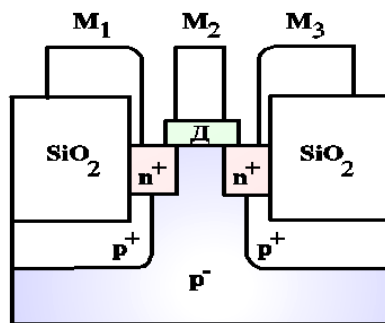
б)



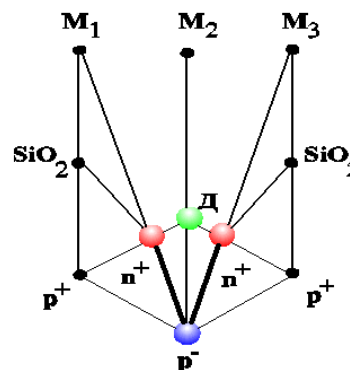
в)

Интегральные  
структуры  
математические  
модели

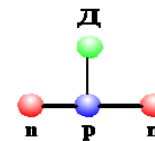
• биполярного а), б),  
в) и



г)



д)

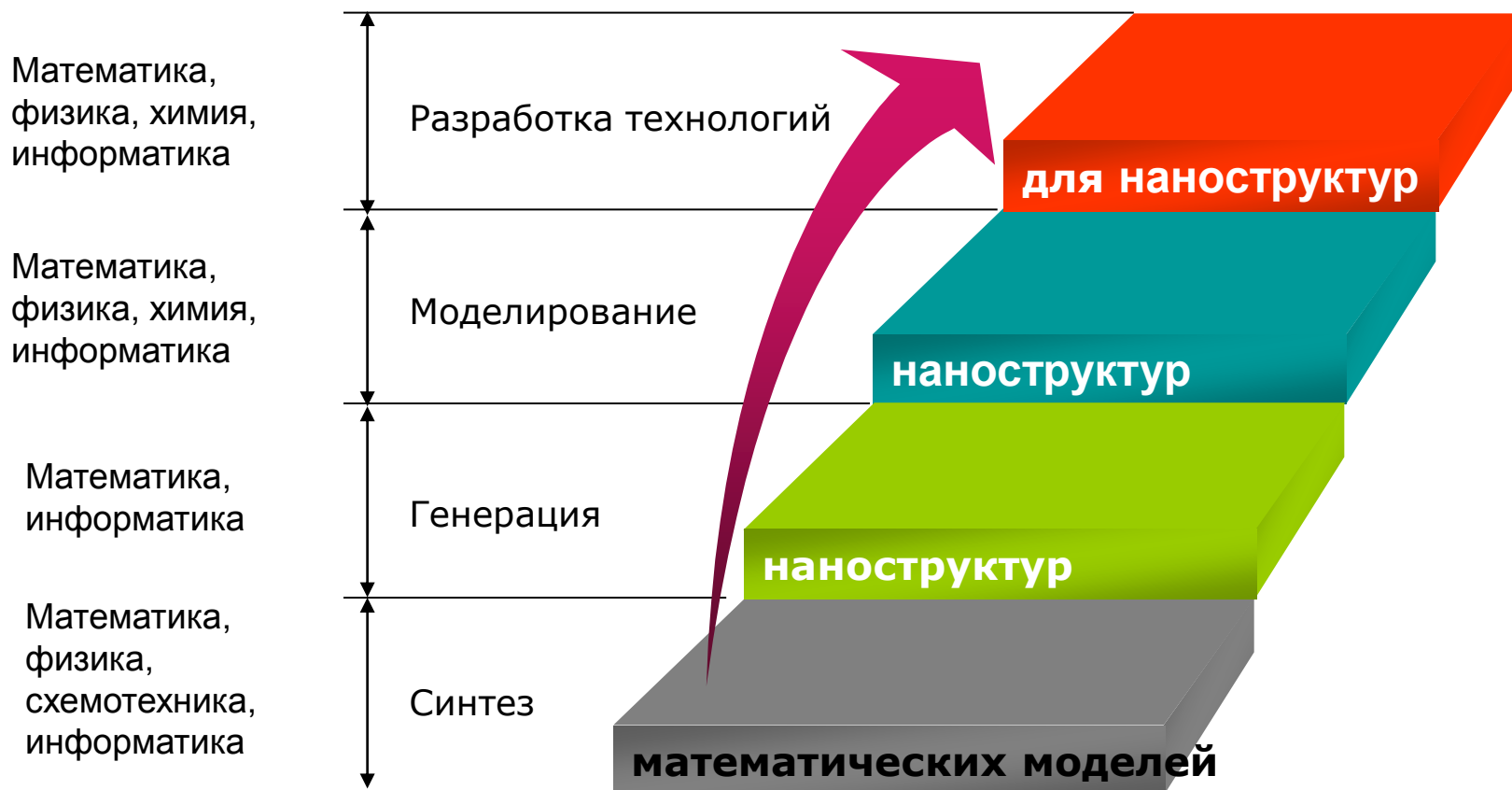


е)

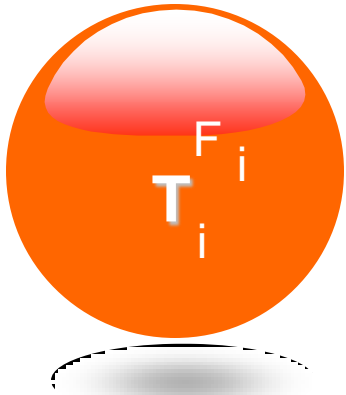
•МОП г), д), е)  
транзисторов  
переходной  
схемотехнике.

Транзисторы – схемы переходной  
схемотехники

## Структура проекта по созданию кремниевой переходной наносхемотехники – модель виртуальной нанофабрики



## Теория. Компонент новой схемотехники – материал (N=1)



$$T = \{T_i\}(i=1,..n) = (p, n, p+, n+,...SiO_2, Al, Ga...) = \Pi \cup Д \cup М$$

$p$  – полупроводниковая область  $p$ -типа,

$n$  – полупроводниковая область  $n$ -типа,

$SiO_2$  – область двуокиси кремния,

$Al$  – область алюминия,

$Ga$  – область галия и т.д.),

$\Pi$  – подмножество областей полупроводников,

$Д$  – подмножество областей диэлектриков,

$М$  – подмножество проводников

$$F = F_y \cup F_n$$

$$F_y = \{F_{yi}\} = (E_1, ..., E_{k1}, I_1, ..., I_{k2}, \Phi_1, ..., \Phi_{k3} ...)$$

$$F_n = \{F_{ni}\} = (v_{x1}, ..., v_{xm}, v_{y1}, ..., v_{yn})$$



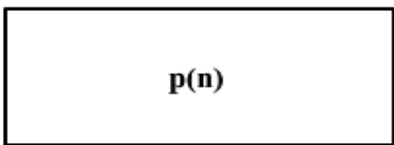
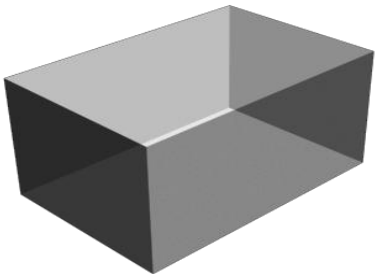
$E_i$  - напряжение,  $I_j$  - ток,  $\Phi_k$  - свет, давление и пр.,

$v_{xi}$  – область, на которую подается входной сигнал,

$v_{yi}$  - область, с которой снимается выходной сигнал (реакция)

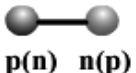
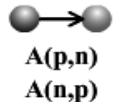
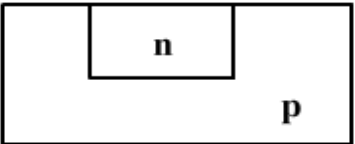
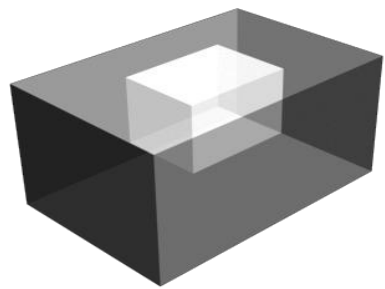


# N=1. Материал

Математическая модель структуры	Структурная формула
 $p(n)$	 $p(n)$
2D модель структуры	3D модель структуры
 $p(n)$	

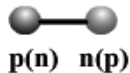
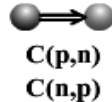
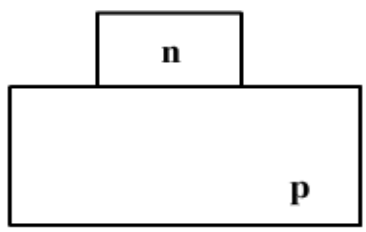
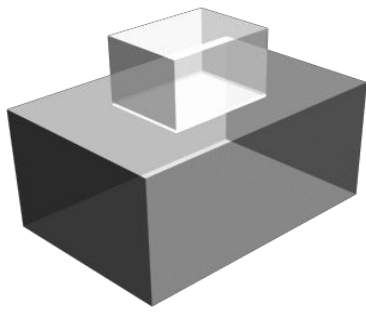


## N=2. Внутренний переход

Математическая модель структуры	Структурная формула
 <p><math>p(n)</math> <math>n(p)</math></p>	 <p><math>A(p,n)</math> <math>A(n,p)</math></p>
2D модель структуры	3D модель структуры
	

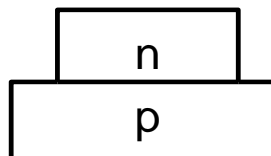
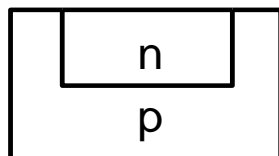
**Основной компонент переходной  
схемотехники**

## N=2. Поверхностный переход

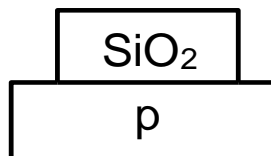
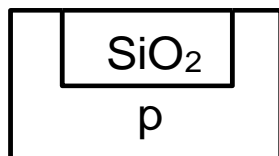
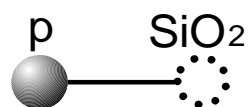
Математическая модель структуры	Структурная формула
	
2D модель структуры	3D модель структуры
	

**Основной компонент переходной  
схемотехники**

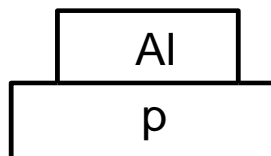
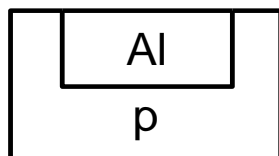
# Примеры переходов



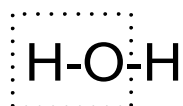
Полупроводник-  
Полупроводник



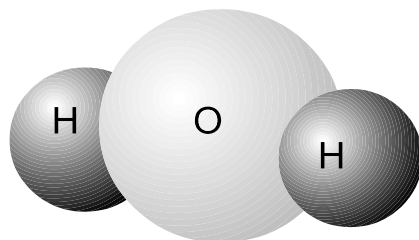
Полупроводник-  
Диэлектрик



Полупроводник-  
Металл

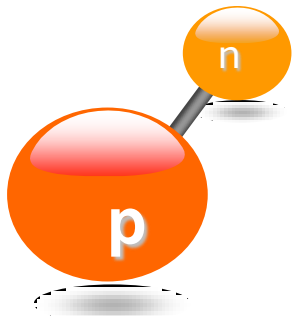


АТОМ-АТОМ

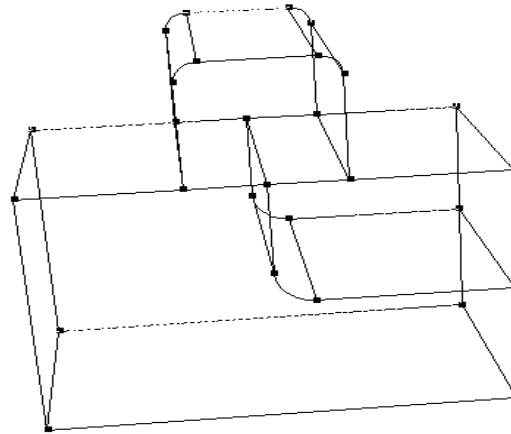


Молекула  
воды

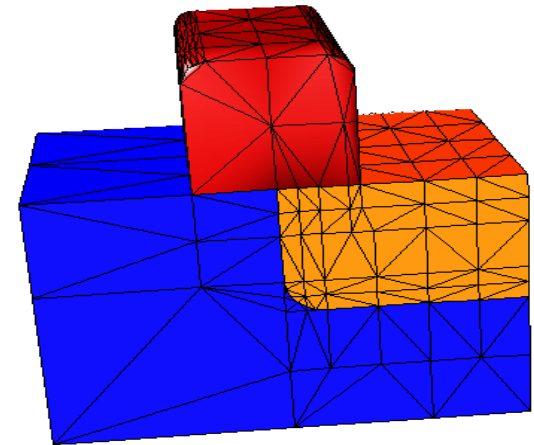
# Физическое 3D-моделирование наноструктуры р-п-перехода. Исходные данные



