

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Национальный исследовательский университет
Программа повышение конкурентоспособности ННГУ им. Н.И. Лобачевского
Стратегическая инициатива 7 «Достижение лидирующих позиций в области суперкомпьютерных технологий и высокопроизводительных вычислений»

Основные образовательные программы
Радиофизика, Информационные технологии,
Информационная безопасность телекоммуникационных систем

Учебно-методическая разработка по дисциплинам
Электроника и схемотехника. Физическая электроника

Е.В.Волкова, С.В.Оболенский

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО
В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ
КЛАСТЕРОВ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ.
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Нижний Новгород,
2014 год

УДК 53.082, 538.95

ББК 32.85

В67

В67 Волкова Е.В., Оболенский С.В. Метод Монте-Карло в задачах моделирования структуры кластеров радиационных дефектов. Применение технологии высокопроизводительных вычислений. Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2014. – 81.

Данное пособие является продолжением цикла учебных пособий по радиационно-стойкой полупроводниковой электронике и содержит информацию о возможностях анализа структуры сложных радиационных дефектов. Обсуждаются особенности использования метода Монте-Карло, который на сегодняшний день является наиболее подходящим для применения технологии высокопроизводительных вычислений.

Пособие предназначено для студентов, изучающих курсы «Электроника и схемотехника» и «Физическая электроника».

УДК 53.082, 538.95

ББК 32.85

© Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	5
Глава 1. Физические процессы образования кластеров радиационных дефектов и программная реализация метода Монте-Карло	6
1.1. Дефектообразование и ионизация в полупроводниковых материалах и субмикронных полупроводниковых структурах.....	6
1.1.1. Источники радиационного излучения.....	7
1.1.2. Ионизация полупроводников при радиационном воздействии. Функция распределения электронов, ионизированных при радиационном воздействии	9
1.2. Применение метода Монте-Карло для численного моделирования движения первичных атомов в полупроводниковых структурах.....	15
Глава 2. Параллельные вычисления и особенности их реализации при использовании метода Монте-Карло для анализа структуры кластеров радиационных дефектов	25
2.1. Описание пакета программ TRIM (SRIM), реализующего метод Монте-Карло.....	25
2.1.1 Англоязычные термины и обозначения	25
2.2.2 Порядок использования пакета программ (ППП) TRIM (SRIM).....	27
2.3. Преимущество технологии параллельных вычислений	32
2.4. Особенности технологии параллельных вычислений при проведении расчетов структуры кластеров радиационных дефектов методом Монте-Карло.....	38

Глава 3. Примеры задач анализа структуры кластеров радиационных дефектов, решаемые с использованием высокопроизводительных вычислений.....	43
3.1. Структура кластеров радиационных дефектов в GaAs и Si при облучении быстрыми нейтронами.....	43
3.1.1. Неоднородности распределения дефектов в кластере.....	46
3.1.2. Неоднородности распределения субкластеров радиационных дефектов при нейтронном облучении.....	50
3.1.3. Алгоритм анализа топологии радиационных дефектов, образующихся при воздействии нейтронного облучения различных энергий.....	52
3.1.4. Расчет распределений размеров СКРД и расстояний между ними при воздействии нейтронов различных энергий.....	59
3.1.5. Расчет фрактальной размерности кластеров радиационных дефектов, образующихся в GaAs при нейтронном облучении.....	63
3.1.6. Стабилизация кластера радиационных дефектов в GaAs.....	64
3.2. Характеристики области пространственного заряда СКРД в GaAs..	66
Заключение.....	74
Литература.....	75
Контрольные вопросы	79

ВВЕДЕНИЕ

Учебное пособие предназначено для студентов и читателей, не являющихся специалистами в области физики полупроводников и параллельных вычислений, но знакомых с теми или иными особенностями методов и схем компьютерного моделирования, а также с азами методов программирования. Для чтения пособия также необходимы азы знаний по физике взаимодействия быстрых частиц и квантов с твердыми телами.

В пособии обсуждаются вопросы применения технологии высокопроизводительных вычислений для решения физических задач моделирования процессов возникновения кластеров радиационных дефектов в полупроводниковых структурах современных диодов, транзисторов и интегральных схем. Актуальность выбранной тематики связана с бурно развивающейся отраслью знаний, посвященной проектированию радиационно-стойкой электроники для космических аппаратов и иной специальной техники. Приведены примеры результатов расчетов и обсуждены особенности построения параллельных схем вычислений при проведении моделирования с использованием метода Монте-Карло – наиболее удобного для применения процедуры высокопроизводительных вычислений. Подобран список литературы [1-30] содержащий основные монографии и публикации как по тематике вычислений структуры радиационных дефектов, так и по тематике радиационной стойкости полупроводниковых материалов и приборов на их основе. Вопросы высокопроизводительных вычислений можно изучать по источникам [31-46].

Пособие предназначено для студентов, изучающих курсы «Электроника и схемотехника» и «Физическая электроника». Выпуск пособия поддержан программой повышения конкурентоспособности ННГУ, мероприятие СИ7: «Достижение лидирующих позиций в области суперкомпьютерных технологий и высокопроизводительных вычислений».

ГЛАВА 1. ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Известно, что воздействие радиации, помимо ионизации полупроводника, приводит к образованию в нем различного рода структурных дефектов [1-3]. В случае воздействия высокоэнергетических частиц, например, при облучении быстрыми нейтронами, энергия, передаваемая атому материала, значительно превышает минимальную, необходимую для смещения атома из узла решетки. При этом первично смещенный атом способен сам создать целый каскад вторичных, третичных и т.д. атомов. Таким образом, при радиационном воздействии, кроме точечных дефектов, могут образовываться так называемые разупорядоченные области или кластеры радиационных дефектов (КРД) [4-21], которые влияют на характер протекания тока в полупроводниках [22, 23] и могут привести к отказу полупроводниковых приборов [24-28].

1.1. Дефектообразование и ионизация в полупроводниковых материалах и субмикронных полупроводниковых структурах

Параграф посвящен разработке модели кластера радиационных дефектов (КРД) как непрозрачного или частично прозрачного (для электронов с высокой энергией) включения. Для последующего использования данных при моделировании протекания тока в полупроводнике с радиационными дефектами необходимо получить зависимость поперечного сечения рассеивающего центра (т.е. КРД) от энергии носителей заряда. Имеющиеся в литературе аналитические оценки должны быть дополнены и уточнены, исходя из появившихся в последние годы экспериментальных данных и результатов расчета по методу Монте-Карло [29], имеющему более высокую точность. Особое внимание следует обратить на внутреннюю структуру кластера. Поскольку быстрые частицы могут передавать атомам вещества энергии до нескольких мегаэлектронвольт,

то размеры КРД могут быть значительно больше, чем характерные пространственные параметры электронно-дырочного газа (длины Дебая, релаксации энергии и импульса и т.д.). Вместе с тем, такие включения по сути являются фракталами типа дерева Пифагора (т.е. это ветвящиеся структуры, образованные первичными, вторичными и последующими поколениями атомов в каскаде столкновений). В современных приборах, где энергия носителей заряда может достигать ~ 1 эВ, протяженные кластеры дефектов распадаются на цепочку независимых, непрозрачных для горячих носителей заряда включений - субкластеров радиационных дефектов (СКРД). Именно СКРД являются рассеивающими центрами для электронов с высокой энергией. Поэтому следует оценить количество СКРД внутри КРД, расстояния между ними и их характерные размеры.

Другим важным моментом при моделировании радиационного воздействия на полупроводниковые приборы является учет процесса разогрева электронного газа ионизирующим излучением (ИИ). Поскольку размеры современных полупроводниковых приборов меньше, чем длина релаксации энергии носителей заряда, то появившиеся за счет ионизации в активной области прибора свободные электроны не успевают остыть до того, как они втянутся электрическим полем в контакт. Поэтому в момент радиационного облучения электронный газ в полупроводниковой структуре разогревается, что может влиять на характеристики прибора сильнее, чем дополнительная ионизация материала. Для моделирования подобных эффектов необходимо знать функцию распределения ионизованных электронов по энергии.

1.1.1. Источники радиационного излучения

К источникам радиации относят [1]: ядерный взрыв (нейтроны и гамма-кванты), ядерные энергетические установки (нейтроны и гамма-кванты), космическое пространство (протоны и электроны), рентгеновские и гамма-

установки, а также ускорители электронов и протонов. Для описания излучения используют понятия интегрального потока частиц (флюенс) F , част·см⁻², и плотности потока частиц Φ , 1/(см²·с). Для электромагнитного излучения - поглощенную дозу, D , Гр (10⁴ эрг/г) и мощность поглощенной дозы P , Гр/с.

Сводные данные об уровнях излучений, генерируемых различными источниками, приведены в таблице 1. Кроме указанных источников, быстрые частицы могут генерировать ускорители частиц, самым мощным из которых является Большой адронный коллайдер, т.е. ускоритель с встречными пучками частиц, позволяющими получить максимальное энергосодержание при столкновении. При участии России, США и крупных европейских стран коллайдер был запущен в 2008 г. в Швейцарии (ЦЕРН). На нем проводятся эксперименты с участием российских ученых.

Другим мощным источником полезных радиационных излучений в перспективе может стать управляемый термоядерный реактор ITER, который строится совместными усилиями многих стран, в том числе и России, во французском городе Кадараш. На нем предполагается отработать технологию преобразования энергии частиц, получаемой в термоядерной реакции, в электрическую энергию, аналогично атомным станциям.

Таблица 1. Сводные данные об уровне излучения космического пространства, ядерных установок и ядерного взрыва [1]

<i>Источник излучения</i>	<i>Вид излучения</i>	<i>Энергия, МэВ</i>	<i>Плотность потока, част./ (см²·с)</i>	<i>Мощность дозы, Гр/с</i>
Космическое пространство	протоны	0,001...700	до 10 ⁶	—
	Электроны	0,02...10	до 10 ⁹	—
Ядерные установки	Нейтроны	0...8	10 ³ ...10 ⁸	—
	γ-кванты	0,01...10	—	До 10 ¹¹
Ядерный взрыв	Нейтроны	0...14	10 ¹⁸ ...10 ²¹	—
	γ-кванты	0,01...10	—	До 10 ¹²

1.1.2. Ионизация полупроводников при радиационном воздействии.

Функция распределения электронов, ионизированных при радиационном воздействии

При воздействии любого вида радиационного излучения на полупроводниковый материал в конечном итоге часть энергии тратится на ионизацию. При моделировании радиационного воздействия на субмикронные приборы разогрев электронно-дырочного газа необходимо учитывать. В связи с этим важно провести оценку функции распределения электронов, появившихся в зоне проводимости при ионизации материала гамма-излучением, и получить значение средней энергии ионизованных носителей заряда. В дальнейшем эта информация понадобится для учета разогрева электронного газа в уравнении баланса энергии [30] и при вычислении электрического тока в субмикронных полупроводниковых структурах в условиях радиационного облучения, что будет подробно рассмотрено в отдельном учебном пособии.

Важнейшими характеристиками ионизационных процессов в веществе являются средняя энергия ионизации и удельные потери энергии. В [2-5] приведено выражение для определения средней энергии ионизации W_i в зависимости от ширины запрещенной зоны (W_g), которое достаточно хорошо согласуется с экспериментальными результатами:

$$W_i = 2,67W_g + 0.87 \text{ (эВ)}. \quad (1.1)$$

При взаимодействии гамма-квантов с веществом, в соответствии с существующей теорией [4-7], в области средней энергии фотонов W_γ (примерно до 10 МэВ) наиболее важное значение для субмикронных полупроводниковых структур имеют [9-14]:

- когерентное рассеяние связанными электронами, при котором фотон отклоняется на небольшой угол от своего первоначального направления без потери энергии;

- фотоэлектрическое поглощение, при котором фотон поглощается атомом и освобождается фотоэлектрон, а находящийся в возбужденном состоянии атом испускает квант характеристического излучения или Оже-электрон;
- некогерентное (комптоновское) рассеяние, при котором фотон рассеивается атомным электроном с передачей электрону части энергии, достаточной, чтобы вырвать его с оболочки атома: таким образом, этот процесс сопровождается появлением свободных (комптоновских) электронов;
- поглощение фотона и образование двух частиц - электрона и позитрона, которые ионизируют среду, причем часть их энергии тратится на тормозное излучение; замедлившись, позитрон взаимодействует с одним из электронов среды с образованием двух фотонов аннигиляционного излучения.

Вклад от *когерентного рассеяния* в сечение взаимодействия σ_γ составляет 2...3% при $W_\gamma = 10$ кэВ, возрастает до 6...8% при 0,1 МэВ и быстро падает при дальнейшем увеличении энергии W_γ [4, 8]. Учитывая малость $\sigma_{\text{cог}}$ по сравнению с сечением фотоэлектрического поглощения, процессами когерентного рассеяния можно пренебречь.

Качественная зависимость функции сечения *фотоэлектрического поглощения* $\sigma_\tau(W_\gamma, Z_A)$ для нерелятивистской области энергий ($W_\gamma \ll 2m_0c^2$) дается приближенной формулой Гайтлера [5] :

$$\sigma_\tau = 1,25 \cdot 32\sqrt{2}\pi r_e^2 (m_0c^2)^{7/2} Z_A^5 / (3 \cdot 137^4 W_\gamma^{7/2}), \quad (1.2)$$

где $r_e = q^2 / (m_0c^2) = 2,82 \cdot 10^{-13}$ см - классический радиус электрона; $m_0c^2 = 0,511$ МэВ - энергия покоя электрона; Z_A - атомный номер элемента. Как видно из приведенных формул, $\sigma_\tau(Z_A) \sim Z_A^5$ и убывает с ростом энергии как $W_\gamma^{-7/2}$.

Комптоновское рассеяние гамма-квантов имеет место в том случае, если энергия падающего фотона намного превышает энергию связи электрона в атоме. Поперечное сечение комптоновского рассеяния определяется формулой [4]:

$$\sigma_c = \sigma_0 \left\{ \frac{1}{1-w'} + 1 - w' + \frac{w'}{\gamma'^2(1-w')} \left[\frac{w'}{(1-w')} - \gamma' \right] \right\}, \quad (1.3)$$

где $w' = T_e/W_\gamma$; $\gamma' = W_\gamma/m_0c^2$; $\sigma_0 = \pi r_e^2 Z_A m_0 c^2 / W_\gamma^2$; r_e - классический радиус электрона; Z_A - атомный номер вещества, T_e - энергия атома.

Процесс *образования электронно-позитронной пары* происходит в кулоновском поле ядра. При этом энергия отдачи ядра незначительна, и образование пары может наблюдаться при энергии гамма-квантов, превышающей суммарную энергию покоя электрона и позитрона $2m_0c^2 = 1,02$ МэВ. Вероятность такого процесса становится существенной при энергиях гамма-квантов выше 3...6 МэВ.

В силу малой массы электрона траектория его движения носит весьма запутанный характер, поэтому ионизация объемного полупроводникового материала достаточно однородна.

Как указано выше, гамма-кванты, попадая в полупроводник, порождают один или несколько быстрых электронов, которые в свою очередь ионизируют вещество. Для энергий гамма-квантов порядка 1 МэВ главным механизмом ослабления первичного пучка является эффект Комптона. Распределение первичных электронов по энергии представляет собой сплошной спектр от 50 кэВ до 1 МэВ, причем электроны с энергией около 300 кэВ наиболее вероятны. Приблизленно вычислим функцию распределения электронов по энергии.

