



УДК 681.326.32

DOI 10.22363/2312-8143-2017-18-1-107-114

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФфуЗИИ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ СРЕДЫ

А.В. Назаров

Московский авиационный институт
ул. Новая Басманная, д. 16-а, Москва, Россия, 107078

Представлены результаты компьютерного моделирования процесса взаимной диффузии двухкомпонентной среды. Разработан и апробирован алгоритм моделирования диффузии в двухкомпонентной равнообъемной среде методом клеточного автомата, а также алгоритм моделирования диффузии в неравнообъемной среде методом прямого моделирования Монте-Карло. В результате моделирования определена зависимость длительности процесса диффузии от числа частиц, принимающих участие в процессе, и построен график влияния соотношения компонентов среды на длительность диффузионного процесса, которые могут быть использованы для практической оценки параметров реального диффузионного процесса.

Ключевые слова: диффузия, клеточный автомат, метод Монте-Карло, клеточный автомат, длительность диффузионного процесса, дискретное рабочее поле

Введение

Решение задач, связанных с процессами переноса, является в настоящее время весьма актуальным направлением научных исследований в области твердотельной электроники [1]. К числу таких задач относится, в частности, диффузия примесей, являющаяся основой ряда технологических операций и играющая важную роль в деградации электрофизических свойств элементов твердотельной электроники [2].

Важным при исследовании процессов диффузии является создание компьютерных моделей, которые адекватно описывают результаты, получаемые экспериментально и позволяющие прогнозировать электрофизические свойства формируемых элементов твердотельной электроники. Вследствие уменьшения размеров элементов все большее значение приобретает именно двумерное математическое моделирование технологических процессов [3].

Известные двумерные математические модели процессов диффузии, предложенные Фишером, Уипплом, Судзукой, Смолуховским, строятся на основе законов Фика. Для аналитического решения систем диффузионных уравнений авторы используют приближенные методы, такие как синус-преобразования и косинус-преобразования Фурье, преобразования Лапласа и др. Учет действия внешних электрических полей и упругих напряжений в этих работах не учитывается, что приводит к ограниченной возможности их применения в ряде практически важных задач.

Численные методы свободны от некоторых упрощений, используемых при аналитических решениях диффузионных задач, и позволяют снизить трудоемкость расчетов. В настоящее время наиболее распространенным методом численного решения диффузионных уравнений является классический метод конечных разностей [4].

Как видим, до настоящего времени не разработано достаточно полной общей теории, позволяющей сделать точный расчет характеристик диффузионного процесса, а существующие теории описывают реальные процессы либо для частных случаев и определенных условий проведения процесса, либо для создания диффузионных слоев при относительно низких концентрациях и достаточно больших глубинах введения примеси. Причиной этого является многообразие процессов, протекающих в твердом теле при диффузии, таких как взаимодействие атомов различных примесей друг с другом и с атомами полупроводника, механические напряжения и деформации в решетке кристалла, влияние окружающей среды и других условий проведения процесса. В связи с этим актуальным вопросом является разработка алгоритмов прогнозирования временных характеристик диффузионного процесса, а также зависимости указанных характеристик от объемного состава участвующих в диффузионном процессе материалов. Исследованию данного вопроса посвящен материал данной статьи, причем для компьютерного моделирования выбран метод клеточных автоматов [5].

Предлагаемый метод

Для построения компьютерной модели диффузионного процесса необходимо рассмотреть основные ее механизмы. Диффузия — неравновесный процесс, вызываемый молекулярным тепловым движением и приводящий к установлению равновесного распределения концентраций внутри фаз. Диффузия обусловлена хаотическим тепловым движением атомов, сопровождаемым их переносом, причем последний может стать направленным под действием градиента концентрации или температуры. Диффундировать могут как собственные атомы решетки (самодиффузия или гомодиффузия), так и атомы других химических элементов, растворенных в полупроводнике (примесная или гетеродиффузия), а также точечные дефекты структуры кристалла — междоузельные атомы и вакансии.