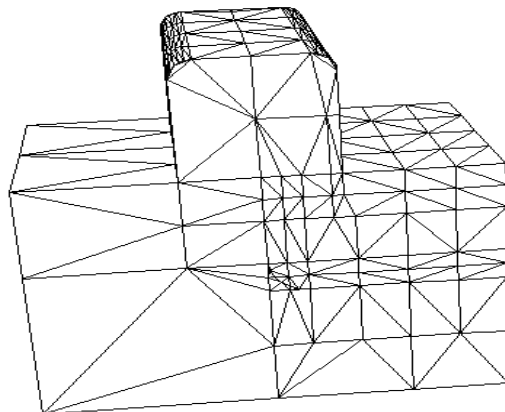
Модель



Каркас



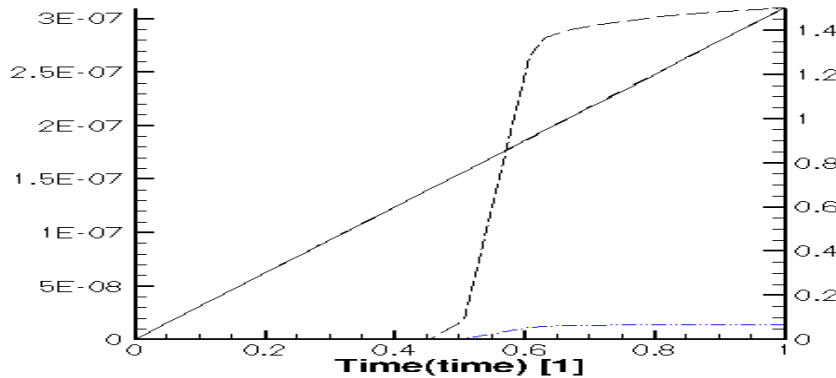
Назначение  
материалов



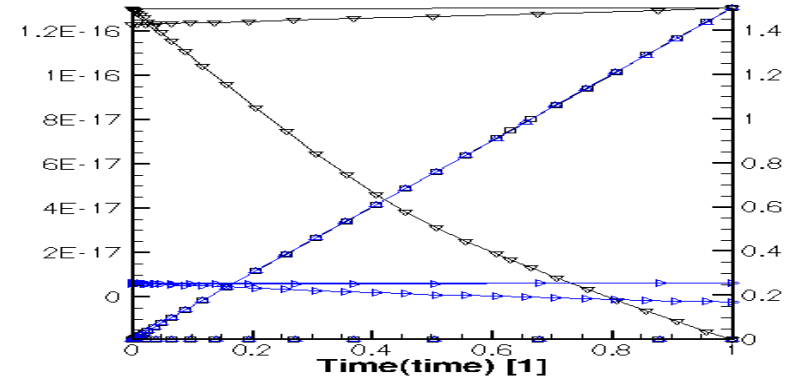
Расчетная сетка

# Результаты моделирования

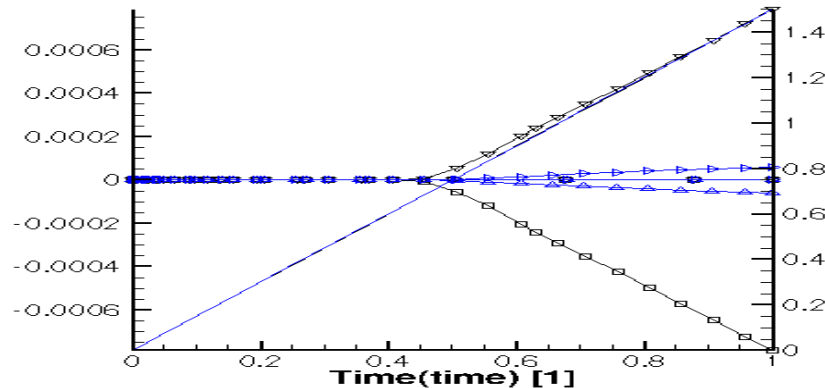
— anoOutVol(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 - - - anoOutVol(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)  
 - - - anohCurr(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 - - - anohCurr(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)



— anoInnVol(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 — anoInnVol(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)  
 — catChar(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 — catChar(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)



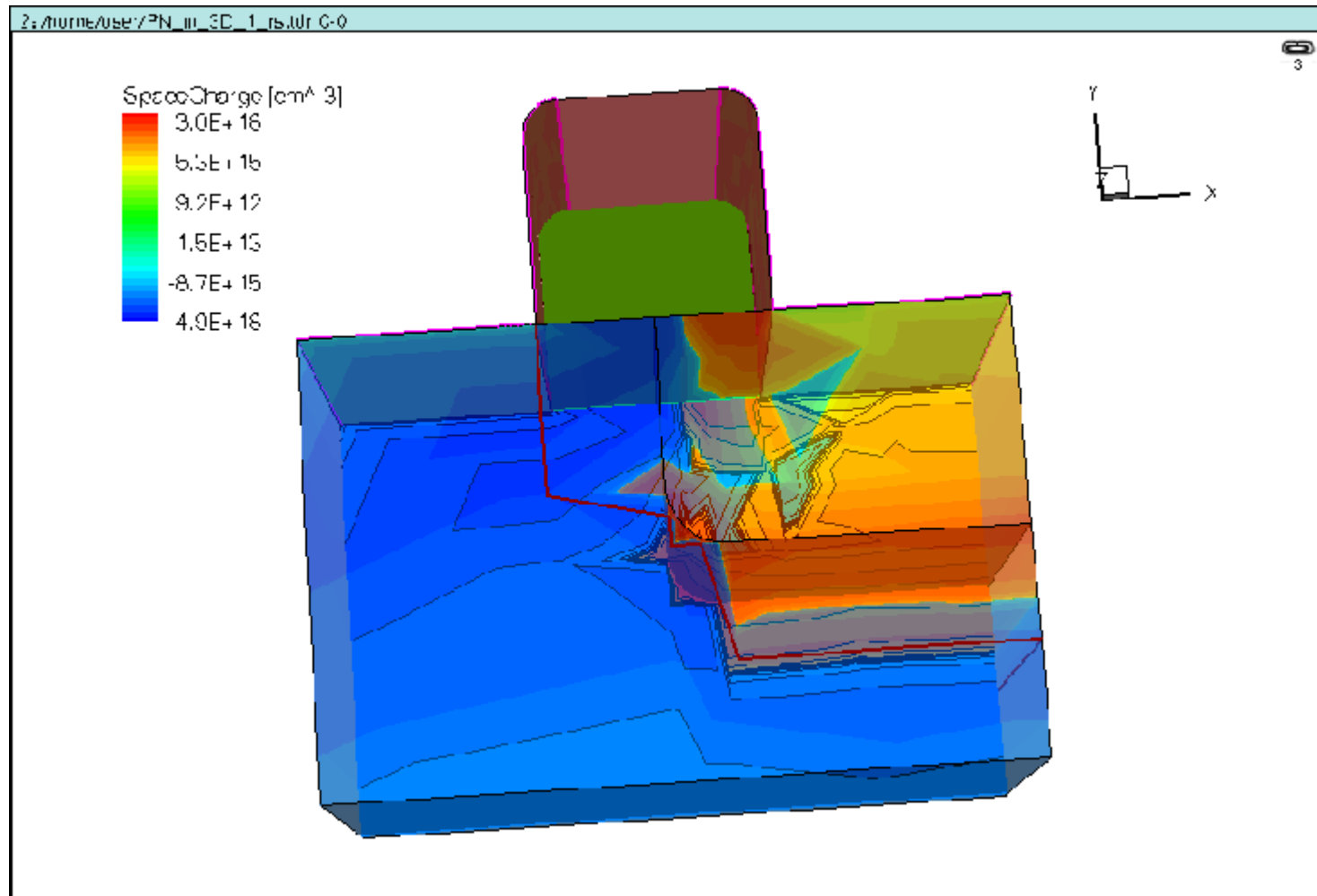
— catTotCurr(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 — catTotCurr(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)  
 — anoTotCurr(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 — anoTotCurr(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)  
 — anoInnVol(PN\_in\_1\_rs.plt/PN\_in\_1\_rs.plt)  
 — anoInnVol(PN\_in\_3D\_1\_rs.plt/PN\_in\_3D\_1\_rs.plt)



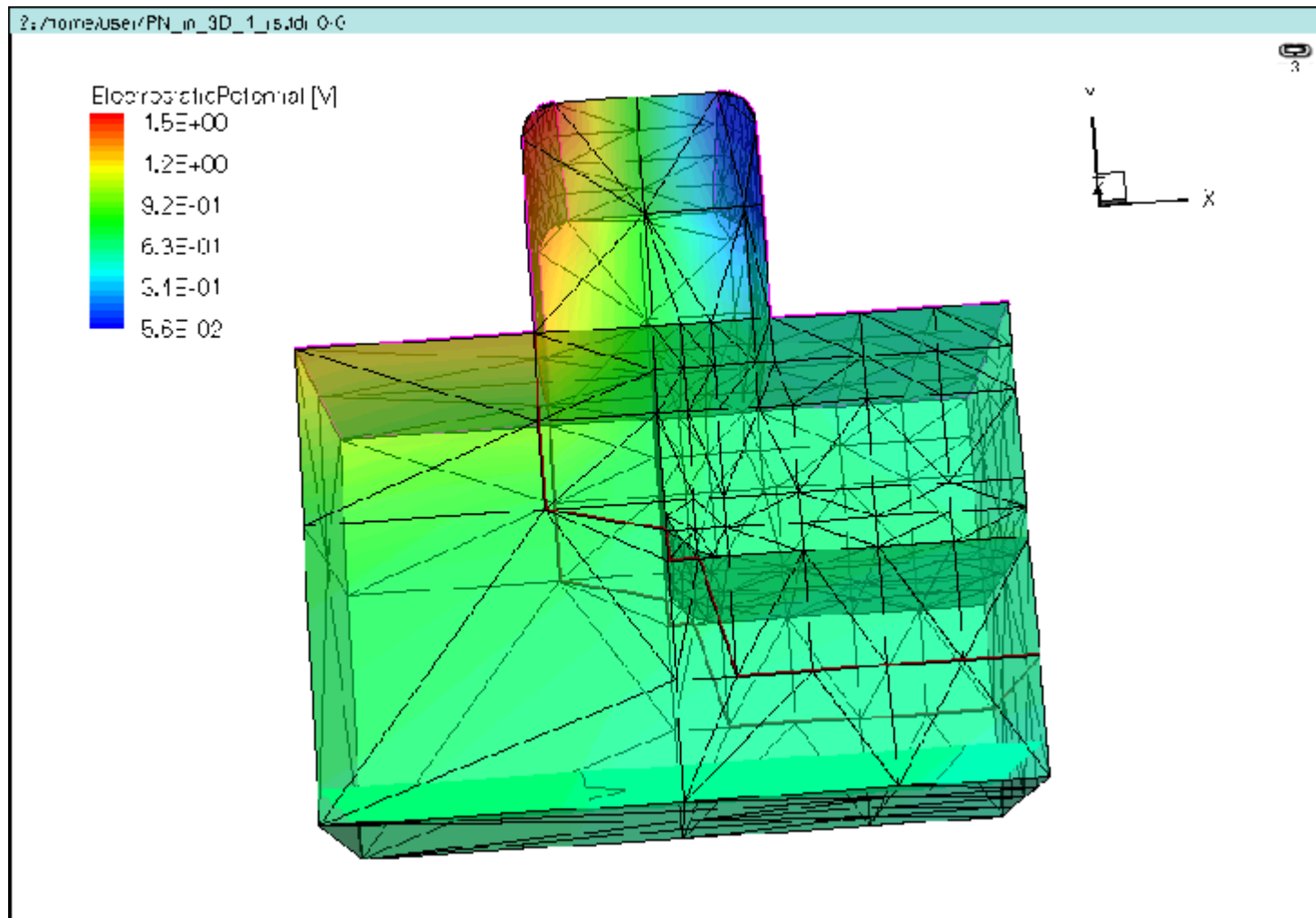
По ним определяется  
работоспособен ли новый  
разрабатываемый элемент или нет.



