

УДК 519.633:621.382

А. А. Самарский, Б. Н. Четверушкин

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА КАК НОВЫЙ ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЙ В ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКЕ

Введение. Вопросы развития элементной базы — основы современной вычислительной техники (ВТ) — находятся под постоянным вниманием исследователей. Прогресс в этой области знаний, как и во многих других областях науки и техники, в значительной мере определяется уровнем применения математического моделирования (ММ) и вычислительного эксперимента (ВЭ). Показательным является опыт организации работ в США и Японии, где ММ и ВЭ стали важной составной частью исследований по микроэлектронике.

В нашей стране применению ММ и ВЭ для исследований в области микроэлектроники уделяется большое внимание. Прежде всего следует отметить работы научных направлений под руководством К. А. Валисва и Ю. К. Пожелы, а также работы других авторов [1—15]. В этих работах удалось получить ряд интересных результатов, касающихся изучения физических процессов в полупроводниках и технологии их производства.

В указанных работах рассматривались и вычислительные алгоритмы для исследования соответствующих процессов. Однако в большинстве из них основное внимание уделялось не разработке численных методов, а конкретным результатам вычислительного эксперимента. Между тем эффективность алгоритма в значительной мере определяет успех ВЭ [16—17].

Создание и исследование численных методов для решения задач науки и техники является крупным научным направлением, представляющим большую самостоятельную значимость. Применение вычислительных алгоритмов в рамках ВЭ означает существенное повышение уровня требований к их качеству: применимость для широкого класса задач, экономичность расчетов для проводимых серий вариантов, гарантированная точность вычислений в классе задач. Помимо этого, трудности построения эффективных численных методов для ВЭ в области микроэлектроники во многом связаны с существенной нелинейностью моделей для теории полупроводников, для описания технологических процессов производства полупроводниковых материалов.

В предлагаемой статье акцент делается на проблеме ММ и ВЭ в области элементной базы для ВТ именно с точки зрения создания и использования вычислительных методов, их связи с основными проблемами прикладной математики. При этом приходится сталкиваться с разнообразными физическими постановками (особенно для технологических процессов), которым соответствуют различные математические модели, описывающие: 1) физические процессы в электронно-дырочной плазме (ЭДП) полупроводников; 2) процессы литографии, включающие электронную и ионную литографию, разнообразные процессы травления, имплантации и окисления полупроводниковых материалов; 3) процессы выращивания кристаллов по методу Чохральского, а также жидкофазовой и газофазовой эпитаксий для получения полупроводниковых материалов.

Однако с точки зрения математической физики множество задач микроэлектроники сводится к сравнительно небольшому числу базовых

вых задач, соответствующих типичным уравнениям в частных производных. Это открывает возможности применения общей теории разностных схем для построения алгоритмов. Поэтому главное внимание в работе будет уделяться не подробному рассмотрению тех или иных методов расчета, а нахождению связей между математическими постановками в микроэлектронике и другими проблемами прикладной математики с целью использования уже имеющегося опыта для решения сходных задач в ряде областей, например, в физике плазмы, нейтронной физике, динамике излучающего газа и т. д.

Авторы посвящают эту работу одному из создателей современной вычислительной и прикладной математики академику Андрею Николаевичу Тихонову, много сделавшему для разработки и применения численных методов решения сложных задач математической физики.

§ 1. *Кинетические модели.* Рассмотрение моделей, применяемых при изучении процессов, связанных с созданием элементной базы, начнем с модели уравнения переноса. Этот тип уравнений используется как наиболее общий для описания процессов, происходящих в ЭДП полупроводников [5, 18].

Распределение носителей заряда характеризуется функциями распределения электронов $f_e(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ и дырок $f_h(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$, которые в пренебрежении квантовыми эффектами удовлетворяют уравнениям

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \frac{p_i}{m_e} \frac{\partial f_e}{\partial x_i} + e \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial f_e}{\partial p_i} = S_e \{f_e, f_h\} + R_e \{f_e, f_h\}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial f_h}{\partial t} - \frac{p_i}{m_h} \frac{\partial f_h}{\partial x_i} - e \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial f_h}{\partial p_i} = S_h \{f_e, f_h\} + R_h \{f_e, f_h\}. \quad (2)$$

Уравнения переноса (1)–(2) необходимо дополнить уравнением для потенциала самосогласованного поля

$$\operatorname{div} \left(\frac{\chi(\mathbf{r})}{4\pi\epsilon} \operatorname{grad} \Phi \right) = \int [f_e(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) - f_h(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)] dp - N(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

В уравнениях (1)–(3) использовались следующие обозначения: m_e , m_h — эффективные массы электронов и дырок; S_e , S_h — члены, описывающие различного рода столкновения электронов и дырок; R_e , R_h — также функционалы от функции распределения, которые описывают процессы генерации и рекомбинации; $\chi(\mathbf{r})$ — диэлектрическая проницаемость, $N(\mathbf{r}, t)$ — плотность пространственного заряда, связанная с легирующими примесями.

