

АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В УСТРОЙСТВАХ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

И.Н. Козлова, Н.И. Бережков

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва», г. Самара

Для моделирования процессов в устройствах микро- и нанoeлектроники предложены вычислительные алгоритмы модулей поверхностной диффузии, объёмной диффузии и химических процессов. Они позволяют провести анализ элементарных физико-химических процессов (ФХП) с единой физической позиции и выбрать альтернативные варианты исходов. Выбор альтернативных вариантов исходов (да – нет) при оценке возможности реализации элементарных ФХП производится следующим образом:

- Генератор случайных чисел с наперед заданной функцией распределения случайных величин (равномерного, нормального или экспоненциального распределения) генерирует «случайное число» в диапазоне значений (0 – 1). Этому случайному числу Q приписывается смысл «потенциально допустимой вероятности» протекания ФХП на данном временном шаге моделирования.

- На основании анализа температурных режимов технологических процессов (при термическом принципе активация ФХП), механизмов протекания элементарных ФХП и характеристических параметров атомов (молекул), входящих в состав рабочих сред, аналитическим путем определяются вероятности реализации ФХП для случая единичного колебательного движения атома.

- На основании данных предыдущего пункта определяется вероятность ω протекания элементарного ФХП за интервал времени, соответствующего единичному шагу временной дискретизации процесса моделирования.

- Производится проверка выполнения условия для вероятностных параметров Q и ω :

- а) если $Q \geq \omega$, то считается, что элементарный ФХП может быть успешно реализован на текущем шаге временной дискретизации;

- б) если $Q < \omega$, то считается, что на данном шаге временной дискретизации отсутствуют благоприятные условия для протекания элементарного ФХП, и, следовательно, этот тип ФХП не может быть реализован на текущем шаге моделирования.

На рисунке 1 в качестве примера приведен алгоритм модуля объёмной диффузии.

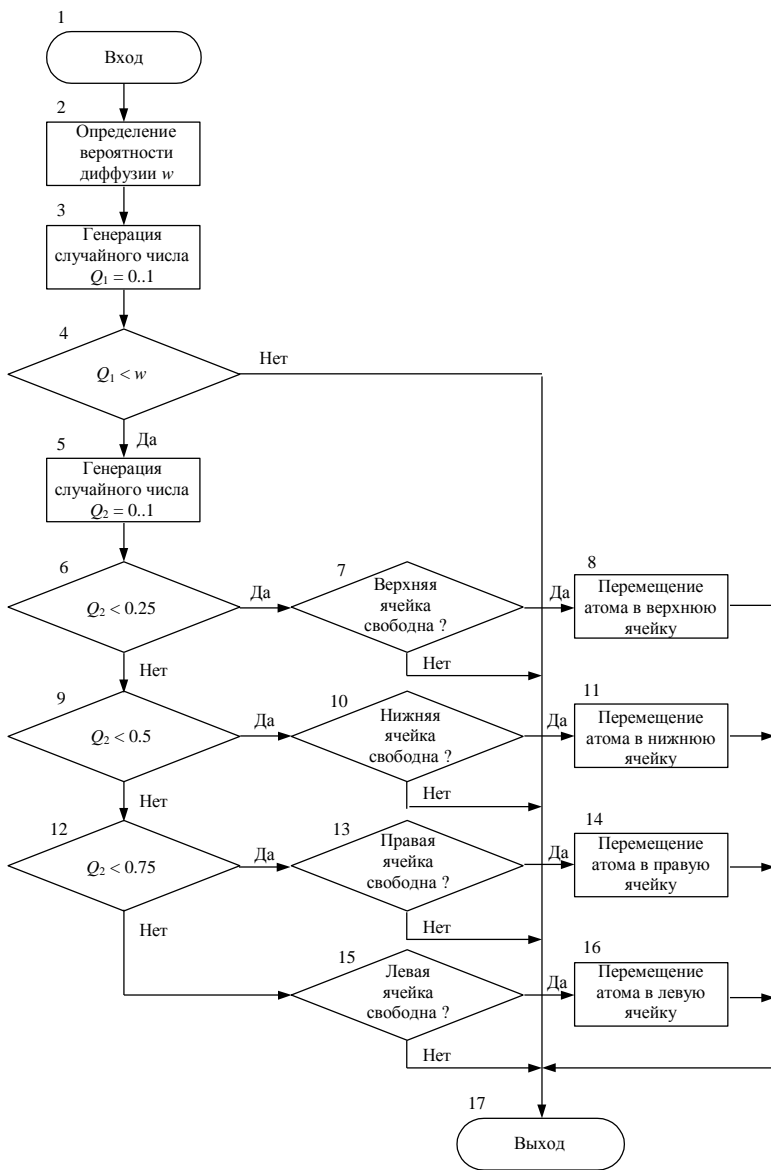


Рисунок 1 – Типовая схема алгоритма блока «модуль объемной диффузии»
 e-mail: kipres@ssau.ru