Заряженные частицы при прохождении через вещество испытывают рассеяние, торможение и поглощение. Постепенно скорость частицы из-за рассеяния уменьшается до величины порядка скоростей атомных электронов, и электрон может быть захвачен атомом вещества. Неупругие и упругие столкновения быстрых электронов с атомами могут быть рассмотрены с помощью борновского приближения, (скорость падающего электрона велика по сравнению

со скоростью атомных электронов, равной приблизительно 10^6 м/с, что соответствует 3 эВ), что и было сделано Бете [5]. Для случая малых энергий падающего электрона задача решена Ванье [5]. В результате, для больших углов рассеяния при неупругом столкновении получается резерфордовское сечение рассеяния на ядре атома. В приближении, когда скорость вторичного электрона много меньше скорости первичного, обменные эффекты можно не учитывать и сечение рассеяния имеет вид [5]

$$d\sigma = Z \left(\frac{e^2}{W_e} \right)^2 \frac{d\theta}{\theta^4}, \quad (1.4)$$

где W_e - энергия первичного электрона; θ - угловое отклонение; Z - атомное число; q - заряд электрона. При упругом столкновении сечение рассеяния имеет вид:

$$d\sigma = \left(\frac{Zq^2}{4W_e} \right)^2 \frac{d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.5)$$

Итак, первичная частица, которой является электрон с достаточно большой энергией, ионизирует атом, вызывая тем самым появление вторичных электронов. Каскадный процесс развивается до тех пор, пока энергия конечных продуктов не станет меньше энергии ионизации. Однако, как показано в [4], энергия вторичных электронов имеет величину порядка нескольких электрон-вольт, а значит образование «третичных» электронов маловероятно. Таким образом, реально каскадный процесс состоит всего из нескольких поколений электронов. Оценим количество быстрых электронов в полупроводнике при облучении потоком гамма-квантов. Для мощности дозы гамма-квантов P концентрация ионизированных носителей в GaAs составляет [25]

$$n = 7,1 \cdot 10^{13} P \tau, \quad (1.6)$$

где τ - время жизни.

Для $\tau=10$ нс и $P=10^9$ Гр/с концентрация электронно-дырочных пар составляет $6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, т.е. порядка 10...50% от концентрации носителей в канале

полевого транзистора. В тоже время концентрация первичных электронов примерно на 3...5 порядков меньше, а сами они не принимают участия в токе, что позволяет не учитывать их в функции распределения.

Теперь более точно рассчитаем среднюю энергию вторичных электронов, которые из-за своей более высокой энергии, приведут к изменению картины рассеяния носителей заряда. Будем предполагать, что каскадный процесс развивается в однородном полупроводнике и последовательные ионизационные столкновения статистически независимы. При многократном рассеянии закон распределения плотности потока частиц по углу отклонения выражается гауссовским законом ошибок [7]:

$$n(\theta) = \frac{n_o}{2\pi\lambda^2} e^{-\frac{\theta^2}{2\lambda^2}}. \quad (1.7)$$

В частности, для электронов [7]

$$\lambda = \frac{8000}{\varphi} \frac{5,12 \cdot 10^5 + \varphi}{10,24 \cdot 10^5 + \varphi} Z \sqrt{\frac{\rho x}{A}}, \quad (1.8)$$

где x - толщина слоя, мкм; ρ - плотность вещества, г/см³; φ - начальная энергия электрона, эВ; A - атомный вес; Z - атомный номер, λ - длина свободного пробега. Процесс движения первичного электрона в кристалле полупроводника рассчитывается с использованием статистического метода Монте-Карло [8]. Для определения максимального и минимального значений энергии, которая сообщается атому при неупругом взаимодействии, используются эмпирические данные для пробегов электрона в веществе [10].

Объем области, в которой появляются вторичные электроны, необходимый для вычисления функции распределения генерированных носителей, рассчитывается по методу «ершика» [4] то есть, предполагается, что траектории движения вторичных электронов перпендикулярны траектории движения первичного электрона [7]. Для больших энергий налетающий электронов (~ 100...200 кэВ при облучении гамма-квантами) это физически оправдано, поскольку составляющая силы Кулона, действующей со стороны первичной частицы на вторичную, параллельная траектории движения первичной частицы,

половину времени взаимодействия частиц направлена в одну сторону, а затем меняет направление на противоположное. Объем области рассчитывается как объем фигуры вращения (в простейшем случае конуса), высота которой равна длине пробега первичной частицы, а диаметр основания определяется расстоянием, которое пройдет вторичный электрон за время между первым и последним актами ионизации.

В результате проведенных расчетов получено, что функция распределения вторичных электронов описывается экспоненциальной зависимостью (рис. 1.). Этот результат согласуется с данными теоретических работ [4] и экспериментальных измерений спектра вторичных электронов, описанных в [8].

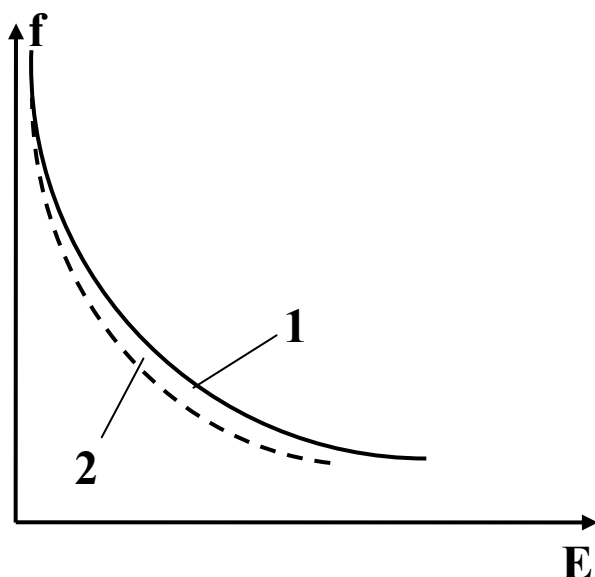


Рис. 1. Распределения электронов по энергии: максвелловское распределение – 1; функция распределения ионизованных электронов по энергии -2. Энергия отсчитывается от дна зоны проводимости

Максимальное отличие не превышает 20%, что позволяет в первом приближении, использовать максвелловскую функцию для описания энергетического распределения ионизированных электронов. Средняя энергия вторичных носителей, отсчитываемая от дна зоны проводимости, равна 0,24 эВ и в интервале энергий первичных электронов от 50 кэВ до 1 МэВ остается примерно постоянной, что согласуется с данными [8].

1.2. Применение метода Монте-Карло для численного моделирования движения первичных атомов в полупроводниковых структурах

Основы теоретических представлений о процессе возникновения радиационных дефектов изложены в [9-21].

Исходным положением теории радиационных нарушений в твердом теле является предположение об образовании первичных дефектов типа пары Френкеля в результате столкновения движущейся частицы с атомом вещества. Считается, что атом всегда смещается, приобретая энергию T_A , которая больше некоторой пороговой энергии смещения атома (T_d). Экспериментальные значения T_d для GaAs по данным различных авторов лежат в диапазоне 9...20 эВ, хотя в последние годы утвердилось мнение о том, что эта энергия 9...10 эВ [29]. Для Si $T_d = 15...20$ эВ [16]. При столкновении с нейтроном атому вещества передается кинетическая энергия, определяемая следующими выражениями [10]:

$$T_A = \frac{4M_n M_A}{(M_n + M_A)^2} T_n \sin^2(\theta/2),$$
$$T_{A \max} = \frac{4A}{(1+A)^2} T_n,$$
(1.9)

где M_n , M_A - масса нейтрона и атома; T_n - кинетическая энергия бомбардирующего нейтрона; θ - угол отдачи между направлением движения нейтрона до и после столкновения, A – атомный вес.

Рассеяние быстрых нейтронов в твердом теле является анизотропным и происходит преимущественно в направлении распространения частиц. В такой ситуации средняя энергия, передаваемая атому вещества, составит

$\langle T_A \rangle = k_T \frac{T_{A \max}}{2}$, где k_T - поправочный коэффициент, учитывающий анизотропию

рассеяния быстрых нейтронов. При этом второй множитель $T_{A \max}/2$ представляет собой среднюю энергию, которая передавалась бы атому в изотропном случае. Значения поправочных коэффициентов для веществ с атомной массой 9...63 находятся в пределах $k_T = 0,6...0,8$ [10].

На рис. 2 представлены энергетические спектры нейтронов импульсного ядерного реактора (с $\tau_u=2,5$ мс и средней энергией нейтронов 1 МэВ) и типовой спектр ядерного взрыва [1]. На рис. 3 приведены пересчитанные с помощью выражения (1.9) спектры первичных атомов Ga в GaAs и Si в Si, получивших энергию в результате взаимодействия с нейтроном. Учет зависимости сечения рассеяния нейтронов на ядрах Ga и As от энергии нейтрона несколько изменяет форму спектра в области энергий, больших 1 МэВ, где сечение рассеяния уменьшается.

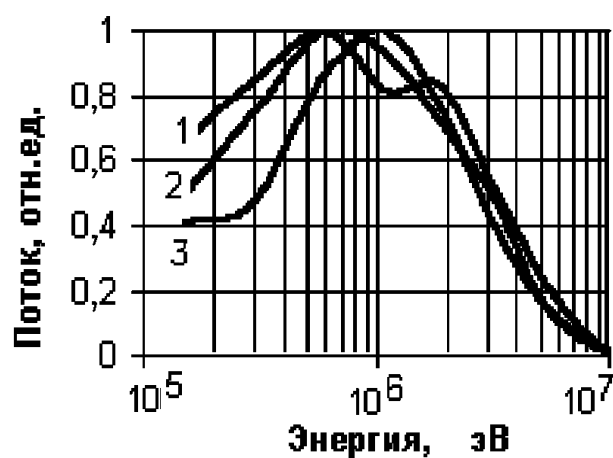


Рис. 2. Энергетические спектры нейтронов ядерного реактора «ГИР-2» [2]: спектр после конвертера нейтронного излучения - 1; спектр без конвертера нейтронного излучения - 2; спектр нейтронного излучения ядерного взрыва - 3

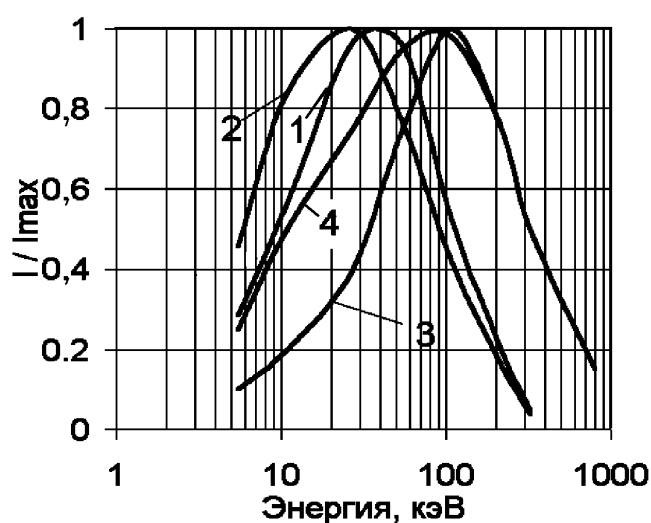


Рис. 3. Энергетические спектры первичных атомов Ga в GaAs и Si в Si, получивших энергию в результате взаимодействия с нейтронами: спектра ядерного взрыва (GaAs) - 1; спектра ГИР (GaAs) - 2; спектра ядерного взрыва (Si) - 3; спектра ГИР (Si) - 4

Хотя вероятность передачи большого количества энергии вторичному атому от первичного и невелика, практически в каждом каскаде столкновений, возникающем при облучении нейтронами Si и GaAs, будет происходить несколько подобных событий. Поэтому распределение дефектов в каскаде столкновений будет неоднородно – вторичные атомы, получившие большую энергию, образуют субкластер точечных дефектов. Поскольку энергия, переданная вторичному атому, меньше, чем у первичного, длина пробега вторичных атомов будет составлять лишь некоторую часть от пробега первичного атома, а расстояние между субкластерами может превосходить их размер. При рассмотрении движения электронов в облученном полупроводнике необходимо учитывать подобные неоднородности в распределении дефектов. Для детального анализа структуры разупорядоченных областей предлагается использовать метод Монте-Карло.

Цель расчетов – оценка характерных размеров кластеров и субкластеров в наиболее широко используемых полупроводниковых соединениях. На основании этих данных далее мы оценим временные и пространственные масштабы характерных процессов релаксации кластера и сопоставим их с известными из литературы данными. В итоге результаты проведенных расчетов позволят нам определить сечения рассеяния горячих электронов на субкластерах радиационных дефектах.

Для расчета распределения радиационных дефектов в структуре при моделировании нейтронного воздействия рассматривается процесс движения атома отдачи, получающего энергию при столкновении с нейтроном. Для моделирования движения атома в веществе используется программа, которая, как и другие программы моделирования методом Монте-Карло, учитывает поведение большого числа атомов в мишени. Траектория каждого атома начинается с введения его положения, направления движения и энергии. Затем прослеживается последовательность столкновений с атомами мишени, а между столкновениями свободный пробег атома предполагается прямолинейным. На пути каждого свободного пробега энергия частицы уменьшается на величину электронных

потерь энергии, а затем, после столкновения, - на так называемые ядерные, или упругие, потери энергии, т. е. на величину энергии, переданной атому мишени при столкновении. Если атом мишени получает энергию, которая превышает предварительно заданное значение, то его называют вторичным атомом отдачи и его поведение прослеживается таким же образом, как и поведение налетающего. Это же остается справедливым для любых атомов отдачи последующих поколений. Траектория атома отдачи обрывается, если его энергия уменьшается до предварительно заданного значения, либо если частица выходит за пределы мишени.

Предполагается, что мишень аморфная, с хаотическим расположением атомов. Это означает, что любыми свойствами, связанными с выделенным направлением в кристаллической решетке, пренебрегали. Не учитывался эффект каналирования, который может стать существенным при низкотемпературном облучении малыми дозами, когда часть атомов может устремляться через открытые каналы (плоскостные или осевые) вдоль определенных направлений кристаллической структуры. Наибольший эффект достигается в случае облучения легкими атомами кристалла из тяжелых атомов.

Поскольку по порядку величины межатомные расстояния одинаковы для всех элементов, то «склонность» атомов кристалла к каналированию определяется потенциалом взаимодействия налетающего атома с атомом мишени. Именно поэтому каналирование наиболее важно для легких атомов, а его вероятность убывает с ростом атомного номера, Z , как Z^2 [23]. Ниже будут рассмотрены элементы и соединения элементов средней части таблицы Менделеева (Ge, SiGe, Si GaN), а особое внимание будет уделено GaAs, поэтому погрешность, связанная с пренебрежением каналированием, не велика.

Подобно теории переноса, расчет методом Монте-Карло основан на так называемой модели парных столкновений, но поведение налетающего атома определяется рядом последовательных парных столкновений с атомами мишени. Это допущение может не соблюдаться при очень низких энергиях, когда заметное рассеяние атомов происходит даже на большом удалении от ядер ато-

мов мишени. В этом случае атом может взаимодействовать одновременно более чем с одним атомом мишени и раздельное рассмотрение таких столкновений с очень малым свободным пробегом между ними может привести к существенной ошибке. Тот факт, что при очень низких энергиях взаимодействие подчиняется потенциалу твердых шаров, говорит в пользу модели последовательных парных столкновений. Из практики использования модели парных столкновений следует, что существует вполне удовлетворительное согласие с экспериментальными данными даже для атомов отдачи чрезвычайно низких энергий, которые встречаются в каскадах столкновений.

Пороговая энергия смещения атомов из узлов кристаллической решетки в общем случае зависит от направления движения первичного атома относительно кристаллографических направлений решетки и может колебаться от 10 до 40 эВ (и даже более 100 эВ строго в некоторых направлениях). В силу усредняющего характера процесса образования каскада смещений, а также из-за тепловых колебаний решетки (интерес представляет диапазон комнатных температур) реально эта энергия имеет величину от 10 до 20 эВ [13]. Иными словами, влияние упорядоченности кристаллической решетки не велико.

Кроме перечисленных выше эффектов в кристаллическом веществе при облучении могут возникать цепочки фокусированных столкновений (фокусиров). Как показывает теория Гибсона-Виньярда, большее влияние на развитие каскада фокусы будут оказывать в тяжелых материалах [13]. Характеризующая этот процесс энергия фокусировки изменяется от ~ 10 эВ в легких материалах до $\sim 10^3$ эВ в тяжелых, поэтому процесс имеет смысл учитывать начиная, например, с Си, у которого эта величина по разным оценкам составляет от 40 до 70 эВ [13]. Таким образом, для рассматриваемых нами полупроводниковых кристаллов этим эффектом можно пренебречь.

