Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Н. Агафонов, А. В. Волков, С. Б. Коньгин, А. Г. Саноян, Разработка физических принципов и алгоритмов компьютерного моделирования базовых процессов формирования микроструктур методами вероятностного клеточного автомата, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2007, выпуск 1(), 99–107

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu495>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.219.149

26 апреля 2023 г., 09:30:41

Выполним некоторые оценки. Для максимальных значений $\lambda \approx 5 \cdot 10^{-3}$ ед. CGSE/см величина напряженности поля у левой границы скопления будет равна

$$E_x(l_1) = \frac{2\lambda}{\epsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left(1 - \sqrt{\frac{l_2}{l_1}} \right) \quad (21)$$

и может достигать значений $\approx 10^2$ ед. CGSE. Это величины, сравнимые с напряженностью электрического пробоя воздуха. Приводимые в работе оценки, таким образом, могут быть использованы для интерпретации механоэлектрических процессов, имеющих место на стадии активного деформирования кристаллов, дислокации в которых являются заряженными.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Тялин Ю. И., Финкель В. М. Скопления заряженных дислокаций и зарождение трещин в неметаллических кристаллах // Доклады АН СССР. 1984. Т. 279. № 5. С. 1126–1130.
2. Тялин Ю. И., Финкель В. М., Гурова О. В., Копылов Н. В. Специфика скоплений заряженных дислокаций // Физика твердого тела. 1985. Т. 27, № 10. С. 3005–3009.
3. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
4. Шевцова И. Н. Заряжение подвижных дислокаций и электризация ионных кристаллов при пластической деформации // Физ. тверд. тела. 1983. Т. 25, № 4. С. 1172–1178.
5. Владимиров В. И., Хананов Ш. Х. Дискретно-континуальное рассмотрение дислокационных скоплений // Физика металлов и металловедение. 1969. Т. 27, № 6. С. 969–975.
6. Бредихин С. И., Шмурак С. З. Стимулированное деформацией свечение кристаллов ZnS // Письма в ж. эксперим. и теор. физ. 1974. Т. 19. Вып. 12. С. 709–713.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-01-00759).

Поступила 16.08.2006 г.

УДК 621.382

А. Н. Агафонов, А. В. Волков, С. Б. Коньгин, А. Г. Саноян

РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ И АЛГОРИТМОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ БАЗОВЫХ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУР МЕТОДАМИ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА

Предложена методика моделирования базовых процессов формирования микроструктур с использованием метода вероятностных клеточных автоматов. Разработан программный комплекс, реализующий данную методику. Приведены примеры моделирования комплексных процессов при наличии на поверхности подложки дефектов различных типов.

Введение. Сложность технологических процессов при создании элементов микроэлектроники и дифракционной оптики вызывает необходимость одновременного рассмотрения широкого круга разнообразных физико-химических процессов (ФХП) и факторов, как непосредственно связанных с рассматриваемыми процессами, так и побочными — например, диффузионного (объемного и поверхностного) транспорта материальных сред.

Решение данной задачи, в столь широкой постановке, с помощью традиционных термодинамических методов, основанных на физике сплошных сред, представляет известные трудности, как в части формирования начальных и динамических граничных условий, так и математического характера.

Широко применяемые в настоящее время методы, основанные на решении систем дифференциальных уравнений в частных производных, оказываются недостаточно эффективными при моделировании процессов создания структур, размер которых сравним с размерами атомных дефектов поверхности, а также при моделировании многокомпонентных систем. Указанные трудности стимулируют поиск принципиально новых методов анализа подобных процессов и систем, которые позволят существенно расширить спектр рассматриваемых ФХП и определять кинетические характеристики процессов, протекающих при создании устройств микро- и наноэлектроники.

В представленной работе рассмотрена возможность решения вышеуказанной задачи методами компьютерного моделирования, основанными на использовании метода вероятностных клеточных автоматов (ВКА) [1].

