

УДК 658.512.2

Теслюк В.М., Гранат П.П., Корбецький О.Р.
НУ «Львівська політехніка», кафедра САПР

ДОСЛІДЖЕННЯ ТОЧНОСТІ ТА ЕФЕКТИВНОСТІ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ЗАДАЧ МЕТОДАМИ СКІНЧЕННИХ РІЗНИЦЬ ТА СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

© Теслюк В.М., Гранат П.П., Корбецький О.Р., 2000

Проведені вичислювальні експерименти на ЕОМ для дослідження точності та ефективності розв'язання дифузійних задач методами скінченних різниць та скінченних елементів. Отримані результати дозволяють стверджувати, що при розв'язанні дифузійних задач ефективнішим є метод скінченних різниць.

Після побудови математичної моделі (ММ) будь-якого фізичного процесу необхідно розв'язати сформульовану задачу. Якщо в ММ присутні нестационарні чи нелінійні диференціальні рівняння в часткових похідних, то для їх розв'язання зазвичай використовують чисельні методи [1-5]. Тому необхідно вибрати такий чисельний метод, який дозволяє розв'язувати диференціальне рівняння з необхідною точністю та потребує менше машинного ресурсу, ніж інший, що надзвичайно актуально при чисельному моделюванні на ЕОМ з обмеженим ресурсом оперативної пам'яті і швидкодії.

Нині найбільш поширеними чисельними методами є метод скінченних різниць (МСР) [1, 2, 3] та метод скінченних елементів (МСЕ) [4,5]. Кожний з методів має свої переваги та недоліки і без попереднього дослідження, вибрати той чи інший метод для розв'язання конкретної задачі практично неможливо. Тому в даній роботі досліджується ефективність застосування МСЕ та МСР до розв'язання дифузійних задач.

Один з основних параметрів будь-якої ММ – це точність вихідних порохованих результатів, яка залежить від похибки чисельного розв'язку диференціальних рівнянь. Ця похибка, в свою чергу, залежить від похибки апроксимації похідної за часом та похибки апроксимації похідної за координатами.

Похибку апроксимації похідної за часом визначає часовий крок Δt , а похибку апроксимації похідної за координатою – крок за просторовими координатами (в одновимірному наближенні крок за координатою X позначимо ΔX). Значення Δt і ΔX зазвичай знаходять на основі індивідуальних досліджень програмістів та дослідників. Вибір дуже малих значень Δt і ΔX призведе до великих об'ємів обчислень і значного часу обрахунків, що інколи може перевищити години та десятки годин. Вибір великих значень для Δt і ΔX призведе до швидкого розрахунку, але втрати точності ММ. Тому необхідно вибрати оптимальні значення Δt і ΔX , які забезпечать необхідну точність при задовільних витратах машинного ресурсу, а саме: похибка застосування чисельного методу до розв'язання задачі має не перевищувати похибку вхідних даних.

Математичні співвідношення для розв'язання задачі дифузії з необмеженого джерела за допомогою МСР наведені в роботі [6], а співвідношення для розв'язання цієї ж задачі МСЕ розглянемо в даній роботі.

Отже, перша стадія дифузії призначена для формування в приповерхневому шарі кремнієвої пластини тонкої області з високою концентрацією легуючої домішки.

Одновимірною математичною моделлю першої стадії дифузії базується на розв'язанні рівняння Фур'є [7]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(D \frac{\partial C}{\partial X} \right), \quad (1)$$

де C – концентрація легуючої домішки; t – час дифузії; x – просторова координата.

З початковою умовою та крайовими умовами [7]:

$$C(X,0) = 0, \quad (2)$$

$$C(0,t) = C_s, \quad (3)$$

$$C(\infty, t) = 0,$$

де C_s – поверхнева концентрація легуючої домішки.

На першому етапі розв'язання задачі (1)–(3) необхідно диференціальне рівняння (1) замінити його функціоналом. Згідно з роботою [2] відповідний функціонал можна записати у формі:

$$X = \int_0^{LX} \frac{1}{2} \left[D \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \right)^2 + 2 \frac{\partial \bar{C}}{\partial T} \bar{C} \right] dX, \quad (4)$$

де $\bar{}$ – пробна функція, яка є неперервною на проміжку інтегрування, має кусково-неперервні перші похідні і задовольняє основні крайові умови (3).