# 3D-анимация пространственного заряда в наноструктуре p-n-перехода по оси Z

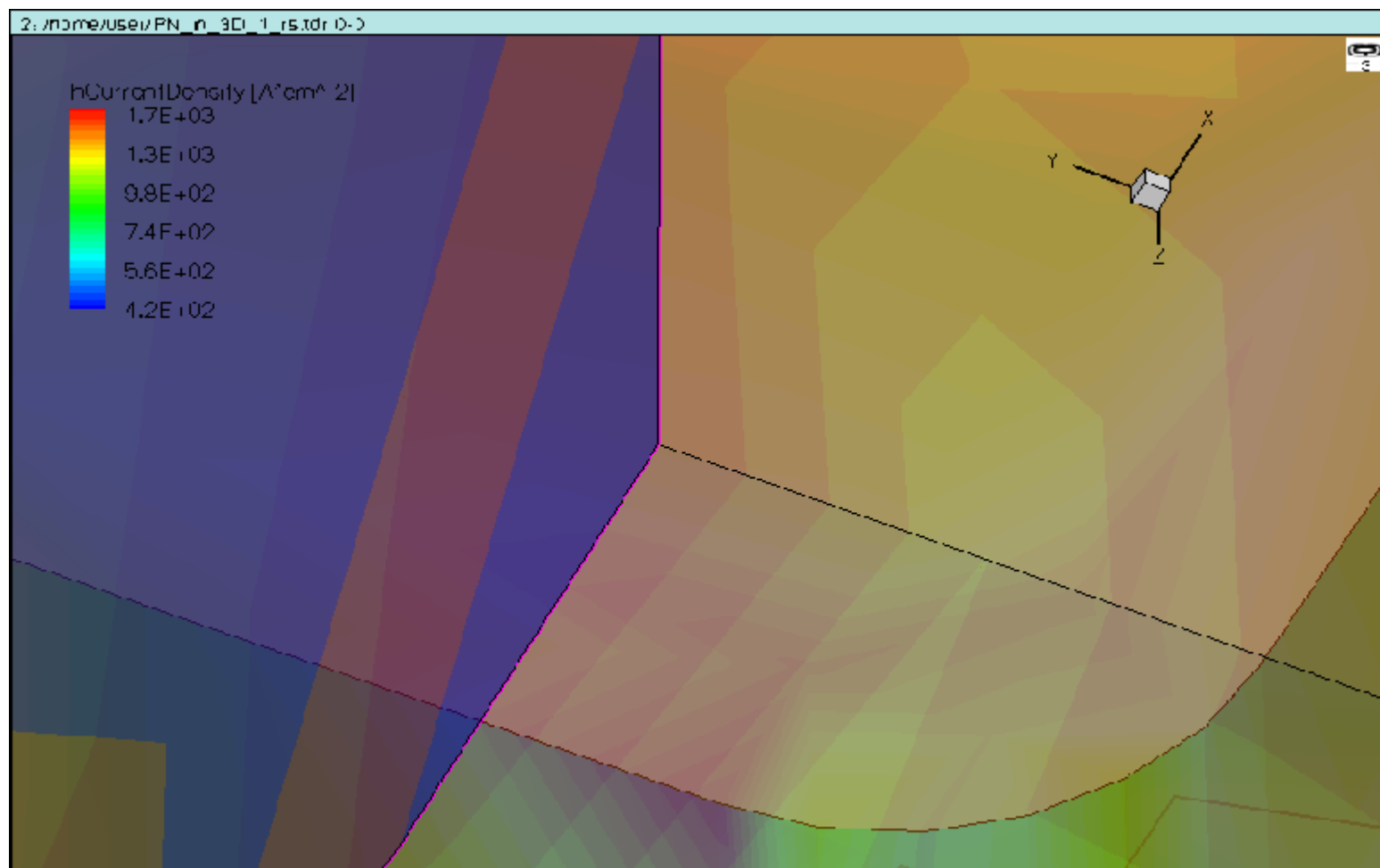


# 3D-анимация электростатического потенциала в наноструктуре р-п-перехода по оси Z

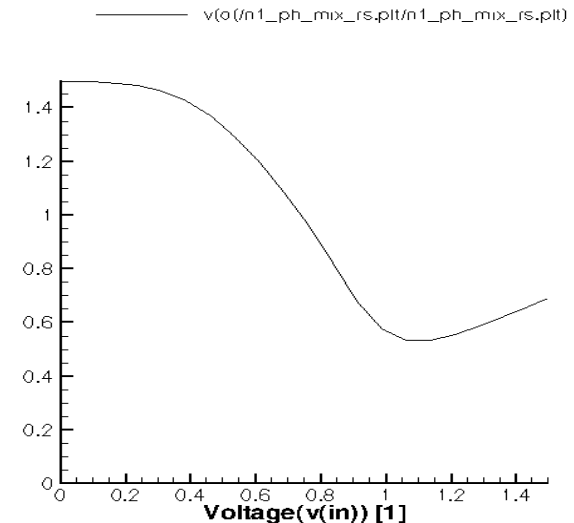
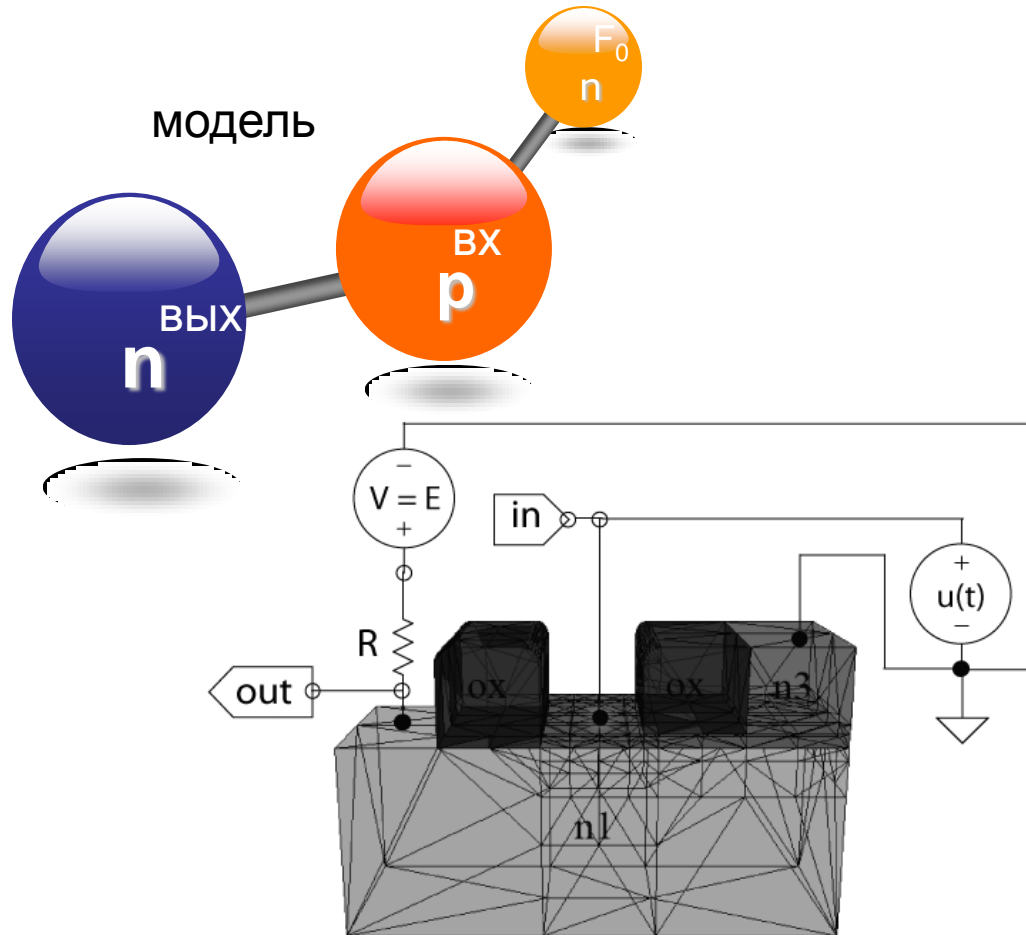


# 3D-анимация плотности тока дырок

в области контакта катода в наноструктуре p-n-перехода по оси X


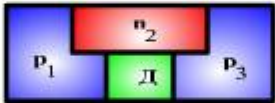
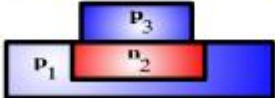



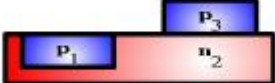



# 3D-смешанное моделирование биполярного нанотранзистора



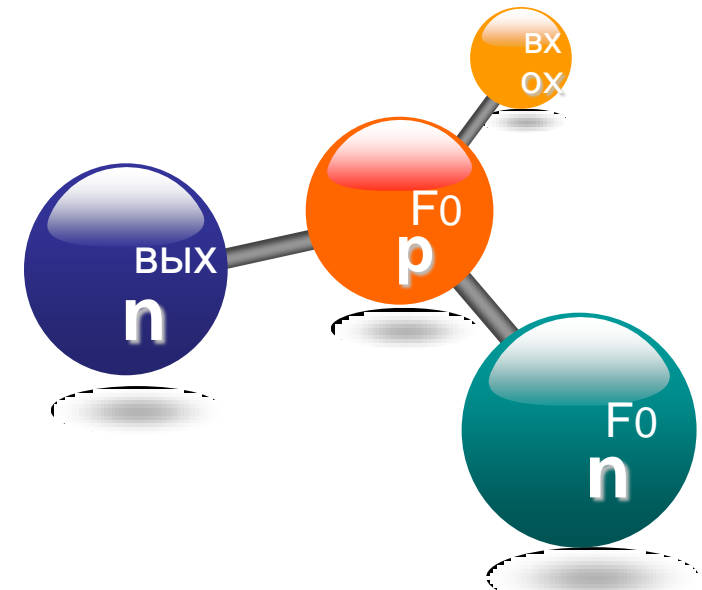
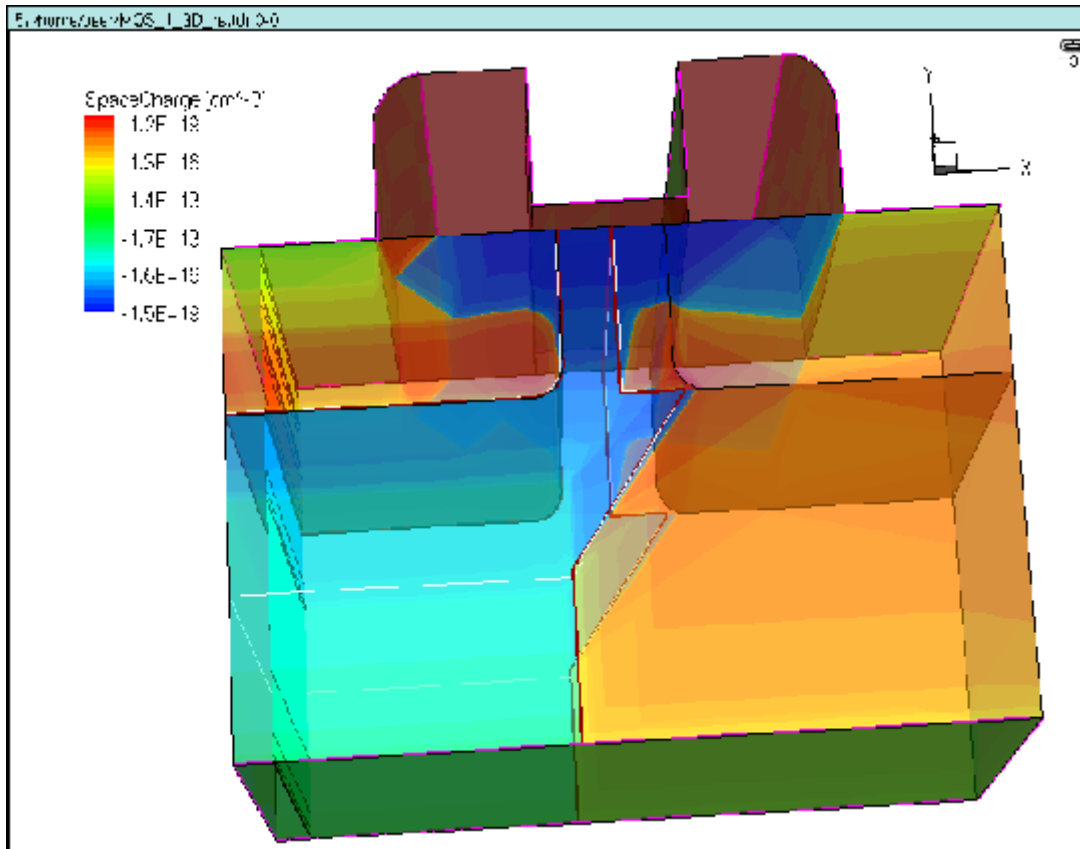
Передаточная характеристика ступенчатой структуры биполярного транзистора, полученная в результате смешанного моделирования

# Алгоритм синтеза структур математической модели N=3

№ п/п	$a_1 a_2$	Структурная формула	Интегральная структура			
1	A A	$p_1 \xrightarrow{a_1} n_2 \xrightarrow{a_2} p_3$		9	C A	$p_1 \Rightarrow n_2 \rightarrow p_3$
2	A B	$p_1 \rightarrow n_2 \leftarrow p_3$		10	C B	$p_1 \Rightarrow n_2 \leftarrow p_3$
3	A C	$p_1 \rightarrow n_2 \Rightarrow p_3$		11	C C	$p_1 \Rightarrow n_2 \Rightarrow p_3$
4	A D	$p_1 \rightarrow n_2 \Leftarrow p_3$		12	C D	$p_1 \Rightarrow n_2 \Leftarrow p_3$
5	B A	$p_1 \leftarrow n_2 \rightarrow p_3$		13	D A	$p_1 \Leftarrow n_2 \rightarrow p_3$
6	B B	$p_1 \leftarrow n_2 \leftarrow p_3$		14	D B	$p_1 \Leftarrow n_2 \leftarrow p_3$
7	B C	$p_1 \leftarrow n_2 \Rightarrow p_3$		15	D C	$p_1 \Leftarrow n_2 \Rightarrow p_3$
8	B D	$p_1 \leftarrow n_2 \Leftarrow p_3$		16	D D	$p_1 \Leftarrow n_2 \Leftarrow p_3$