Используем так называемую универсальную функцию экранирования Φ , которая была выбрана на основании эмпирических данных и расположена среди обычно используемых функций экранирования [29] (рис. 4). Потенциал взаимодействия описывается формулой:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a), \quad \Phi(r/a) \approx \exp(-k \cdot (r/a));$$

$$a = 0,8854 + 0,0529 / (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}),$$
(1.10)

где Z_1 и Z_2 - соответственно атомные номера налетающего атома и мишени, q – абсолютная величина заряда электрона, a – радиус экранирования. Диапазон применимости подобного потенциала взаимодействия 1 кэВ...1 МэВ [29]. В зависимости от диапазона значений r/a показатель k изменяется в пределах 0,35...0,55.

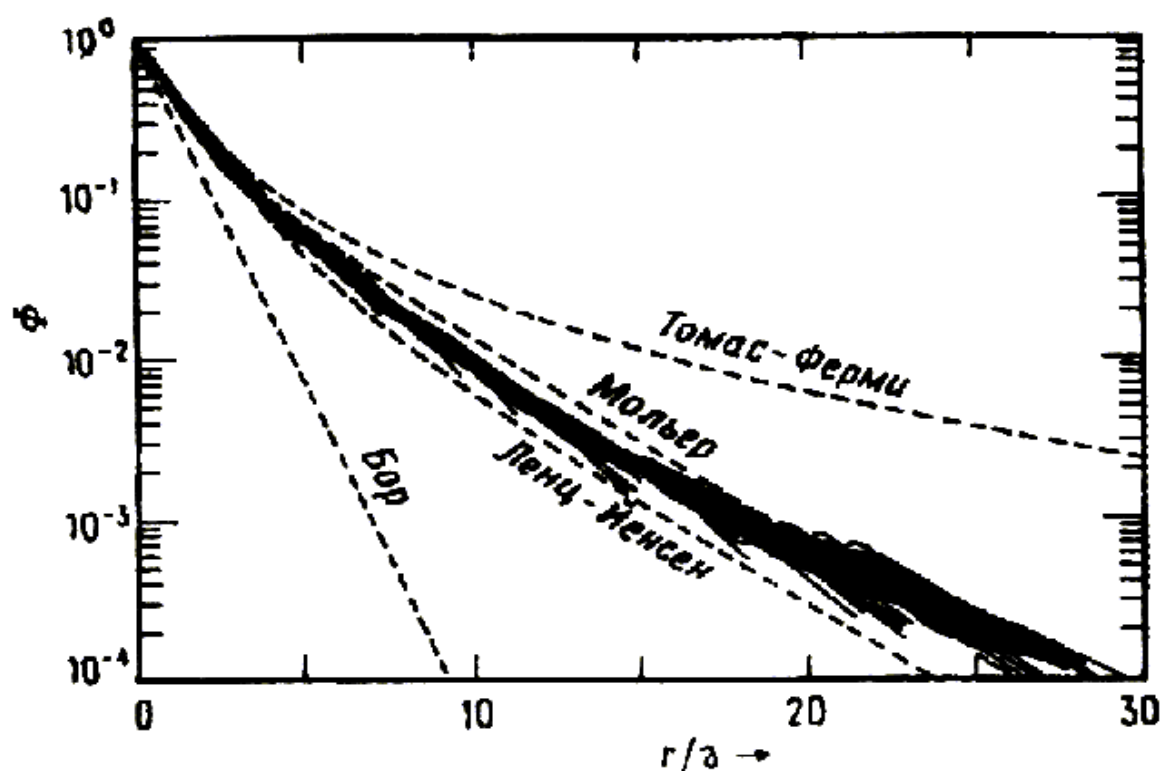


Рис. 4. Функция экранирования Φ для 500 комбинаций атом-мишень (жирная линия) [26]. Для сравнения штриховыми линиями показаны другие распространенные потенциалы взаимодействия

Как было показано выше, первичные атомы при взаимодействии с нейтронами получают энергию от 20 до 200 кэВ для GaAs и от 50 до 400 кэВ для Si. В силу того, что генерация вторичных и последующих поколений атомов происходит в тех же самых материалах, что и первичные атомы, то атомные веса взаимодействующих атомов имеют одинаковые значения. Последнее

обуславливает максимально возможную передачу энергии от налетающего атома атому мишени, в среднем составляющую половину от энергии налетающего атома. Поэтому подобные каскады столкновений будут характеризоваться высокими энергиями вторичных и последующих поколений атомов в каскаде. Поскольку длина пробега атомов спадает с уменьшением энергии нелинейно, то учет длин пробега 5...7 поколений атомов в каскаде (энергия которых еще больше 1 кэВ, что обуславливает высокую точность при расчете длины пробега) позволяет рассчитывать размеры каскада и субкластеров достаточно точно.

Функция экранирования, приведенная на рис. 4, хорошо совпадает с более, чем сотней экспериментально определенных потенциалов, вполне реалистично определяет потенциал отталкивания и хорошо аппроксимируется:

$$\Phi = 0,182 \cdot \exp(-3,2x) + 0,51 \cdot \exp(-0,9423x) + 0,28 \cdot \exp(-0,429x) + 0,0282 \cdot \exp(-0,2016x),$$

$$x = r/a.$$

При высоких энергиях все заметные отклонения и передачи энергии происходят при достаточно близких столкновениях, когда кулоновский потенциал только немного экранирован. В этом случае существенная экономия вычислительных ресурсов достигается путем использования потенциала, изменяющегося от кулоновского до потенциала вида $r^{-1,5}$ и далее до r^{-2} , для которого угол отклонения и передаваемые энергии рассчитываются простым аналитическим способом. Отметим, что эта особенность крайне важна именно в случае применения технологии параллельных вычислений, так как указанное приближение «работает» при расчете каждой пары сталкивающихся атомов. С точки зрения программного кода это означает, что данная формула используется в самом внутреннем цикле программы, вычислительные процедуры которого крайне важно оптимизировать для снижения объема вычислений и ускорения расчетов, так как соответствующие действия повторяются максимальное количество итераций.

Угол отклонения ψ траектории иона в лабораторной системе координат для известного угла рассеяния θ в системе центра масс рассчитывается по формуле:

$$\psi = \arctg \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{M_1}{M_2}}. \quad (1.11)$$

Для определения нового направления движения иона в трехмерном пространстве кроме полярного угла ψ необходимо задать азимутальный угол θ , который для аморфных материалов выбирается случайным образом в области значений между 0 и 2π .

Для тщательного анализа углов отклонения и переданных энергий используется соотношение между поперечным сечением взаимодействия с атомами мишени и длиной среднего свободного пробега:

$$\pi P_{max}^2 L = 1/N. \quad (1.12)$$

где P_{max} – радиус сечения рассеяния, L – длина среднего свободного пробега, N – число соударений.

Получить действительную функциональную зависимость сечения от параметров материала мишени с учетом энергии налетающей частицы достаточно сложно, однако можно выразить ее аналитической функцией. При очень низких энергиях критерий включения небольших углов отклонения является наиболее жестким и определяет P_{max} , тогда как при высоких энергиях максимальный параметр столкновения обусловлен минимально переданной энергией T_{min} . В случае распыления T_{min} выбирается равной поверхностной энергии связи E_s .

Для каждого столкновения параметр столкновения и азимутальный угол рассчитываются с помощью случайных чисел R_n ($0 < R_n < 1$) следующим образом:

$$P = \sqrt{R_n} P_{max}, \quad \theta = 2\pi R_{n+1}. \quad (1.13)$$

Если при очень высоких энергиях длина среднего свободного пробега L становится чрезмерно большой, то производится независимая проверка. Электронные потери энергии на длине свободного пробега не должны превышать 5% энергии иона. Если это происходит, то длина свободного пробега иона должна быть соответственно уменьшена.

Длину первого свободного пробега требуется умножить на случайное число $0 < R_n < 1$ для того, чтобы переданные энергии были равномерно распределены в поверхностной области.

После того как ион (или атом отдачи) переместился на длину свободного пробега вдоль новой траектории в положение с координатами x, y, z , вводят два случайных числа, определяющих параметр столкновения P и азимутальный угол θ . На основании этих данных рассчитывают положение следующего атома мишени и проверяют, где он находится - внутри одного из слоев, перед мишенью или за ней. В двух последних случаях ион или атом отдачи считается движущимся без отклонения или ядерных потерь энергии, не сталкиваясь с атомами мишени. (Если ион или атом отдачи уходит с поверхности, то он становится кандидатом в отраженные или прошедшие через данный слой мишени ионы или распыленные частицы). Если слой мишени определен, то в качестве партнера для следующего столкновения выбирается атом из этого слоя.

Выбор атомов мишени производится с помощью случайных чисел; при этом предполагается, что вероятность столкновения с атомом каждого вида пропорциональна его стехиометрическому коэффициенту. Различие между легкими и тяжелыми атомами в мишени заключается в величине потенциала, но не области взаимодействия.

Для того чтобы ускорить расчеты, что крайне важно даже при использовании высокопроизводительных вычислений, в программу встроен тест, определяющий, движется ли атом отдачи вдали от поверхности, либо он потерял так много энергии, что не способен достигнуть поверхности; в этом случае дальнейшая судьба атома не прослеживается.

В модели локальных электронных потерь величины энергий потери зависят от расстояния наибольшего сближения r_0 , которое входит в множитель

$$f = \frac{0,045}{\pi a^2} \exp(-0,3r_0 / a), \quad (1.14)$$

добавляемый к уравнению предыдущего пункта в предположении, что $L = N^{1/3}$.

Для многокомпонентных мишеней используется правило Брэгга, устанавливающее, что вклад в тормозную способность каждого типа атомов мишени пропорционален их атомной доле. Тормозную способность при этом следует рассчитывать для каждого слоя мишени. В случае движения атомов отдачи значение тормозной способности следует определять для каждого типа возможных атомов отдачи в каждом слое мишени.

ГЛАВА 2. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ И ОСОБЕННОСТИ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ КЛАСТЕРОВ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

2.1. Описание пакета программ TRIM (SRIM), реализующего метод Монте-Карло

Пакет программ TRIM (SRIM) предназначен для моделирования физических процессов возникновения каскадов радиационных дефектов при облучении слоистых твердотельных композиций быстрыми протонами, альфа-частицами и ионами с большей массой. Пакет свободно распространяется через Интернет (<http://www.srim.org>).

2.1.1 Англоязычные термины и обозначения

В пакете использованы следующие условные обозначения диалоговых окон, кнопок и команд:

- Ion Type - кнопка выбора типа иона из таблицы Менделеева;
- Ion Energy – поле ввода стартовой энергии иона (первичного атома);
- Ion Angle degrees – поле ввода угла влета иона (первичного атома);
- Completed – конечное число рассчитываемых ионов (первичных атомов);
- Show live data – кнопка вызова информации о координатах атома;
- Plot Window - окно графиков;
- Max Target Depth - кнопка ввода толщины мишени;
- Collision Plots - окно вывода графиков столкновений;
- XY - Longitudinal - кнопка визуализации изображения каскада столкновений в координатных осях XY;
- XZ - Longitudinal – кнопка визуализации изображения каскада столкновений в координатных осях XZ;

- XY - Ions Only – кнопка визуализации изображения каскада столкновений в координатных осях XY;
- YZ - Lateral – кнопка визуализации изображения каскада столкновений в координатных осях YZ;
- Background color White/Black - кнопка выбора цвета фона графика;
- Distributions - окно распределений;
- File – ввод названия файла данных;
- Plot – активизация вывода графика соответствующего распределения;
- Ion Distribution - кнопка вывода графика ионного распределения в материале;
- Ion/Recoil Distribution - кнопка вывода графика распределения ионов/атомов отдачи в материале мишени;
- Lateral Range - кнопка вывода графика поперечного распределения ионов / первичных атомов в материале мишени;
- Ionization – кнопка (окно) вывода графика распределения ионных потерь первичных атомов в материале мишени;
- Phonons – кнопка (окно) вывода графика распределения фононов в материале мишени;
- Energy to Recoils - кнопка вывода графика распределения энергии отдачи в материале мишени;
- Damage Events - кнопка вывода графика распределения дефектов в материале мишени;
- Integral Sputtered - кнопка вывода графика интегрального распыления (не для модели Кинчина-Пиза);
- Differential Ions - кнопка вывода графика дифференциального распыления материала мишени;
- Ion Range - кнопка вывода графика ионного распределения;
- Backscattered Ions – кнопка (окно) вывода графика обратнорассеянных ионов в материале мишени;

- Transmitted Ions – кнопка (окно) вывода графика распределения прошедших (насквозь) мишень ионов;
- Collision Details – вывод файла протокола расчета;
 - Vacancies / Ion – окно вывода среднего количества вакансий на первичный ион (атом);
 - Sputtering/yield – усредненное распределение энергетических потерь, приходящихся на различные компоненты гетероструктур;
 - Random Number counter – окно вывода датчика случайных чисел.

2.1.2. Порядок использования пакета программ TRIM (SRIM)

Пакет программ (ПП) доступен в двух версиях: TRIM для операционной системы DOS (также может работать под Windows в режиме эмуляции DOS) и SRIM for Windows. TRIM (SRIM) использует графический пользовательский многооконный интерфейс. Состав ПП TRIM (SRIM):

- а) блок ввода исходных данных;
- б) блок моделирования;
- в) блок статистического анализа результатов расчета;
- г) блок вывода результатов расчета

Основой интерфейса является стандартное окно с набором кнопок для ввода исходных данных и кнопок, предназначенных для запуска команд, а также стандартные типы изображений, играющие роль управляющих элементов. Следует отметить, что указанная программа может быть запущена на компьютере в виде нескольких копий с разными исходными данными. Как будет показано в разделе 2.4 это иногда дает некоторое преимущество в скорости вычислений. Последнее особенно важно, когда решается оптимизационная задача, например ищется состав материала в котором количество повреждений в одном из слоев будет минимально. Более подробно о результатах расчетов и проведении оптимизации рассказывается в 3 главе учебного пособия.

Принцип организации экранной области схематично показан на рисунках 5 и 6.

Верхняя часть экрана - диалоговые кнопки
главного меню



Нижняя часть экрана – области ввода исходных
данных и анализа результатов расчета

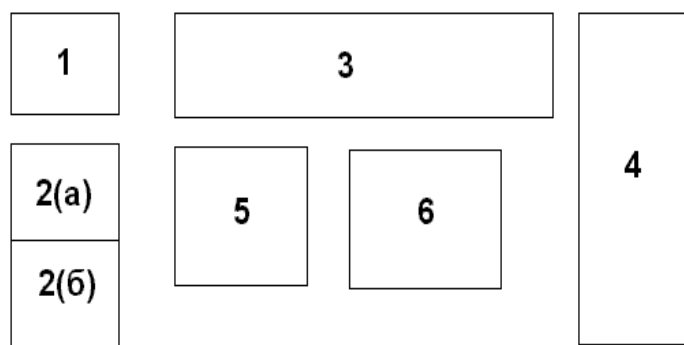


Рис. 5. Принцип организации графического интерфейса: область 1 - блок исходных данных первичных атомов; Область 2(а) - панель визуализации траекторий и столкновений частиц в различных координатных осях; 2(б) - панель информации о количестве вывода статистических графиков на экран; 3 - панель ввода и редактирования данных о гетероструктуре; 4 - панель краткой статистики расчета; 5 - область визуализации траекторий и точек столкновения движущихся атомов; 6 - область вывода на экран статистических графиков расчетов

Как следует из указанных рисунков, при проведении расчетов возможно использование различного набора окон, выводящих результаты расчетов на монитор. Указанное обстоятельство важно, когда оператору приходится одновременно контролировать ход вычислений нескольких задач. Последнее требуется, когда используются технологии параллельных вычислений на вычислительном кластере, состоящем из нескольких компьютеров, а также при решении нескольких аналогичных задач на одном компьютере.

В этом случае работа по организации вычислений разбивается на два временных отрезка – отладка запуска серии вычислений, когда задача разбивается на несколько подзадач и необходимо контролировать корректность ввода исходных данных на различных компьютерах и непосредственно сами вычисления. В ручном режиме возможен запуск около 10 задач, а при большем объеме вычислений оператор начинает делать ошибки, поэтому использование технологии высокопроизводительных вычислений не только позволяет ускорить

процесс вычислений, но и снижает вероятность возникновения ошибки при вводе исходных данных.