Інтеграл (4) можна розбити на суму двох інтегралів, а саме:

$$X = \frac{1}{2} \int_0^{LX} D \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \right)^2 dX + \int_0^{LX} \bar{C} \frac{\partial \bar{C}}{\partial T} dX, \quad \text{або } X = X_X + X_T. \quad (5)$$

Розглянемо більш детально перший інтеграл, який описує стаціонарне рівняння дифузії, тобто:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} = 0. \quad (6)$$

Наступний крок розв'язання дифузійної задачі методом скінченних елементів полягає в розбитті області на елементи. Для нашого випадку відрізок $[0, LX]$ поділимо на N елементів і отримаємо $N+1$ вузол. Тоді загальний інтеграл (5) із врахуванням лише його першої половини виразу можна записати як суму елементарних інтегралів:

$$X_X = \frac{1}{2} \int_0^{X_1} D \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \right)^2 dX + \frac{1}{2} \int_{X_1}^{X_2} D \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \right)^2 dX + \dots + \frac{1}{2} \int_{X_N}^{X_{N+1}} D \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \right)^2 dX, \quad (7)$$

або простіше:

$$X_X = \sum_{I=1}^N \frac{1}{2} \int_{X_I}^{X_{I+1}} D \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \right)^2 dX = \sum_{I=1}^N X_X^I, \quad (8)$$

де X_X^I – внесок кожного елемента.

Для апроксимації рівняння (8) візьмемо лінійні пробні функції \bar{C}_I у вигляді:

$$\bar{C}^{(I)} = A_1^{(I)} + A_2^{(I)} X_I, \quad \text{при } X_I \leq X \leq X_{I+1}, \quad (9)$$

де $A_1^{(I)}$ та $A_2^{(I)}$ – постійні коефіцієнти для i -го елемента, які визначаються, виходячи з таких умов у вузлах:

$$\bar{C}^I(X_I) = C_I^I, \quad \bar{C}^I(X_{I+1}) = C_{I+1}^I. \quad (10)$$

Коли підставимо (10) у (9), отримаємо два рівняння з двома невідомими і після їх розв'язання матимемо такі вирази для коефіцієнтів рівняння (9):

$$A_I^{(1)} = \frac{X_{I+1}C_I^{(1)} - X_I C_{I+1}^{(1)}}{X_{I+1} - X_I}, \quad A_2^{(1)} = \frac{C_{I+1}^{(1)} - C_I^{(1)}}{X_{I+1} - X_I}. \quad (11)$$

Підставимо (11) в (9) і отримаємо повний вираз для пробних функцій:

$$\overline{C}^{(1)} = \left(\frac{X_{I+1} - X}{X_{I+1} - X_I} \right) C_I^{(1)} + \left(\frac{X - X_I}{X_{I+1} - X_I} \right) C_{I+1}^{(1)}. \quad (12)$$

Коефіцієнти при $C_I^{(1)}$ та $C_{I+1}^{(1)}$ називають базисними функціями $N_I^{(1)}$ і $N_{I+1}^{(1)}$, після чого вираз (12) можна переписати:

$$\overline{C}^{(1)} = N_I^{(1)} C_I^{(1)} + N_{I+1}^{(1)} C_{I+1}^{(1)}, \quad X_I \leq X \leq X_{I+1}, \quad (13)$$

яке в свою чергу переписемо у матричній формі:

$$\overline{C}^{(1)} = N^{(1)} C^{(1)}, \quad X_I \leq X \leq X_{I+1}, \quad (14)$$

де $N^{(1)} = [N_I, N_{I+1}]^{(1)}$, $C^{(1)} = \begin{bmatrix} C_I \\ C_{I+1} \end{bmatrix}^{(1)}$; $[N]^I$ – матриця базисних функцій, а $[C]^I$ – матриця вузлових векторів.