Метод ВКА позволяет перевести вопросы анализа сложных существенно неравновесных динамических систем, характерных для процессов формирования структур микроэлектроники, из плоскости макроскопических подходов в плоскость микроскопических подходов. В этом случае в качестве исходных данных фигурируют не термодинамические параметры рабочих сред и систем, а параметры элементарных (с атомно-молекулярной точки зрения) ФХП, определяющие кинетику процессов эволюции. Одним из основных преимуществ метода ВКА является возможность рассмотрения большого (практически неограниченного) количества одновременно протекающих элементарных процессов, каждый из которых подчиняется определенным физическим закономерностям. В принятом подходе отпадает необходимость в разработке уравнений состояния системы в их традиционном понимании, поскольку их роль выполняют:

- фактическая конфигурация индивидуальных атомных объектов (как рассматриваемого, так и его ближайшего окружения) при очередном шаге моделирования;
- ограниченный набор логических правил для обеспечения переходов (химическое взаимодействие или транспорт веществ) микроскопической системы в последующее состояние при очередном шаге моделирования;
- вероятностные параметры индивидуальных ФХП, выступающие в качестве критериев возможности реализации этих процессов при очередном шаге моделирования.

Разработанные для проведения компьютерного моделирования программные средства включают в себя ряд автономных модулей и допускают последующее развитие, посредством включения дополнительных модулей, реализующих необходимые индивидуальные ФХП. Результаты моделирования, полученные для ряда конкретных технических систем, свидетельствуют о том, что использование метода ВКА позволяет:

- получить наглядное отображение (на атомном уровне рассмотрения) кинетики процессов на границе раздела фаз;
- учесть (и отобразить в режиме реального времени) влияние стохастических эффектов в общей динамике эволюции систем;
- учесть специфику структуры и строения системы (в том числе факторы неоднородности и пористости);
- проводить комплексный анализ процессов эволюции системы, с учетом широкого круга индивидуальных ФХП;
- получить интегральные характеристики системы, свойственные макроскопическим методам анализа.

Исходя из вышеизложенного, в качестве базовой основы анализа процессов формирования структур микроэлектроники выбран метод ВКА. Основными причинами предпочтительности указанного метода является возможность модульной реализации процесса вычислительного моделирования, а также относительная простота и наглядность отображения конечных и промежуточных результатов моделирования. В настоящей работе предложенный метод моделирования рассматривается на примере двух базовых процессов технологии микроэлектроники: адсорбции и диффузии.

1. Сущность и особенности метода ВКА для моделирования процессов микроэлектроники. Методы клеточных автоматов (КА) основаны на представлении моделируемой системы в виде распределенной сети взаимосвязанных ячеек, состояния которых изменяются синхронным образом через дискретные интервалы времени в соответствии с локальными правилами, которые могут зависеть от состояния соседних ячеек. Состояние каждой отдельно взятой ячейки в момент времени n характеризуется значением некоторой переменной a_i^n , которая может быть целым, действительным или комплексным числом, либо представлять собой набор из нескольких чисел. Состояния ячеек изменяются синхронным образом через дискретные интервалы времени в соответствии с локальными вероятностными правилами, которые могут зависеть от состояния переменных в ближайших соседних узлах [2]. Эти правила регламентируют процессы эволюции системы, и, как правило, не меняются со временем. КА могут генерировать огромное число уникальных путей эволюции распределенных систем. Обработка состояний ячеек позволяет получить информацию о термодинамических параметрах моделируемой системы.

Совокупность таких свойств как локальность правил поведения атомов, расположенных в массиве элементарных ячеек, и дискретность переменных порождает в ряде случаев совершен-

но непредсказуемое поведение распределенной дискретной системы. Непредсказуемость поведения единичных реализаций является одной из отличительных черт ВКА и в данном контексте является следствием стохастических факторов. Основная задача описания макросистемы с помощью ВКА сводится к нахождению таких локальных правил взаимодействия между ячейками, которые, будучи применены в модели, позволяют эволюционировать всему ансамблю этих ячеек в соответствии с основными особенностями моделируемого макроявления.