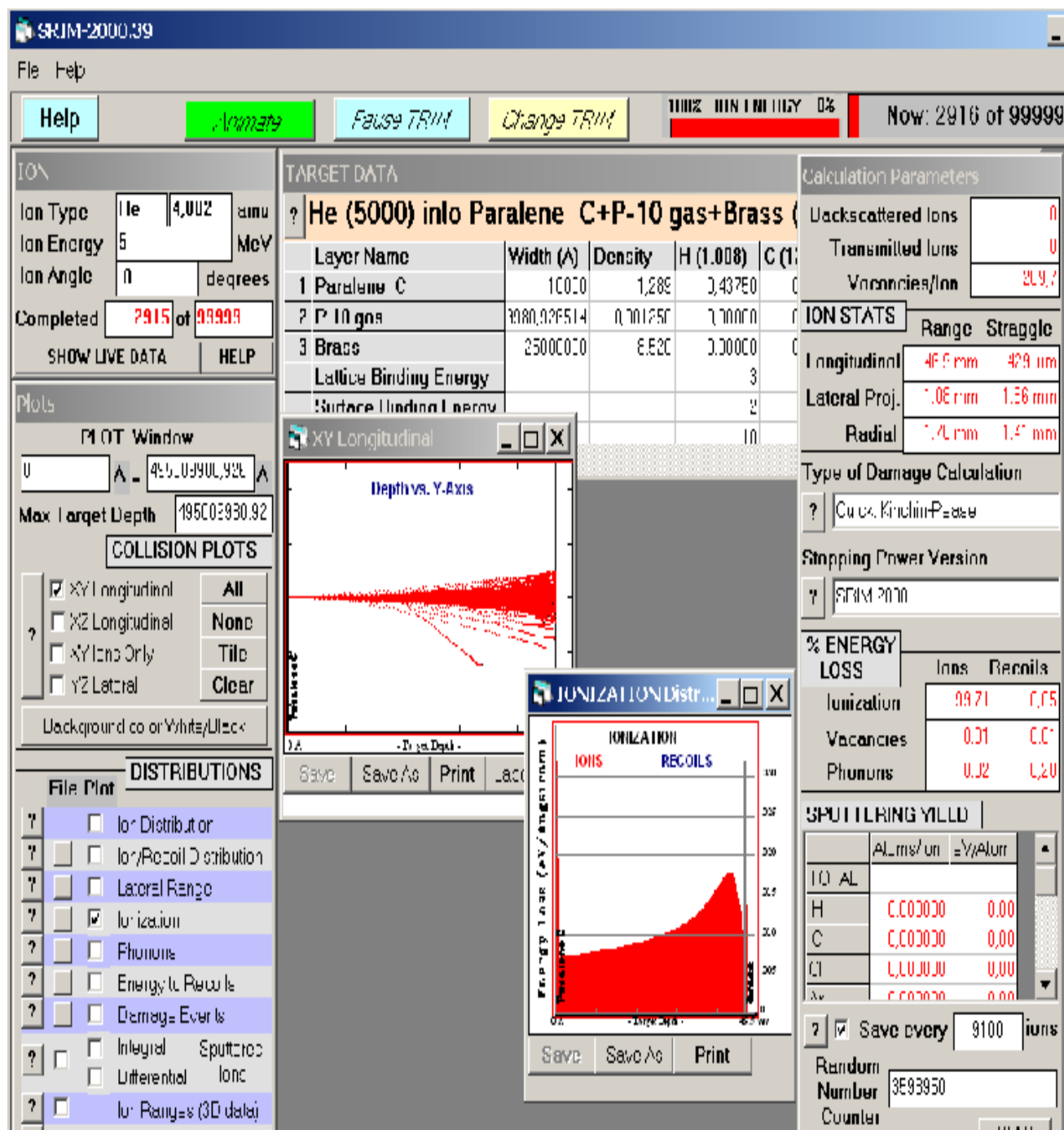


Рис. 6. Внешний вид интерфейса пользователя ПП TRIM

Стандартные типы диалоговых окон представлены:

а) диалоговыми кнопками в виде прямоугольных областей с текстом (пример – на рисунке 7);

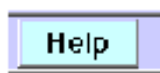


Рис. 7. Пример изображения диалоговой кнопки

б) диалоговым переключателем в виде прямоугольной области с текстом и кнопкой, при помощи которой происходит управление процессом счета.

На рисунке 8 дан пример изображения диалоговых переключателей;



Рис. 8. Панель главного меню

в) диалоговым редактором в виде прямоугольной области с однострочным редактором текста, позволяющим осуществлять ввод и редактирование исходных данных, называемым полем ввода. Ввод и редактирование текста в диалоговом редакторе осуществляется после нажатия диалоговых кнопок и окрашивания полей ввода в желтый цвет. На рисунке 9 дан пример изображения диалогового редактора;

г) списком в виде прямоугольной области с перечнем графиков, которые можно выбирать, выделять, добавлять, удалять:

- график распределения первичных атомов по глубине;
- график распределения вторичных радиационных дефектов;
- график латерального распределения первичных атомов;
- график распределения ионизационных потерь;
- график распределения фоонов;
- график распределения энергетических потерь.

В случае выбора какого-либо графика в окошке напротив него появляется "галка". На следующем рисунке дан пример изображения такого перечня. Выбор графиков производится с помощью мыши путем установки значка «V» в окошке ввода столбца «Plot». Выбор имени выходного файла с результатами

расчета производится нажатием мыши на соответствующую кнопку из столбца «File».

TARGET DATA										
He (5000) into Paralene_C+P-10 gas+Brass (3 layers, 9 atoms)										
	Moving atom colors ->									
	Stopped atom colors ->									
Layer Name	Width (A)	Density	Si (27.977)	S (15.995)	Al (26.982)	Ge (73.92)	Ga (68.93)	As (74.92)	Au (196.96)	Ti (48.95)
1 Paralene_C	10000	5.350	0.00000	0.00000	0.00100	0.99900	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2 P-10 gas	250.26514	0.001250	0.00000	0.00000	0.00000	0.64286	0.07143	0.28571	0.00000	0.00000
3 Brass	250	8.520	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00990	0.00000	0.61386	0.34653
Lattice Binding Energy			3	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	3.6	3.7
Surface Binding Energy			2	2.5	3	3.5	4	4.5	5	5.5
Displacement Energy			18	11	12	10	10	10	16	17

ION

Ion Type

Ar

39

amu

Ion Energy

5

MeV

Ion Angle

0

degrees

Completed

8339

of

99999

SHOW LIVE DATA

HELP

Plots

PLOT Window

0

A

50000

A

Max Target Depth

495009980.92

Рис. 9. Пример диалоговых окон ввода исходных данных по анализируемой гетероструктуре и данных, характеризующих ионизирующее излучение. Данные по анализируемой структуре вводятся, исходя из задачи, а тип первичных атомов (ионов) выбирается исходя из типа анализируемого ионизирующего излучения. Пересчет энергии нейтронного излучения в энергию первичного атома (иона) осуществляется согласно (1.9). В случае использования файла данных trim.dat тип атома и его энергия будут сформированы автоматически.

д) панелью краткой статистики расчета (рисунок 11), показывающей количество рассчитанных траекторий первичных атомов, усредненные показатели потерь энергии на различные механизмы взаимодействия первичных атомов со структурой, средние значения пробегов атомов и среднюю величину их отклонения от точки старта в латеральном направлении.

Каждой команде главного меню соответствует своё контекстное меню. Список его команд приведен в таблице 3. Для вызова команд главного и появляющегося меню достаточно щелкнуть по ним мышью.

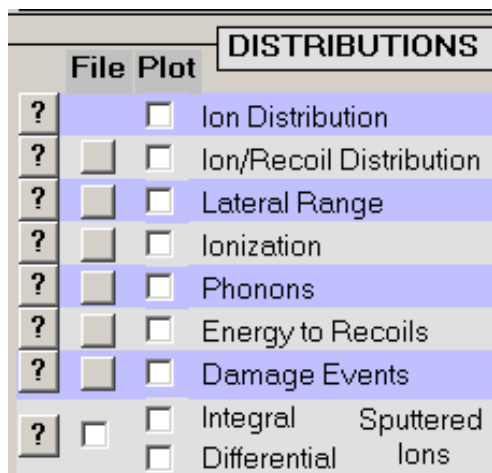


Рис. 10. Перечень графиков статистической обработки результатов расчета

Calculation Parameters		
Backscattered Ions	0	
Transmitted Ions	0	
Vacancies/ion	596,1	
ION STATS		
	Range	Straggle
Longitudinal	4.57 mm	713. um
Lateral Proj.	673. um	845. um
Radial	1.06 mm	558. um
Type of Damage Calculation		
?	Quick: Kinchin-Pease	
Stopping Power Version		
?	SRIM-2000	
% ENERGY LOSS		
	Ions	Recoils
Ionization	98,33	1,03
Vacancies	0,01	0,07
Phonons	0,01	0,55

Рис. 11. Панель краткой статистики расчетов

Порядок использования ПП TRIM сводится к вводу исходных данных согласно пунктам в) и г), проведению расчетов с помощью управляющих кнопок а) и б) и записи в файлы данных результатов расчета г) и д). Важным является контроль проведения вычислений в течении всей вычислительной сессии. В случае вычислений с использованием большого количества частиц указанный контроль позволяет выявить ошибки ввода исходных данных на ранних стадиях проведения расчета, что существенно экономит время.

Таблица 3. Команды главного меню

Команда главного меню	Команда контекстного меню	Назначения команды
Help		Помощь
Animate	End Animate	Вкл./выкл. процедуры перерисовки структуры кластера дефектов
Pause	Continue	Управление процессом счета
Change TRIM	End Edit	Остановка счета для редактирования данных

2.3. Преимущество технологии параллельных вычислений

В некоторых, реализованных на суперкомпьютерах, параллельных системах программирования передача данных между компонентами скрыта от программиста, тогда как в других она должна указываться явно. Явные взаимодействия могут быть разделены на два типа:

- взаимодействие через разделяемую память: на каждом процессоре мультипроцессорной системы запускается поток исполнения, который принадлежит одному процессу. Потоки обмениваются данными через общий для данного процесса участок памяти. Количество потоков соответствует количеству процессоров. Потоки создаются либо средствами языка программирования, либо с помощью библиотек или автоматически встроенными средствами компилятора. Данный вид параллельного программирования обычно требует какой-то формы захвата управления (мьютексы, семафоры, мониторы) для координации потоков между собой.

- взаимодействие с помощью передачи сообщений: на каждом процессоре многопроцессорной системы запускается однопоточный процесс, который обменивается данными с другими процессами, работающими на других процессорах, с помощью сообщений. Процессы создаются явно, путем вызова соответствующей функции операционной системы, а обмен сообщениями — с помощью библиотеки (например, реализация протокола MPI) или с помощью средств языка (например, High Performance Fortran). Обмен сообщениями может происходить асинхронно либо с использованием метода «рандеву», при котором отправитель блокирован до тех пор, пока его сообщение не будет доставлено.

Параллельные системы, основанные на обмене сообщениями, зачастую более просты для понимания, чем системы с разделяемой памятью, и обычно рассматриваются как более совершенный метод параллельного программирования. Существует большой выбор математических теорий для изучения и анализа систем с передачей сообщений. Обмен сообщениями может быть эффективно реализован на симметричных мультипроцессорах как с разделяемой когерентной памятью, так и без неё.

У параллелизма с распределенной памятью и с передачей сообщений разные характеристики производительности. Обычно (но не всегда), накладные расходы памяти на процесс и времени на переключение задач у систем с передачей сообщений ниже, однако передача самих сообщений более накладна, чем вызовы процедур. Эти различия часто перекрываются другими факторами, влияющими на производительность.

На многопроцессорных системах с распределённой памятью также может быть реализован гибридный способ (DM-MIMD), где каждый узел системы представляет собой мультипроцессор с общей памятью (SM-MIMD). На каждом узле системы запускается многопоточный процесс, который распределяет потоки между процессорами данного узла. Обмен данными между потоками на узле осуществляется через общую память, а обмен данными между узлами — через передачу сообщений. В этом случае количество процессов определяется

количеством узлов, а количество потоков — количеством процессоров на каждом узле. Гибридный способ программирования более сложен (требуется особым образом переписывать параллельную программу), но наиболее эффективен в использовании аппаратных ресурсов каждого узла многопроцессорной системы. Разумеется, в такой системе можно также использовать и исключительно метод передачи сообщений, то есть запустить на каждом процессоре каждого узла отдельный процесс, так как это было описано выше в данном разделе. В этом случае количество процессов (и потоков) будет равно количеству процессоров на всех узлах. Этот способ проще (в параллельной программе надо только увеличить количество процессов), но является менее эффективным, так как процессоры одного и того же узла будут обмениваться друг с другом сообщениями, словно они находятся на разных персональных компьютерах.

Общая классификация архитектур ЭВМ по признакам наличия параллелизма в потоках команд и данных была предложена Майклом Флинном в 1966 году. Все разнообразие архитектур ЭВМ сводится к четырем классам:

- вычислительная система с одиночным потоком команд и одиночным потоком данных;
- вычислительная система с одиночным потоком команд и множественным потоком данных;
- вычислительная система со множественным потоком команд и одиночным потоком данных;
- вычислительная система со множественным потоком команд и множественным потоком данных.

Существенное влияние на развитие архитектур ЭВМ и методов параллельных вычислений оказало бурное развитие микроэлектроники. Экспоненциальный рост числа транзисторов, которые возможно изготовить на одном полупроводниковом кристалле, привел к крайне быстрому увеличению вычислительных мощностей как персональных компьютеров, так и высокопроизводительных систем — вычислительных кластеров и суперкомпьютеров. Закон Мура — эмпирическое наблюдение, изначально сделанное Гордоном Муром, соглас-

но которому количество транзисторов, размещаемых на кристалле интегральной схемы, удваивается каждые 24 месяца (см. рис. 12).

Часто цитируемый интервал в 18 месяцев связан с прогнозом Давида Хауса из Intel, по мнению которого производительность процессоров должна удваиваться каждые 18 месяцев из-за сочетания роста количества транзисторов и быстродействия каждого из них.

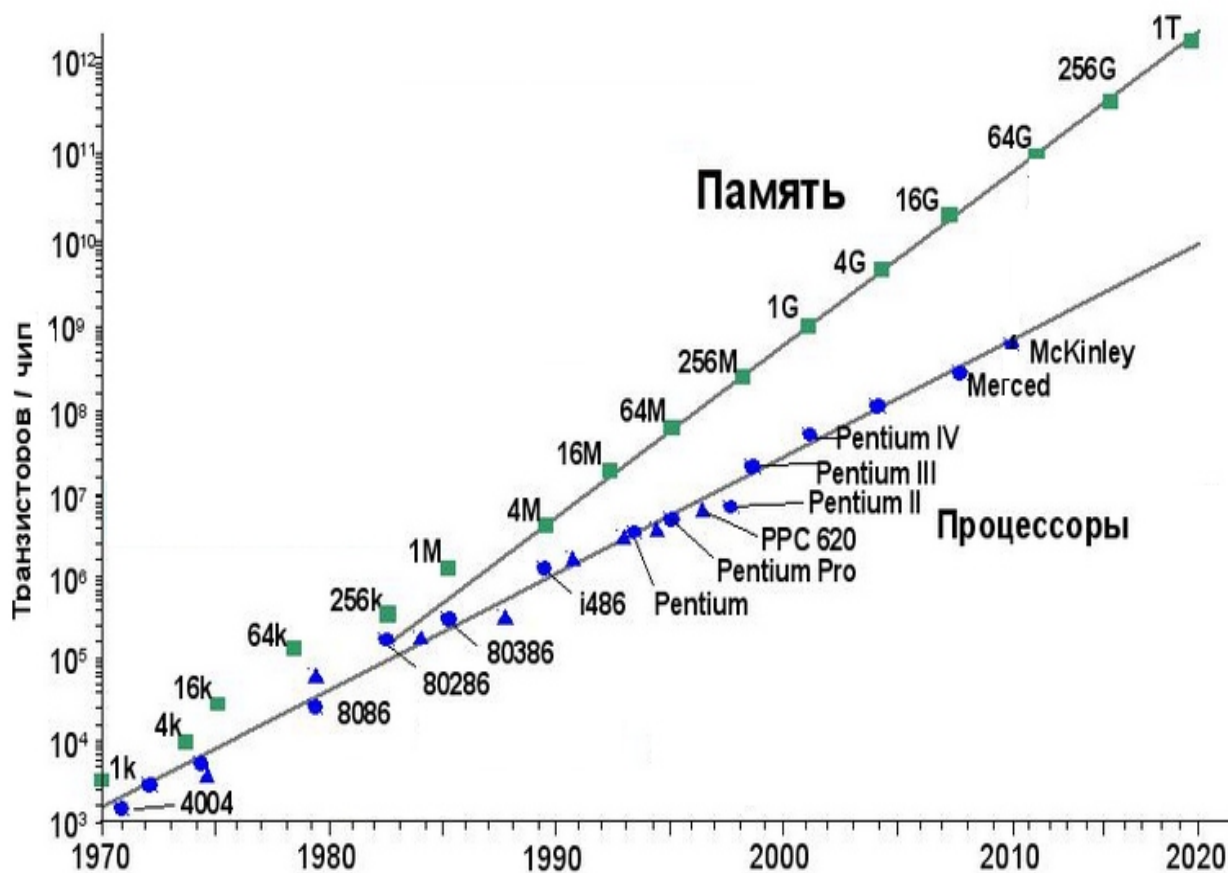


Рис. 12. Закон Мура: показывает рост количества транзисторов на одном чипе интегральных схем компьютерной памяти и процессоров [24]

Упомянутый вычислительный кластер - это группа компьютеров, объединённых высокоскоростными каналами связи, работающих совместно для выполнения общих приложений и представляющих с точки зрения пользователя единый аппаратный ресурс. Один из первых архитекторов кластерной технологии Грегори Пфистер дал кластеру следующее определение: «Кластер —

это разновидность параллельной или распределённой системы, которая состоит из нескольких связанных между собой компьютеров и используется как единый, унифицированный компьютерный ресурс».

