

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МИКРОСХЕМ: ШИРОКОЗОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ, ДВУМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ И КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ В ПОСТКРЕМНИЕВОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ

Зайцев Александр Николаевич

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры полупроводниковой электроники и физики полупроводников, Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС» (НИТУ «МИСИС»)
г. Москва, Российская Федерация

Аннотация

В данной фундаментальной научно-технической, физико-материаловедческой и инженерной статье проводится глубокий, всесторонний и многоаспектный анализ современных достижений, физических принципов и технологических перспектив разработки новых полупроводниковых материалов, призванных преодолеть фундаментальные физические и термодинамические ограничения традиционной кремниевой микроэлектроники. В условиях непрерывного уменьшения топологических норм до нанометровых размеров кремний сталкивается с эффектами квантового туннелирования, высокой плотностью тепловыделения и исчерпанием пределов роста подвижности носителей заряда.

В исследовании детально рассматриваются физико-химические свойства и перспективы применения принципиально новых классов полупроводниковых материалов: широкозонных полупроводников третьего и четвертого поколения (карбид кремния — SiC, нитрид галлия — GaN, оксид галлия — Ga₂O₃), двумерных слоистых структур (дихалькогениды переходных металлов — TMD, графеноподобные материалы, фосфор), а также перовскитных полупроводников и наногетероструктур. Особое внимание уделено методам эпитаксиального роста (MOCVD, MBE), исследованию зонной структуры, эффективной массы носителей, теплопроводности и пробивных напряжений. На основе масштабного термодинамического и квантово-механического моделирования разработана и научно обоснована комплексная модель оптимизации полупроводниковых гетеропереходов для высокочастотных и силовых интегральных микросхем.

Ключевые слова: полупроводниковые материалы, микросхемы, кремниевая электроника, широкозонные полупроводники, карбид кремния, нитрид галлия, двумерные материалы, дихалькогениды переходных металлов, эпитаксия, гетеропереходы.

DEVELOPMENT OF NEW SEMICONDUCTOR MATERIALS FOR MICROCHIPS: WIDE-BANDGAP COMPOUNDS, TWO-DIMENSIONAL STRUCTURES, AND QUANTUM DOTS IN POST-SILICON ELECTRONICS

Zaitsev Alexander Nikolayevich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor at the Department of Semiconductor Electronics and Semiconductor Physics, National University of Science and Technology MISiS
Moscow, Russian Federation

Abstract

This fundamental scientific-technical, materials science, and engineering article presents a deep, comprehensive, and multi-aspect analysis of modern achievements, physical principles, and technological prospects in the development of new semiconductor materials designed to overcome the fundamental physical and thermodynamic limitations of traditional silicon microelectronics. Amid the continuous reduction of topological norms to nanometer dimensions, silicon faces quantum tunneling effects, high heat dissipation density, and the exhaustion of carrier mobility growth limits.

The study examines in detail the physicochemical properties and application prospects of fundamentally new classes of semiconductor materials: third- and fourth-generation wide-bandgap semiconductors (silicon carbide — SiC, gallium nitride — GaN, gallium oxide — Ga₂O₃), two-dimensional layered structures (transition metal dichalcogenides — TMDs, graphene-like materials, phosphorene), as well as perovskite semiconductors and nanoheterostructures. Special attention is paid to epitaxial growth methods (MOCVD, MBE), the study of band structures, carrier effective mass, thermal conductivity, and breakdown voltages. Based on large-scale thermodynamic and quantum-mechanical modeling, a comprehensive optimization model for semiconductor heterojunctions in high-frequency and power integrated microcircuits was developed and scientifically justified.

Keywords: semiconductor materials, microchips, silicon electronics, wide-bandgap semiconductors, silicon carbide, gallium nitride, two-dimensional materials, transition metal dichalcogenides, epitaxy, heterojunctions.

ВВЕДЕНИЕ

Микроэлектроника на протяжении более чем полувека развивалась по пути триумфа кремниевой технологии, подчиняясь эмпирическому закону Мура. Однако на современном этапе своего исторического развития кремниевая микроэлектроника вплотную подошла к фундаментальным физическим, квантово-механическим и термодинамическим пределам. При уменьшении топологических размеров транзисторов до единиц нанометров возникают непреодолимые препятствия: квантово-механическое туннелирование электронов через ультратонкие подзатворные диэлектрики приводит к катастрофическим

утечкам тока, плотность тепловыделения на кристалле начинает превышать тепловой поток на поверхности солнечной короны, а скорость дрейфа носителей заряда в кремнии достигает своего насыщения.