Оскільки всі елементи однакової довжини, то:

$$(X_{I+1} - X_I) = \frac{(L_X - X_I)}{N}, \quad I = 1, 2, \dots, N. \quad (15)$$

Виходячи з того, що $X_I = 0$, вираз (15) можна переписати:

$$X_{I+1} - X_I = \frac{L_X}{N}. \quad (16)$$

Коли (16) підставимо у (12), отримаємо вираз для поелементної пробної функції:

$$\overline{C}^{(1)} = \left(\frac{N}{L_X} \right) \left[\{X_{I+1} - X\} C_I^{(1)} + \{X - X_I\} C_{I+1}^{(1)} \right], \quad X_I \leq X \leq X_{I+1}. \quad (17)$$

Візьмемо похідну по X від виразу (17):

$$\frac{\partial \overline{C}^{(1)}}{\partial X} = \frac{N}{L_X} (C_{I+1} - C_I). \quad (18)$$

Підставимо отриманий вираз (18) у формулу для окремо взятого i -го елемента:

$$\begin{aligned} X_X^{(1)} &= \frac{1}{2} \int_{X_I}^{X_{I+1}} D \left(\frac{\partial \overline{C}^{(1)}}{\partial X} \right)^2 dx = \frac{1}{2} \int_{X_I}^{X_{I+1}} D_{I+\frac{1}{2}} \left\{ \frac{N}{L_X} (C_{I+1} - C_I) \right\}^2 dx = \frac{D_{I+\frac{1}{2}} N^2}{2L_X^2} \int_{X_I}^{X_{I+1}} (C_{I+1} - C_I)^2 dx = \\ &= \frac{D_{I+\frac{1}{2}} N^2}{2L_X^2} \left\{ (C_{I+1} - C_I)^2 \times \left. \frac{X}{X_I} \right|_{X_I}^{X_{I+1}} \right\} = \frac{D_{I+\frac{1}{2}} N^2}{2L_X^2} \left\{ (C_{I+1} - C_I)^2 (X_{I+1} - X_I) \right\} = \\ &= \frac{D_{I+\frac{1}{2}} N^2}{2L_X^2} \times \frac{L_X}{N} (C_{I+1}^2 - 2C_{I+1}C_I + C_I^2) = \frac{D_{I+\frac{1}{2}} N}{2L_X} \left\{ C_{I+1}^2 - 2C_{I+1}C_I + C_I^2 \right\}. \end{aligned} \quad (18a)$$

У випадку підстановки (18а) у (8), X стає функцією від вузлових значень концентрації домішки:

$$X_X = X_X(C_1, C_2, C_3, \dots, C_{N+1}). \quad (19)$$

З курсу варіаційного числення відомо, що умова мінімуму функціонала X має вигляд:

$$\frac{\partial X_X}{\partial C_P} = 0, \quad P=1,2,3,\dots,N+1. \quad (20)$$

Використовуючи вираз (8) разом з (20), отримаємо мінімізуючу умову для всіх вузлів, тобто:

$$\frac{\partial X_X}{\partial C_P} = \sum_{I=1}^N \frac{\partial X^I}{\partial C_P} = 0, \quad \text{при } p=1,2,3,\dots,N+1. \quad (21)$$

Неважко помітити, що підсумовування в (21) достатньо провести лише для межуючих елементів, оскільки значення вкладів для всіх інших елементів дорівнює нулю. Якщо для прикладу взяти вузлове значення C_1 , то вклад у рівняння (21) дають лише елементи (I-1)-й та (I)-й. Виходячи з цього, візьмемо типовий (I)-й елемент і отримаємо:

$$\frac{\partial X_X^I}{\partial C_1} = \frac{D_{I-1/2} N}{2L_X} \times 2C_1 - \frac{D_{I-1/2} N}{L_X} \times C_{I+1} = \frac{D_{I-1/2} N}{L_X} (C_1 - C_{I+1}), \quad \frac{\partial X_X^{I-1}}{\partial C_1} = \frac{D_{I-1/2} N}{L_X} (C_1 - C_{I-1}). \quad (22)$$

Підставивши (22) в (21) і взявши до уваги, що при підсумовуванні в рівняння (21) дають вклад лише (I)-й та (I-1)-й елементи, отримаємо:

$$\frac{\partial X_X}{\partial C_P} = -\frac{D_{P-1/2} N}{L_X} \times C_{P-1} + \left[\frac{D_{P-1} N}{L_X} + \frac{D_{P+1/2} N}{L_X} \right] C_P - \frac{D_{P-1/2} N}{L_X} \times C_{P+1} \quad \text{при } p=2,3,4,\dots,N. \quad (23a)$$