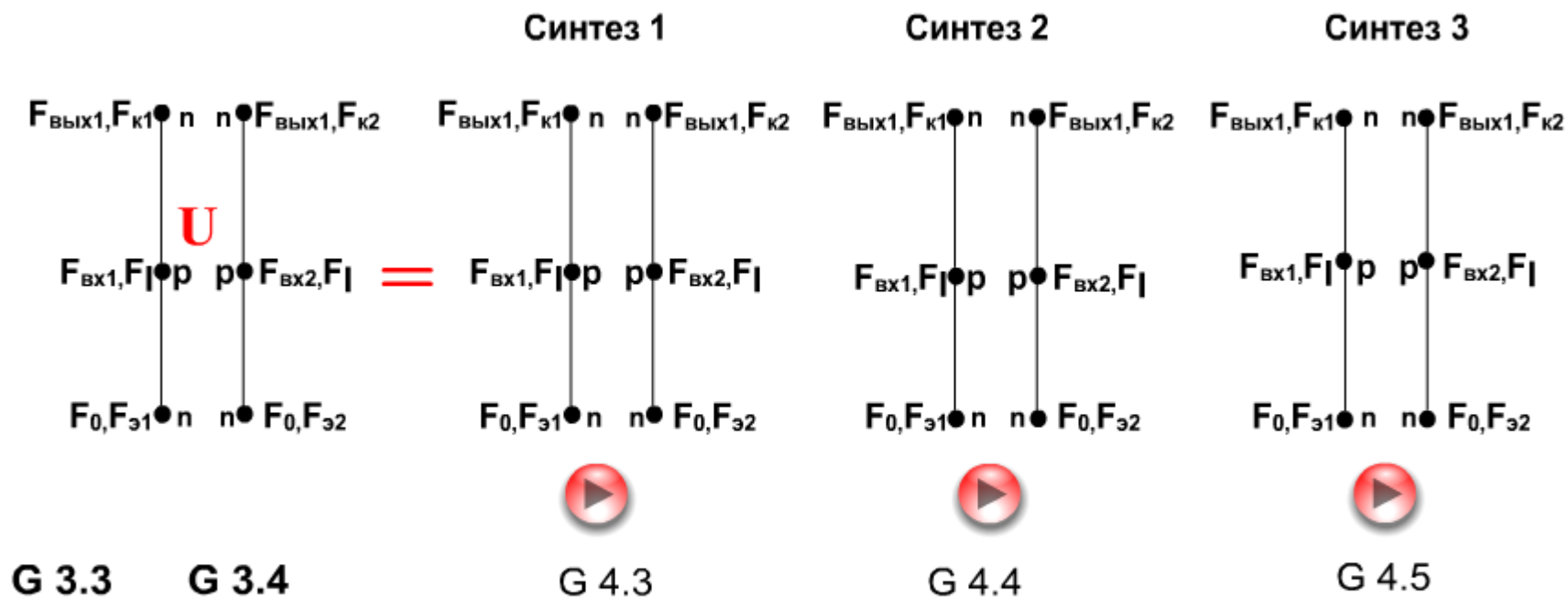
# Проектирование МОП-транзистора. N=4



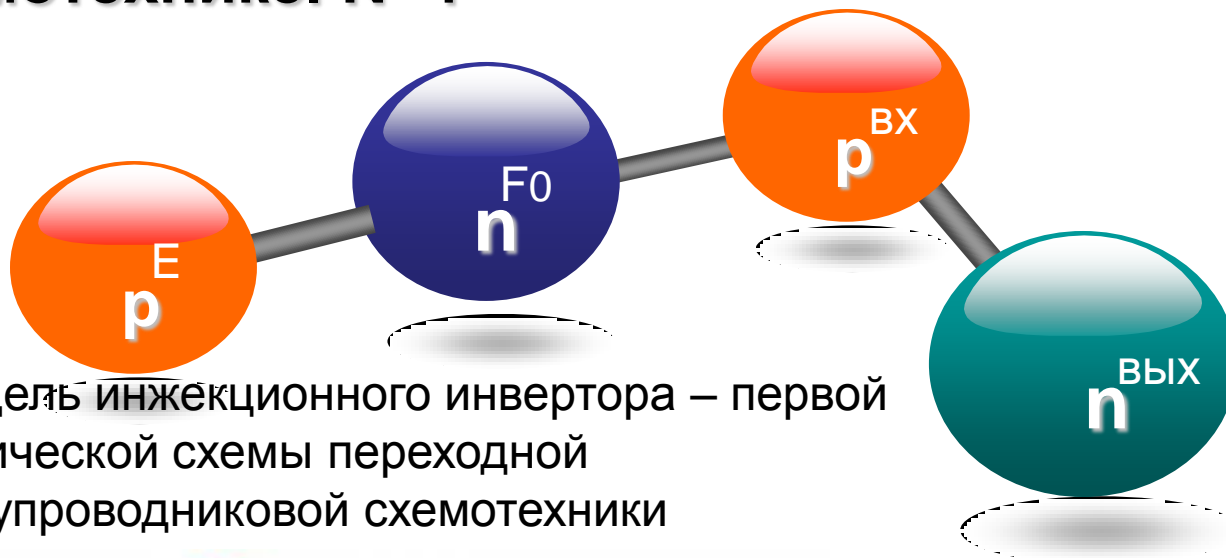
Модель n-канального МОП транзистора в переходной схемотехнике. N=4

3D-моделирование пространственного заряда в наноструктуре МОП транзистора. Сканирование по оси X

# Уравнение синтеза математических моделей "ИЛИ", "НЕ-И", "И" N=4



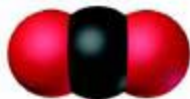
# Схема – модель И<sup>2</sup>Л инвертора в переходной схемотехнике. N=4