Если сравнивать методы клеточных автоматов и обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), то одно из основных отличий первых от вторых заключается в локальности правил, с помощью которых описывается динамика системы. В случае применения ОДУ используются некоторые правила изменения усредненных (макроскопических) величин по всей системе в целом, например, концентраций. При этом изначально полагают, что такие правила существуют в виде физических закономерностей детерминированного типа. В случае КА существование таких обобщенных правил становится необязательно. Необходимо знать только законы локального взаимодействия между ячейками (микрообъектами), которые определяются параметрами элементарных физико-химических процессов и считаются постоянными и одинаковыми для всех ячеек. Другим отличием КА от дифференциальных уравнений (ДУ) является использование не только дискретных, но и, как правило, целочисленных переменных. Дискретность переменных позволяет рассматривать большой класс разрывных (не дифференцируемых) функций. Следует отметить, что проявление дискретных свойств КА существенно уменьшается при работе с большими значениями переменных (массив ячеек), но, в принципе, никогда не исчезает. В случае же численного решения задач методами ОДУ или ДУ в частных производных можно уменьшать шаг дискретности до сколь угодно малых величин (что находится в противоречии с фактом дискретизации реальных атомно-молекулярных сред).

Особенностью метода ВКА является непредсказуемость результатов моделирования. Как и в реальной системе, движение частиц в создаваемой модели является хаотическим, поэтому в различных сериях моделирования получаются различные картины распределения молекул даже при неизменных параметрах моделирования. Следует отметить, что, если модель описывает систему, стремящуюся к равновесию, то различия в результатах моделирования будут незначительными (последнее относится к получаемым макроскопическим кинетическим характеристикам). В случае, если в системе нет никаких правил, обеспечивающих ее приход к равновесному состоянию, то результаты могут резко различаться в каждой серии машинного эксперимента.

2. Представление и формализация объекта анализа в виде поля моделирования. Первым этапом при проведении моделирования методом ВКА является формализация объекта моделирования в части его представления в виде решетки ВКА (поля моделирования). Процесс оптимизации поля моделирования непосредственно связан с проблематикой пространственной дискретизацией рассматриваемого объекта. Желательно, чтобы поле моделирования адекватно отражало специфику геометрической структуры объекта моделирования (на микроскопическом уровне рассмотрения) на уровне отображения элементарной ячейки размещения индивидуальных атомов, например, для веществ с кубической кристаллической решеткой уместно выбрать аналогичную трехмерную решетку ВКА.

Метод ВКА позволяет, в принципе, использование поля моделирования любой размерности и геометрической конфигурации. Однако следует иметь в виду тот факт, что повышение размерности на одну единицу существенно снижает быстродействие выполнения вычислительных процедур. Следует отметить, что методология ВКА не накладывает никаких ограничений на вид элементарных ячеек, используемых в поле моделирования. В частности, они могут быть выбраны либо в виде плоских геометрических фигур (квадратов, треугольников, шестиугольников и т.д.), либо объемных. Геометрические размеры поля моделирования определяются с учетом необходимости отражения характеристических размеров моделируемого объекта в целом и его функциональных фрагментов. Чем больше геометрические размеры поля моделирования, тем большее количество атомных частиц объекта может быть отражено, а, следовательно, становится больше точность описания объекта.

На рис. 1 представлены примеры двухмерного и трехмерного полей моделирования.

Особенностью метода ВКА является дискретность коэффициента заполнения с шагом, равным величине обратной ширине поля моделирования. Действительно, коэффициент заполнения вычисляется как число «адсорбированных» частиц к общему числу «мест» на поверхности, с учетом, что обе эти величины целые. Для увеличения достоверности получаемых результатов необходимо увеличивать размеры поля моделирования, но это ведет к увеличению времени расчетов. Высота поля моделирования влияет на эффективность механизма начального распре-

Р и с. 1. Примеры полей моделирования

– атомной диффузии (объемной и поверхностной) в конденсированных средах.