Для першого та останнього елементів вираз (23а) дещо відрізняється, а саме:

$$\frac{\partial X_X}{\partial C_1} = \frac{N}{L_X} \left[D_{3/2} C_1 - D_{3/2} C_2 \right], \quad \text{при } p=1; \quad (23б)$$

$$\frac{\partial X_X}{\partial C_{N+1}} = \frac{N}{L_X} \left[D_{N+1/2} C_{N+1} - D_{N+1/2} C_N \right], \quad \text{при } p=N+1. \quad (23в)$$

Після об'єднання всіх рівнянь отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) з (N+1)-им невідомим. Додавши до цієї системи лінійних алгебраїчних рівнянь початкові та крайні умови (2)–(3), будемо мати:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{D_3 N}{2L_X} & \frac{N}{L_X} \left[\frac{D_3 + D_5}{2} \right] & -\frac{D_5 N}{L_X} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{D_5 N}{L_X} & \frac{N}{L_X} \left[\frac{D_5 + D_7}{2} \right] & -\frac{D_7}{L_X} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & -\frac{D_{N-1/2} N}{L_X} & \frac{N}{L_X} \left[\frac{D_{N-1} + D_{N+1}}{2} \right] & -\frac{D_{N+1/2} N}{L_X} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \dots \\ C_{N-1} \\ C_N \\ C_{N+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_S \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Систему лінійних алгебраїчних рівнянь (24) можна переписати в матричній формі:

$$[K]\{C\} = \{F\}, \quad (25)$$

де $[K]$ – глобальна матриця жорсткості; $\{F\}$ – вектор навантаження.

Для розв'язання СЛАР (25), яка є тристрічковою, використовують метод прогонки [4].

Розглянемо тепер нестационарне рівняння дифузії (1). На відміну від попереднього в функціоналі (окрім X_X) буде присутній додатковий інтеграл, а саме:

$$X_T = \int_0^{L_X} \bar{C} \frac{\partial \bar{C}}{\partial T} dx, \text{ або } X_T = \sum_{I=1}^N \int_{X_I}^{X_{I+1}} \bar{C}^{(I)} \frac{\partial \bar{C}^{(I)}}{\partial T} dx. \quad (26)$$

Продиференціюємо вираз (26). Для цього продиференціюємо пробну функцію $\bar{C}^{(I)} = [N]^I [C]^I$ за часом:

$$\frac{\partial \bar{C}^{(I)}}{\partial T} = [N]^{(I)} \frac{\partial \{C\}}{\partial T}, \quad (27)$$

оскільки $[N]^{(I)}$ є функцією лише координат і не залежить від часу, то підставивши (27) у (26), отримаємо:

$$X_T = \sum_{I=1}^N \int_{X_I}^{X_{I+1}} [N]^{(I)} \{C\} [N]^{(I)} \frac{\partial \{C\}}{\partial T} dx. \quad (28)$$

Сума інтегралів (28) має бути мінімізована по $\{C\}$. Після диференціювання (28) по $\{C\}$, будемо мати:

$$\frac{\partial X_T}{\partial \{C\}} = \sum_{I=1}^N \left(\int_{X_I}^{X_{I+1}} [N]^{(I)T} [N]^{(I)} dx \right) \frac{\partial \{C\}}{\partial T}. \quad (29)$$

Після об'єднання (29) з (25) отримаємо систему диференціальних рівнянь:

$$[M] \frac{\partial \{C\}}{\partial T} + [K]\{C\} + \{F\} = 0, \quad (30)$$

де $[M]$ – матриця демпферування, де внесок кожного елемента в матрицю $[M]$ визначається виразом:

$$[m]^{(I)} = \int_{X_I}^{X_{I+1}} [N]^{(I)T} [N]^{(I)} dx. \quad (31)$$

При організації обчислювального процесу для розв'язання системи диференціальних рівнянь (30) її можна подати у більш зручному вигляді за допомогою замін:

$$\frac{\partial \{C\}}{\partial T} = \frac{1}{\Delta T} (\{C\}_1 - \{C\}_0), \quad \{F\}^* = \frac{1}{2} (\{F\}_1 + \{F\}_0), \quad \{C\}^* = \frac{1}{2} (\{C\}_1 + \{C\}_0). \quad (32)$$