(a) Oxygen



(b) Water



(c) Carbon dioxide



(d) Ethanol

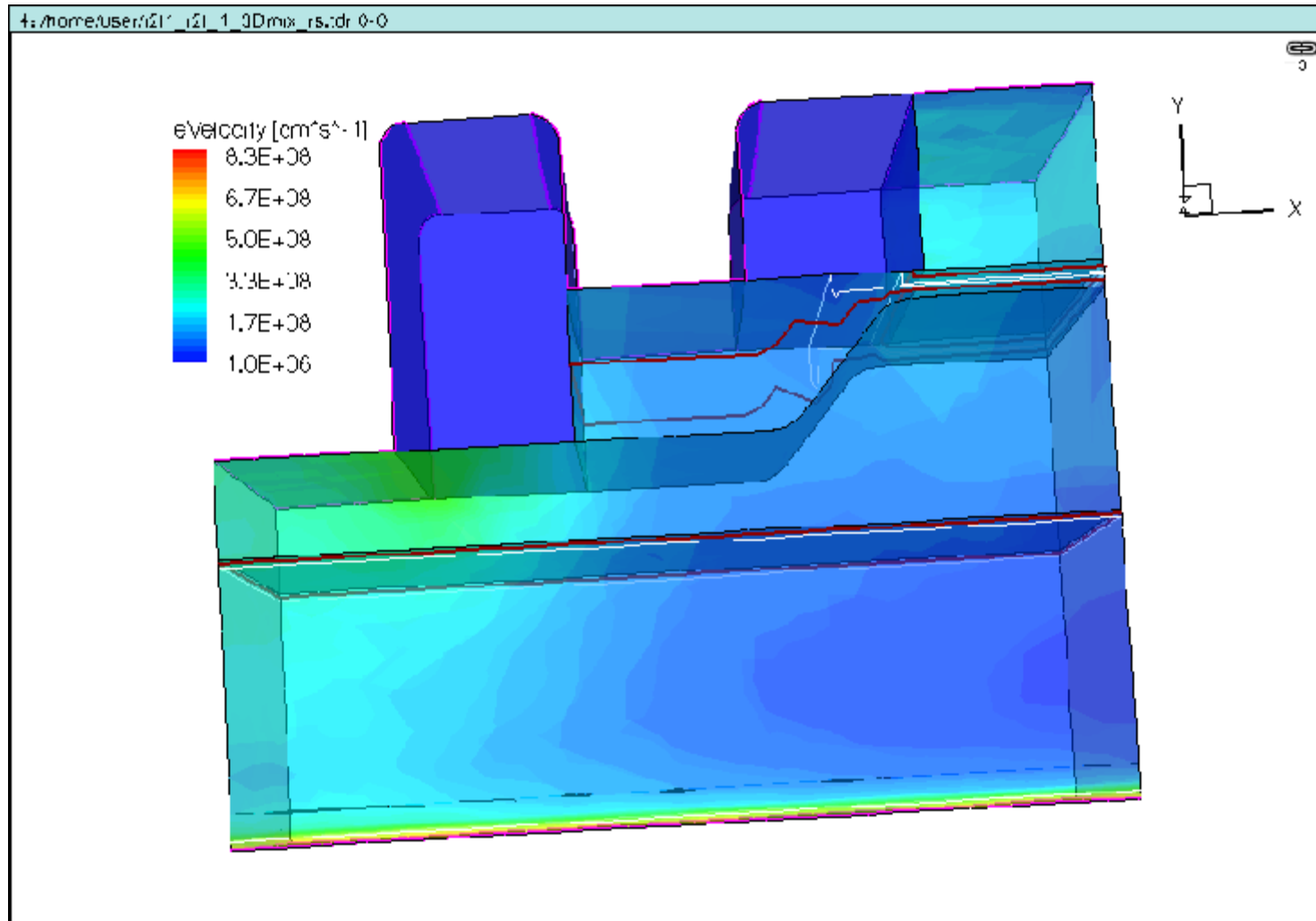


(e) Ethylene glycol

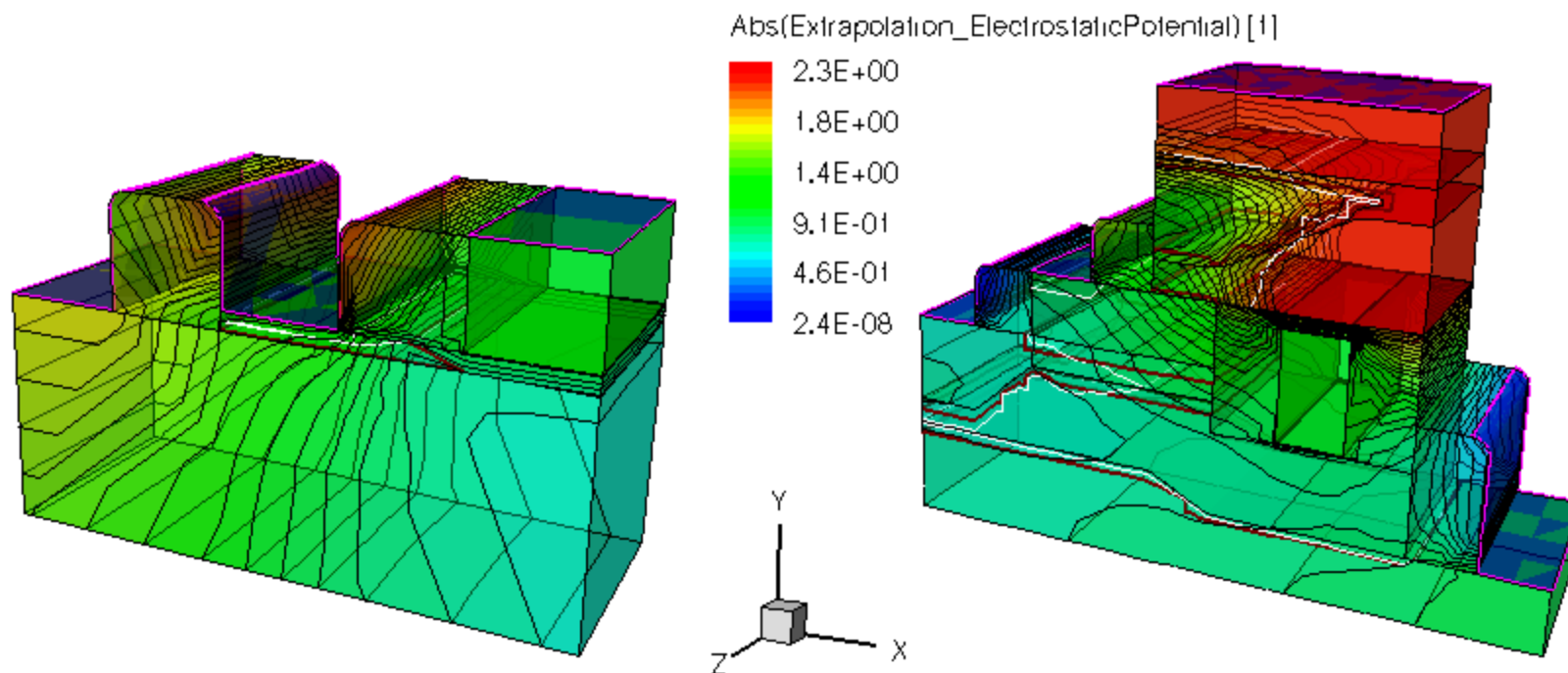


(f) Aspirin

# 3D-моделирование скорости электронов в И<sup>2</sup>Л наноструктуре N=4. Сканирование по оси Y



# От транзистора (N=3) до 3D вентиля И-НЕ (N=8)

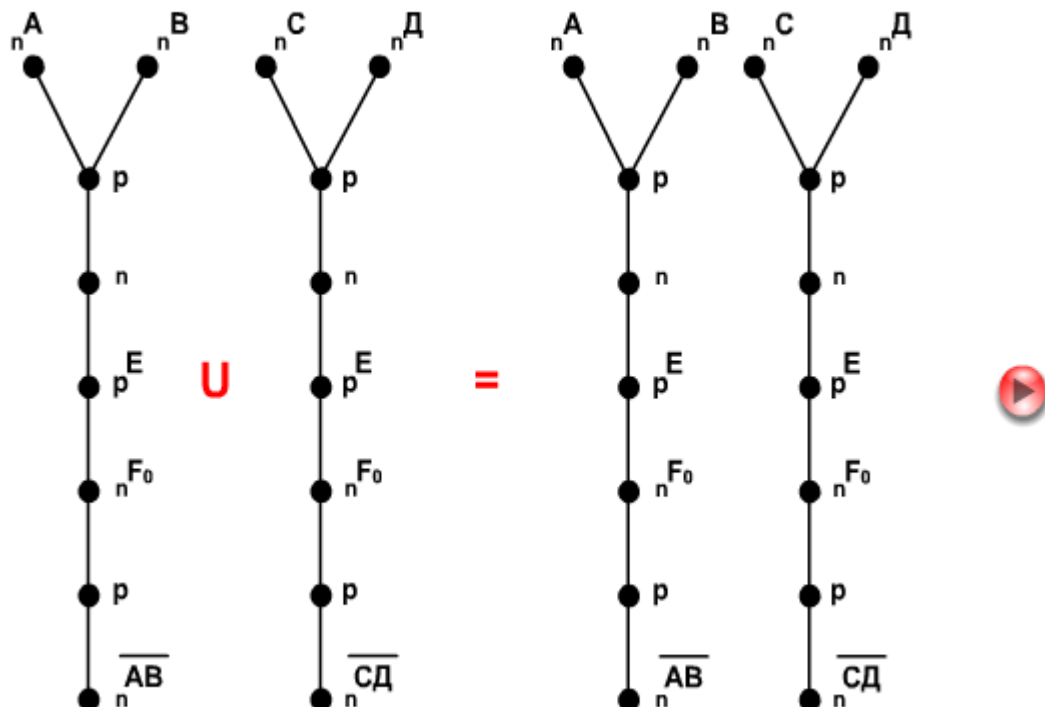


Биполярный  
нанотранзистор

3D вентиль И-НЕ

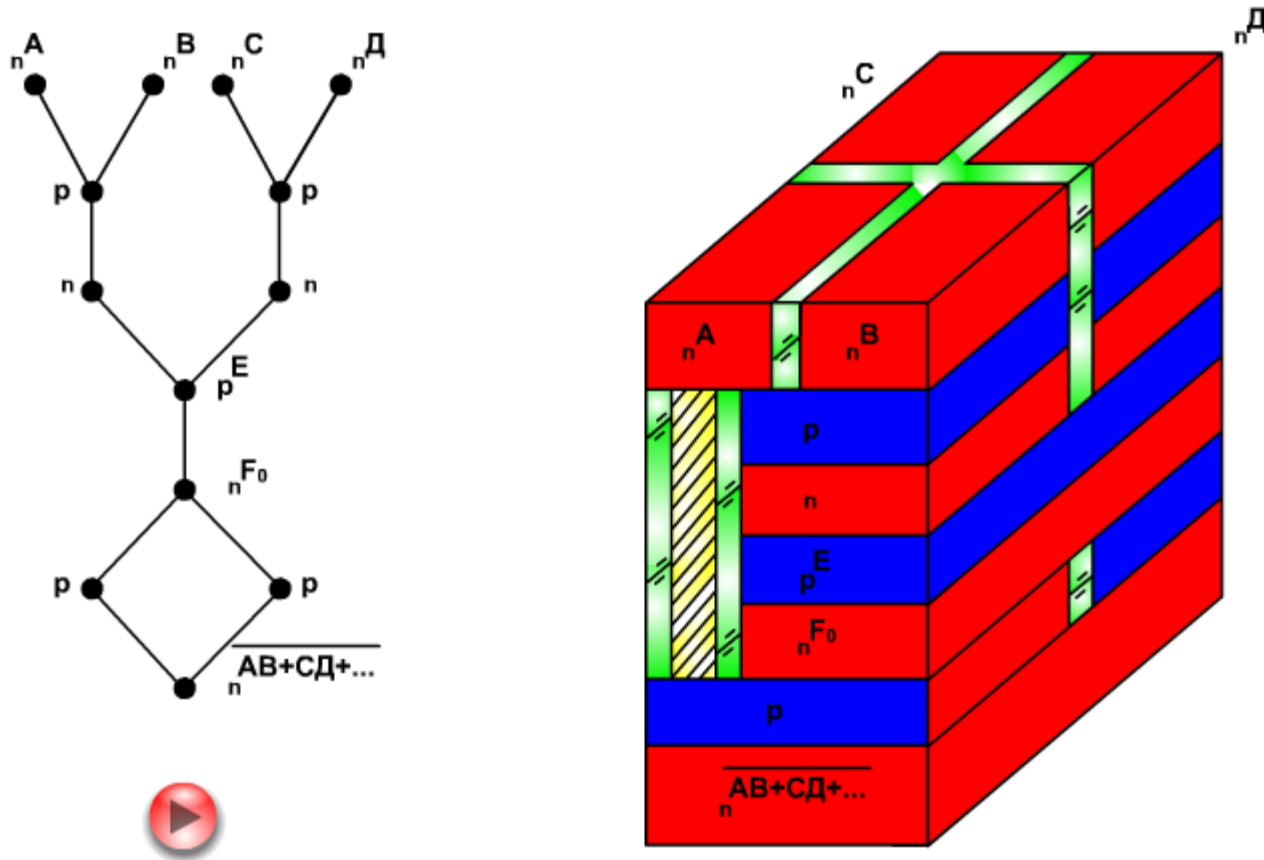


# Уравнение синтеза математической модели схемы $AB+CD+\dots$ $N=13$

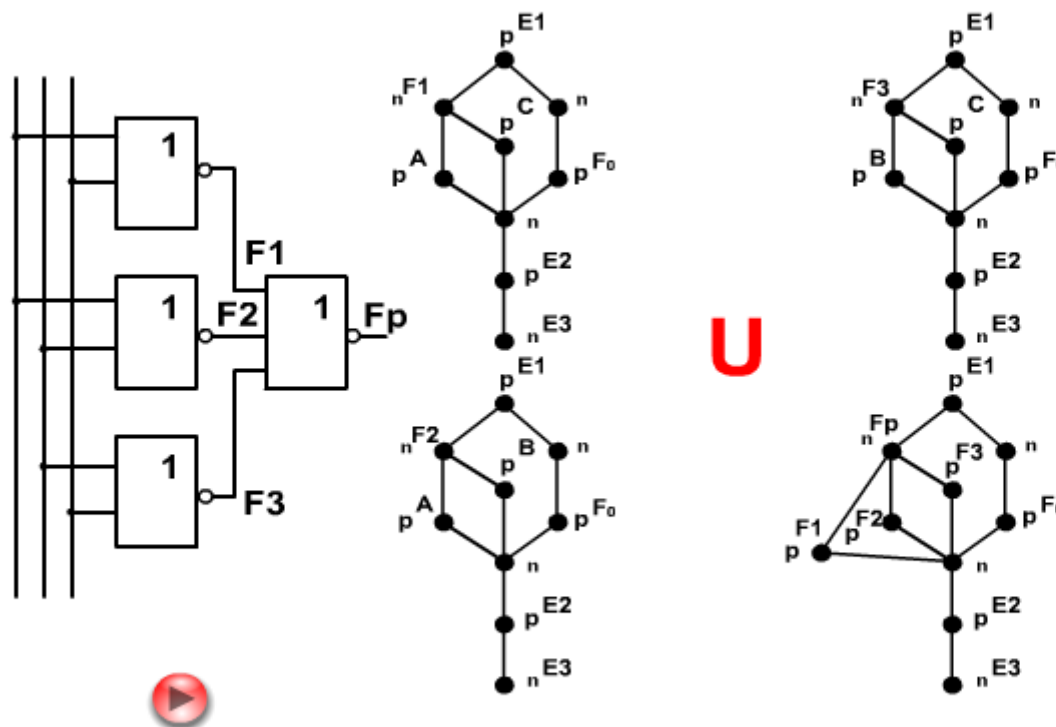


Исходные модели –  
2 модели И-НЕ

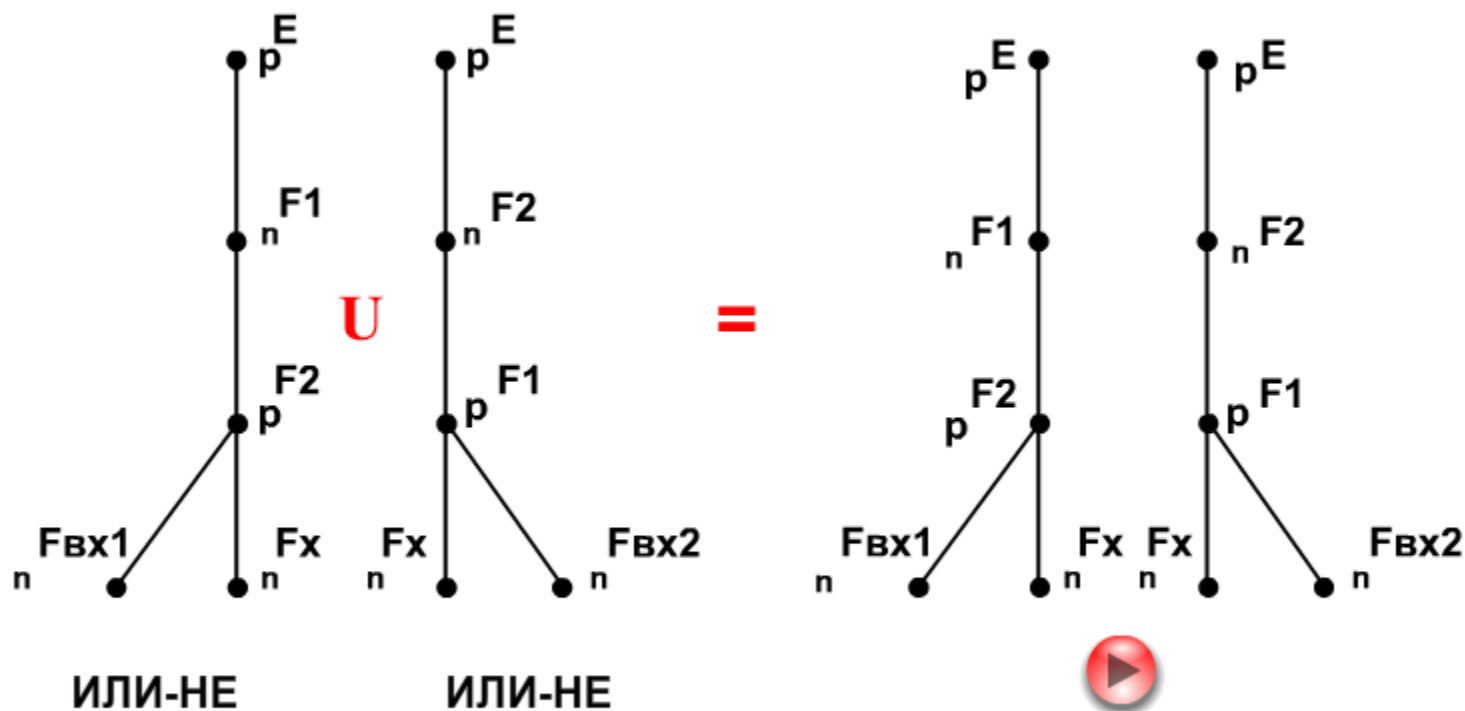
# Синтез 3-D структуры "И-ИЛИ-НЕ" N=13



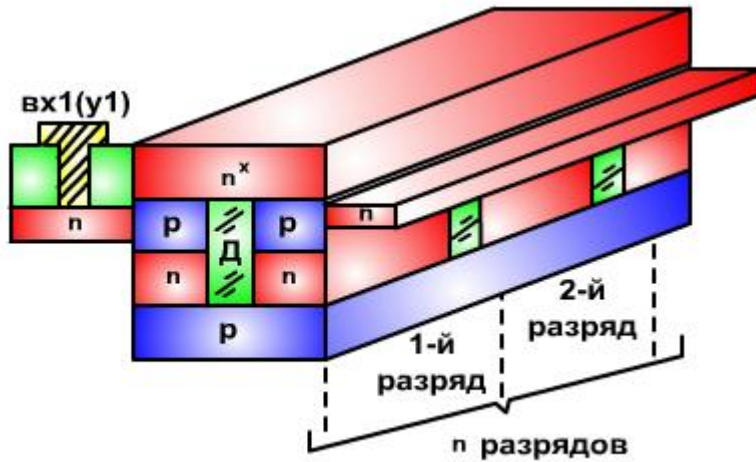
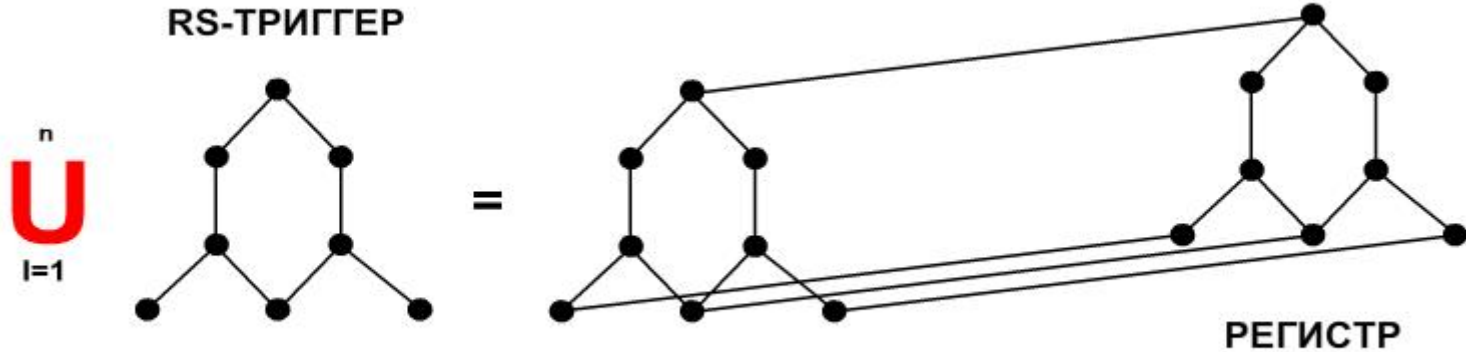
# Уравнение синтеза математической модели схемы переноса



# Уравнение синтеза математической модели RS-триггера N=8 (ДБЯ<sub>ВХ</sub>)



## Уравнение синтеза математической модели регистра







# Научные результаты применения переходной схемотехники в кремниевой наноэлектронике

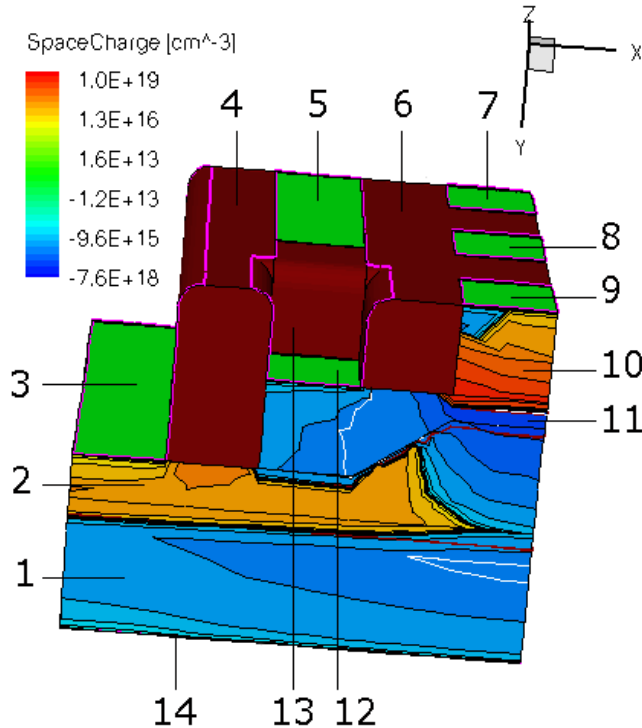
1. Получены принципиально новые переходные логические наноструктуры и наноструктуры памяти.
2. Наноструктуры обладают патентной новизной.
3. На их основе можно создавать чипы нового поколения для суперкомпьютеров .