В качестве основополагающего параметра, ответственного за реализацию вышеуказанных элементарных процессов, выступает вероятность протекания процесса на рассматриваемом дискретном (временном) шаге моделирования. Считается, что все элементарные ФХП протекают по механизму термической активации. Согласно активационной модели протекания индивидуальных ФХП следует, что в указанном процессе могут принимать участие только те атомы, энергия которых превышает энергию активации W_a . В первом приближении можно принять, что скорость (интенсивность) протекания индивидуальных ФХП будет пропорциональна концентрации таких высокоэнергетических частиц N_a . Определим концентрацию N_a с учетом допущения, что ансамбль частиц подчиняется статистике Максвелла–Больцмана

$$N_a = \int_{W_a}^{\infty} dN = \int_{W_a}^{\infty} \alpha W^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) dW, \quad (1)$$

где k — постоянная Больцмана; T — температура рабочих сред; α — константа.

Для упрощения операции интегрирования учтем то обстоятельство, что в практическом плане интересны те случаи (события), когда выполняется условие $W_a \gg k \cdot T$. В результате интегрирования для концентрации активных частиц имеем

$$N_a = N_0 \exp\left(-\frac{W_a}{kT}\right), \quad (2)$$

где N_a — локальная концентрация частиц рассматриваемого типа.

Рассматривая вероятность реализации индивидуального физико-химического процесса в виде $\omega_0 = N_a / N_0$, с учетом выражения (2) имеем

$$\omega_0 = \exp(W_a / kT). \quad (3)$$

Выражение (3) является базовым при определении параметров ВКА для вышеперечисленных элементарных процессов, но оно не учитывает фактор временной дискретизации вычислительных процедур.

4. Принципы временной дискретизации при моделировании методом ВКА. Широкий спектр элементарных ФХП, используемых при моделировании процессов формирования устройств микроэлектроники, ставит задачу выбора оптимальной временной дискретизации. Основной трудностью при выборе временной дискретизации является чрезвычайно большой разброс характеристических времен протекания элементарных актов индивидуальных ФХП, обусловленный различием энергий активаций индивидуальных ФХП и механизмами их протекания. В тоже время, для эффективной работы ВКА необходимо выполнение требования, заключающегося в единстве временного шага моделирования.

С физической точки зрения, наиболее естественным временным шагом ВКА является продолжительность периода колебаний атомов вблизи положения равновесия (в конденсированных средах порядка 10^{-12} с [3]). Однако периоды колебаний поверхностных и объемных атомов могут существенно различаться. Помимо этого, на практике часто возникают требования к ускорению процесса моделирования. Например, может потребоваться, чтобы за один шаг моделирования изменилось состояние не менее 1% ячеек, что приводит к значительному увеличению шага временной дискретизации. Для согласования вышеуказанных требований необходимо установить правило вычисления вероятностей реализации процессов за период времени, не совпадающий с характеристическими временами элементарных актов ФХП:

деления частиц. Желательно сделать высоту поля как можно меньше, чтобы увеличить скорость расчетов, но при этом снижается эффективность моделирования диффузионных процессов в конденсированных средах.

3. Классификация и механизмы элементарных физико-химических процессов. В рамках настоящей работы рассмотрены следующие элементарные ФХП:

– атомной адсорбции (десорбции) из газовой фазы;

$$\omega(t) = 1 - (1 - \omega_0)^{t/\tau_0}, \quad (4)$$

где t — длительность шага временной дискретизации при моделировании методом ВКА; τ_0 — характеристическое время элементарного акта актов физико-химического процесса; ω_0 — вероятность реализации процесса в течении характеристического времени.

Следует заметить, что проблема выбора характеристического времени имеет нетривиальный характер и ее решение, в ряде случаев, требует привлечения эмпирической информации [4].