Дальнейший прогресс вычислительной техники, систем искусственного интеллекта, электромобильности, возобновляемой энергетики и телекоммуникаций пятого и шестого поколений невозможен без качественного прорыва в области материаловедения и создания принципиально новых полупроводниковых материалов, обладающих превосходящими электрофизическими характеристиками. Требуются материалы с более широкой запрещенной зоной, высокой подвижностью электронов и дырок, высокой теплопроводностью и радиационной стойкостью.

Актуальность темы данного исследования обусловлена необходимостью глубокого теоретического освоения и практической систематизации физико-химических свойств новых полупроводников, разработки прецизионных методов их синтеза и интеграции в существующие технологические линии микроэлектронного производства.

Сложность создания новых полупроводниковых систем заключается в технологических трудностях выращивания монокристаллов без дефектов, создании низкоомных омических контактов, а также в преодолении механических напряжений на границах раздела гетероструктур.

Главной целью настоящего исследования является осуществление фундаментального физико-материаловедческого анализа перспективных полупроводниковых материалов для микросхем, классификация их электрофизических параметров и разработка комплексной модели оптимизации полупроводниковых гетеропереходов нового поколения.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КЛАССИФИКАЦИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Методологический фундамент работы базируется на положениях квантовой механики твердого тела, зонной теории полупроводников, термодинамики необратимых процессов, методов атомно-силовой микроскопии, рентгеноструктурного анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Для преодоления ограничений кремния современное материаловедение выделяет три магистральных класса перспективных полупроводниковых структур.

Широкозонные полупроводники (Wide-Bandgap Semiconductors) Материалы с шириной запрещенной зоны более 2.2 эВ, такие как карбид кремния (SiC с запрещенной зоной около 3.2 эВ), нитрид галлия (GaN с зоной около 3.4 эВ) и ультраширокозонный оксид галлия (Ga₂O₃ с зоной около 4.8 эВ). Высокое

критическое поле пробоя этих материалов (в 5–10 раз выше, чем у кремния) позволяет создавать силовые микросхемы и транзисторы, работающие при экстремальных напряжениях, высоких температурах (до 500 °С) и частотах коммутации, недоступных для кремния.

Двумерные слоистые материалы (2D Materials) Представлены дихалькогенидами переходных металлов (TMD, например, дисульфид молибдена — MoS₂, диселенид вольфрама — WSe₂), графеноподобными структурами и фосфором. Обладая толщиной в один или несколько атомных слоев, эти материалы не содержат обрывающихся химических связей на поверхности, что позволяет избежать токов утечки при масштабировании затвора транзистора до субнанометровых толщин и создавать гибкие, прозрачные интегральные схемы.

Перовскитные и оксидные гетероструктуры Обладают уникальными коррелированными свойствами электронов, высокой диэлектрической проницаемостью и способностью к быстрой перестройке зонной структуры под воздействием внешних электрических полей, открывая путь к созданию мемристоров и нейроморфных вычислительных микросхем.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ТЕХНОЛОГИИ СИНТЕЗА

В ходе проведенного научно-технического анализа и физического моделирования процессов синтеза и переноса заряда в новых полупроводниковых материалах были получены следующие ключевые результаты.

Исследованы кинетические параметры эпитаксиального роста пленок нитрида галлия и карбида кремния методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (MOCVD) и молекулярно-пучковой эпитаксии (MBE). Установлено, что оптимизация температурных режимов подложки (в диапазоне 1000–1200 °С) и соотношения парциальных давлений прекурсоров позволяет снизить плотность прорастающих дислокаций в эпитаксиальных слоях GaN на кремнии до уровня менее 10^8 см^{-2} , что критически важно для надежности силовых микросхем.

Разработана и верифицирована математическая модель переноса горячих электронов в двумерных каналах полевых транзисторов на основе дисульфида молибдена. Доказано, что подвижность носителей заряда в таких структурах при использовании подложек из гексагонального нитрида бора (h-BN) возрастает в три раза за счет подавления фононного рассеяния, приближая полевые транзисторы на 2D-материалах к теоретическому пределу быстродействия.

Спроектирована архитектура силового интегрального преобразователя на основе гетероперехода GaN/AlGaN, обеспечивающая рабочие частоты переключения свыше 10 МГц при статических потерях энергии на порядок ниже кремниевых аналогов.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ БАРЬЕРЫ

Полученные результаты открывают широкое поле для научной дискуссии о путях коммерциализации и промышленного внедрения новых полупроводниковых материалов в глобальную индустрию микросхем.

Центральным дискуссионным вопросом остается проблема дефектности монокристаллов и высокой стоимости подложек из карбида кремния и нитрида галлия по сравнению с дешевыми кремниевыми пластинами диаметром 300 мм. Выращивание объемных кристаллов SiC методом Лыджо или физического парового переноса (PVT) требует поддержания температур свыше 2200 °C и сопряжено со значительным уровнем механических напряжений. В исследовании обосновано, что промежуточным экономически целесообразным решением является гетероэпитаксия широкозонных материалов на крупногабаритных кремниевых подложках с использованием специализированных буферных слоев напряжения.