## Научно-технический уровень (на примере нановентиля И-НЕ).

Использование теории переходной схемотехники дает количественный выигрыш:

- уменьшено количество полупроводниковых областей с 11 (в транзисторном аналоге) до 8 (в переходном), выигрыш по областям составляет 37,5%;
- уменьшено количество внутренних соединений с 3 (в транзисторном аналоге) до 1 (в переходном), выигрыш по соединениям составляет 200%.

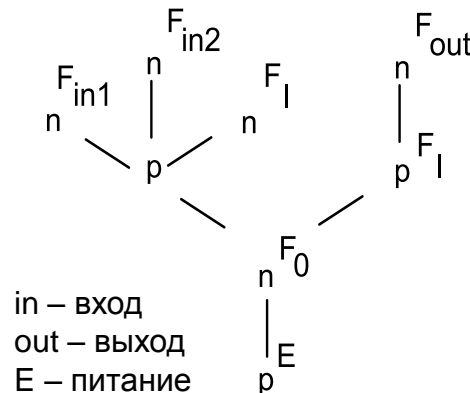
# Практические результаты применения переходной схемотехники в кремниевой наноэлектронике



4-слойная наноструктура И-НЕ

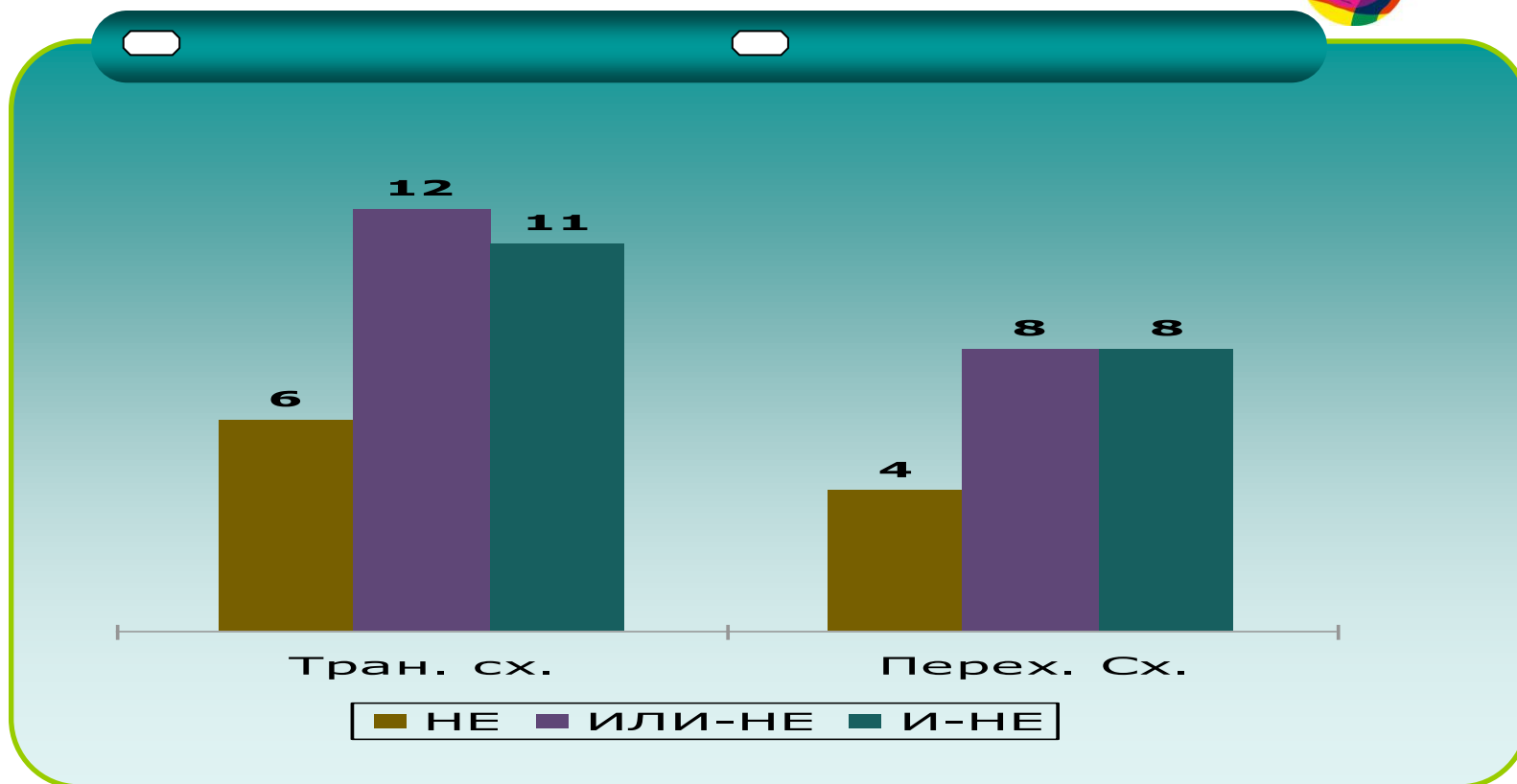
При 10-нм технологическом шаге и минимальной толщине базовых слоев в 3 нм, например, 4-слойная наноструктура И-НЕ обладает следующими техническими параметрами:

- площадь самой структуры ( $\text{нм}^2$ ) -  $50 \times 50$  (ТЗ  $100 \times 100$ );
- площадь структуры на базовом кристалле ( $\text{нм}^2$ ) -  $70 \times 70$  (ТЗ  $120 \times 120$ );
- информационная плотность (вентилей/ $\text{см}^2$ )  $2 \times 10^{10}$  (ТЗ  $7 \times 10^9$ );
- частота (Гц)  $1 \times 10^{10}$  (ТЗ  $0.5 \times 10^{10}$ ).

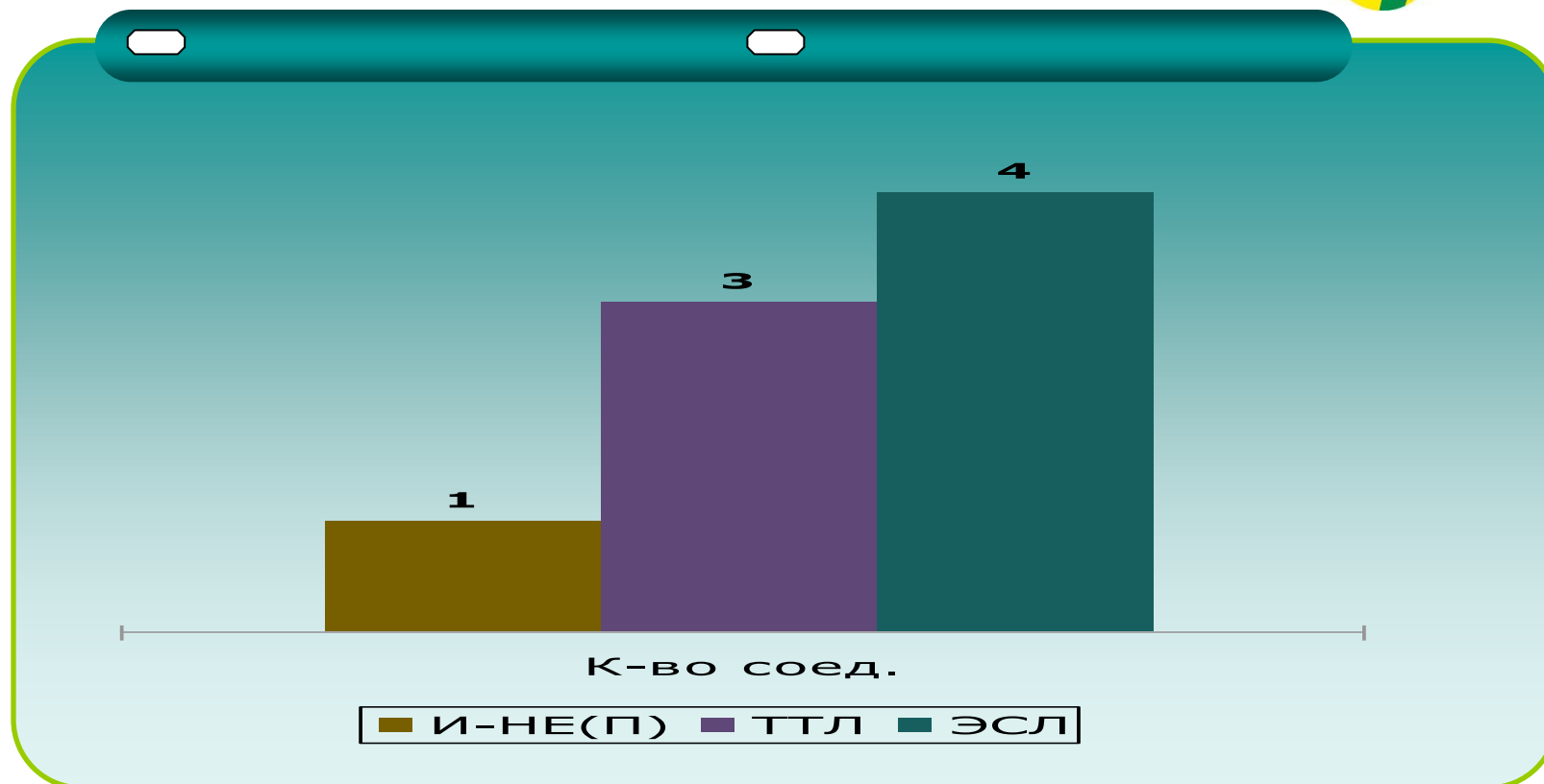


in – вход  
out – выход  
E – питание  
F0 - «земля»

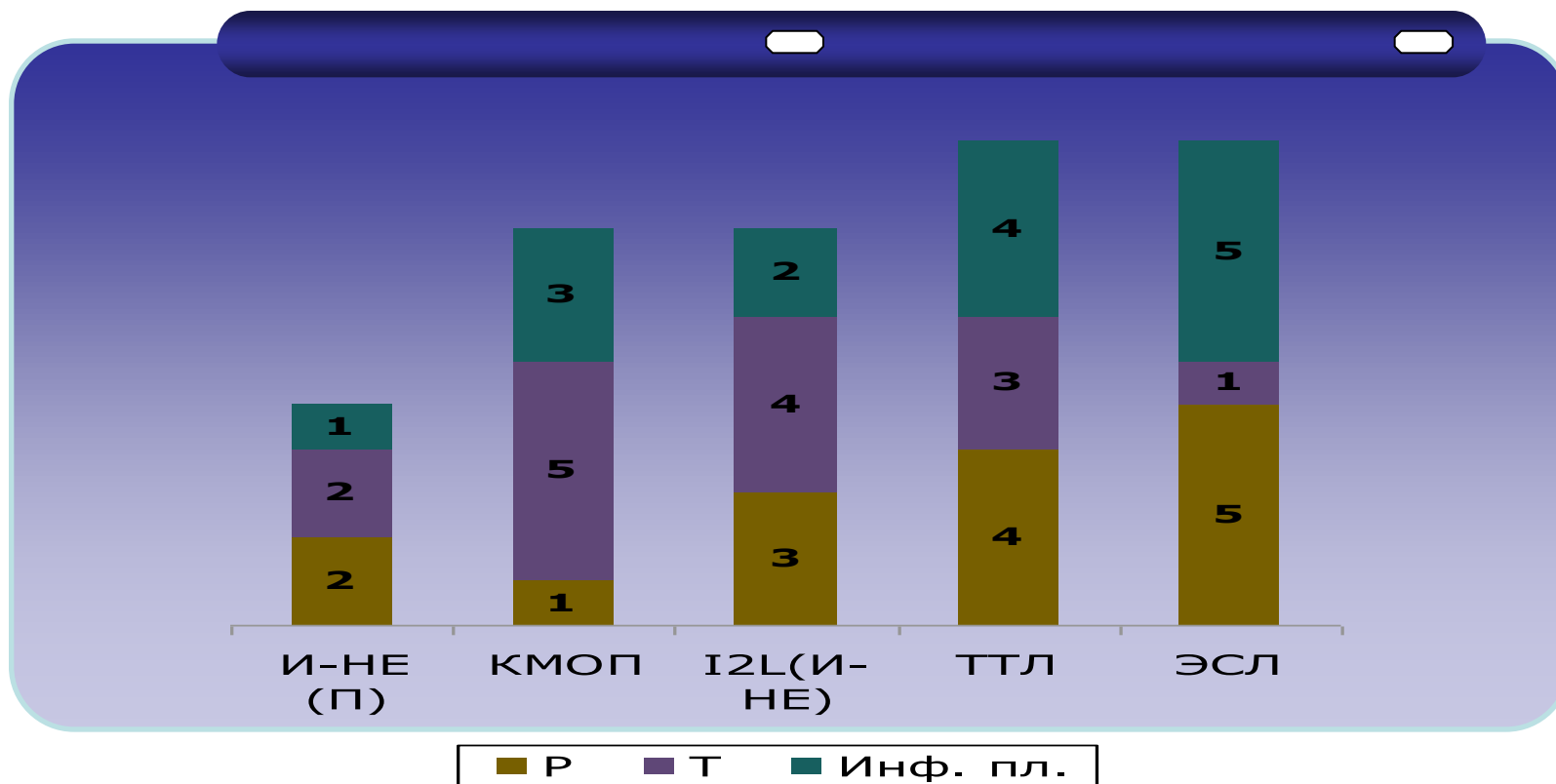
Переходная модель  
4-слойной наноструктуры И-НЕ