5. Концентрационное представление результатов моделирования методом ВКА. Результатом моделирования актов физико-химических процессов являются пространственно-временные распределения атомных частиц в объеме моделируемой системы. При этом в ходе вычислительных экспериментов ВКА порождает гигантское количество промежуточных и конечных структур размещения атомных частиц в поле моделирования. В силу чрезвычайного разнообразия, эти структуры не могут рассматриваться в качестве выходных данных моделирования, когда речь идет о формировании конечных выводов и рекомендаций. В этой связи, в качестве интегральных критериев можно рассматривать локальные концентрации атомов определенного типа

$$n = N / (N_0 \cdot d^k), \quad (5)$$

где n — локальная концентрация атомных частиц; N — число ячеек поля моделирования, занятых частицами определенного типа; N_0 — общее число ячеек поля моделирования; d — размер ячейки поля моделирования; k — координатная размерность рассматриваемой области ($k = 2$ для двумерного ВКА, $k = 3$ — для трехмерного).

Следует отметить, что в случае моделирования формирования структур нанoeлектроники представление о существовании локальной концентрации становится некорректным.

6. Флуктуационный и спектральный анализ результатов моделирования. Моделирование методом ВКА позволяет получать пространственно-временные распределения веществ (вплоть до атомных масштабов) в рассматриваемых материальных средах в процессе эволюции системы.

Следует, однако, отметить, что при практической постановке этого вопроса необходимо проявлять известную осторожность, обусловленную тем обстоятельством, что в ряде случаев результаты моделирования могут содержать различные тренды и низкочастотные компоненты, период которых превышает длину реализации вычислительного процесса. Если такие тренды не исключить из исходных данных, то при их последующем анализе могут возникнуть значительные искажения в оценках плотности вероятности и спектральных характеристик. Обнаружение и удаление этих трендов производится в том случае, если их присутствие сказывается очевидным образом на промежуточных и конечных результатах и моделирования или следует из априорных физических представлений.

Наиболее распространенным способом удаления тренда заключается в нахождении многочлена невысокого порядка [4]. Пусть исходная последовательность результатов моделирования в виде чисел x_i подвергается аппроксимации многочленом степени K :

$$x_i = \sum_{x=0}^K b_x \cdot (i \cdot \tau)^x, \quad (6)$$

где i — порядковый номер шага моделирования; τ — длительность шага моделирования; b_i — постоянный коэффициент.

В рамках метода наименьших квадратов искомая последовательность коэффициентов b_i определяется системой уравнений

$$\sum_{x=0}^K b_x \sum_{i=1}^N (i \cdot \tau)^{k+m} = \sum_{i=1}^N x_n \cdot (i \cdot \tau)^m, \quad (7)$$

где $m = 0, 1, \dots, K$.

Тренды сложной формы удаляются подбором многочленов высокого порядка, однако принимать значения степени $K > 3$ не рекомендуется.

7. Обобщенная структурно-логическая схема программного комплекса. Разработка пакета прикладных программ является наиболее трудоемким этапом моделирования методом ВКА. В связи с этим, представляется необходимым рассмотреть структуру и логику работы предлагаемого программного комплекса более подробно.

Разрабатываемое программное обеспечение решает задачу комплексного моделирования поверхностных физико–химических процессов, характерных для процессов создания структур микроэлектроники с учетом наличия на поверхности ряда дефектов.

В разработанном программном комплексе при моделировании рассматриваются следующие элементарные физико-химические процессы: 1) адсорбция; 2) десорбция; 3) поверхностная диффузия; 4) объемная диффузия.

Структурно-логическая схема разработанного программного комплекса представлена на рис. 2.

Р и с. 2. Структурно-логическая схема программного комплекса

Вычислительные блоки элементарных ФХП служат для определения вероятностей протекания ФХП и внесения изменений в состояние ячеек. Для определения реализующихся процессов вычислительные блоки используют генератор случайных чисел, способный генерировать случайные числа с равномерным, нормальным и экспоненциальным распределением вероятностей. Случайные числа используются для определения вариантов реализации процессов, выбора направления движения атомов или молекул, задания начальных пространственных распределений частиц и силовых полей различной физической природы. Так как генерация случайных чисел (величин), отвечающих требованиям конкретной теоретической модели, процесс весьма тонкий и сложный, то в практике моделирования методом ВКА используются псевдослучайные числа.