В соответствии с общепринятой методикой оценки развития вычислительной техники первым поколением считались ламповые компьютеры, вторым — транзисторные, третьим — компьютеры на интегральных схемах, а четвёртым — с использованием микропроцессоров. В настоящее время разработчики компьютеров стали выделять в отдельную категорию компьютеры пятого поколения, ориентированного на распределенные вычисления. Предполагается что, пятое поколение станет базой для создания устройств, способных к имитации мышления.

Другим возможным устройством, позволяющим увеличить производительность вычислительной системы, является графический процессор (GPU) - отдельное устройство персонального компьютера, выполняющее графический рендеринг. Современные графические процессоры очень эффективно обрабатывают и отображают компьютерную графику. Благодаря специализированной конвейерной архитектуре они намного эффективнее в обработке графической информации, чем типичный центральный процессор (CPU). Графический процессор может применяться как в составе дискретной видеокарты, так и в интегрированных решениях (встроенных в северный мост, либо в гибридный процессор). Отличительными особенностями, по сравнению с центральным процессором, являются:

- архитектура, максимально нацеленная на увеличение скорости расчёта текстур и сложных графических объектов;
- ограниченный набор команд.

Высокая вычислительная мощность GPU объясняется особенностями архитектуры. Если современные CPU содержат несколько ядер (на большинстве современных систем от 2 до 6, по состоянию на 2012 г.), то графический процессор изначально создавался как многоядерная структура, в которой количество ядер может достигать сотен. Разница в архитектуре обуславливает и

разницу в принципах работы. Если архитектура CPU предполагает последовательную обработку информации, то GPU исторически предназначался для обработки компьютерной графики, т.е. рассчитан на параллельные вычисления.

Более сложными вычислительными системами являются гибридные, т.е. системы с гетерогенной аппаратной вычислительной структурой, где комбинируются любые вычислительные устройства или блоки, например вычисления с помощью CPU и GPU совместно. Обычно основным вычислительным компонентом систем для высокопроизводительных вычислений, включая кластеры, является центральный процессор. Однако, уже начиная с процессоров Intel486DX, в составе компьютеров появился такой элемент, как сопроцессор, что можно считать гибридизацией на аппаратном уровне. В середине 2000-х для вычислительных целей начали использовать графический процессор (GPU). При этом основная проблема состояла в том, чтобы найти способы выполнения вычислительных задач. Осознав спрос на подобные расчеты, компания NVIDIA в 2007 году представила программно-аппаратную платформу CUDA, позволяющую запускать произвольный код на GPU.

2.4. Особенности технологии параллельных вычислений при проведении расчетов структуры кластеров радиационных дефектов методом Монте-Карло

Как следует из предыдущих разделов, вычисления движения первичных атомов, влетающих в мишень, рассчитываются по очереди, так что один каскад столкновений развивается абсолютно не связано с другими. Данное условие выполняется строго при ионном и нейтронном воздействиях, когда расстояния между соседними случайными местами влета быстрых первичных атомов через поверхность облучаемого образца превышают максимальный радиус кластера радиационных дефектов, возникающего в мишени.

Например, для полупроводниковых кристаллов, облучаемых атомами с энергиями 10...1000 кэВ, указанный радиус составляет от 10 до 1000 нм, в за-

висимости от массы и энергии первичного атома, а также от типа вещества мишени. Поэтому если уровни облучения не велики, так что кластеры дефектов не перекрываются, их образование можно считать независимым, а значит моделировать в любой последовательности и с использованием любых вычислительных средств: разных ядер одного процессора, различных процессоров или даже различных компьютеров. Результаты расчетов распределения дефектов, ионизированных электронов, выделившегося тепла усредненные по результатам расчета одного каскада столкновений, могут быть затем путем аналогичного усреднения обобщены с результатами многократных расчетов аналогичных событий. Искомый результат – усредненные распределения, о которых сказано выше.

Поскольку полупроводниковые приборы состоят из десятков сортов различных атомов, а энергии радиационных частиц имеют диапазон от единиц кэВ, до единиц ГэВ, то для оптимизации конструкции радиационно-стойких полупроводниковых приборов необходимо рассчитывать сотни и тысячи столкновений различных пар «первичный атом – мишень». Для каждой пары необходимо рассчитать не менее 10^4 , а лучше 10^6 столкновений, чтобы усредненный результат обладал достаточно малой погрешностью. Это приводит к необходимости использования технологии распараллеливания вычислений.

При организации вычислений в исследовательской лаборатории для целей расчета может быть использована вся компьютерная сеть, обычно состоящая из 5....20 компьютеров. Исходные данные для расчетов генерируются на одном из компьютеров вычислительной сети (вычислительного кластера), а затем передаются по сети на другие компьютеры, где и запускается расчетная программа. Результаты расчетов собираются обычно на том же управляющем компьютере и обрабатываются. Поскольку в ручном режиме выполнение таких процедур достаточно утомительно, то обычно используют автоматические программы генерации исходных данных и обработки вычислений.

На рис. 13 приведен график, демонстрирующий закон Амдала: эффективность применения процедуры распараллеливания при увеличении количе-

ства вычислительных процессоров от процента кода, который невозможно распараллелить. Как следует из приведенной зависимости, если параллельная программа содержит 10% последовательного кода ($\alpha = 0.1$), то максимальное ускорение на 16 процессорах будет составлять 5 раз, а на 1024 процессорах — только 12 раз. Поэтому при организации высокопроизводительных вычислений важным фактором является наличие специализированного кода, не просто позволяющего решать требуемую задачу, но и реализующего алгоритмы с минимальным количеством последовательных процедур.

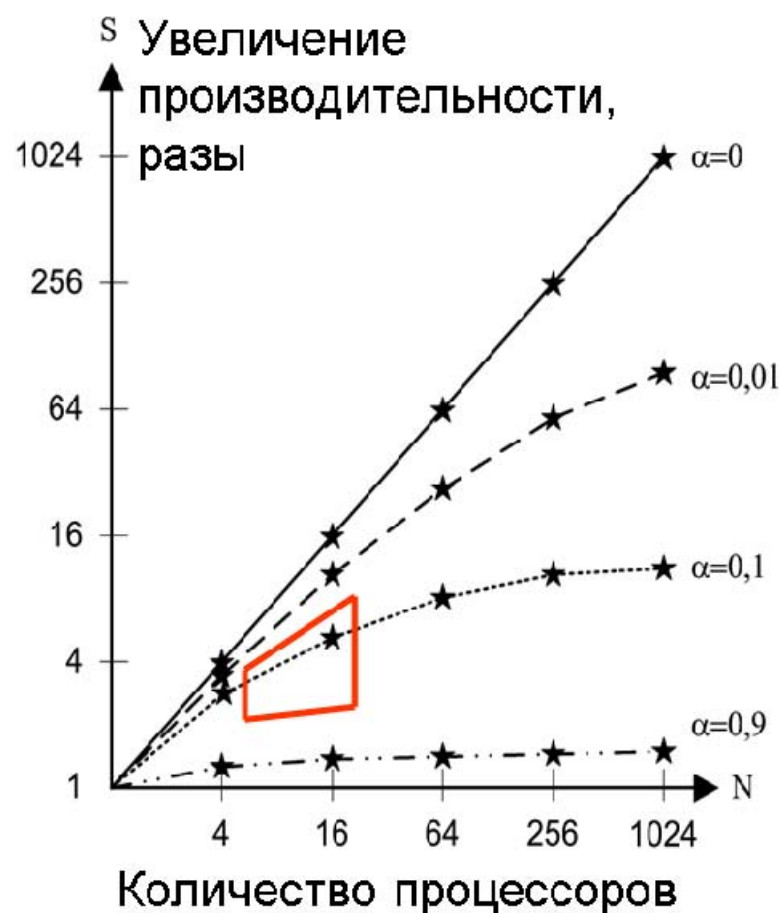


Рис. 13. Закон Амдала, показывающий эффективность применения процедуры распараллеливания. Особенностью метода Монте-Карло является низкое значение коэффициента $\alpha \leq 0.1$, так что при соответствующей оптимизации вычислительного кода возможен большой выигрыш в производительности от применения вычислительных систем с большим количеством процессоров и ядер

Часто, при решении физических задач исследователям приходится использовать вычислительные программы, разработанные другими группами и свободно распространяемые через Интернет. Одной из таких программ, как упоминалось выше, является программа TRIM (SRIM), позволяющая моделировать структуру кластеров радиационных дефектов в твердотельных слоистых структурах. Данная программа предназначена для персональных компьютеров. Особенностью организации параллельных вычислений с использованием вычислительных программ, не оптимизированных для такого использования, является необходимость экспериментальных исследований производительности вычислительной сети, в которой запускается несколько идентичных копий программы на различных компьютерах.

В таблице 4 приведены результаты работ по эмпирическому определению оптимального количества задач, параллельно выполняемых на одном компьютере (1 процессор, 2 ядра) вычислительной сети. Как следует из таблицы, наилучшим является выполнение двух задач на каждом ядре одновременно. Это объясняется особенностями выполнения вычислительного кода, когда процедура расчета прерывается сохранением промежуточных данных на жестком диске компьютера.

Другой особенностью организации научных исследований с использованием большого объема высокопроизводительных вычислений является необходимость проведения серии работ по подготовке исходных данных и анализу результатов расчетов между сериями компьютерных вычислений. Программы, на цикл которых тратится более 8 часов времени, часто запускают в вечерние часы с тем, чтобы получить результаты расчетов утром следующего дня. Однако такой график проведения работ означает, что компьютеры вычислительной сети, на которых программа закончила работу, например, ночью будут до утра простаивать. Последнее однозначно показывает преимущество использования централизованной организации высокопроизводительных вычислений на суперкомпьютерах.

Таблица 4. Экспериментальное определение оптимального количества параллельно выполняемых задач на одном компьютере (1 процессор, 2 ядра) вычислительной сети

Время, затраченное на проведение вычислений, мин	Кол-во одновременно выполняемых идентич- ных вычислительных задач на одном компь- ютере с двухядерным процессором	Среднее кол-во рассчитанных каскадов столк- новений в одной задаче	Среднее кол-во рассчитанных кластеров де- фектов в минуту
163	1	2990	18,34
165	2	2840	34,42
119	3	2010	50,67
143	4	1830	51,19
132	5	1060	40,15
124	6	615	29,76

ГЛАВА 3. ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ КЛАСТЕРОВ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ, РЕШАЕМЫЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

3.1. Структура кластеров радиационных дефектов в GaAs и Si при облучении быстрыми нейтронами

На рис. 14 представлены характерные структуры каскадов смещений в различных полупроводниковых материалах [30]. Для Si длина пробега первичного атома примерно в несколько раз больше, чем первичного атома Ga или As в GaAs, что обуславливает иную форму КРД. Это объясняется тем, что при взаимодействии налетающего нейтрона с атомом вещества первичному атому передается энергия, обратно пропорциональная его массе, поэтому атому Si передается энергия почти в 4 раза большая, чем атому Ga или As. В то же время, атомарные плотности кремния и арсенида галлия отличаются несущественно. Аналогичные рассуждения справедливы и для других материалов. В результате, как видно из рисунка 14, чем тяжелее и плотнее материал, тем более плотные КРД будут в нем образовываться.

Для соединений, в которых один из атомов имеет значительно большую массу, чем другой (например, GaN или SiGe), наблюдается картина более равномерного распределения дефектов, связанная с тем, что размеры плотных субкластеров определяет тяжелый атом, а благодаря большим длинам пробега легкие атомы заполняют пространство между субкластерами точечными дефектами. В соединениях типа GaAs, когда массы атомов примерно равны, области между субкластерами будут содержать меньшее количество точечных дефектов, что делает их более прозрачными для горячих электронов в субмикронных полупроводниковых приборах.

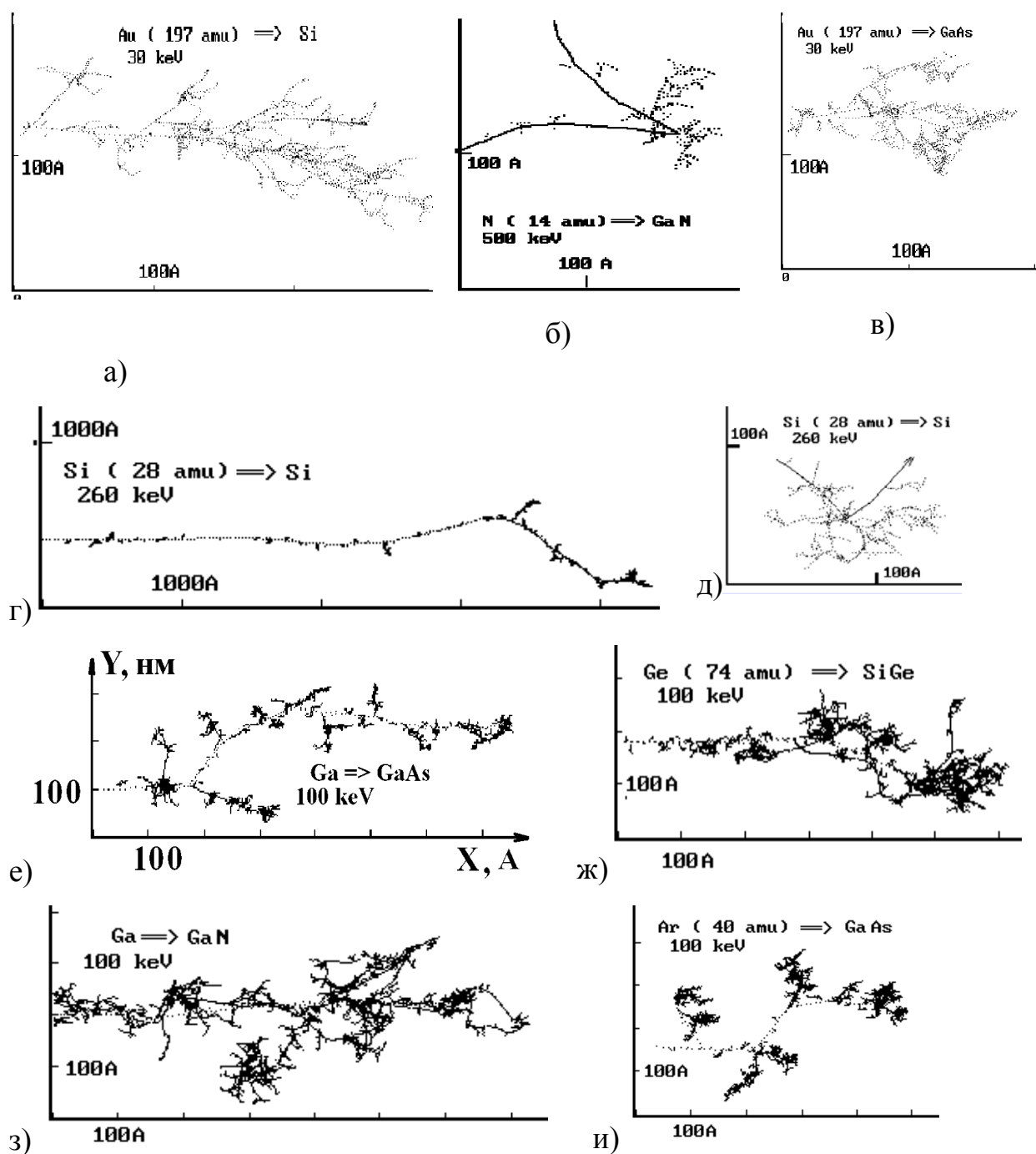


Рис. 14. Каскады смещений, образованные в различных полупроводниковых материалах: а) каскад смещений, образованный атомом Au при его движении в Si; б) часть каскада смещений, созданная вторичным атомом Ga, смещенным при движении атома азота в GaN; в) каскад смещений, образованный атомом Au при его движении в GaAs; г) каскад смещений, порожденный атомом Si при его движении в Si; д) часть каскада смещений, образованная вторичным атомом Si, смещенным при движении атома Si в Si; е) каскад смещений, образованный атомом Ga при его в GaAs; ж) каскад смещений, порожденный атомом Ge при его движении в SiGe; з) каскад смещений, созданный атомом Ga при его движении в GaN; и) каскад смещений, образованный атомом Ar при его движении в GaAs

Расчеты проводились в два этапа, на первом из которых исследовались усредненные распределения дефектов. Параметром в этом случае была исходная энергия внедряемого атома. На втором этапе путем обработки нескольких сотен картин кластеров рассчитывалась гистограмма распределений субкластеров по размерам.