**Сравнение переходной и транзисторной  
схемотехник по количеству областей на  
реализацию логической функции**



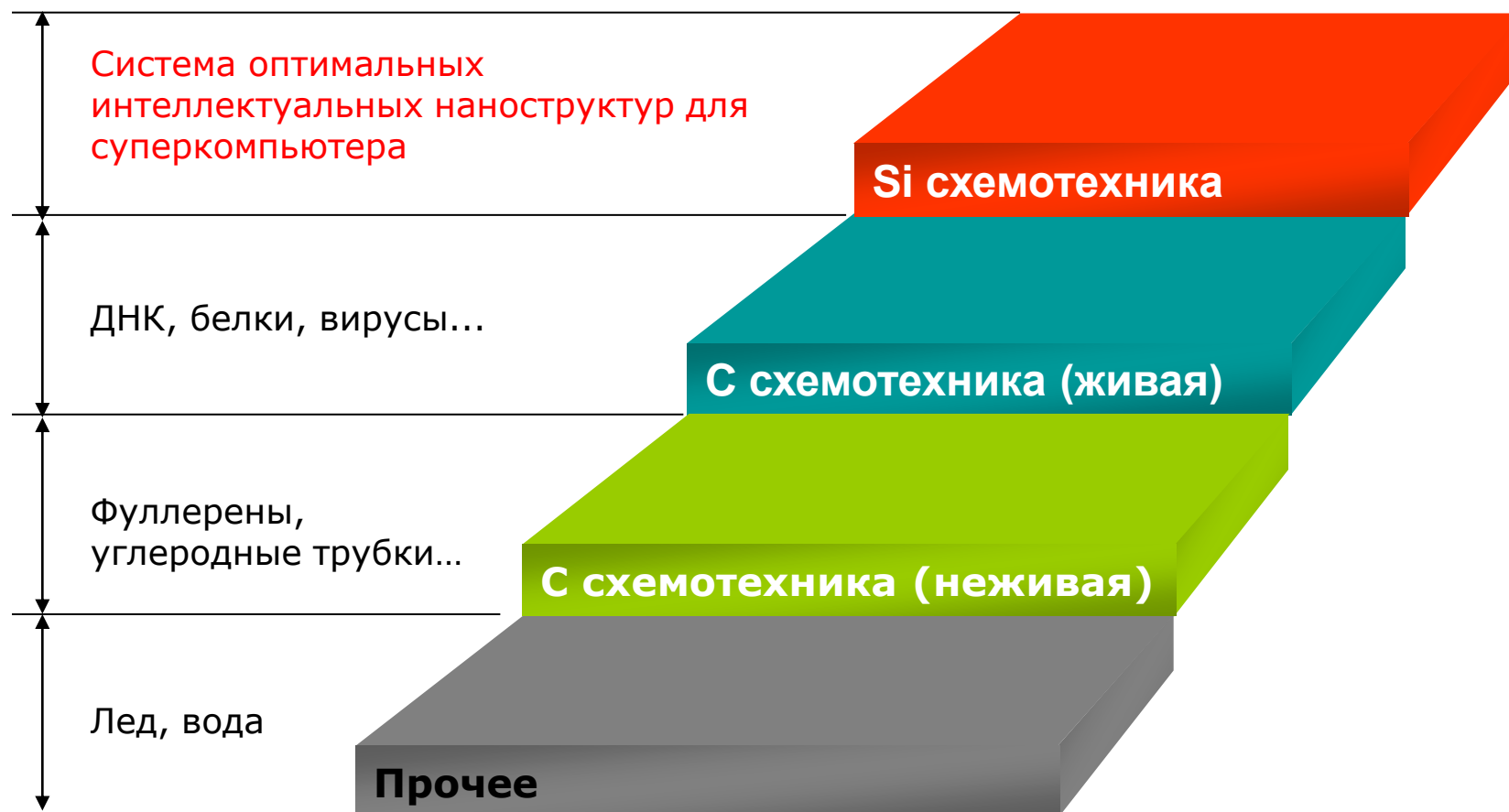
**Сравнение переходной и транзисторной схемотехник по количеству внутренних соединений простого вентиля**



Общая сумма мест по мощности (Р),  
быстродействию (Т) и информационной  
плотности (1 место – лучшее)

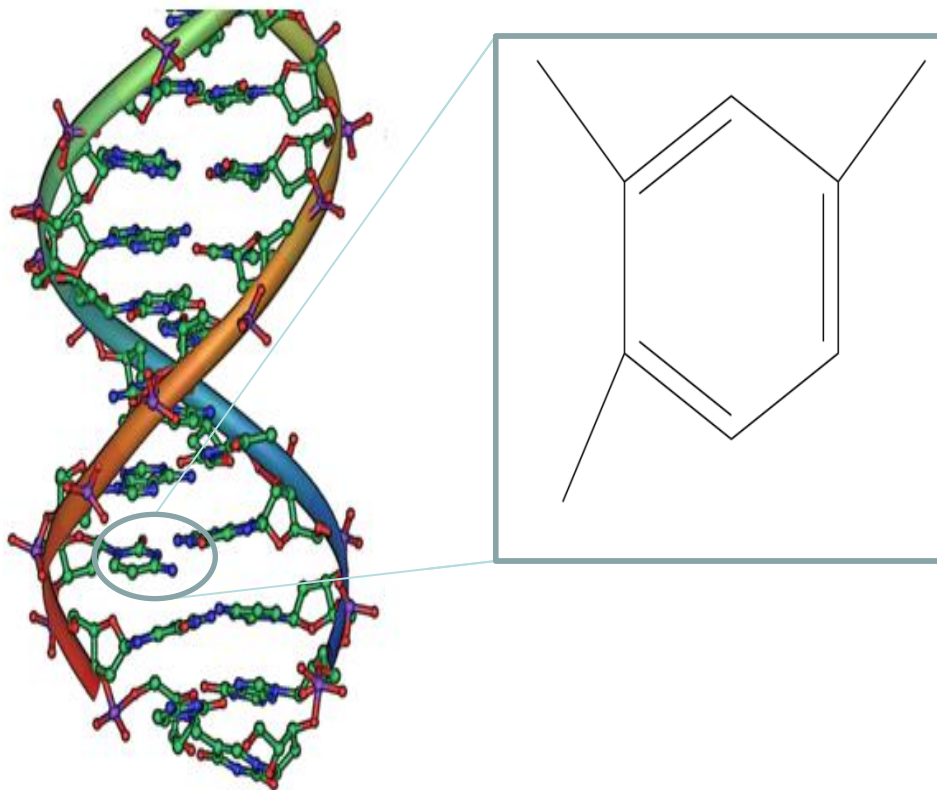
# Это интересно.

