

делей позволяет анализировать динамику процесса измерения и отображает взаимное влияние параметров друг на друга.

Построение алгоритма обработки на основе нелинейной математической модели измерительной системы, отражающей внутрисистемные связи между измеряемыми параметрами и конструктивные особенности первичных преобразователей позволяет обеспечить инвариантность и точность при измерении параметров газового потока, а также качественно повысить уровень разработки оптимальных алгоритмов управления.

Приведенные в статье результаты получены при поддержке фонда содействия и развития малых форм предприятий в научно-технической сфере в рамках программы "Участник молодежного научно-инновационного конкурса" ("У.М.Н.И.К.") по государственному контракту № 6041p/8519 "Разработка новых образцов техники в области машиностроения, радиотехники и средств управления с использованием критических технологий" и гранта по аналитической ведомственной целевой программе "Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)" № 2.1.2/6206 "Исследование устойчивости и обеспечение инвариантности энергосберегающих систем адаптивного управления динамическими объектами".

Литература

Белова, Н.В. Система измерения параметров газового потока в трубопроводе / Н.В. Белова // Труды 3-й международной конференции молодых ученых и студентов "Актуальные проблемы современной науки". Естественные науки. Часть 12. Секция: НЕФТЕХИМИЯ, ОХРАНА ТРУДА. Самара. 2007. 50 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ

В. И. Белько (Минск, Беларусь)

Ионная имплантация является одним из основных этапов в технологии производства современных интегральных схем, поэтому процессы формирования кластеров собственных дефектов в ионно-облученном кремнии привлекают значительное внимание. Расчеты *из первых принципов* и методы классической молекулярной динамики (МД) используются для нахождения определяющих параметров дефектообразования, таких, как энергия связи, барьерная энергия миграции при диффузии, энергии формирования и др. Тем не менее, используя эти методы, невозможно отслеживать динамику системы в процессе облучения кремния и его отжига.

Задачи по моделированию объектов больших размеров в течение длительного времени могут быть решены методами уравнений скоростей реакций и (кинетическим) методом Монте-Карло. В данной работе рассматривается модель, основанная на численном решении системы уравнений реакции-диффузии, а также особенности ее применения при решении задач по моделированию кластеризации собственных дефектов в кремнии. Входные параметры получены методом молекулярной динамики и из литературы.

Теоретические расчеты *из первых принципов* и с использованием эмпирических потенциалов показывают, что объединение отдельных междоузлий (и вакансий) в крупные кластеры энергетически выгодно. Это было подтверждено экспериментальным наблюдением агломератов междоузлий кремния, таких, как стержнеобразные $\langle 311 \rangle$ -дефекты [1] и дислокационные петли. Процесс кластеризации междоузлий кремния

может быть интерпретирован как набор химических реакций: прямой— объединения междоузлий в кластеры— и обратной— эмиссии междоузлий из них.

Эти реакции могут быть описаны посредством дифференциальных уравнений в частных производных диффузионного типа. Скорость роста кластеров определяется интенсивностью, с которой кластер захватывает междоузлия, что, в свою очередь, зависит от концентрации кластеров и междоузлий, радиуса захвата и частоты диффузионных прыжков подвижных междоузлий. Интенсивность выхода междоузлий из кластеров зависит от количества кластеров и скорости эмиссии междоузлий из кластера, и эта интенсивность определяется частотой удачных попыток выхода междоузлия из кластера, которая зависит от энергии связи E_b .

Таким образом, в одномерном (по пространству) случае перераспределение и реакции дефектов во время постимплантационного отжига могут быть описаны с использованием диффузионно-реакционных уравнений. Пусть $I(x, t)$ и $V(x, t)$ — концентрация одиночных (свободных) междоузлий и вакансий в мишени на глубине x в момент времени t , соответственно. Пусть концентрация междоузлий в кластерах $C(x, t)$, при этом мы не будем учитывать размеры кластеров, а также будем считать их неподвижными. Тогда процессы диффузии одиночных междоузлий и вакансий, аннигиляции вакансий и междоузлий, захват одиночных междоузлий в кластеры и эмиссия одиночных междоузлий из кластеров описываются системой уравнений в частных производных второго порядка:

$$\begin{aligned}\frac{\partial I}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}(D_I \cdot I) - 4\pi \frac{R^3}{L^2} D_I \cdot I \cdot C + \frac{6D_I}{L^2} \exp\left(\frac{-E_b}{k_B T}\right) \cdot C - 4\pi \frac{R^3}{L^2} (D_I + D_V) \cdot I \cdot V, \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}(D_V \cdot V) - 4\pi \frac{R^3}{L^2} (D_I + D_V) \cdot I \cdot V, \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= 4\pi \frac{R^3}{L^2} D_I \cdot I \cdot C - \frac{6D_I}{L^2} \exp\left(\frac{-E_b}{k_B T}\right) \cdot C,\end{aligned}$$

где $D_I(T)$ и $D_V(T)$ — коэффициенты диффузии междоузлий и вакансий, соответственно; E_b — энергия связи междоузлий в кластерах, k_B — постоянная Больцмана, R — радиус захвата, L — длина диффузионного прыжка.