Блок обработки данных служит для организации последовательного взаимодействия всех ячеек ВКА с вычислительными блоками.

Блок создания ячеек выделяет память под ячейки ВКА и инициализирует их исходное состояние в соответствии с заданными начальными условиями. Для инициализации состояния ячеек он использует генератор случайных чисел.

Блок формирования параметров моделей процессов вносит изменения в работу вычислительных блоков при определении вероятностей реализации ФХП. Изменение параметров может производиться как перед началом работы программы, так и в процессе вычислительного эксперимента. В данной работе использовался метод вероятностного клеточного автомата. По умолчанию заданы следующие параметры ВКА:

- 1) трехмерная регулярная решетка кубического типа с размерами 50х50х255 ячеек;
- 2) каждая ячейка обладает набором параметров, приведенных в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Параметры ячейки ВКА

№	Наименование параметра	Примечание
1	Состояние ячейки	
2	Энергия активации процесса адсорбции	Вычисляется динамически
3	Энергия активации процесса десорбции	---/---
4	Энергия активации процесса диффузии	---/---
5	Температура	Для всех ячеек одна, задается сразу
6	Давление газа	---/---
7	Изменение энергии активации адсорбции при наличии дефекта типа Д1	---/---
8	Изменение энергии активации адсорбции при наличии дефекта типа Д2	---/---

В работе были рассмотрены дефекты следующих типов: адсорбированные атомы, выход на поверхность краевой дислокации, вакансии, примесные атомы. Эти дефекты были выбраны как наиболее широко распространенные из оказывающих существенное влияние на процессы формирования структур нано- и микроэлектроники. Кроме рассмотренных, могут задаваться и произвольные дефекты поверхности, путем изменения базовых энергий активации как в ячейках, соответствующих дефекту, так и соседних с ним ячейках.

8. Разработка алгоритмов. Можно выделить несколько основных алгоритмов, которые были необходимы для реализации предложенной модели. Это алгоритмы моделирования элементарных актов физико-химических процессов. Приведенные алгоритмы реализованы в блоке обработки данных. В качестве примера рассмотрим алгоритм моделирования элементарного акта поверхностной диффузии более подробно. Алгоритм моделирования элементарного акта диффузии приведен на рис. 3.

Последовательность выполняемых блоком действий имеет следующий вид:

- 1) после передачи управления блоку «Десорбция» (символ 1) определяется, имеется ли в ячейке атом или нет (символ 2);
- 2) если ячейка пуста, то происходит выход из блока (символ 7);
- 3) если в ячейке имеется атом, то, в зависимости от количества и типа соседей, определяется вероятность десорбции (символ 3);
- 4) генерируется случайное число Q в диапазоне от 0 до 1, которое определяет, может ли реализоваться десорбционный процесс на данном шаге (символ 4);
- 5) сравниваются числа Q и w (символ 5);
- 6) если $Q \geq w$, то десорбционный процесс не реализуется, и происходит выход из блока (символ 7);
- 7) если $Q < w$, то десорбционный процесс реализуется;
- 8) из текущей ячейки удаляется атом (символ 6);
- 9) происходит выход из блока (символ 7).

Р и с. 3. Алгоритм моделирования элементарного акта диффузии

9. Результаты моделирования. Как отмечалось выше, моделирование комплексных ФХП в рамках классических подходов чрезвычайно затруднено, а порой и просто невозможно. Метод ВКА позволяет моделировать указанные процессы и практически не накладывает никаких ограничений на количество и типы элементарных ФХП. Моделирование процессов формирования структур микроэлектроники, как правило, сопряжено с необходимостью комплексного рассмотрения весьма широкого круга индивидуальных ФХП. Последнее обстоятельство свидетельствует об эффективности применения метода ВКА при моделировании подобных процессов.

В качестве примера можно привести результаты моделирования процессов адсорбции и диффузии, идущих на поверхности с выходом краевой дислокации. Расчет проводился при значениях параметров модели, приведенных в табл. 2. На рис. 4 и рис. 5 приведены результаты моделирования рассмотренной системы.