Уравнения переноса вида (1) и (2) используются в задачах литографии для описания поглощения мишенью энергии электронного пучка [1]:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial f}{\partial t} + \Omega \operatorname{grad} f = N \int \sigma(\Omega, \Omega') [f(\mathbf{r}, t, \Omega') - f(\mathbf{r}, t, \Omega)] d\Omega'. \quad (4)$$

Здесь Ω — косинус угла между направлением полета электрона и соответствующей осью декартовой системы координат, N — число рассеивающих атомов в единице объема, σ — сечение рассеяния.

Объединяющим фактором для рассмотренных физических процессов служит использование кинетических уравнений (1)–(2) и (4), описывающих перенос различных сортов частиц. Тот же самый тип уравнений используется и для описания процессов взаимодействия ионного пучка с мишенью в задачах ионной литографии [1].

Численное решение кинетических уравнений сталкивается с рядом серьезных трудностей. Эти трудности вызваны, во-первых, многомер-

ностью уравнений переноса, так как функция распределения f зависит не только от пространственной переменной r , но и от импульса p (или направления полета Ω). Во-вторых, кинетические уравнения являются интегродифференциальными уравнениями. Наличие интегралов в правых частях уравнений приводит к тесной взаимосвязи значений функции при различных значениях импульсов, что еще более усложняет процесс численного решения.

Фактически единственным алгоритмом, используемым до сих пор для решения кинетических уравнений в задачах микроэлектроники, является метод Монте-Карло в сочетании с методом макрочастиц [1, 4, 11, 19—21]. Здесь не будут подробно рассматриваться другие методы. Однако следует обратить внимание на многообразие вычислительных алгоритмов, используемых при решении задач, описываемых родственными уравнениями переноса — задач нейтронной физики и динамики излучающего газа [22—23].

Сходство уравнений приводит к тому, что и вычислительные трудности, возникающие при решении этих задач, близки. Так, при расчете задач электронной литографии [4] приходится использовать алгоритм «размножения» траекторий для моделирования процесса в области, удаленной от оси пучка. Близкая негативная проблема «эффекта луча», требующая для своего решения специальных вычислительных алгоритмов, возникает при рассмотрении процессов переноса нейтронов и задач динамики излучающего газа [23—24].

Проблемы технологии производства элементной базы самым тесным образом переплетены с проблемой создания источников частиц и излучений для целей литографии. Для многих направлений субмикронной фотолитографии представляется перспективным использование мягкого рентгеновского излучения. Источником такого излучения может служить лазерная плазма [25].

Процесс трансформации лазерного излучения в излучение мягкого рентгеновского диапазона описывается системой уравнений двухтемпературной динамики излучающего газа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 \rho u}{\partial r} = 0, \quad (5)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = - \frac{\partial}{\partial r} (p_e + p_i), \quad (6)$$

$$\rho \frac{de_e}{dt} = - \frac{p_e}{r^2} \frac{\partial r^2 u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} [r^2 (W_n + W_n + W_e)] - Q_{ie}, \quad (7)$$

$$\rho \frac{de_i}{dt} = - \frac{p_i}{r^2} \frac{\partial r^2 u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 W_i}{\partial r} + Q_{ie}, \quad (8)$$

$$\mu \frac{\partial I_k}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_k}{\partial \mu} + \kappa_k I_k = \kappa_k \int_{\nu_k}^{\nu_{k+1}} I_{\nu p} d\nu, \quad k = 1, \dots, N_k, \quad (9)$$

$$W_n = \sum_{k=1}^{N_k} \int_{-1}^1 \mu I_k d\mu. \quad (10)$$

В системе уравнений (5) — (10), описывающей сферически симметричный процесс, использовались следующие обозначения: $p_e, p_i, \epsilon_e, \epsilon_i$ — давление и внутренняя энергия электронной и ионной компонент; W_e, W_i — тепловой поток за счет электронной и ионной теплопровод-

ности; W_{\parallel} и W_{\perp} — поток энергии собственного излучения плазмы и лазерного излучения; Q_{ie} — член, описывающий обмен энергией между электронами и ионами; I_k — интенсивность энергии излучения в группе частот $\nu \in [\nu_k, \nu_{k+1}]$, κ_k — групповой коэффициент поглощения, μ — косинус угла между направлением полета фотона и радиус-вектором, проведенным из исследуемой точки в центр симметрии.

Основная сложность численного решения этой системы уравнений (так же, как и ранее рассмотренных уравнений) заключается в большей размерности уравнения переноса (10) по сравнению с уравнениями газовой динамики, так как в этом случае решение дополнительно зависит от двух переменных: от частоты фотона ν и от косинуса угла μ .

Для эффективного понижения размерности уравнения переноса в расчетах, которые проведены авторами совместно с В. И. Маслянкиным и Г. А. Евсеевым, использовался метод квазидиффузии и метод осреднения по энергиям фотонов [23, 26—27]. Выход мягкого рентгеновского излучения, полученный в результате расчетов, хорошо соответствует экспериментальным данным работы [25].