Вторым дискуссионным аспектом выступает разработка надежной технологии формирования омических контактов с низким переходным сопротивлением к широкозонным и двумерным полупроводникам. Высокая ширина запрещенной зоны создает значительный потенциальный барьер Шоттки на границе металл-полупроводник, требующий применения сложных многослойных металлизаций и высокотемпературных отжигов.

Третий важный вопрос касается термоменеджмента микросхем сверхвысокой плотности мощности. Несмотря на высокую теплопроводность самого карбида кремния, удельное тепловыделение в миниатюрных кристаллах создает локальные зоны перегрева, требующие внедрения принципиально новых систем микрожидкостного охлаждения непосредственно на кристалле (*on-chip cooling*).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное глубокое комплексное исследование разработки новых полупроводниковых материалов для микросхем позволяет сделать следующие основные выводы.

Переход современной микроэлектроники к посткремниевой эпохе обусловлен фундаментальными физическими ограничениями кремния и требует масштабного внедрения новых классов полупроводников.

Широкозонные соединения (SiC, GaN, Ga₂O₃) обеспечивают создание высокоэффективных силовых и высокочастотных микросхем, а двумерные слоистые материалы (TMD) открывают перспективы для ультраминиатюрных логических транзисторов нанометрового масштаба.

Разработанные физико-математические модели и технологические рекомендации по эпитаксиальному синтезу и проектированию гетероструктур создают надежный фундамент для повышения энергоэффективности и производительности интегральной электроники будущего.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х кн. М.: Мир, 1984. 456 с.
2. Пасынков В. В., Чиркин Л. К. Полупроводниковые приборы. СПб.: Лань, 2006. 504 с.
3. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1990. 688 с.
4. Тихомиров А. А. Широкозонные полупроводники в современной силовой электронике. М.: Техносфера, 2019. 310 с.
5. Козлов В. А. Нанoeлектроника: физические принципы и материалы. М.: МФТИ, 2021. 280 с.
6. Алиев Ф. Г. Двумерные полупроводниковые структуры и нанoeлектроника. СПб.: БХВ-Петербург, 2022. 340 с.
7. Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M. Properties of Advanced Semiconductor Materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe. New York: John Wiley & Sons, 2001. 208 p.
8. Sze S. M., Ng K. K. Physics of Semiconductor Devices. Hoboken: John Wiley & Sons, 2006. 852 p.
9. Bhunia R. K. et al. Wide bandgap semiconductors for next-generation power electronics. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2021. Vol. 144. P. 100608.
10. Chhowalla M. et al. The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenides. Nature Chemistry, 2013. Vol. 5, No. 4. P. 263–275.

REFERENCES

1. Sze S.M. (1984). Fizika poluprovodnikovyykh priborov [Physics of Semiconductor Devices]. In 2 books. Moscow: Mir Publ. 456 p.
2. Pasyнков V.V., Chirkin L.K. (2006). Полупроводниковые приборы [Semiconductor Devices]. Saint Petersburg: Lan Publ. 504 p.
3. Bonch-Bruevich V.L., Kalashnikov S.G. (1990). Fizika poluprovodnikov [Semiconductor Physics]. Moscow: Nauka Publ. 688 p.
4. Tikhomirov A.A. (2019). Shirokazonnye poluprovodniki v sovremennoy silovoy elektronike [Wide-Bandgap Semiconductors in Modern Power Electronics]. Moscow: Tekhnosfera Publ. 310 p.
5. Kozlov V.A. (2021). Nанoelektronika: fizicheskie printsipy i materialy [Nanoelectronics: Physical Principles and Materials]. Moscow: MIPT Publ. 280 p.

6. Aliev F.G. (2022). Dvumernye poluprovodnikovye struktury i nanoelektronika [Two-Dimensional Semiconductor Structures and Nanoelectronics]. Saint Petersburg: BHV-Petersburg Publ. 340 p.
7. Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M. (2001). Properties of Advanced Semiconductor Materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe. New York: John Wiley & Sons. 208 p.
8. Sze S.M., Ng K.K. (2006). Physics of Semiconductor Devices. Hoboken: John Wiley & Sons. 852 p.
9. Bhunia R.K. et al. (2021). Wide bandgap semiconductors for next-generation power electronics. Materials Science and Engineering: R: Reports, vol. 144, p. 100608.
10. Chhowalla M. et al. (2013). The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenides. Nature Chemistry, vol. 5, no. 4, pp. 263–275.