

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИДА ГАФНИЯ И ОКСИДА ГАФНИЯ–ЦИРКОНИЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ FeRAM

Павлишин Кирилл Юрьевич

Аспирант

Факультет ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: kirill1999super15@gmail.com

Научный руководитель — Абгарян Каринэ Карленовна

FeRAM — это энергонезависимая память, основанная на ферроэлектрической технологии. Её разработка стала результатом объединения принципов старой ферромагнитной памяти с динамической памятью.

Актуальность разработки FeRAM связана с растущей потребностью в энергонезависимой памяти, которая сочетает высокую скорость работы, долговечность и низкое энергопотребление. В современных устройствах требуется быстрая и надёжная память, способная сохранять данные без постоянного питания. FeRAM становится перспективным решением, обеспечивая баланс между энергоэффективностью и производительностью.

Математическое моделирование FeRAM играет ключевую роль в её развитии, позволяя предсказать поведение ферроэлектрических материалов, оптимизировать характеристики памяти и сократить затраты на эксперименты. С помощью математических моделей можно изучать процессы переключения поляризации, туннелирования заряда и деградации материала, что важно для повышения долговечности и энергоэффективности памяти.

Современные разработчики FeRAM активно исследуют использование оксидов, таких как оксид гафния (HfO_2) и оксид гафния–циркония ($HfZrO_2$) [1–2]. Однако на данный момент отсутствуют полноценные математические модели, корректно описывающие ферроэлектрические свойства этих материалов, что затрудняет прогнозирование их поведения.

Один из возможных подходов для решения задачи, связанной с моделированием процессов переключения поляризации представлен в работе [3], где приведена молекулярно-динамическая модель, основанная на эффективном гамильтониане, полученном с применением квантовомеханических расчетов:

$$\begin{aligned}
 H^{\text{eff}} = & \frac{M_{\text{dipole}}^*}{2} \sum_{R,\alpha} \dot{u}_\alpha^2(R) + \frac{M_{\text{acoustic}}^*}{2} \sum_{R,\alpha} \dot{w}_\alpha^2(R) + V^{\text{self}}(\{u\}) + \\
 & + V^{\text{dpl}}(\{u\}) + V^{\text{short}}(\{u\}) + V^{\text{elas,homo}}(\eta_1, \dots, \eta_6) + \\
 & + V^{\text{elas,inho}}(\{w\}) + V^{\text{coup,homo}}(\{u\}, \eta_1, \dots, \eta_6) + \\
 & + V^{\text{coup,inho}}(\{u\}, \{w\}) - Z^* \sum_R \mathcal{E} \cdot u(R).
 \end{aligned} \tag{1}$$

Данная модель применяется авторами для моделирования процессов переключения, имеющих место в ферроэлектрических плёнках на основе перовскитов (ABO_3).

В данной работе предложенный в статье [3] подход взят за основу для изучения процессов переключения поляризации и туннелирования заряда в материалах на основе оксида гафния и оксида гафния–циркония. В рамках работы проводится программная реализация этой модели на современных языках программирования с использованием технологий распараллеливания, а также её адаптация под моделирование ферроэлектрических плёнок на основе оксида гафния и оксида гафния–циркония. Процесс адаптации заключается в получении параметров модели из первопринципных расчётов для оксида гафния и оксида гафния–циркония [4–5].

Реализуемая модель позволит более точно предсказывать ферроэлектрические свойства оксида гафния и оксида гафния–циркония, что существенно улучшит понимание физических процессов в FeRAM. Это, в свою очередь, позволит оптимизировать характеристики памяти, повысить её долговечность и энергоэффективность, а также ускорить разработку новых устройств. Программная реализация модели с использованием технологий распараллеливания обеспечит возможность масштабных вычислений, необходимых для дальнейшего совершенствования FeRAM и её интеграции в современные электронные системы.

Литература

1. Tianyuan Z., Liyang M., Shiqing D., Shi L. Progress in computational understanding of ferroelectric mechanisms in HfO_2 // npj Comput Mater, 2024, vol. 10, A. 188.
2. Schroede U., Park M. H., Mikolajick T., Hwang C. S. The fundamentals and applications of ferroelectric HfO_2 // Nat Rev Mater, 2022, vol. 7, P. 653–669.

3. Nishimatsu T., Waghmare U. V., Kawazoe Y., Vanderbilt D. Fast molecular-dynamics simulation for ferroelectric thin-film capacitors using a first-principles effective Hamiltonian // PhysRevB.78.104104.-2008.
4. Программа для первопринципных расчётов «ABINIT»: https://abinit.github.io/abinit_web
5. Программа для первопринципных расчётов «Quantum Espresso»: <https://www.quantum-espresso.org/>