Не останавливаясь на описании и исследовании алгоритмов решения системы уравнений (5)—(10), отметим, что они подробно изложены в работах [23, 28—29]. Эти конечно-разностные методы могут быть используемы для решения уравнения переноса в связи с другими проблемами микроэлектроники.

§ 2. Диффузионные модели. В этом параграфе рассмотрим некоторые вычислительные проблемы, возникающие при использовании диффузионных моделей в задачах микроэлектроники. К таким моделям можно отнести широко применяемые для исследования ЭДП дрейфово-диффузионную и квазигидродинамические модели. Они являются следствиями более общей кинетической модели (1)—(3) [18]*. Рассмотрим здесь в качестве примера систему дрейфово-диффузионных уравнений, которые в пространственно-двумерном случае имеют следующий вид [13]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{4\pi e}{\chi} [n - p - N], \quad (11)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_n \left(\frac{\partial n}{\partial x} - n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_n \left(\frac{\partial n}{\partial y} - n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \right] + g_n, \quad (12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} + p \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_p \left(\frac{\partial p}{\partial y} + p \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \right] + g_p. \quad (13)$$

Здесь n и p — плотности электронов и дырок, μ_n и μ_p — коэффициенты их подвижности, g_n и g_p — члены, описывающие процессы генерации и рекомбинации, для электронов и дырок, N — плотность зарядов примесей в полупроводнике, φ — потенциал электрического поля.

Какие вычислительные проблемы возникают при решении этой системы уравнений методом конечных разностей? Во-первых, в каждый момент времени надо знать потенциал φ , что требует решения на каждом слое по времени сеточного аналога уравнения Пуассона (11), поэтому алгоритмы для решения сеточного уравнения Пуассона должны обладать высокой эффективностью в случае областей сложной формы. Использование таких областей при разработке САПР [30] вытекает из

* В данной работе области применимости указанных моделей обсуждаться не будут, так как этот интересный и во многом еще дискуссионный вопрос может отвлечь от алгоритмической направленности статьи.

потребностей создания сверхбольших интегральных схем (СБИС). Та же проблема возникает и при использовании кинетической модели (1) — (3), которая содержит уравнение эллиптического типа с переменным коэффициентом для определения потенциала самосогласованного поля. Успех математического моделирования в работе [11] в значительной мере объяснялся использованием эффективных методов и пакетов прикладных программ для решения систем сеточных уравнений [31—33]. В настоящее время наиболее эффективным методом для решения сеточных уравнений для эллиптических уравнений типа $\text{div}(k(\mathbf{r}) \text{grad } u) = -F(\mathbf{r})$ с переменными коэффициентами $k(\mathbf{r})$ в областях произвольной формы является попеременно-треугольный итерационный метод [29, 31]. Число итераций в этом случае практически не зависит ни от формы области, ни от диапазона изменения коэффициента $k(\mathbf{r})$ в области.

Во-вторых, серьезные трудности численного решения системы (11) — (13) возникают в случае, когда $n - p \approx N$, т. е. правая часть уравнения (11) мала по сравнению с N и $n - p$ [13]. Аналогичные трудности, приводящие к тому, что для устойчивости счета требуется жесткое ограничение на шаг по времени, возникают и при решении задач динамики излучающего газа [23]. В этих задачах температура газовой среды и плотность энергии излучения определяются из системы уравнений энергии и диффузии излучения, весьма похожих на систему (11) — (13). Поэтому использование неявных разностных схем по аналогии с [34—35] представляется полезным и для решения системы дрейфово-диффузионных уравнений.

Следует отметить, что с вычислительной точки зрения численное решение системы (11) — (13) есть решение системы нелинейных тесно взаимосвязанных уравнений. В этом случае использование алгоритмов, когда в каждом из уравнений на новом слое по времени определяется лишь одно неизвестное, а остальные берутся либо с предыдущего шага по времени, либо с предыдущей итерации, часто заканчивается неудачей.

Более естественным с точки зрения учета взаимосвязи неизвестных является линеаризация уравнений по Ньютону [28, 36]. Для решения возникающей при этом системы сеточных уравнений в пространственно-одномерном случае эффективным оказывается алгоритм матричной прогонки [31]. Его применение для разностных аналогов типичных задач теории полупроводников не вызывает особых трудностей [15, 37]. Однако уже для двумерной задачи подобного рода матричная прогонка трудно реализуема.

Удобным и эффективным в этом случае оказывается матричный вариант « $\alpha - \beta$ » итерационного алгоритма [23, 38—40]. Продемонстрируем его на решении разностной схемы для системы, описывающей поведение ЭДП в квазигидродинамическом приближении

$$\frac{\partial N}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(N, 0) N] - \frac{\partial^2}{\partial z^2} [D(N, 0) N] + R(N, 0), \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon(N, 0)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \kappa(N, 0) \frac{\partial \theta}{\partial x} + \Pi(N, 0) \frac{\partial}{\partial x} [D(N, 0) N] \right\} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \kappa(N, \theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} + \Pi(N, \theta) \frac{\partial}{\partial z} [D(N, 0) N] \right\} + P(N, \theta). \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $D(N, 0)$ и $\kappa(N, \theta)$ — коэффициенты диффузии и теплопроводности ЭДП; $\varepsilon(N, \theta)$ — плотность энергии ЭДП; $\Pi(N, \theta)$ — энергия,

переносимая одним электроном (дыркой) в потоке; член $R(N, \theta)$ описывает генерацию и рекомбинацию электронов и дырок, а член $P(N, 0)$ — выделение энергии в ЭДП и передачу ее решетке.