На рис. 15 и рис. 16 приведены рассчитанные зависимости пробегов атомов Si, Ge, H, Ti, Au в Si и GaAs, внедренных в полупроводниковые и диэлектрические материалы, от их первоначальной энергии.

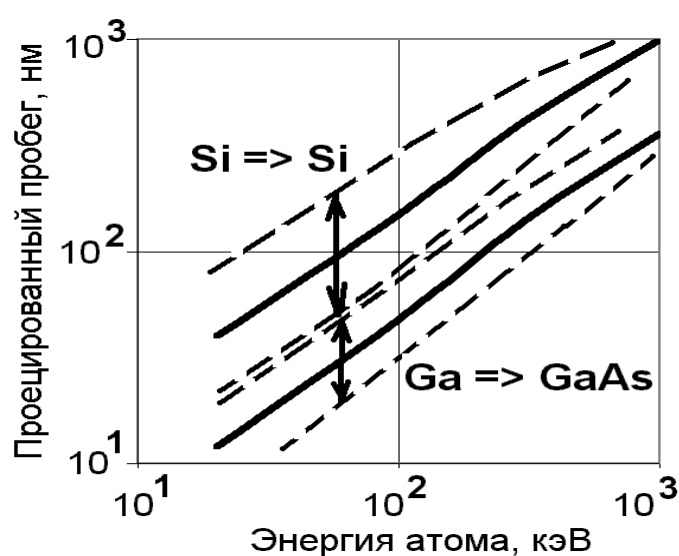


Рис. 15. Пробег Si и Ga в Si и GaAs соответственно: сплошные линии - среднее значение; пунктир - дисперсия

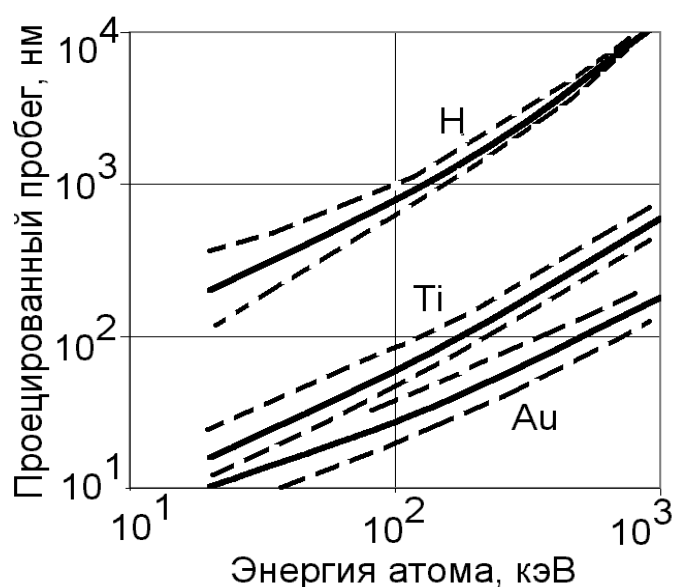


Рис. 16. Пробег различных атомов в GaAs: сплошные линии - среднее значение; пунктир - дисперсия

Как видно, в зависимости от массы внедряемого атома и его исходной энергии длины траекторий могут изменяться в несколько раз, причем даже при одинаковой энергии они могут отличаться в 1,5...2 раза. В зависимости от того, лобовой или скользящий удар получил вторичный атом в каскаде столкновений, размер субкластера будет изменяться в широких пределах. Поэтому его аналитические оценки имеют низкую точность и для детального анализа необходимо проводить расчеты на основе метода Монте-Карло.

Важной особенностью проектирования радиационно-стойких приборов является сравнительная оценка параметров материалов, из которых можно изготовить полупроводниковые приборы с одинаковым функциональным назначением. Необходимо сопоставить размеры кластеров радиационных дефектов, в приборах на разных структурах и определить какой из приборов будет поражаться излучением в меньшей степени, т.е. больше всего подходит для создания радиационно-стойкой аппаратуры. Поскольку указанная задача носит характер оптимизационной, т.е. требующей большого числа повторных итераций при ее решении, то необходимо применять технологии высокопроизводительных вычислений. К счастью, как было показано во 2 главе данного пособия, метод Монте-Карло хорошо поддается процедуре распараллеливания, так что использование суперкомпьютера дает значительное ускорение при решении подобных задач.

3.1.1. Неоднородности распределения дефектов в кластере

Согласно (1.9), энергетический спектр первичных атомов Ga и As будет иметь среднюю энергию 60...90 кэВ и содержать достаточно большое количество атомов с энергиями от 20 до 200 кэВ. Для последующих вычислений рассеяния электронов на субкластерах (или кластерах) радиационных дефектов важно было определить характерный размер субкластера. Последний оценивался в приближении цилиндрической формы КРД (особенно состоящих из цепоч-

ки перекрывающихся мелких субкластеров). В этом случае характерный размер вычислялся как средний между диаметром и высотой цилиндра.

В ходе вычислений для каждой из энергий 25, 50, 100 и 200 кэВ были рассчитаны по 300 каскадов столкновений [30]. Для каждого каскада проводился расчет числа субкластеров, их распределения по размерам и среднего расстояния между ними. Результаты расчета приведены на рис. 17, 18.

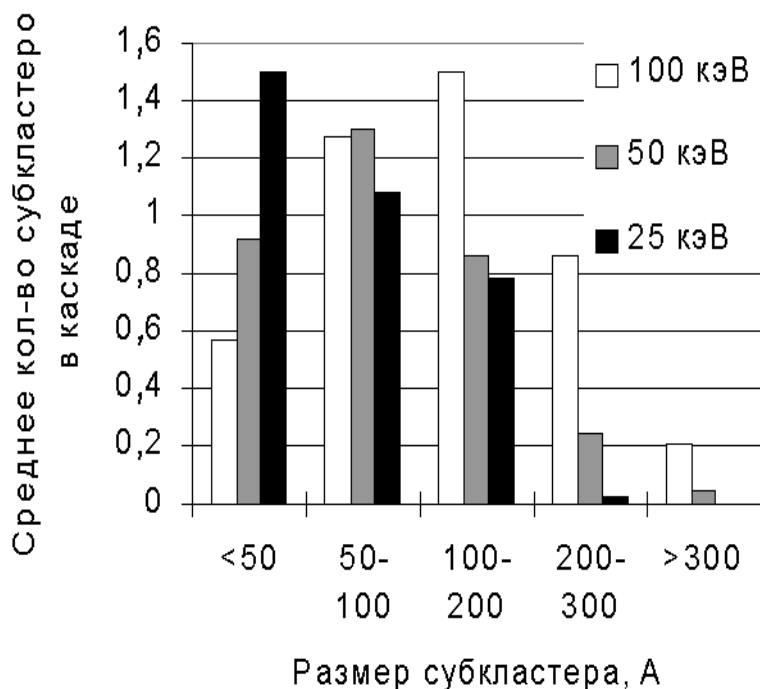


Рис. 17. Распределение субкластеров по размерам в каскаде столкновений для различных начальных энергий первичного атома [27]

При энергиях менее 50 кэВ около 40% всех кластеров не имели субкластеров, а их характерный размер составлял около 12 нм. Для энергий исходных атомов 25 кэВ – соответственно, 62% и 9 нм, а для 100 кэВ – 11% и 25 нм.

На рисунке 19 показана характерная для крупных кластеров картина, когда кластер распадается на 3...10 субкластеров. Если субкластеры отстояли друг от друга на расстоянии меньше 5 нм (характерная длина волны электрона в субмикронных GaAs структурах), то при расчетах предполагалось, что это единый субкластер. Таким образом, крупные субкластеры внутри неоднородны, как и каскады столкновений в целом, и характерный размер неоднородности имеет величину около 10 нм.

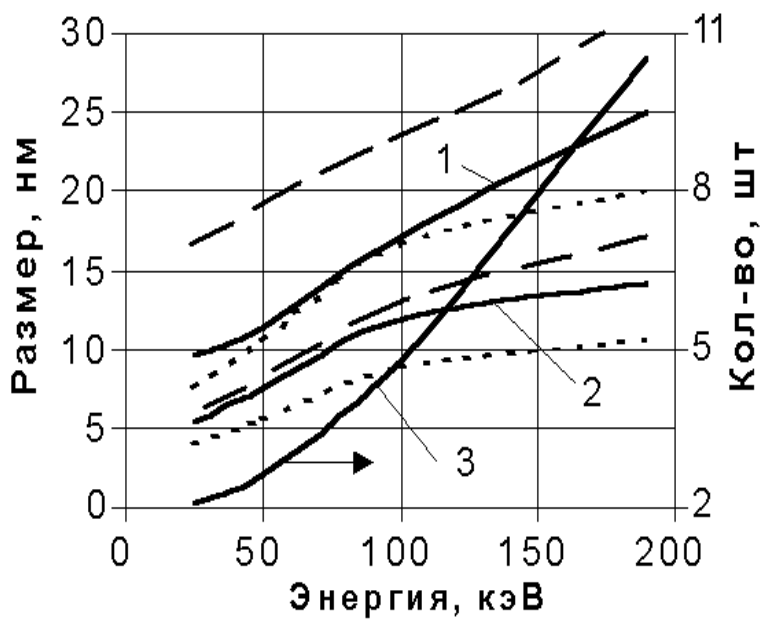


Рис. 18. Зависимости от энергии первичного атома: среднего расстояния между субкластерами – 1; среднего размера субкластера – 2; среднего числа субкластеров в каскаде – 3. Пунктиром показан разброс в размерах субкластеров, а штриховой линией - разброс в расстояниях между субкластерами на полувысотах распределений [30]

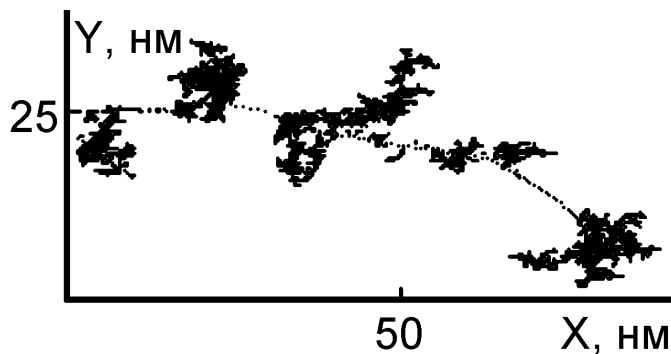


Рис. 19. Характерный вид кластера, возникшего при движении атома Ga (200 кэВ) в GaAs. Расстояния между субкластерами имеют величину 10...20 нм

Для кремния, облучаемого нейтронами, моделировалась иная ситуация. Рассматривалась энергия первичных атомов кремния, равная 300 кэВ, что соответствует энергии нейтронов около 2 МэВ. Поскольку каскады смещений в кремнии имеют протяженную форму (отношение длины к диаметру каскада порядка 10), то рассматривалось распределение размеров субкластеров вдоль траектории первичного атома. Результаты расчетов приведены на рис. 20. Так как кремний менее плотный, чем GaAs, то крупные субкластеры в нем распадутся на более мелкие, расстояния между которыми 20...30 нм.

Итак, при нейтронном облучении GaAs и Si в полупроводнике возникают каскады смещений с характерным размером субкластеров около 10 нм, расстоянием между ними до 20...30 нм для GaAs и до 40...60 нм в кремнии. Поскольку у горячих электронов длина свободного пробега (и длина волны) имеет величину менее 10 нм, то столкновения электронов с отдельными субкластерами можно рассматривать отдельно, при условии, что между ними высота потенциального барьера меньше, чем энергия электрона.

Около 10...20% каскадов содержат от 3 до 10 субкластеров, что приведет не только к несколько большему рассеянию электронов, но и к другому механизму взаимодействия, когда электрон может «заблудиться» между субкластерами.

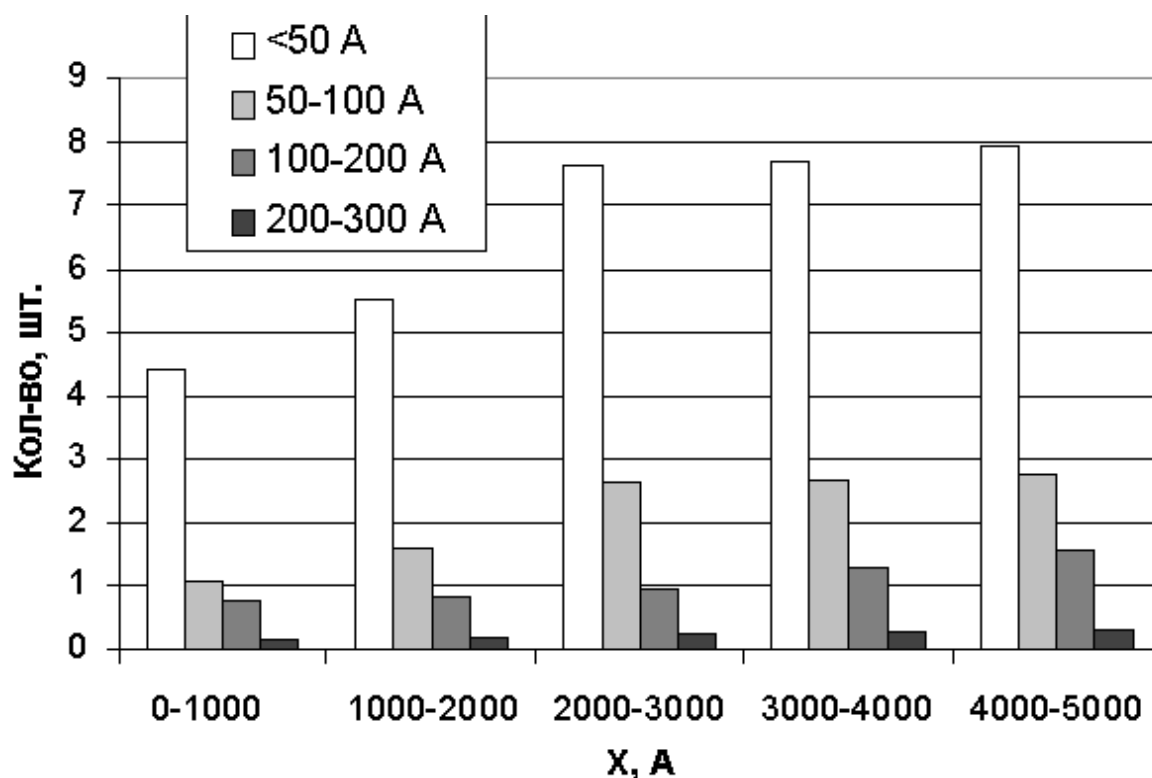


Рис. 20. Усредненное распределение размеров субкластеров вдоль траектории движения атома родоначальника каскада (300 кэВ) в кремнии

3.1.2. Неоднородности распределения субкластеров радиационных дефектов при нейтронном облучении

При облучении полупроводника малыми флюенсами нейтронного излучения распределение СКРД в структуре будет неоднородно – все субкластеры будут сосредоточены в областях КРД, а вокруг последних будут располагаться лишь точечные дефекты, появившиеся там из-за диффузии. При увеличении флюенса облучения, когда КРД будут касаться друг друга краями, распределение СКРД, наоборот, станет однородным. Оценим флюенс нейтронного воздействия, при котором неоднородностью в распределении кластеров радиационных дефектов можно пренебречь.