## Другие разделы переходной схемотехники

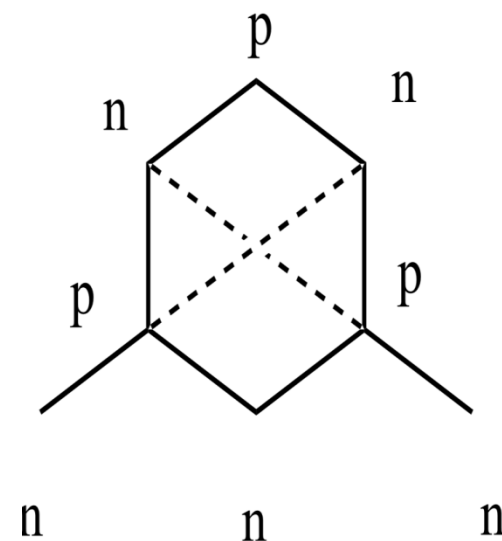




# Биология и переходная схемотехника

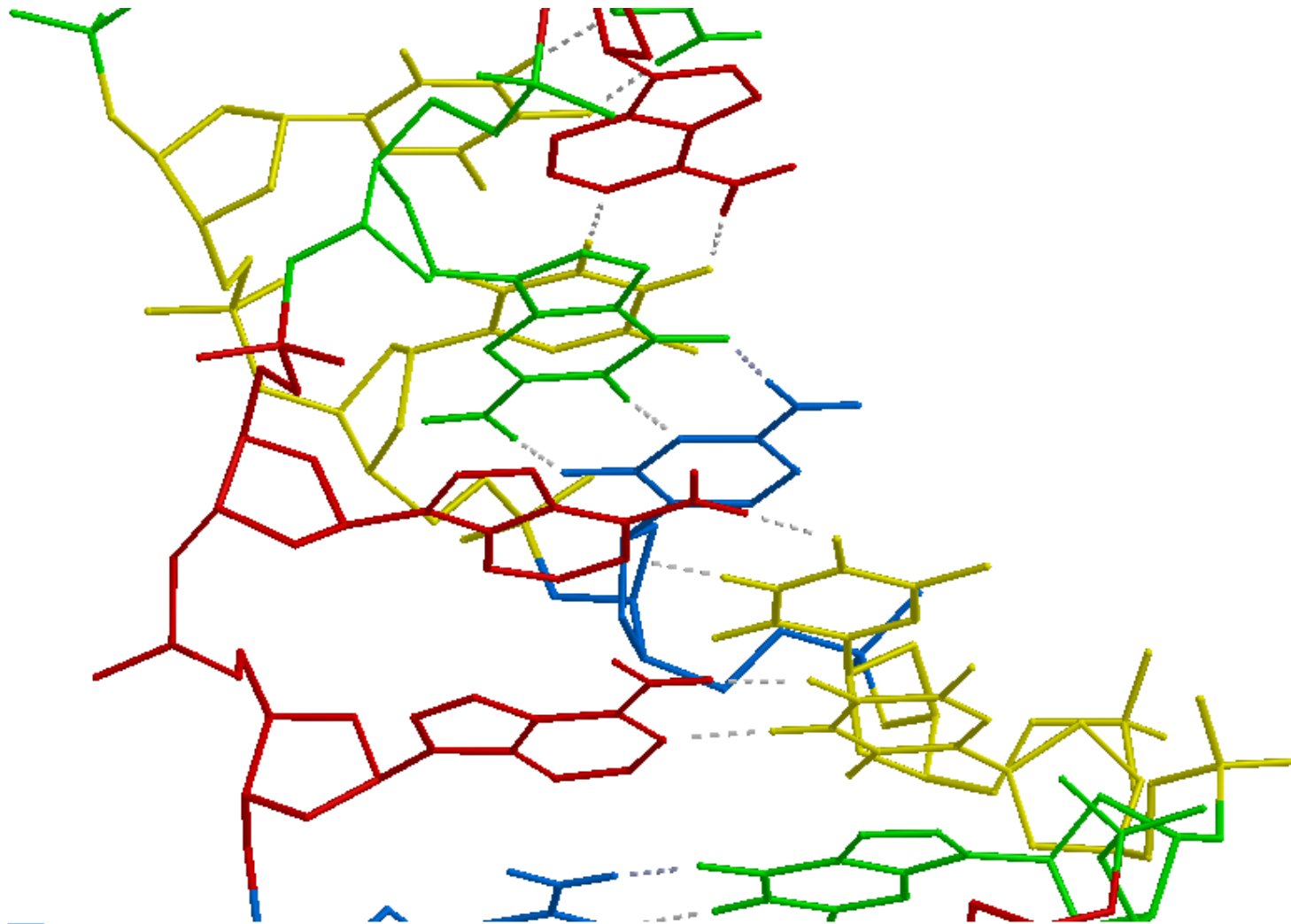


Фрагмент дезоксирибонуклеиновой кислоты

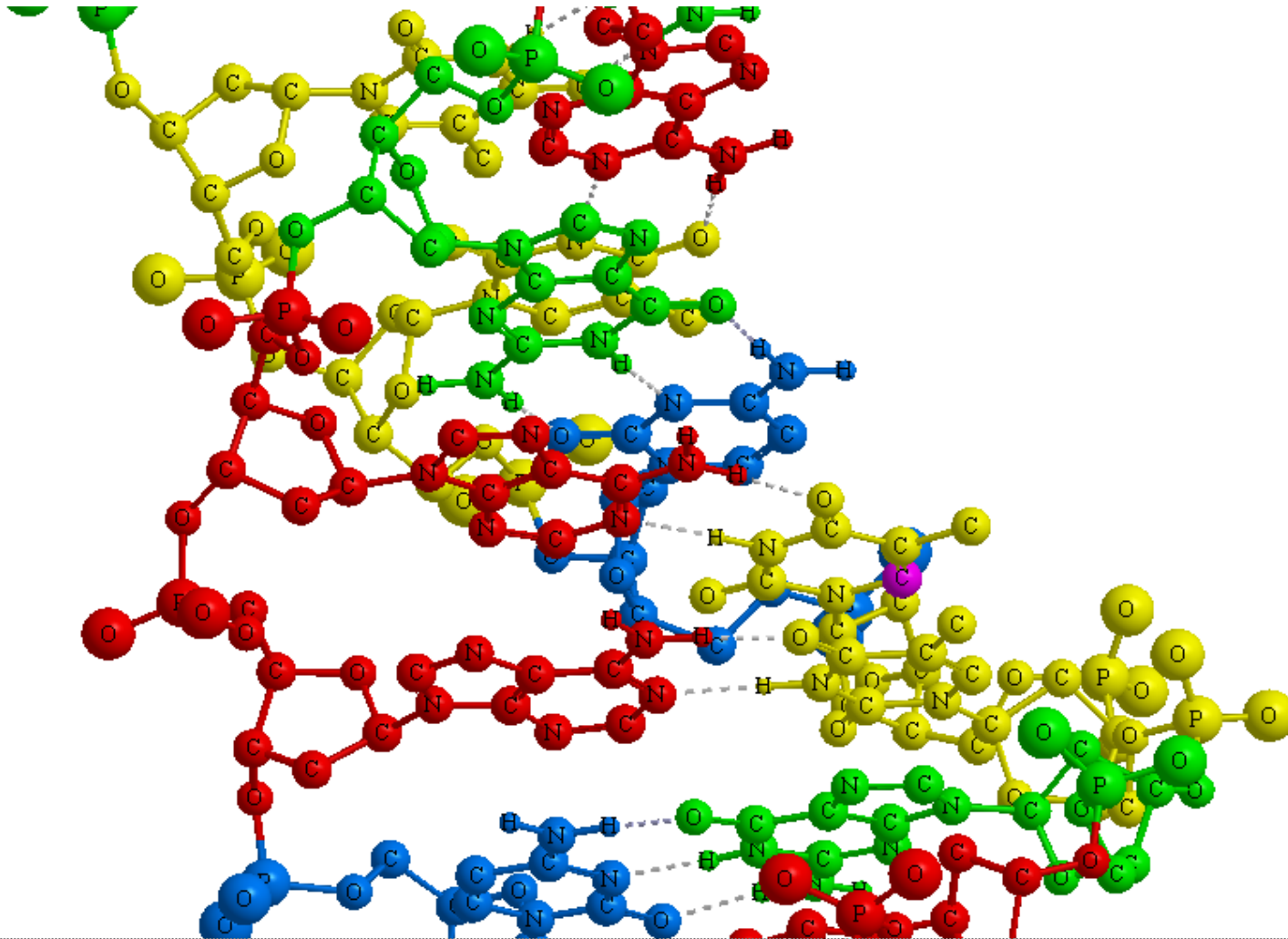


Бистабильная ячейка памяти в кремниевой переходной схемотехнике

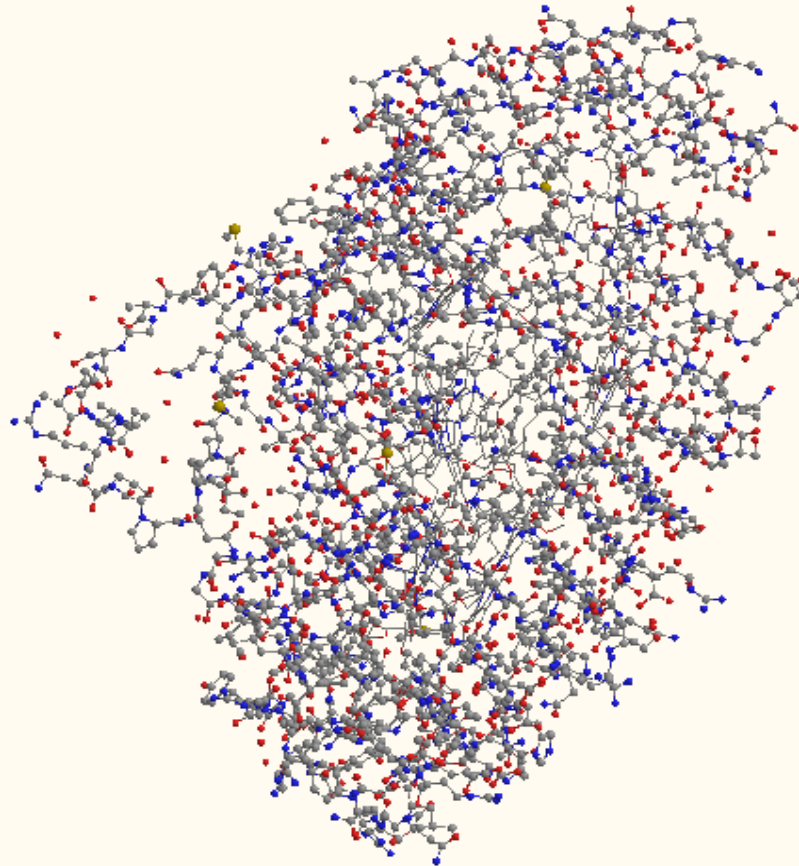
# Что такое ДНК?



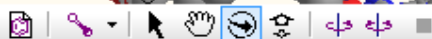
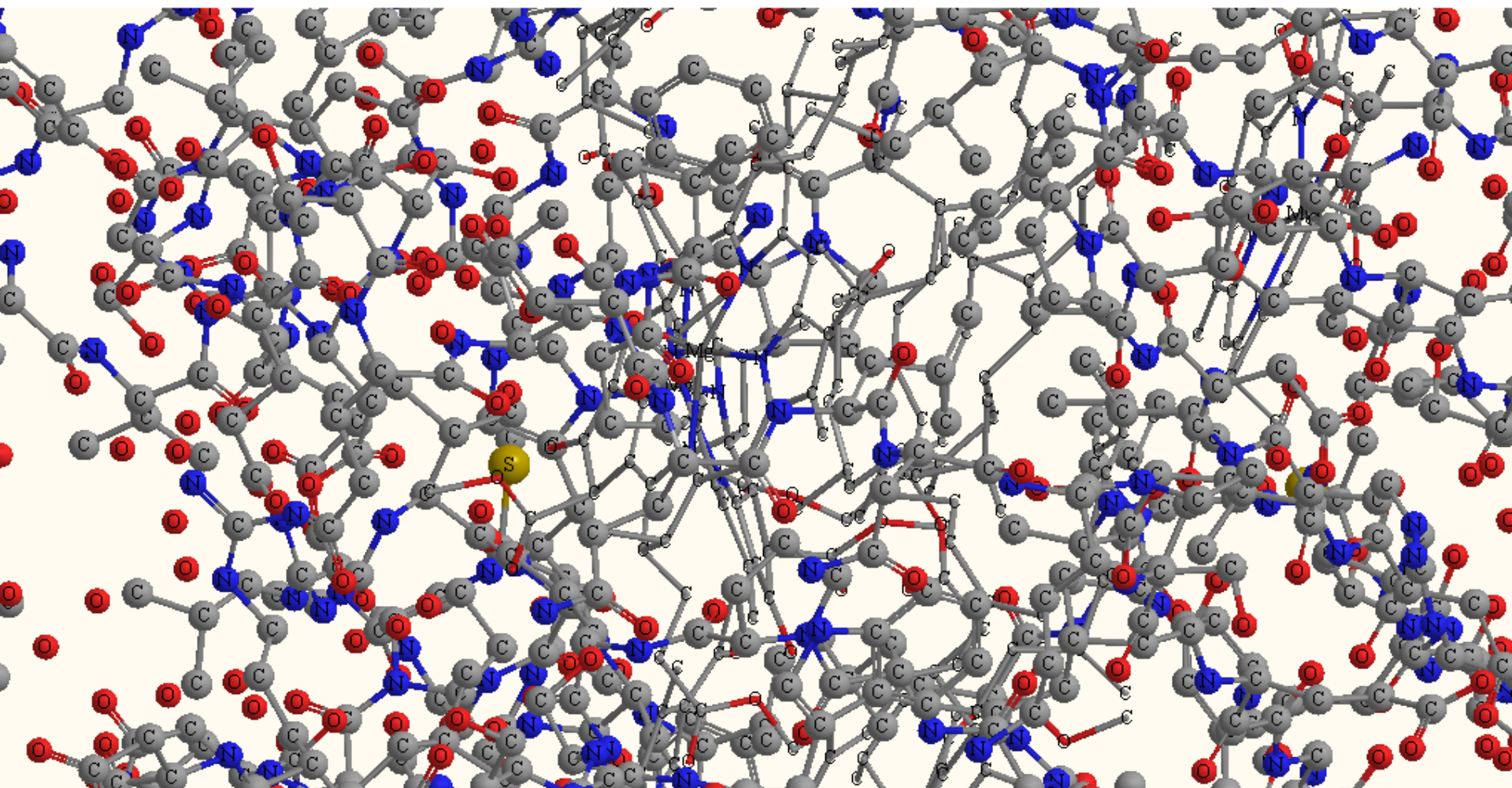
# Что такое ДНК?



# Бактерия Chlorophyll

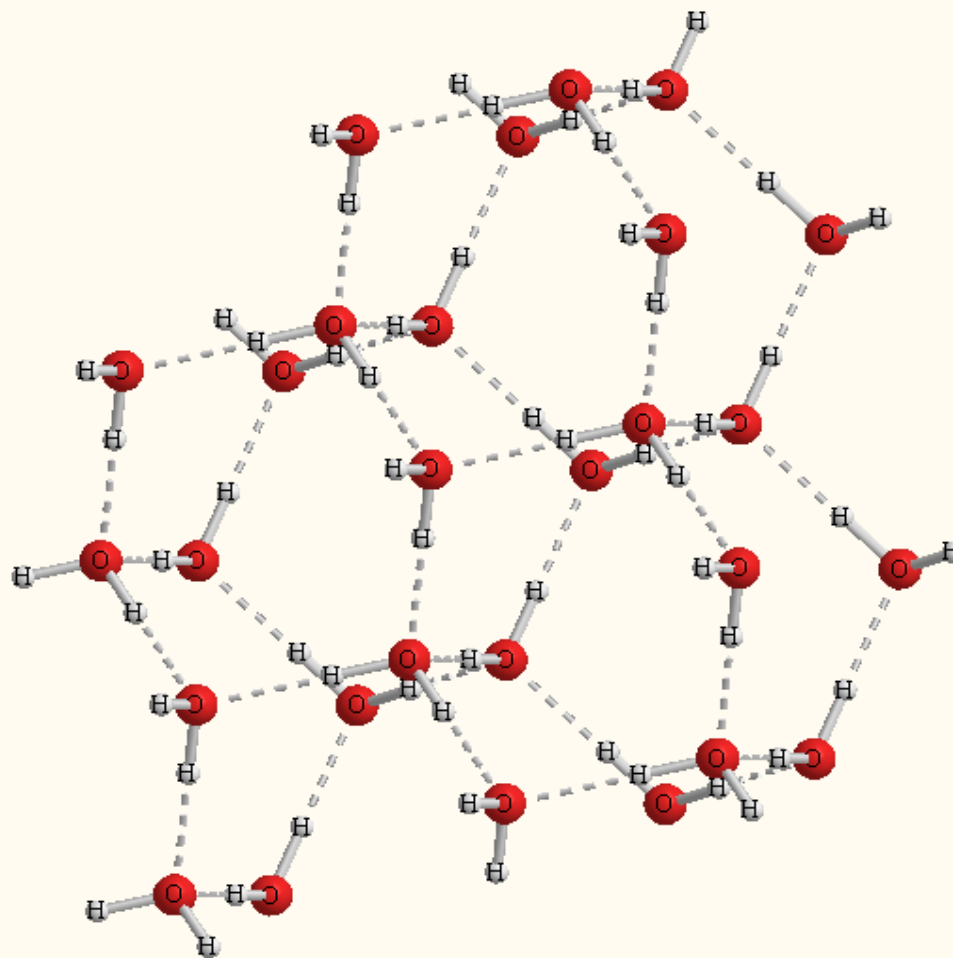


# Бактерия Chlorophyll (увеличено)



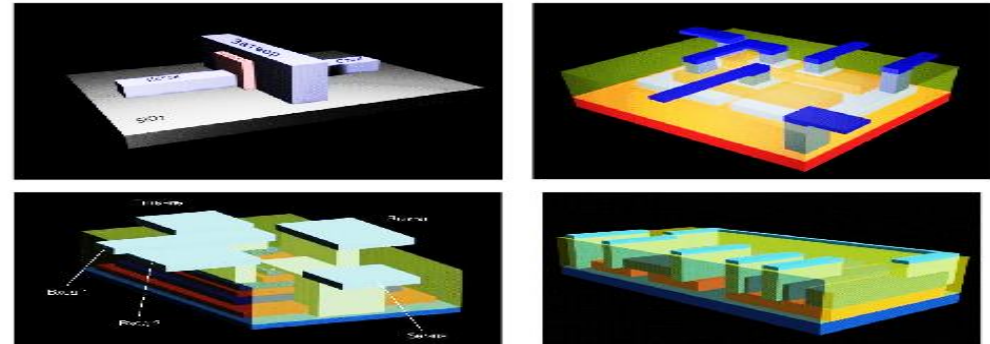
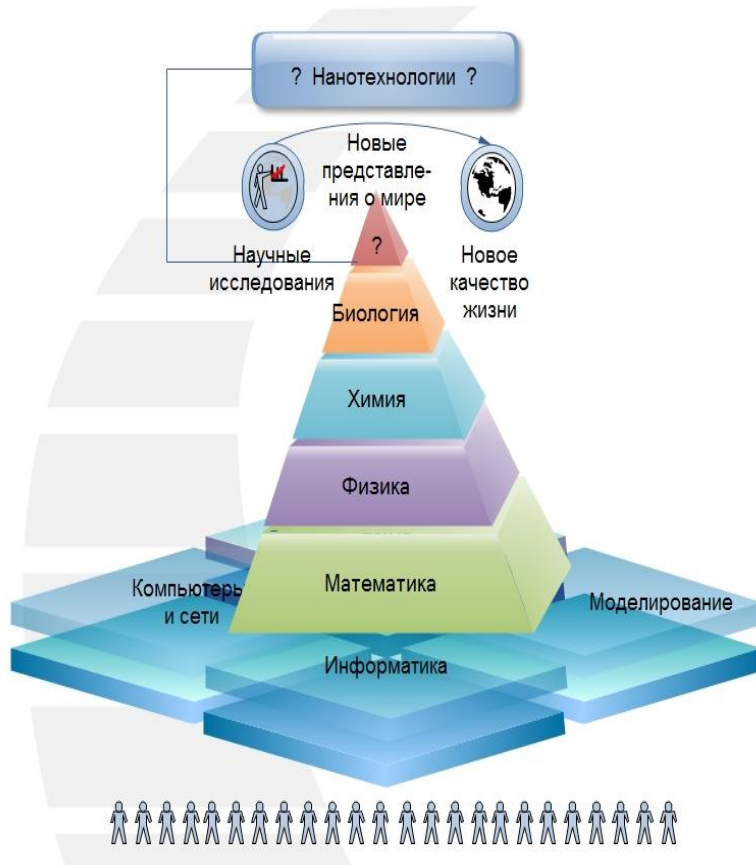


# Лед





# Заключение



Потребовались компьютеры и сети, чтобы промоделировать работоспособность новых элементов для суперкомпьютеров на базе переходной схемотехники.

А для этого потребовались знания:

- математики,
- физики,
- схемотехники
- химии,
- биологии
- информатики...

**Спасибо за внимание!**

**МЫ БУДЕМ РАДЫ,  
если эта лекция пробудит у вас интерес  
к наукам  
и неодолимое желание найти свою задачу и  
решить ее для человечества!**