Система уравнений (14)—(15) описывает частный случай квазинейтральной ЭДП, что оправдано при высокой плотности электронно-дырочной плазмы. Продемонстрируем на ее примере предлагаемый алгоритм совместного решения.

После линеаризации неявная разностная дискретизация системы (14)—(15) примет следующий вид:

$$A_{ij}U_{i-1,j} - C_{ij}U_{ij} + B_{ij}U_{i+1,j} + \tilde{A}_{ij}U_{i,j-1} + \tilde{B}_{ij}U_{i,j+1} + F_{ij} = 0. \quad (16)$$

Здесь $U_{ij} = (\delta N_{ij}^{(s-1)}, \delta 0_{ij}^{(s-1)})$ — вектор неизвестных функций; F_{ij} — известный вектор, определяемый с помощью значений функции на предыдущих шагах по времени и предыдущих итерациях; $A_{ij}, C_{ij}, B_{ij}, \tilde{A}_{ij}, \tilde{B}_{ij}$ — матрицы второго порядка.

Для решения матричного уравнения (16) U_{ij} требуем, чтобы одновременно удовлетворились условия

$$\begin{aligned} U_{ij} &= \alpha_{i+1,j} U_{i+1,j} - \beta_{i+1,j}, & U_{ij} &= \tilde{\alpha}_{i,j-1} U_{i,j-1} + \tilde{\beta}_{i,j-1}, \\ U_{ij} &= \gamma_{i-1,j} U_{i-1,j} + \mathbf{d}_{i-1,j}, & U_{ij} &= \tilde{\gamma}_{i,j-1} U_{i,j-1} + \tilde{\mathbf{d}}_{i,j-1}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\alpha, \gamma, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}$ — матрицы второго порядка, $\beta, \mathbf{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\mathbf{d}}$ — двумерные векторы. Подставляя соотношения (17) в сеточное уравнение (16), аналогично формулам одномерной прогонки можно получить систему уравнений относительно $\alpha, \gamma, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}, \beta, \mathbf{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\mathbf{d}}$, которая решается итерационным путем [23, 38—40].

Рассмотренный алгоритм применялся для математического моделирования процесса стратификации ЭДП, нелинейная теория которого была развита в работах [41—42]. Подробные расчеты показали, что в пространственно-одномерном и пространственно-двумерном случаях в зависимости от величины энергии инжектируемых носителей и эффективности передачи энергии решетке возможны установившиеся распределения, имеющие максимум концентрации электронов, дырок и минимум температуры, и наоборот [12, 37]. Количество возникающих неоднородностей тесным образом связано с геометрическими размерами исследуемого элемента. Следует отметить, что во всех рассматриваемых случаях начальные концентрации и температуры были постоянны. Данные расчетов соотноствуют имеющимся результатам экспериментов [43], где при близких значениях исходных параметров наблюдались явления стратификации в ЭДП полупроводников.

Другой важной областью применимости диффузионных моделей являются задачи травления в литографических процессах [2—4]. Типичной с точки зрения математической формулировки является задача плазмохимического травления.

В этом случае система уравнений для описания используемой в процессе травления газоразрядной плазмы примет вид

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \text{div}(D_i \text{grad } n_i) + Q_i, \quad i = 1, 2, \dots, i_0, \quad (18)$$

где n_i — плотность, i — компоненты плазмы, D_i — коэффициент диффузии этой компоненты, Q_i — член, описывающий процессы генерации и рекомбинации частиц. В свою очередь каждая правая часть Q_i уравнения (18) состоит из нескольких членов в зависимости от числа учи-

тивасмых реакций, приводящих к образованию i компоненты. Типичной формой для Q_i является

$$Q_i = -k_1 n_p n_j - k_2 n_p n_i n_l - k_3 n_i^2 n_p, \quad (19)$$

где k_1, k_2, k_3 — константы скоростей соответствующих реакций.

Если отбросить члены, связанные с диффузией частиц, то система (18) станет системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\frac{dn_i}{dt} = Q_i. \quad (20)$$

В случае, когда константы скоростей реакций имеют большой разброс по порядку величины, решение этой системы вызывает серьезные трудности. Для преодоления возникающих при этом трудностей приходится применять алгоритмы решения жестких систем ОДУ [44—45]. Эти методы оказываются эффективными для решения системы уравнений (20). Однако при учете влияния диффузии и соответственно при переходе к решению более общего уравнения (18) эти алгоритмы теряют свою эффективность.