Концентрация субкластеров в области КРД определялась, исходя из данных, полученных методом Мотне-Карло. Результаты расчетов приведены на рис. 21. При увеличении энергии первичного атома СКРД в среднем располагаются дальше друг от друга, поэтому их концентрация падает. Поскольку количество субкластеров в каскаде и отношение длины траектории первичного атома к усредненному диаметру кластера примерно равны (рис. 22), то в усредненном КРД субкластеры расположены в цепочку один за другим.

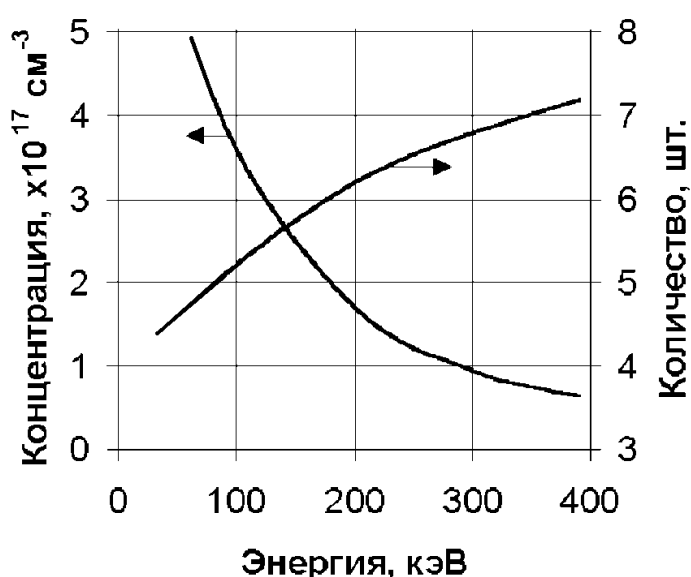


Рис. 21. Зависимости среднего количества и концентрации субкластеров в КРД от исходной энергии первичного атома. Расчет для GaAs

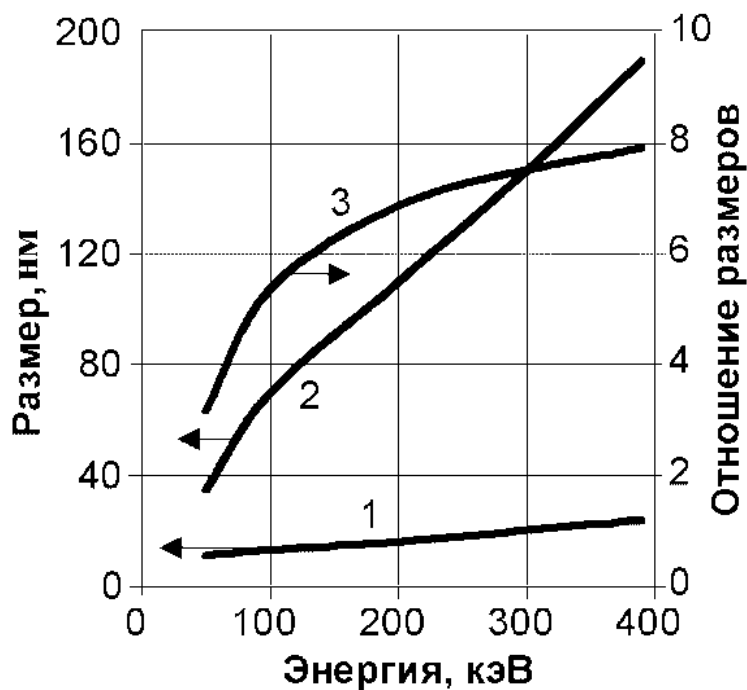


Рис. 22. Зависимости от энергии первичного атома для GaAs: усредненного диаметра каскада – 1; длины траектории первичного атома родоначальника каскада – 2; их отношения – 3

Форма цепочки имеет вид кривой с радиусом закругления порядка длины пробега первичного атома. Для энергии первичного атома 100 кэВ усредненный размер КРД составляет 25...30 нм, поэтому полная однородность в распределении СКРД будет достигаться только при флюенсах нейтронного облучения 10^{16} см^{-2} и выше. Однако, если учесть, что расстояние между соседними СКРД внутри КРД имеет большую неравномерность и часто достигает значений 50...100 нм, то при флюенсах нейтронного облучения выше $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ (расстояние между КРД 100...200 нм) приближение равномерного распределения субкластеров верно.

В субмикронных структурах современных полупроводниковых приборов, например, полевых транзисторов с затвором Шоттки, вдоль структуры будет располагаться всего несколько КРД, однако эти неравномерности будут в большой степени компенсироваться за счет усреднения из-за значительно больших размеров структур по третьей координате. В последнем случае взаимодействие электронов с КРД будет усредняться за счет параллельно включенных частей структуры.

3.1.3. Алгоритм анализа топологии радиационных дефектов, образующихся при воздействии нейтронного облучения различных энергий

Сравним структуру КРД, для определенности, в GaAs при облучении материала нейтронами различных энергий. Для анализа топологии КРД и СКРД в GaAs на основе данных, полученных при моделировании процесса дефектообразования методом Монте-Карло (п. 1.2.1), использовались следующие общие подходы:

I. Анализ распределения вторичных атомов по энергии. Согласно [12-15] пороговая энергия первичного атома отдачи, образующего стабильный КРД (и СКРД) в GaAs, составляет ≈ 5 кэВ. Количество вторичных атомов в отдельном каскаде столкновений с большими энергиями определяет число субкаскадов $N_{суб}$ в каскаде смещенных атомов. Зная величину проецированного пробега (а для большей точности, длину траектории) S первичного атома, легко оценить расстояние между центрами субкаскадов как $S / N_{суб}$. Подставляя далее в качестве начальной энергии значения, полученные для вторичных атомов, моделируются отдельные субкаскады, которые приближенно можно считать вытянутыми эллипсоидами. В качестве оценочного значения большой оси субкаскада $D_{суб}$ аналогично используется длина траектории вторичного, а малой – третичного атома. Максимальное расстояние между субкаскадами можно оценить как $(S - N_{суб} \cdot (D_{суб} + L_{ОПЗ_{суб}})) / (N_{суб} - 1)$, где $L_{ОПЗ_{суб}}$ – размер ОПЗ субкаскадов (данная формула справедлива, когда радиус кривизны траекторий первичного атома превышает размер СКРД, т.е. при низких энергиях первичного атома она может дать существенную ошибку). В случае, когда субкаскады (с учетом ОПЗ) разделяются, можно говорить об образовании отдельных СКРД в кластере. Достоинство такого подхода состоит в отсутствии необходимости моделировать полный каскад смещения атомов материала, т.е. в возможности использовать упрощенную модель Кинчина-Пиза [10].

II. Анализ проекций точечных дефектов в составе КРД, рассчитанного с помощью TRIM, на различные плоскости. В этом случае визуально выделяются

дефектные скопления в составе кластера и непосредственно на координатной сетке находятся их характерные размеры. Среднее по всем трем проекциям дает характерный размер СКРД.

III. Анализ *распределения попарных расстояний* между дефектами в составе КРД по размерам, а также расчет его фрактальной размерности. Координаты дефектов определяются с помощью расчета по TRIM. Результатом расчета является распределение $dN(r)$, где dN – число дефектов, расстояние между которыми находится в интервале $(r, r+dr)$. Такое распределение имеет характерные пики, причем ширина полученного распределения в целом определяет характерный радиус кластера, а положение пиков (при их разделении) – радиус субкластеров и расстояние между ними.

В применении к анализу топологии кластеров в реальных структурах данные методы должны быть использованы в комплексе, что подробнее обсуждается ниже.

Для проверки возможности применения подобного подхода были проведены модельные расчеты: заполненный случайно распределенными дефектами шар, заполненный случайно распределенными дефектами эллипсоид, заполненные случайно распределенными дефектами несколько шаров и эллипсоидов на различных расстояниях друг от друга. Примеры результатов расчетов приведены на рис. 23 – 27.

На рис. 24 отчетливо видны пики в распределении расстояний между точками на ≈ 5 нм, ≈ 15 нм и ≈ 60 нм, что соответствует данным, приведенным на рис. 23.

Существенное отличие по высоте и ширине первых двух пиков, отвечающих за радиусы точечных скоплений, объясняется тем, что концентрация дефектов в шаре радиуса 5 нм была примерно в 46 раз выше, чем в шаре радиуса 15 нм.

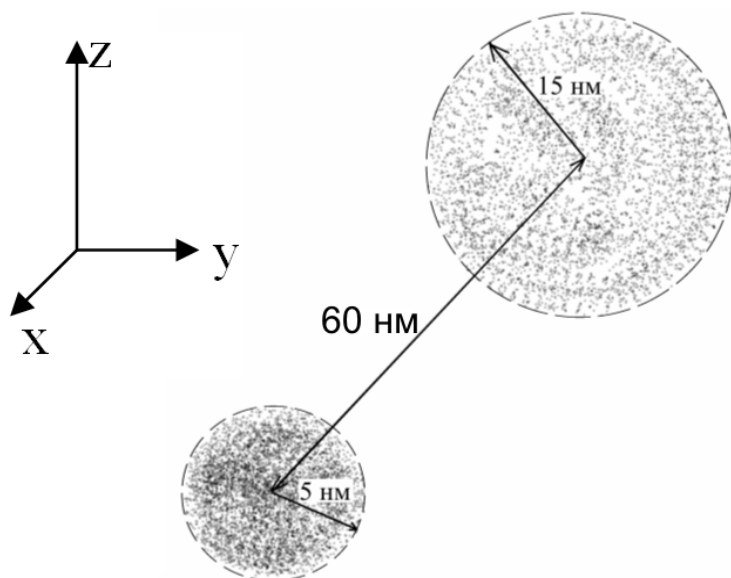


Рис. 23. Модельный «кластер» - точками указаны точечные дефекты, сгруппированные в два субкластера разделенных перемычкой, в которой нет дефектов

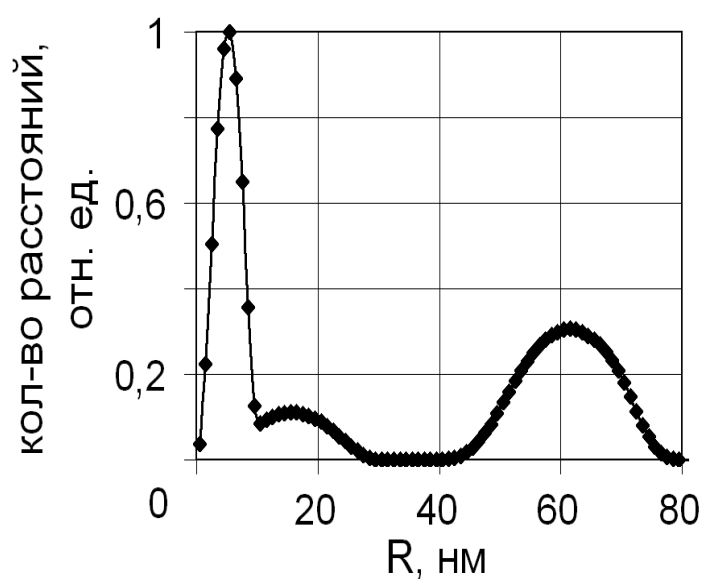


Рис. 24. Результаты расчетов распределения расстояний между точечными дефектами в кластере, рассчитанном методом Монте-Карло

На рис. 25 приведено аналогичное распределение для множества дефектов, расположенных внутри эллипсоида вращения, который более адекватно, чем приближение шара, описывает форму СКРД в GaAs кластерах. Видно, что распределение для эллипсоида становится несимметричным. В изображенном на рисунке случае разброс расстояний, оцененный на полувысоте, составляет $\approx 9,1$ нм, а максимум – ≈ 7 нм. При этом радиус шара, имеющего такой же объем, составляет $\approx 9,1$ нм.

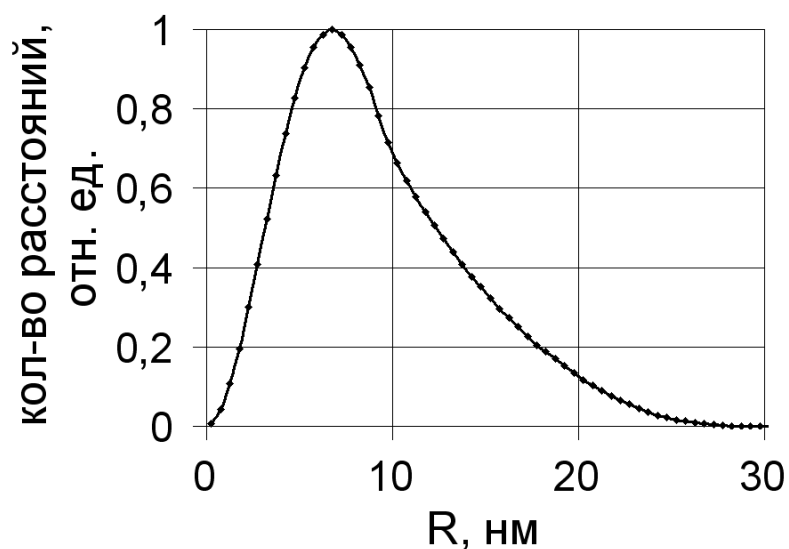


Рис. 25. Распределение попарных расстояний между точками в «суб-кластере», имеющем форму эллипсоида вращения с полуосями 5, 5 и 30 нм

В случае двух эллипсоидов с отличием лишь в длине одной полуоси (рис. 26) пик распределения, отвечающий за характерный размер скопления дефектов, меняется слабо: его ширина составляет ≈ 11 нм, максимум – $\approx 6,5$ нм. Однако пик от расстояния между «СКРД» (70 нм) остается ярко выраженным, т.е. такие дефектные скопления хорошо разделяются.

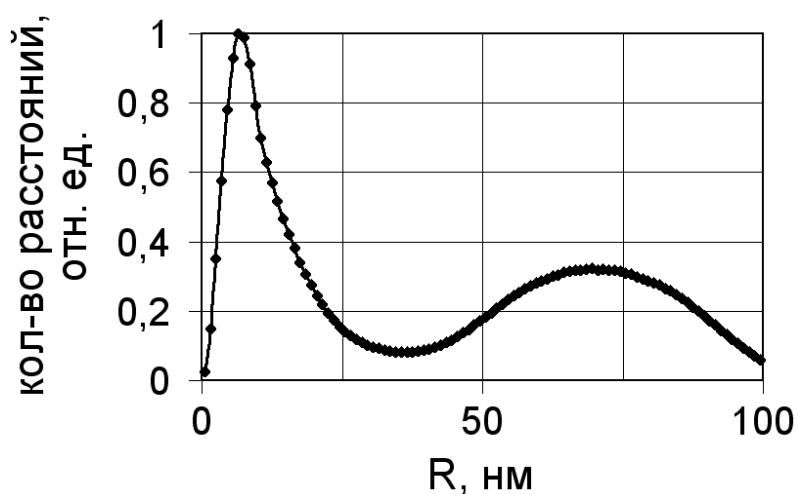


Рис. 26. Распределение попарных расстояний между точками в «кластере», состоящем из двух эллипсоидов вращения с полуосями 5, 5, 30 нм и 5, 5, 15 нм. Последний смещен на 70 нм от первого

Во всех рассчитанных модельных ситуациях получено хорошее соответствие характерных размеров модельных «СКРД» данным, полученным из распределения попарных расстояний между точками, что позволяет предложить данный метод для автоматического численного анализа структуры кластеров.