Для более конкретного изложения материала выберем для моделирования механизм диффузии примесей в полупроводнике с различным типом проводимости. В настоящее время используются три метода введения примеси: термическая диффузия, нейтронно-трансмутационное легирование и ионная имплантация (ионное легирование). С уменьшением размеров элементов интегральных микросхем и толщин легируемых слоев преимущественно используется метод нейтронно-трансмутационного легирования. Однако и диффузионный процесс не теряет своего значения, тем более что при отжиге полупроводника после ионного легирования распределение примеси подчиняется общим законам диффузии.

В качестве механизмов, инициирующих перемещение атомов по кристаллу, можно отметить следующие: прямой и кольцевой обмен атомов местами, перемещение атомов по междоузлиям, так называемая эстафетная диффузия; пере-

мещение атомов по вакансиям; диссоциативное перемещение и миграция по протяженным дефектам.

Схема возможных механизмов диффузии атомов в кристаллах показана на рис. 1 [5]. Для компьютерного моделирования формализуем следующие основные механизмы диффузии: вакансионный, межузельный, а также прямой и кольцевой обмен атомов местами, причем моделирование процесса включения каждого из перечисленных механизмов в модель дискретного рабочего поля диффузии будем производить вероятностным методом.

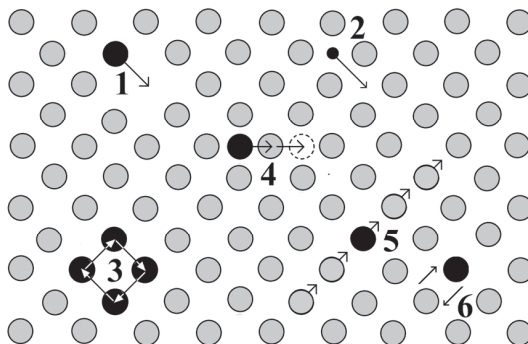


Рис. 1. Вакансионный (1), межузельный (2), кольцевой (3), диссоциативный (4), эстафетный (5) и обменный (6) механизмы диффузии в кристаллах
[The vacancy (1), interstitial (2), the ring (3), dissociative (4), the relay (5) and the exchange (6) diffusion mechanisms crystals]

Механизм перемещения по вакансиям заключается в миграции атомов по кристаллической решетке при помощи вакансий, которые существуют в любом кристалле — это места в решетке без атомов. Атомы вокруг вакансии колеблются и, получив определенную энергию, один из этих атомов может перескочить на место вакансии и занять ее место в решетке, в свою очередь, оставив за собой вакансию.

Механизм перемещения по междоузлиям заключается в переносе вещества межузельными атомами. Диффузия по такому механизму происходит интенсивно, если в кристалле по каким-то причинам присутствует большое количество межузельных атомов и они легко перемещаются по решетке. Такой механизм диффузии предполагается, например, для азота в алмазе.

Прямой обмен атомов местами заключается в том, что два соседних атома одним «прыжком» обмениваются местами в решетке кристалла. Кольцевой обмен атомов местами является общим случаем их прямого обмена.

В любом процессе диффузии, как правило, имеют место все перечисленные механизмы движения атомов. При гетеродиффузии по крайней мере один из атомов является примесным. Однако вероятность протекания этих процессов в кристалле различна.

Целью данной работы является моделирование диффузионного процесса в равнообъемной среде с использованием модели клеточного автомата [4]. Моделирование в клеточном автомате элементарной операции общего диффузионного процесса — перемещения частицы из одного положения в другое — подразуме-

вает пошаговое копирование ее в «новом» месте дискретного рабочего поля с одновременным удалением его со «старого» места. Клеточный автомат двухкомпонентной среды визуально представляет собой набор кругов двух цветов (рис. 2, а).

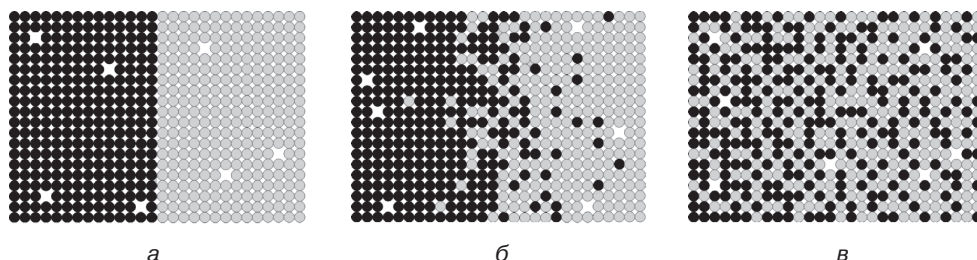


Рис. 2. Модель двухкомпонентной среды: а) исходная; б) в начальной; в) в завершающей стадии диффузионного процесса