Підставимо (32) у (30), отримаємо:

$$\frac{1}{\Delta T} [M]\{C\}_1 - \frac{1}{\Delta T} [M]\{C\}_0 + \frac{1}{2} [K]\{C\}_1 + \frac{1}{2} [K]\{C\}_0 + \{F\}^* = 0, \quad (33)$$

яке після нескладних перетворень можна привести до такого вигляду:

$$\left([K] + \frac{2}{\Delta T} [M] \right) \{C\}_1 = \left(\frac{2}{\Delta T} [M] - [K] \right) \{C\}_0 - 2\{F\}^*. \quad (34)$$

Кінцеву систему диференціальних рівнянь можна привести до вигляду:

$$[A] \{C\}_{\text{НОВЕ}} = [T] \{C\}_{\text{СТАРЕ}} - \{F\}^*, \quad (35)$$

де

$$[A] = [K] + \frac{2}{\Delta T} [M], \quad [T] = \frac{2}{\Delta T} [M] - [K]. \quad (36)$$

Для розв'язання СЛАР (35) на кожному часовому кроці використовують метод прогонки.

Реалізація отриманих співвідношень на ЕОМ дозволила провести обчислювальні експерименти, результати яких зображені на рис.1 та рис.2. На першому рисунку наведено залежності відносної похибки поверхневого опору напівпровідникової області від кроку за часом при розв'язанні дифузійної задачі за допомогою МСР та МСЕ. Графіки показують, що при малих значеннях кроку за часом відносна похибка розрахунку МСЕ є меншою, ніж відносна похибка розв'язання МСР. Із зростанням Δt відносна похибка розв'язку при застосуванні МСЕ зростає, а відносна похибка розв'язку МСР залишається постійною. При досягненні величини Δt порядку декількох сотень секунд швидкість зростання відносної похибки розрахунку МСЕ ще зростає і надалі перевищує відносну похибку розв'язку МСР, яка теж зростає, але дещо повільніше. На рис.2 наведено залежності відносної похибки від кроку за координатою для розв'язку задачі дифузії з необмеженого джерела МСР та МСЕ.

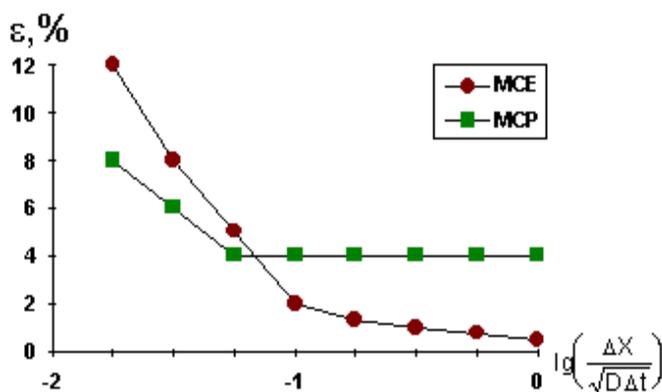


Рис.1 Залежності відносних похибок R_s від Δt при розв'язанні задачі дифузії з необмеженого джерела МСР та МСЕ

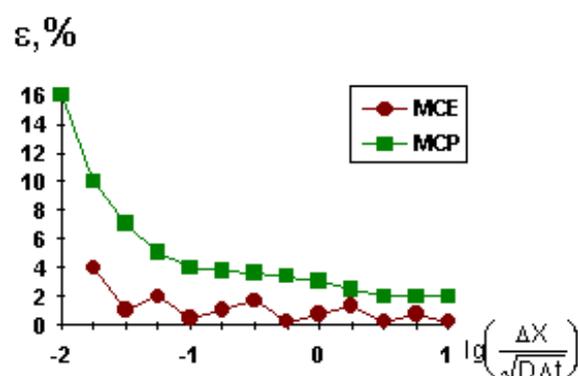


Рис.2. Залежності відносних похибок r - n переходів при розв'язанні дифузійних задач за допомогою МСР та МСЕ