Конечные результаты компьютерного моделирования могут быть представлены в различных формах, например, при больших размерах поля моделирования в виде локальных концентраций атомов различных типов.

Заключение. В работе рассмотрены вопросы компьютерного моделирования технологических процессов создания устройств нано и микроэлектроники.

В рамках проделанной работы разработаны базовые физико-химические принципы, алгоритмы и программные средства для моделирования методом ВКА процессов формирования элементов микроэлектроники в условиях воздействия внешних факторов.

Разработаны принципы построения вероятностного клеточного автомата для моделирования комплексных физико-химических процессов происходящих на реальных поверхностях. Представлены возможные геометрические структуры клеточного автомата.

Т а б л и ц а 2

Параметры моделирования

Наименование параметра	Величина параметра
Давление газа	100 кПа
Температура газов	400 К
Молярная масса	32 г/моль
Период колебаний адсорбированного атома	1 пс
Температура поверхности	500К
Энергия активации диффузии	0.05 эВ
Изменение энергии активации диффузии рядом с выходом краевой дислокации	0.01 эВ
Энергия активации адсорбции	0.25 эВ
Энергия активации десорбции	0.5 эВ
Изменение энергии активации адсорбции рядом с выходом краевой дислокации	0.2 эВ
Изменение энергии активации десорбции рядом с выходом краевой дислокации	0.1 эВ

Р и с. 4. Характерный вертикальный срез трехмерного поля моделирования на 500 шаге модели

Р и с. 5. Характерный вертикальный срез трехмерного поля моделирования на 5000 шаге модели

Создана обобщенная структурная схема программного продукта, реализующего методику моделирования комплексных физико-химических процессов происходящих на реальных по-

верхностях методом вероятностного клеточного автомата. Разработаны алгоритмы работы блоков клеточного автомата, моделирующих индивидуальные физико-химические процессы.

Создан программный комплекс, реализующий методику вероятностных клеточных автоматов для моделирования элементарных и комплексных физико-химических процессов, характерных для создания устройств нано- и микроэлектроники.

Представлены результаты компьютерного моделирования индивидуальных и комплексных технологических процессов, позволяющие выявить влияние технологических параметров на выходные характеристики микротехнологий.

Приведенные результаты исследований свидетельствуют о плодотворности направления компьютерного моделирования технологических процессов создания устройств наноэлектроники, связанного с вероятностным клеточным автоматом.

Показано, что проблематика широкого использования метода ВКА в научно-исследовательской практике обусловлена не трудностями его создания и дальнейшего развития как таковыми, а со сложностью определения исходных физико-химических параметров, используемых в моделях элементарных ФХП. Указанные трудности могут быть преодолены с помощью двух подходов, теоретического и экспериментального. Теоретический подход сопряжен с традиционными принципиальными трудностями, характерными для задач, связанных с анализом поведения микрочастиц в условиях воздействия внутриатомных силовых полей. Экспериментальный подход связан с постановкой широкого спектра экспериментальных исследований на атомно-молекулярном уровне. В этой связи, дальнейшее плодотворное развитие данной тематики представляется в сочетании обоих подходов.

В части дальнейшего развития работы по повышению практической эффективности метода ВКА, представляется интересным и многообещающим включение в методологию ВКА энтропийных методов анализа, в особенности для сложных (в атомно-молекулярном плане) систем.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ванаг В. К.* Исследование пространственно распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // *Успехи физических наук.* 1999. Т. 169. № 5. С. 481–505.
2. *Карпов Ю. Г.* Теория автоматов. СПб.: Машиностроение, 2003. 224 с.
3. *Гуртов В. А.* Твердотельная электроника. М.: Техносфера, 2005. 408 с.
4. Методы молекулярной динамики в физической химии / Сбор. статей под ред. Ю. К. Товбина. М.: Наука, 1996. 334 с.
5. *Бендат Д., Пирсол А.* Прикладной анализ случайных данных. М.: Мир, 1989. 540 с.

Поступила 31.07.2006 г.