

Секция «Высокопроизводительные вычисления и математическое моделирование»

Моделирование развития каскадов атомных смещений в кремнии методом классической молекулярной динамики

Забавичев Илья Юрьевич

Выпускник (специалист)

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: zabavichev.rf@gmail.com

Уменьшение топологических норм изделий микроэлектроники увеличивает их чувствительность к сбоям и отказам, вызванным воздействием отдельных ядерных частиц [1], что обуславливает актуальность моделирования процессов ионизации и дефектообразования в субмикронных полупроводниковых структурах при воздействии ионизирующих излучений.

В настоящее время существует широкий спектр методов моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе [2], которые можно разделить на 4 класса: квантово-механические методы «из первых принципов», методы классической молекулярной динамики, методы парных взаимодействий (алгоритмы Монте-Карло) и континуальные методы, основанные на законах тепломассопереноса в сплошной среде. Наиболее предпочтительным для моделирования представляется комбинация методов классической молекулярной динамики (для плотных кластеров радиационных дефектов) и Монте-Карло (для разреженных кластеров радиационных дефектов) на стадии формирования каскада смещений ($T < 10^{-12}$ с) с методами тепломассопереноса на стадии быстрого отжига радиационных дефектов ($T < 10^{-9}$ с).

В процессе формирования кластера радиационных дефектов можно выделить 4 характерные стадии [3]: баллистический участок (до 0,04 пс), в течение которого первичный атом отдачи движется практически без столкновений; участок термического расширения (от 0,04 до 0,2 пс), на протяжении которого число дефектов в кластере стремительно нарастает; стадия первичной стабилизации (от 0,2 до 0,5 пс), которая характеризуется резким уменьшением числа дефектов за счет рекомбинации близких пар Френкеля, и стадия быстрого отжига (от 0,5 пс), которая может длиться несколько наносекунд, сопровождаясь при этом плавным по сравнению со стадией первичной стабилизации уменьшением числа дефектов за счет отжига. Медленный темп рекомбинации дефектов на последней стадии объясняется термостимулированной диффузией дефектов в остывающем объемном полупроводнике, поэтому для адекватного описания последующего отжига необходим больший промежуток времени физического моделирования (от единиц секунд до нескольких часов).

Результаты работы могут быть использованы для оценки изменения процессов переноса носителей заряда в полупроводниковых материалах после радиационного воздействия.

Источники и литература

- 1) 1 Чумаков А. И. Действие космической радиации на ИС. М.: Радио и связь, 2004
- 2) 2. Калин Б. А. и др. Физическое материаловедение. Том 4. Физические основы прочности. Радиационная физика твердого тела. Компьютерное моделирование. М.: МИФИ, 2008
- 3) 3. И.Ю. Забавичев, А.А. Потехин, А.С. Пузанов, С.В. Оболенский, В.А. Козлов // Физика и техника полупроводников. – 2019. – Т. 53, № 9. – С. 1279-1284