[Model binary medium: a) Initial; b) primary; c) in the final stage of the diffusion process]

Принцип действия клеточного автомата вытекает из практического наблюдения за физикой процесса диффузии: в природе при встрече двух молекул они просто обмениваются местами. Реализовать такой механизм с помощью клеточного автомата можно, если разбить все множество его клеток на четные и нечетные пары (блоки). Далее можно запустить клеточный автомат, определив для него следующее правило: на нечетном шаге производить обмен содержимого клеток внутри его нечетных блоков, а на четном — содержимого четных блоков. При этом на каждом шаге необходимо генерировать новую случайную последовательность нулей и единиц, определяющую правила для блоков: 0 — не выполнять обмен и 1 — выполнять обмен. В данной работе в качестве критерия обмена использовался массив чисел, который заполнялся по следующему правилу: генерируется число в диапазоне от 0 до 100, если число больше 50, в ячейку массива записывается 1, в других случаях в ячейку записывается 0. Генератор случайных чисел реализован таким образом, что вероятность его работы описывается нормальным распределением, что приближает работу клеточного автомата к реальным условиям. На рисунке 2, а представлено исходное состояние диффузионного процесса, а на рис. 2, б и 2, в — в его начальной и завершающей стадии соответственно.

Для анализа среды была введена величина, определяющая процентное содержание частиц компонентов в определенной области среды, которая может выступить критерием окончания диффузионного процесса: как только эта величина становится равной 50, процесс останавливается. Используя этот критерий, можно оценить длительность диффузионного процесса в зависимости от количества частиц компонентов (N). С учетом случайного характера диффузионного процесса полученная оценка, естественно, будет более объективной при ее усреднении по не менее 10 вычислительным экспериментам, каждый из которых должен быть реализован при одинаковом количестве частиц компонентов (N).

В таблице 1, содержащей результаты моделирования, на пересечении i -той строки и j -той графы указана длительность (t_{ij}) диффузионного процесса двухкомпонентной среды, состоящей из N_j числа частиц, выраженная числом тактов перемещения частиц в j -том из десяти вычислительном эксперименте.

Таблица 1

Длительность диффузионного процесса (t_i , тактов) на i -м шаге
[The duration of the diffusion process (t_i , measures) on the i -th step]

N	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{CP}
100	178	284	215	210	255	261	239	302	197	359	250
200	444	355	386	537	684	495	638	428	370	553	489
300	1 157	761	834	694	937	1 262	972	912	935	930	939
400	912	1 387	1 285	1 289	1 007	1 149	1 405	1 343	1 176	1 728	1 268
500	1 113	1 540	1 875	2 091	1 085	2 222	1 430	1 496	1 812	1 657	1 632
600	2 023	2 557	2 599	1 807	1 762	1 680	2 040	1 916	2 118	2 154	2 066
700	1 976	1 954	2 659	2 241	2 109	2 336	1 965	2 283	2 672	1 965	2 216
800	2 488	2 301	3 138	3 049	3 505	3 947	2 557	3 333	2 274	2 145	2 874
900	3 198	2 942	3 213	3 135	3 151	3 482	2 374	3 051	4 132	2 601	3 128
1000	3 758	3 026	4 208	6 142	4 366	3 874	6 253	3 885	3 489	3 069	4 207

В последней графе табл. 1 приведены искомые результаты усреднения. График, построенный по результатам усреднения, представлен на рис. 3.