В работах [46—47] был предложен алгоритм, позволяющий решать такого рода системы уравнений. Суть этого метода, являющегося вариантом метода суммарной аппроксимации [28], заключается в том, что процесс отыскания решения задачи на каждом шаге по времени разбивается на несколько этапов.

Так система уравнений (18) разбивается на две последовательно решаемые системы:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = Q_i, \quad (21)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \text{div} (D_i \text{grad } n_i). \quad (22)$$

Алгоритм расчета представляет собой цепочку из двух разностных схем. Переход с временного слоя j на слой $j+1$ осуществляется таким образом, что вначале на отрезке $[t_j, t_{j+1}]$ решается система уравнений кинетики (21), а затем полученные значения используются в качестве начальных данных, и на том же шаге по времени решается система уравнений переноса (22).

Данный метод успешно использовался для расчета процесса пробы азота лазерным излучением. Уравнения, описывающие это явление, имеют ту же самую математическую структуру, что и система (18)—(19). Поэтому применение метода суммарной аппроксимации в сочетании с методами решения жестких систем ОДУ представляется перспективным и для численного моделирования целого ряда процессов микролитографии.

§ 3. Уравнения динамики вязкой жидкости. Важной математической моделью, используемой при исследованиях в области создания полупроводниковых материалов, является система уравнений Навье — Стокса. Эти уравнения в тех или иных приближениях используются для моделирования выращивания кристаллов по методу Чохральского, процессов жидкофазовой и газофазовой эпитаксии [48—51]. Следует отметить, что вопросы, связанные с моделированием указанных процессов, являются наиболее продвинутыми в задачах создания элементной базы, с точки зрения развития численных методов. В известном смысле это связано с тем, что разработка методов решения урав-

нейший Навье — Стокса уже давно стоит в центре внимания специалистов в области прикладной математики.

Для описания этих процессов выпишем основную систему уравнений — систему уравнений Навье — Стокса в приближении Буссинеска. В переменных (функция тока — ψ , вихрь скорости — ω) данная система для наиболее часто рассматриваемого случая $r-z$ геометрии примет вид

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (u\omega) + \frac{\partial}{\partial z} (z\omega) \right] = \frac{1}{\text{Re } r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \omega) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r^2 \omega) \right) \right] + \frac{\text{Gr}}{\text{Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (23)$$

$$\omega = -\frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \right], \quad (24)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (uT) + \frac{\partial}{\partial z} (zT) \right] = \frac{1}{\text{Pe}} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right], \quad (25)$$

где Re , Gr , Pe — соответственно числа Рейнольдса, Грасгофа и Пекле.

Решение системы уравнений (23)—(25) сопряжено с известными серьезными трудностями, сопутствующими расчету задач динамики вязкой жидкости [52]. Кратко рассмотрим некоторые из алгоритмов расчетов этих задач, используемых применительно к исследованию процессов, связанных с созданием полупроводниковых материалов.

В работах [48, 53—54] рассмотрен алгоритм расчета, основанный на аппроксимации конвективных членов направленными разностями. Полученная система разностных уравнений решается последовательными прогонками. Сначала по известным значениям T , ω , ψ находится значение температуры \hat{T} , на новом слое по времени. Затем, используя \hat{T} , последовательно определим $\hat{\omega}$ и $\hat{\psi}$. Итерационные параметры для определения $\hat{\psi}$ находятся по Жордану [28, 31] на основе оценок границ спектров соответствующих разностных операторов. Предложенная схема использовалась для решения разнообразных задач, связанных с течением несжимаемой жидкости, и реализована в комплексе программ НЕИТОН [54].

Оригинальный и эффективный алгоритм расчета уравнений, описывающих течение несжимаемой жидкости в переменных (функция тока — ψ , вихрь скорости — ω), предложен в работе [39]. После линеаризации по Ньютону получена неявная девятиточечная система сеточных уравнений

$$A_{ij}U_{i-1, j-1} + B_{ij}U_{i, j-1} + L_{ij}U_{i+1, j-1} + K_{ij}U_{i-1, j} - C_{ij}U_{ij} + E_{ij}U_{i+1, j} + P_{ij}U_{i-1, j+1} + M_{ij}U_{i, j+1} + Y_{ij}U_{i-1, j+1} + F_{ij} = 0, \quad (26)$$

где U_{ij} — неизвестный вектор, A_{ij}, \dots, Y_{ij} — известные матрицы второго порядка, F_{ij} — известный вектор. Эта система решается с помощью матричного варианта « $\alpha - \beta$ » итерационного алгоритма [23, 38—39]. Предложенный в работе [39] метод успешно применялся для решения задач жидкофазовой эпитаксии [51].

В работе [55] рассматривалась схема, использующая центральные разности для аппроксимации конвективных членов. Эта схема обладает более высоким порядком точности, чем схема с направленными разностями. Однако при малом значении коэффициента кинетической вязкости обычно такая аппроксимация приводит к немонотонным и неустойчивым схемам.