Отримані залежності показують, що відносна похибка глибини залягання r - n переходу, порахована за допомогою МСР, із зростанням кроку ΔX збільшується. Вона є задовільною до величини кроку за часом (100 с), а при перевищенні цього значення швидкість росту відносної похибки поступово зростає. Залежність відносної похибки значення глибини залягання r - n переходу, пораховане за допомогою МСЕ, суттєво відрізняється від попереднього і має коливальний характер. Із зростанням значення Δx амплітуда зростає, але не перевищує значення 3–5 %. Дана відносна похибка завжди є меншою, ніж відносна похибка знаходження r - n переходу, порахована МСР.

Наведені графіки показують, що при зміні кроку за часом для МСЕ більш критичним параметром є поверхневий опір напівпровідникової структури порівняно із глибиною залягання r - n переходу. У випадку використання МСР ситуація є зворотньою. Щоб забезпечити відносну похибку в межах 10 %, необхідно, щоби значення Δt для МСР не перевищувало 100–200 с, а для МСЕ – 200–300 с.. Нижня межа величини кроку за часом знаходиться в межах 0,001–0,0001 секунди. Подальше зменшення кроку за часом призводить до зростання похибки заокруглення. Дослідження кроку за координатою виконані на основі великої кількості машинних експериментів. У результаті були отримані залежності, які наведені на рис.3 та 4. На рис.3 наведено залежність похибки глибини залягання r - n

переходу від значення кроку за координатою. З отриманих результатів для МСР випливає, що при величині кроку Δx менше 0.01мкр. похибка має найменше значення і є постійною величиною. Подальше збільшення величини кроку за координатою призводить до різкого зростання ε . Відносна похибка не буде перевищувати 5 %, якщо $\Delta x < 0,03$ мкм. і 10 %, якщо $\Delta x < 0,05$ мкм.

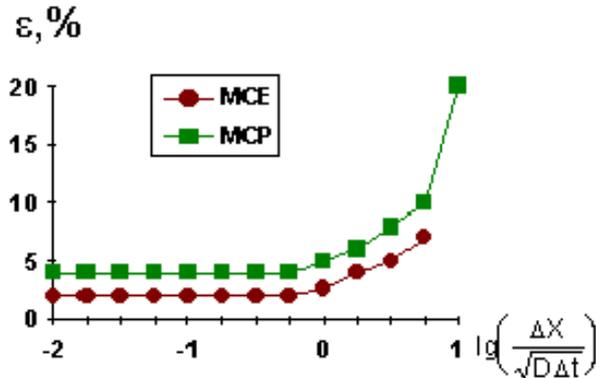


Рис.3. Залежності відносної похибки глибини залягання р-п переходу при розв'язанні рівняння дифузії МСР та МСЕ залежно від Δx

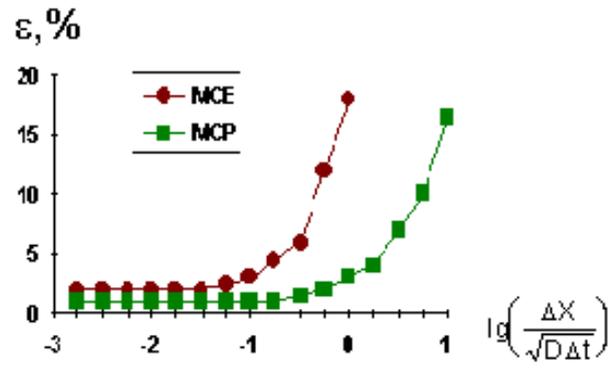


Рис.4. Залежності відносних похибок R_s при чисельному розв'язанні рівняння дифузії МСР та МСЕ залежно від Δx

На рис.4. наведена подібна залежність, що показує зміну відносної похибки поверхневого опору від значення кроку за координатою. Аналіз отриманої залежності показує, що при $\Delta x < 0,01$ мкм. похибка є постійною і має найменше значення. На наступному відрізку відносна похибка зростає із збільшенням Δx ($\varepsilon < 3$ %, якщо $\Delta x < 0,04$ і $\varepsilon < 10$ %, якщо $\Delta x < 0,08$ мкм.).