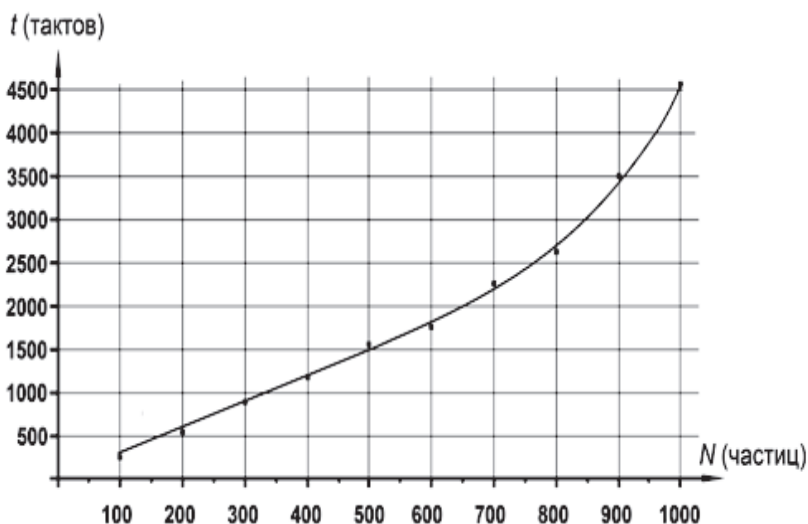


Рис. 3. График зависимости длительности процесса от числа частиц
 [Graph of the processing of the number of particles]

Из графика видно, что увеличение длительности процесса диффузии при количестве частиц $M < 500$ прямо пропорционально числу N частиц, участвующих в эксперименте. Однако при $M > 500$ угол наклона линии увеличивается, т.е. зависимость приобретает нелинейный (полиномиальный) характер, что необходимо учитывать при моделировании среды с большим количеством частиц.

Кроме того, задавая длительность диффузионного процесса, можно оценить однородность структуры, не дожидаясь его окончания. В качестве показателя однородности среды можно принять выраженную в процентах величину P — отношения числа частиц первой компоненты к числу частиц второй компоненты

диффузионного процесса в единице объема. Данные по компьютерному моделированию величины P_i через 1000 тактов от начала диффузионного процесса приведены в табл. 2. Каждая графа этой таблицы за исключением последней содержит результаты одного из 10 ($i = 1, 2, \dots, 10$) вычислительных экспериментов. По данным последней графы, содержащей усредненные (по горизонтали) данные, построен график зависимости однородности структуры от количества частиц через 1000 тактов от начала диффузионного процесса, который приведен на рис. 4.

Таблица 2

Процентное (P_i) содержание частиц в единице объема через 1000 тактов от начала диффузионного процесса
[Percentages (P_i) content of particles per unit volume after 1000 cycles from the beginning of the diffusion process]

Число частиц	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6	P_7	P_8	P_9	P_{10}	P_{CP}
100	52,0	50,0	55,0	51,0	53,0	52,0	49,0	54,0	49,0	52,0	51,7
200	53,6	54,6	52,0	52,0	50,5	54,08	49,0	49,0	50,0	50,5	51,5
300	47,1	54,0	46,4	49,5	50,2	48,4	50,2	49,1	51,9	51,9	49,9
400	48,5	48,0	48,8	48,8	46,0	46,8	46,0	51,8	50,3	47,8	48,3
500	44,6	47,3	48,6	47,5	46,5	44,0	44,6	44,2	42,1	45,0	45,5
600	42,1	43,8	42,4	43,0	45,1	44,0	44,5	46,2	41,9	45,0	43,8
700	42,0	41,6	42,9	41,0	39,2	41,8	42,8	41,8	42,4	42,1	41,8
800	39,4	40,2	39,8	39,8	40,7	38,5	40,9	40,5	39,7	36,9	39,6
900	38,9	39,1	37,6	36,1	40,3	37,3	37,0	38,9	36,7	37,9	38,0
1000	36,5	37,0	35,8	36,0	36,0	37,9	36,5	35,9	35,3	37,4	36,4

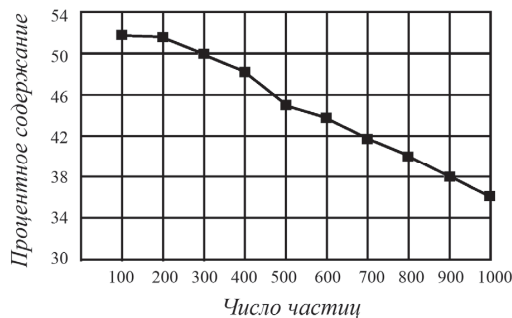


Рис. 4. Соотношение компонентов среды после 1000 тактов диффузионного процесса
 [The ratio of components of the environment after 1000 cycles diffusion process]

Из данного графика видно, что удовлетворительную однородность среды (> 45%) можно получить за время, гораздо меньшее длительности диффузионного процесса.