В той же работе [55] предложен способ введения математической (искусственной) вязкости, который сохраняет баланс кинетической энергии. Этот способ приводит к отсутствию пилообразных решений для компонент скорости на грубых сетках. В то же время на не слишком грубых сетках сохранялись детали течения. Предложенный алгоритм использовался для математического моделирования выращивания монокристаллов из расплава по методу Чохральского [49, 56].

Задачи выращивания кристаллов, жидкофазовой и газофазовой эпитаксии — не единственные связанные с проблемами создания полупроводниковых материалов, которые в своей математической постановке приводят к уравнениям Навье — Стокса. К этим уравнениям, записанным в приближении ползущего движения [57] и дополненным уравнением для концентрации окислителя c , приводят также и задачи термического окисления кремния при изготовлении СБИС [58—60]:

$$\mu \Delta u = \text{grad } p, \quad (27)$$

$$\text{div } u = 0, \quad (28)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div } (D \text{ grad } c) + u \text{ grad } c. \quad (29)$$

В заключение отметим следующее. Рассмотренные в данной работе постановки не охватывают всех имеющихся процессов, связанных с созданием элементной базы. Кроме того, возможно с течением времени появление других математических моделей, описывающих новые технологические процессы. Формирование этих моделей, их активное использование в вычислительном эксперименте являются важнейшей совместной задачей как специалистов в области микроэлектроники, так и специалистов в области математического моделирования и прикладной математики.

Из анализа рассмотренных математических постановок видно, что для их решения необходимо активно использовать арсенал средств современной прикладной математики. Здесь применяются методы решения интегродифференциальных уравнений переноса, методы решения систем сеточных уравнений, жестких систем ОДУ, уравнений Навье — Стокса и т. д. Таким образом, существует прямая связь между математическим моделированием в микроэлектронике и ключевыми проблемами прикладной математики.

Однако из-за сложности возникающих математических постановок их решение зачастую невозможно путем механического применения ранее разработанных численных алгоритмов. Более того, сами задачи микроэлектроники могут явиться стимулом дальнейшего развития вычислительных методов. Эти факты, а также практическая важность решаемых задач позволяют говорить о микроэлектронике, как о новом важном объекте исследований в прикладной математике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Валиев К. А., Раков А. В. Физические основы субмикронной литографии в микроэлектронике. М.: Радио и связь, 1984, 350 с.
2. Валиев К. А., Махвиладзе Т. М., Сарычев М. Е. Механизм плазмохимического травления полимеров. — ДАН СССР, 1985, 283, № 2, с. 366—369.
3. Валиев К. А., Махвиладзе Т. М. Теория процесса фототравления полимеров под действием рентгеновского излучения. — Поверхность, 1985, № 3, с. 57—67.
4. Валиев К. А., Кириллов А. Н., Ковтун Б. Н., Махвиладзе Т. М., Мкртчян М. М. Моделирование электронно-литографического процесса экспонирования полимерных резистов. Препринт ИОФ АН СССР, № 113, 1985.

5. Пожела Ю. К. Плазма и токовые неустойчивости в полупроводниках. М.: Наука, 1977, 236 с.
6. Матуленис А., Пожела Ю. К., Реклайтис А. С. Динамика разогрева электронов. — В кн.: Многодолинные полупроводники. Под ред. Ю. К. Пожелы. Вильнюс, 1978, 223 с.
7. Gruzinskis V. D., Reclaitis A. S. Streaming instabilities in semiconductor diodes. — Abstracts of 7-th Int. Conf. IR and MM waves. Marseille, 1983, 216 p.
8. Буда В. В., Сапоговас М. П., Чегис Р. Ю. Двумерная модель нелинейной диффузии. — В кн.: Матем. и машинное моделирование в микроэлектронике. Вильнюс, 1985, с. 36—43.
9. Буда В. В., Занавичюс Д. Ю., Сапоговас М. П. Вычислительный эксперимент в нелинейной диффузии. — В кн.: Матем. и машинное моделирование в микроэлектронике. Вильнюс, 1984, с. 36—42.
10. Банников Н. А., Рыжий В. И. Численное моделирование СВЧ-явлений в диодных структурах с баллистическим и квазibalлистическим переносом носителей заряда. — Электронная промышленность, 1984, № 9, с. 8—12.
11. Банников Н. А., Рыжий В. И., Елизарова Т. Г., Николаев Е. С. Численное моделирование нестационарных электронных кинетических процессов в двумерных полупроводниковых структурах. Препринт ИПМ АН СССР, № 44, 1986.
12. Николаева В. А., Рыжий В. И., Четверушкин Б. Н. Численное моделирование нестационарного нагрева плотной ЭДП в двойных гетероструктурах. — ДАН СССР, 1986, № 6, 288 с.
13. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрофизики. М.: Наука, 1985, 333 с.
14. Петров В. М., Семяхова О. В., Шипилин А. В. Численное моделирование нестационарных процессов в компенсированных полупроводниках со слабоионизованными примесями. — Электронная промышленность, 1984, № 9, с. 61—65.
15. Галанин М. П. О методе расчета диффузии заряженных примесей в полупроводнике. Препринт ИПМ АН СССР, № 158, 1984.
16. Самарский А. А. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. — Вестн. АН СССР, 1979, № 5, с. 38—48.
17. Самарский А. А. Проблемы применения вычислительной техники. — Вестн. АН СССР, 1984, № 11, с. 17—29.
18. Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975, 400 с.
19. Соболев И. М. Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1985, 77 с.
20. Сигов Ю. С. Численные методы кинетической теории плазмы. М.: МФТИ, 1984, 94 с.
21. Awano Y., Tomizawa K., Hashizume N., Kawashima M. Monte-Carlo particle simulation of GaAs short-channel MFSFET. — Electronics Lett., 1983, 19, N 1, p. 20—21.
22. Марчук Г. И., Лебедев В. И. Численные методы в теории переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1981, 496 с.
23. Четверушкин Б. Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. М.: Наука, 1985, 304 с.
24. Lathrop K. D. Ray effects in discrete ordinates equations. — Nucl. Sci. Eng., 1968, 32, p. 357—369.
25. Mead W. C., Campbell E. M., Estabrook K. G., Turner R. W., Krueger W. L., Lee P. H. Y., Pruett B., Rupert V. C., Tirsell G. L., Stradling F., Max C. E., Rosen M. D., Lasinski B. F. Laser irradiation of disk targets at 0,53 μm wavelength. — Phys. Fluids, 1984, 26(8), p. 2316—2331.
26. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения. — ЖВМ и МФ, 1964, 4, № 6, с. 1078—1084.
27. Филиппычев Д. С., Четверушкин Б. Н. Об одном способе осреднения уравнений диффузионного типа по энергиям фотонов. — ЖВМ и МФ, 1976, 16, № 5, с. 1601—1605.
28. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977, 656 с.
29. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука, 1980, 352 с.
30. Knepper R. W., Gaur S. P., Chang F. Y., Srinivasan G. R. Advanced bipolar transistor modeling: process and device simulation tools for today's technology. — IBM J. Res. Develop., May 1985, 29, N 3, p. 218—227.
31. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения систем сеточных уравнений. М.: Наука, 590 с.