Дослідження відносної похибки чисельного розв'язку рівняння дифузії за допомогою МСЕ показало, що характер зміни похибки від величини кроку за координатою (для глибини залягання р-п переходу та поверхневого опору) аналогічний зміні ε , яка побудована за результатами розв'язання рівняння дифузії МСР.

Отже, підсумовуючи все вище сказане, можна зробити висновок, що більш ефективним чисельним методом розв'язання дифузійних задач є МСР. Хоча при дослідженні відносної похибки вихідних контрольованих параметрів технологічної операції дифузії МСЕ дозволяє використовувати більші кроки за часом (що дозволяє зменшити загальну кількість ітерацій за часом), але ця перевага компенсується великою кількістю обчислень при організації обчислювального процесу за допомогою МСЕ. Кількість обчислень для МСЕ може перевищувати в 2–5 разів кількість обчислень при організації розрахунку МСР. Це пояснюється тим, що при розв'язанні нестационарних диференціальних рівнянь виникає необхідність проведення математичних операцій з матрицями, які значно знижують швидкодію розрахунку на кожному часовому кроці. Для реальних дифузійних задач понизити цей параметр практично неможливо, але у випадку незмінності коефіцієнта дифузії від концентрації та розв'язання стаціонарного рівняння дифузії кількість обчислень при організації розв'язання МСЕ наближається до кількості обчислень при організації розв'язання МСР.

Окрім того, незаперечною перевагою МСР є його простота, яка дозволяє за короткий термін освоїти та реалізувати розв'язання поставленої задачі на ЕОМ.

1. Годунов С.К., Рябенкий В.С. Разностные схемы. М., 1973. 2. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., 1983. 3. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М., 1966. 4. Норри Д., Ж де Фриз. Введение в метод конечных элементов. М., 1981. 5. Молчанов И.Н. Машинные методы решения прикладных задач. Дифференциальные уравнения. К., 1988. 6. Бродай И., Мерей Дж. Физические основы микротехнологии. Пер. с англ. М., 1985.

УДК 658.512.2

Теслюк В.М., Корбецький О.Р., Гранат П.П.
 НУ «Львівська політехніка», кафедра САПР

МОДЕЛЬ ПЕРЕРОЗПОДІЛУ ДОМІШОК У СТРУКТУРІ «КРЕМНІЙ-ДСС»

© Теслюк В.М., Корбецький О.Р., Гранат П.П., 2000

Запропоновано математичну модель для аналізу перерозподілу домішок у структурі «кремній – домішково-силікатне скло», яка містить модель росту плівки ДСС і дозволяє підвищити точність моделювання дифузійних процесів при аналізі першої стадії дифузії та дослідити основні фізичні процеси на межі розділу двох середовищ ДСС-кремній. Дана модель реалізована в програмі ПроМІС-Т.

Вступ

Домінуюче місце при виготовлення інтегральних схем (ІС) займають технологічні операції (ТО) формування легованих областей інтегральних приладів. До цих ТО належать дифузія та інне легування [1,2]. Кожна з цих технологічних операцій має певні переваги та недоліки і займає своє місце в технологічному процесі виготовлення ВІС та ЗВІС. Дифузійні процеси, як правило, використовують при формуванні біполярних інтегральних приладів, «кишень» в техпроцесах виготовлення КМОН-структур, дифузійних резисторів та конденсаторів тощо.

Щоб забезпечити конкурентоздатність своїх виробів, мікроелектронні підприємства змушені зменшувати терміни проектування виробів, які коливаються в межах 1–3 місяців. Особливого значення в цих умовах набувають засоби математичного моделювання технологічних процесів виготовлення ІС, які дозволяють значно прискорити процес проектування мікросхем.

Формалізація задачі

Відомо, що дифузійні процеси описуються другим законом Фіка [1,2,3]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla(D\nabla J), \quad (1)$$

де C – концентрація легуючих домішок; ∇ – оператор градієнта; t – час проведення термічної дифузії; J – потік домішкових атомів.

Оскільки нам доведеться використовувати вищезазначене диференціальне рівняння в часткових похідних, то надалі для зручності його модифікуємо, а саме: перетворимо до безрозмірного вигляду.