Последнее обстоятельство позволяет существенно сократить сроки проведения эксперимента в тех случаях, когда исследователю достаточно получить лишь приблизительную оценку параметров диффузионного процесса.

© Назаров А.В., 2017

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- [1] *Захаров А.Г., Какурин Ю.Б., Филипенко Н.А.* Моделирование процессов массопереноса в неоднородных твердых телах с учетом электродиффузии // *Известия вузов. Северо-Кавказский регион*. 2009. № 2. С. 35—37.
- [2] *Рыгалин Б.Н.* Управление свойствами полупроводникового кремния на основе взаимодействия легирующих примесей в процессах выращивания и обработки кремния: автореф. дисс. ... докт. экон. наук. М.: МИЭТ, 2004. 210 с.
- [3] *Тоффоли Т., Марголус Н.* Машины клеточных автоматов. М.: Мир, 1991.
- [4] *Белащенко Д.К.* Механизмы диффузии в неупорядоченных системах (компьютерное моделирование) // *Успехи физических наук*. Т. 169. № 4. 1999. С. 361—382.
- [5] *Бокштейн Б.С.* Диффузия в металлах. М.: Металлургия. 1978. 248 с.

История статьи:

Дата поступления в редакцию: 19 декабря 2016

Дата принятия к печати: 20 января 2017

Для цитирования:

Назаров А.В. Компьютерное моделирование взаимной диффузии двухкомпонентной среды // *Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Инженерные исследования*. 2017. Т. 18. № 1. С. 107—114.

Сведения об авторе:

Назаров Александр Викторович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой информационных технологий конструирования радиоэлектронных устройств, Московский авиационный институт (МАИ). *Сфера научных интересов*: автоматизация конструирования и системы автоматизации проектирования радиоэлектронных средств. *Контактная информация*: e-mail: a-v-naza@outlook.com.

COMPUTER MODELING OF MUTUAL DIFFUSION OF TWO-COMPONENT MEDIUM

A.V. Nazarov

Moscow Aviation Institute
Novaya Basmannaya str., 16-a, Moscow, Russia, 107078

The article presents the results of computer simulation of the process of mutual diffusion of two-component medium. We developed and tested an algorithm simulation of diffusion in a two coextensive medium by cellular automaton and algorithm modeling diffusion neravnoobemnoy environment by direct Monte Carlo simulation. The simulation determined the dependence of the diffusion length of the number of particles participating in the process, and plotted the ratio of components of the medium influence the length of the diffusion process, which may be used to estimate the parameters of the real practical diffusion process.

Key words: diffusion, cellular automata, Monte Carlo, cellular automata, the duration of the diffusion process, discrete operating field

REFERENCES

- [1] Zakharov A.G., Kakurin Y.B., Filipenko N.A. Simulation of mass transfer processes in heterogeneous environment considering electrodiffusion. Proceedings of the universities. North Caucasus region. 2009. № 2. Pp. 35—37.
- [2] Rygalin B.N. Management by properties of semiconductor silicon, based on the interaction of dopants in the process cultivation and processing of silicon: Abstract of Doctor. dissertation. M.: MIET, 2004. 210 p.
- [3] Toffoli T., Margolus N. Machines cellular automata. M.: Mir, 1991.
- [4] Belaschenko D.K. Mechanisms of diffusion in disordered systems (computer simulation). Advances of Physical Sciences. T. 169. № 4. 1999. 361—382 p.
- [5] Bokstein B.S. Diffusion in metals. M.: Metallurgy, 1978. 248 p.

Article history:

Received: 19 December 2016

Accepted: 20 January 2017

For citation:

Nazarov A.V. (2017) Computer modeling of mutual diffusion of two-component medium. *RUDN Journal of Engineering Researches*, 18(1), 107—114.

Bio Note:

Aleksandr V. Nazarov, Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of the Department of Information Technology of Radio Electronic Device Design, Moscow Aviation Institute (MAI). *Research Interests*: design automation and automation control systems for design of radio electronic devices. *Contact information*: e-mail: a-v-naza@outlook.com