32. Капорин И. Е. Модифицированный марш-алгоритм решения разностной задачи Дирихле для уравнения Пуассона в прямоугольнике. М.: Изд-во МГУ, 1980, с. 11—21.
33. Богданова М. С., Голубева А. А., Капорин И. Е., Кучеров А. Б., Макаров М. М., Николаев Е. С., Перебейнос Е. В., Сухачев Д. В. Комплекс программ ELLDEC-2. — В кн.: Библиотека программ для решения сеточных уравнений. М.: Изд-во МГУ, 1984, с. 3—156.
34. Куликов Ю. Н., Четверушкин Б. Н. Неявный разностный метод определения температуры в задачах радиационной газовой динамики. — ЖВМ и МФ, 1973, 13, № 1, с. 136—146.
35. Зуев А. И. Применение метода Ньютона — Канторовича для решения задачи о распределении неравновесного излучения. — ЖВМ и МФ, 1973, 13, № 3, с. 792—798.
36. Graur S. P., Habitz P. A., Park Y. J., Cook R. K., Huang Y. S., Wagnet L. F. Two-dimensional device simulation program: 2DP. — IBM. J. Res. Develop., May 1985, 29, N 3, p. 242—251.
37. Николаева В. А., Рыжий В. И., Четверушкин Б. Н. Численное моделирование плотной электронно-дырочной плазмы в двойных гетероструктурах. Препринт ИПМ АН СССР, № 38, 1985.
38. Мажорова О. С. Итерационный метод решения двумерных матричных уравнений. Препринт ИПМ АН СССР, № 48, 1979.
39. Мажорова О. С., Попов Ю. П. О методах численного решения уравнений Навье—Стокса. — ЖВМ и МФ, 1980, 20, № 4, с. 1005—1020.
40. Четверушкин Б. И. Об одном итерационном алгоритме решения разностных уравнений. — ЖВМ и МФ, 1976, 16, № 2, с. 519—524.
41. Кернер Б. С., Осипов В. В. Нелинейная теория стационарных страт в диссипативных системах. — ЖЭТФ, 1978, 74, вып. 5, с. 1675—1696.
42. Кернер Б. С., Осипов В. В. Страты в разогретой электронно-дырочной плазме. — ФТП, 1979, 13, вып. 4, с. 721—734.
43. Кернер Б. С., Синкевич В. Ф. Многошнуровые и многодоменные стационарные состояния в горячей электронно-дырочной плазме GaAs. — Письма в ЖЭТФ, 1983, 36, вып. 10, с. 359—362.
44. Gear G. W. DIFSUB for solution of ordinary differential equations. — Comm. Assoc. Comput. Math., 1971, 14, p. 185—190.
45. Гольберг С. М., Захаров А. Ю., Филиппов С. С. О некоторых численных методах решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Препринт ИПМ АН СССР, № 12, 1976.
46. Мажукин В. И., Углов А. А., Четверушкин Б. Н. Численное исследование задачи о лазерном пробое плотного газа. — ЖВМ и МФ, 1980, 20, № 2, с. 451—460.
47. Бочков М. В., Четверушкин Б. Н. Об одном алгоритме численного решения уравнений кинетики пробоя. Препринт ИПМ АН СССР, 1985, № 123.
48. Герасимов Б. П., Лесуновский А. В. Численное исследование смешанной конвекции в газостаром реакторе. Препринт ИПМ АН СССР, № 66, 1985.
49. Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В. Анализ распределения скоростей, температур и концентраций легирующей примеси в расплаве при выращивании монокристаллов по Чохральскому. — В кн.: Рост кристаллов. Т. 14. М.: АН СССР, 1983, с. 124—135.
50. Manke C. W., Donaghy L. F. Analysis of transport processes in vertical cylinder epitaxy reactor. — J. Electrochem. Soc. Solid-State Science and Technology, 1977, 124, N 4, p. 561—569.
51. Мажорова О. С., Попов Ю. П., Смирнов В. А., Шленский А. А. Численное моделирование процесса выращивания монокристаллических слоев полупроводниковых материалов методом жидкофазовой эпитаксии. — Физ. и хим. обраб. материалов, 1983, № 4, с. 81—90.
52. Роч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980, 604 с.
53. Герасимов Б. П., Елизарова Т. Г., Турчанинов В. И. Метод подавления схемой вязкости при решении уравнений Навье—Стокса. — Диф. уравнения, 1984, 20, № 7, с. 1165—1172.
54. Бакирова М. И., Герасимов Б. П., Калачинская И. С., Карпов В. Я., Чурбанова А. Г. Программа расчета уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска. Препринт ИПМ АН СССР, № 13, 1983.
55. Бакирова М. И., Старшинова И. В., Фрязинов И. В. Консервативные монотонные разностные схемы для уравнений Навье—Стокса. — Диф. уравнения, 1982, 18, № 7, с. 1144—1150.
56. Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В. Анализ распределения кислорода в расплаве кремния. — Кристаллография, 1984, 29, вып. 3, с. 560—565.

57. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974, 711 с.
58. Антонов В. И., Пантелькин В. П., Тейтельбаум А. З. Математическое моделирование процесса термического окисления кремния. — Электронная промышленность, 1984, № 9, с. 45—49.
59. Chin D., Oh S.-Y. Two-dimensional oxidation. — IEEE Trans. on Electron Devices, 1983, ED-30, N 7, p. 1563—1566.
60. Chin D., Oh S.-Y., Dutton R. W. A general solution method for two-dimensional nonplanar oxidation. — IEEE Trans. on Electron Devices, 1983, ED-30, N 9, p. 993—998.

Поступила в редакцию
14.03.86

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 15. ВЫЧИСЛ. МАТЕМ. И КИБЕРН., 1986, № 3

УДК 533.9.082

Ю. Н. Диестровский, Д. П. Костомаров, А. В. Мельников

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ АКТИВНОЙ КОРПУСКУЛЯРНОЙ ДИАГНОСТИКИ ПЛАЗМЫ

Введение. Для успешного решения проблемы управляемого термоядерного синтеза нужно знать закономерности нагрева и удерживания плазмы в термоядерных установках. Их определение требует подробной информации о развитии разряда и параметрах плазмы. В современных установках температура плазмы измеряется десятками миллионов градусов, в будущих реакторах она должна быть еще выше. Никакие прямые измерения внутри такой горячей среды невозможны. Поэтому всю информацию о плазме приходится получать на основании косвенных измерений, проводимых вне плазмы, и последующей математической обработки их результатов.

Развитие исследований по термоядерному синтезу, создание нового поколения установок неразрывно связано с совершенствованием измерительной аппаратуры и методов диагностики. Общий объем экспериментальной информации о плазме, который получается в течение одного разряда, нарастает лавинообразно. Сбор, регистрацию, обработку и интерпретацию экспериментальных данных на термоядерных установках осуществляют специальные автоматизированные системы. С их помощью физики получают сведения об особенностях развития разряда в разных условиях, определяют пространственное распределение и временную эволюцию параметров плазмы: концентрации, ионной и электронной температуры, состава ионной компоненты, потоков нейтронов перезарядки и нейтронов, излучения плазмы.

Извлечение информации о параметрах плазмы из результатов наблюдений требует разработки эффективных алгоритмов решения соответствующих математических задач и их реализации в виде программ в автоматизированных системах интерпретации экспериментальных данных. Задачи подобного типа относятся к числу обратных и, как правило, оказываются некорректными. Для того чтобы алгоритмы их решения были устойчивыми по отношению к ошибкам измерений, они должны базироваться на методах регуляризации, которые успешно развиваются в течение двух последних десятилетий в работах А. Н. Тихонова и его учеников.

Ряд работ, посвященных математическим задачам диагностики плазмы, был выполнен непосредственно А. Н. Тихоновым с группой коллег [1—7]. Близкими к ним являются наши работы по локационной и хоровой диагностике (томографии) плазмы [8—15]. Основу математиче-