Начальные концентрации междоузлий и вакансий могут быть рассчитаны методом Монте-Карло в рамках модели бинарных столкновений (с использованием программы SRIM [2] в режиме моделирования каскадов). Начальная концентрация междоузлий в кластерах равна нулю. Граничные условия однородные третьего рода и описывают процесс рекомбинации дефектов на поверхности мишени и поток дефектов в глубь мишени.

При построении набора входных данных для данного алгоритма были проведены необходимые расчеты методом классической молекулярной динамики. Кроме того, были проанализированы известные результаты по теоретическим расчетам диффузионных параметров междоузлий и вакансий в кремнии методом классической МД, квантовой МД в приближении сильной связи [3]; также использовались результаты расчетов методами квантовой химии.

С использованием полученной модели были проведены тестовые расчеты по моделированию сборки кластеров из отдельных междоузлий или отдельных вакансий. Исходная концентрация в области максимума распределения точечных дефектов менялась от 0.01 до 0,1 %. Моделирование проводилось при различных температурах в течение

длительного времени, достаточного для того, чтобы система перешла в «стационарное» состояние. Полученные результаты сравнивались с результатами, полученными кинетическим методом Монте-Карло [4], и имеющимися в литературе. В дальнейшем разработанная модель и ее программная реализация будут использоваться для изучения влияния граничных условий на процесс эволюции дефектов во всем кристалле и для моделирования кластеризации дефектов в сочетании с кинетическим методом Монте-Карло.

Литература

1. Eaglesham D. J., Stolck P. A., Gossmann H. J., Poate J. M. // Appl. Phys. Lett., 1994. Vol. 65. P. 2305.
2. [Electronic resource] <http://www.srim.org>.
3. Cogoni M., Uberuaga B. P. *et al.* // Phys. Rev. B., 2005. Vol. 71. P. 121203(R).
4. Белько В. И., Бородин В. А., Гусаков В. Е., Дорожкин Н. Н., Кондратьева О. М. // III Международная научная конференция «Материалы и структуры современной электроники» БГУ, г. Минск, 25–26 сентября 2008 года. С.145–149.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР

С. С. Белявский, С. Г. Мулярчик, А. М. Дежурко (Минск, Беларусь)

Рассмотрим задачу двумерного моделирования стационарных процессов в функционально-интегрированных элементах интегральных схем. Математическая модель явления переноса заряда описывается краевой задачей для систем дифференциальных уравнений в частных производных. Разностная аппроксимация такой системы на прямоугольной сетке с использованием схемы Шарфеттера-Гуммеля и привлечением для решения сеточных уравнений одной из схем последовательного типа [1] порождает для каждого из уравнений систему линейных уравнений с симметричной положительно определенной матрицей. Итерационный процесс численного моделирования любого полупроводникового прибора сводится в этом случае к последовательному формированию и решению линейных систем. По этой причине эффективность численного метода решения краевой задачи в значительной мере определяется эффективностью метода решения СЛАУ. Из-за больших размеров матриц решение СЛАУ прямыми методами достаточно проблематично. Если при этом учесть, что такую процедуру приходится выполнять многократно и с высокой точностью, то прямые методы оказываются неприемлемыми.

Наиболее эффективным в этом случае является метод сопряженных градиентов. Это итерационный метод, который при отсутствии ошибок округления, сходится к точному решению линейной системы за конечное число итераций, не превосходящее числа уравнений. Это значит, что при компьютерной реализации можно получить решение линейной системы с высокой точностью. Для улучшения сходимости метода сопряженных градиентов применяется предобуславливающая процедура, т. е. некоторое предварительное преобразование решаемой системы. Чаще всего предобуславливатель представляет собой неполную факторизацию матрицы системы, применение которой улучшает спектральные свойства линейной системы. Нами предложен предобуславливатель, который является проекционным оператором. Его использование дает воз-