Однако, в применении данного подхода к исследованию реальной структуры кластеров очевидны две проблемы:

1) концентрации дефектов в реальных СКРД примерно одинаковы, т.е. количество дефектов может существенно отличаться для субкластеров разных размеров, а, следовательно, пики от СКРД малых размеров будут маскироваться пиками от больших СКРД, хотя расстояние между ними при этом будет различаться (рис. 27);

2) в случае, когда расстояния между СКРД сравнимы с размерами последних, пики в распределении, очевидно, не разделяются, хотя визуально скопления дефектов при этом могут быть четко выражены.

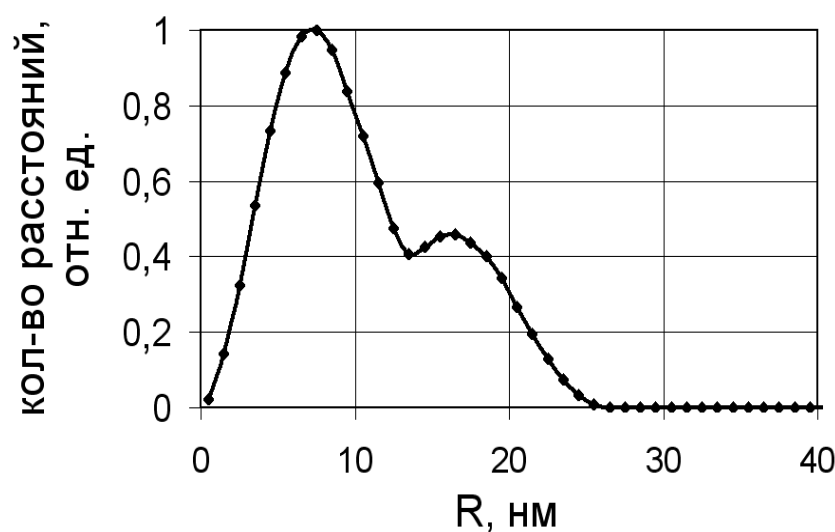


Рис. 27. Распределения попарных расстояний между точками в «кластере», состоящем из а) двух шаров одинаковой «плотности дефектов» с радиусами 4 и 7 нм и расстоянием между ними в 15 нм

В ситуации, подобной той, что часто наблюдается в GaAs, когда несколько скоплений дефектов располагаются в цепочку друг за другом, становится трудно выделить непосредственно размер скоплений (рис. 28). В этом случае только визуальный анализ в сочетании с исследованием отдельных субкаскадов позволят определить соответствие пиков полученного распределения характерным размерам дефектных скоплений и расстояниям между ними.

Таким образом, описанная процедура (III) должна быть дополнена предыдущими (I, II). Визуальный анализ проекций позволяет определить количество СКРД, а расчет энергетического распределения вторичных атомов и моделирование субкаскадов — исследовать отдельные СКРД, что повышает точность и сокращает время расчета, так как число дефектов в СКРД примерно

на порядок меньше, чем в целом кластере. Разность числа субкаскадов в полном каскаде смещенных атомов (т.е. числе вторичных атомов, энергия которых превышает 5 кэВ) и числа СКРД дает число плотных субкластеров в кластере (число перекрывающихся субкаскадов). Общий алгоритм анализа топологии дефектов отображен в блок-схеме на рис. 29.

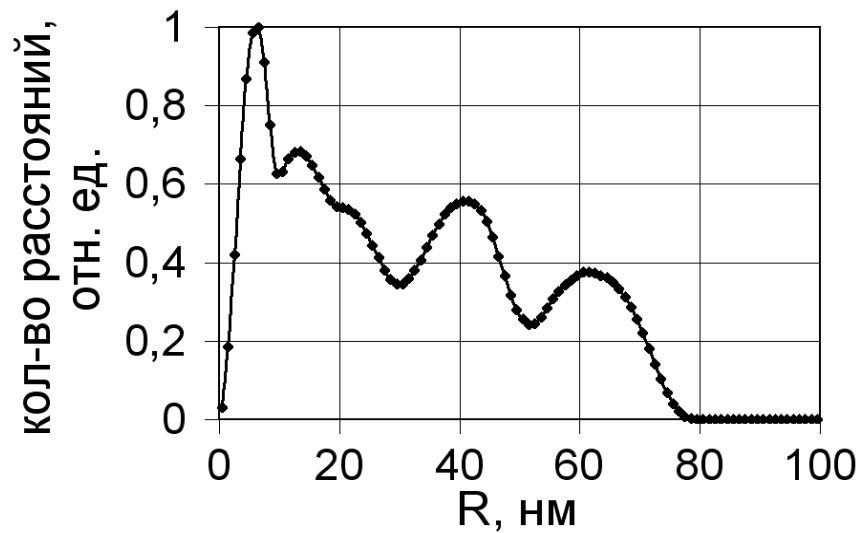


Рис. 28. Распределение попарных расстояний между точками в «КРД», состоящем из трех шаров радиусами 5, 10 и 15 нм, расположенных цепочкой друг за другом. Координаты центров шаров (10, 0, 0), (50, 0, 0) и (70, 0, 0), соответственно

Кластеры радиационных дефектов, аналогично другим типам кластеров в твердом теле, являются фрактальными объектами, одной из их топологических характеристик которых является фрактальная размерность. В данной работе для расчета фрактальной размерности КРД была выбрана формула корреляционной размерности:

$$\alpha = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\ln(C(r))}{\ln(r)}, \quad C(r) = \frac{n(r)}{N^2}, \quad (3.1)$$

где $n(r)$ – число дефектов, расстояние между которыми меньше r , N – полное число дефектов в кластере. Данная формула расчета размерности была выбрана исходя из удобства ее применения на множестве точек (точечных дефектов), которым, по сути, и является КРД. В случае, когда $\ln(C(r))$ является линейной функцией $\ln(r)$, пределом такого частного при $r \rightarrow 0$ будет являться коэффициент перед членом первой степени, т.е. тангенс угла наклона прямой $\ln(C(r))$ в

зависимости от $\ln(r)$. Отметим, что в приведенной формуле, как принято, опущен размерный коэффициент, не влияющий на итоговое значение размерности.



Рис. 29. Общая схема анализа топологии КРД в полупроводниках и полупроводниковых приборах

Как известно, фрактальная размерность определяет плотность заполнения кластером пространства, однако, она никак не характеризует его форму. Предполагалось, что данный параметр может однозначно характеризовать пару «первичный атом – материал». Однако, подобное предположение не подтвердилось.

Отметим, что в данном пункте речь шла об анализе первичного распределения дефектов в КРД. Результаты подобного анализа могут быть использованы для вычисления сечения рассеивающих электроны областей лишь в приближении слабого влияния процессов длительной стабилизации КРД после его

образования. Как будет показано ниже, для легированного GaAs подобное приближение справедливо.

3.1.4. Расчет распределений размеров СКРД и расстояний между ними при воздействии нейтронов различных энергий

На основе предложенной методики проведено моделирование процессов дефектообразования в GaAs при воздействии нейтронов с энергией ~ 1 МэВ и 14 МэВ для различных типов инжектируемых атомов. На рис. 30 приведены рассчитанные в приближении модели твердых шаров спектры первично смещенных атомов, получивших энергию при столкновении с нейтроном спектра деления.

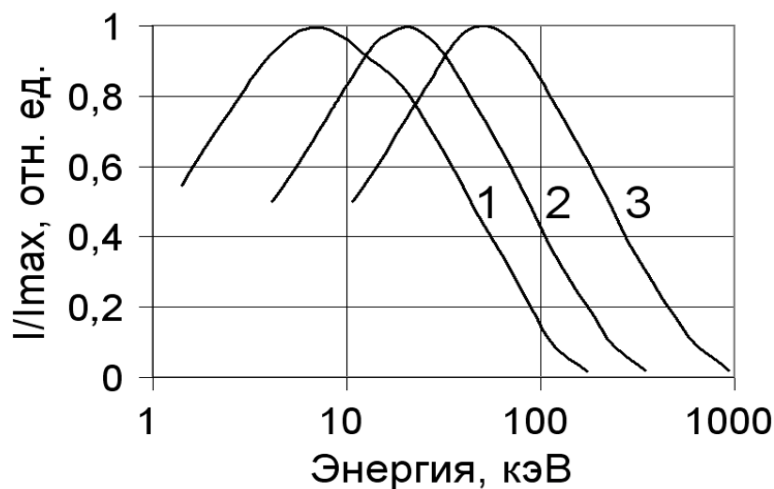


Рис. 30. Энергетические спектры различных первичных атомов, получающих энергию от нейтронов спектра деления: 1 – Au, 2 – Ga, 3 – Al

В распределении учитывалась зависимость сечения взаимодействия нейтронов с атомами материала от их энергии, которое изменяется в пределах нескольких единиц барнов [5, 7, 10]. Среднее значение энергии атомов Ga составляет ≈ 75 кэВ. Однако, достаточно большая часть атомов приобретает энергию до 200 кэВ. Спектр высокоэнергетических нейтронов (14 МэВ) считался моноэнергетическим.

С использованием предложенного выше метода анализировались распределения размеров субкластеров и расстояний между ними при различных энергиях нейтронного облучения. Характерные виды каскадов смещенных атомов показаны на рис. 31; характерный вид распределения расстояний между дефектами в кластере – на рис. 32. В построении итогового распределения найденные параметры (размеры и расстояния между СКРД) учитывались, согласно энергетическому распределению первичных атомов.

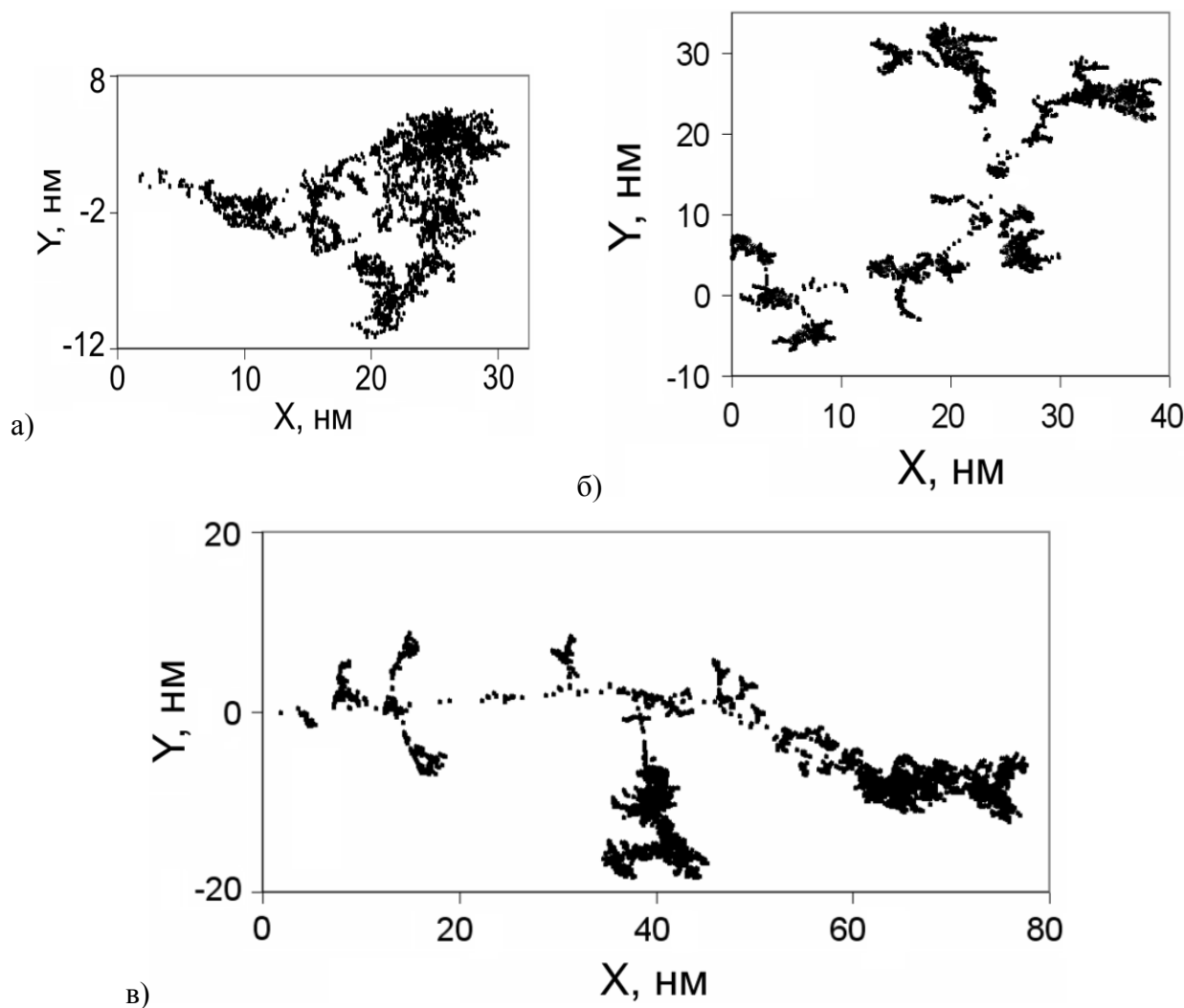
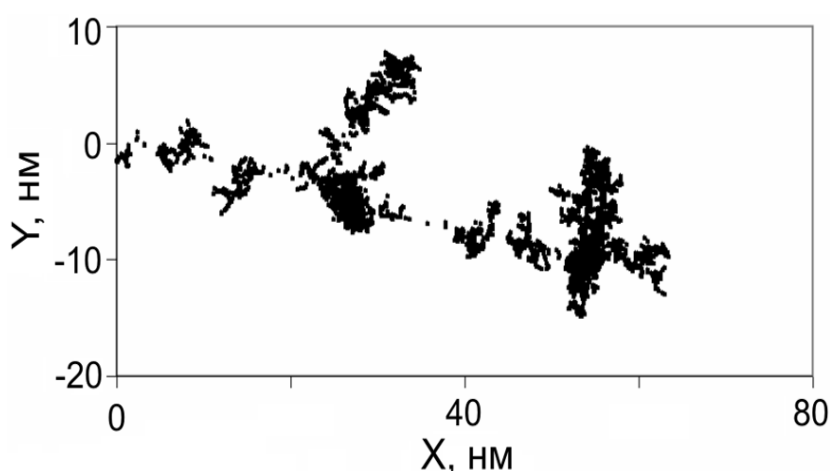
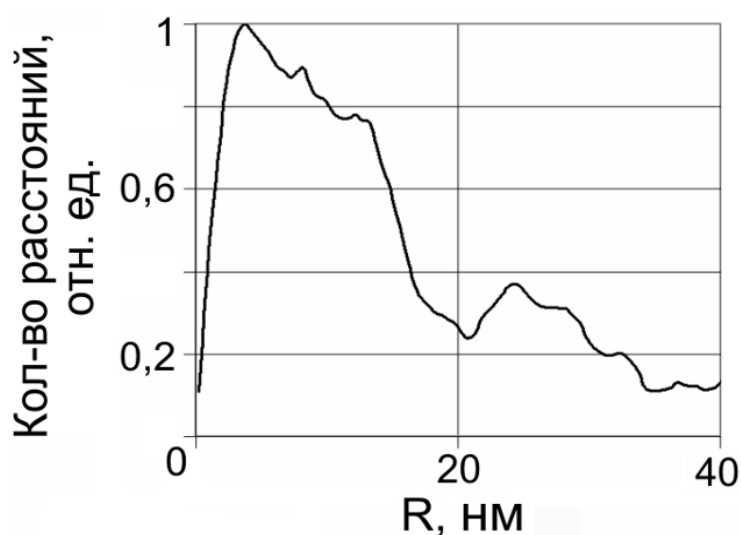


Рис. 31. Проекция на плоскость, перпендикулярную границе раздела, типичных каскадов смещений, образованных в GaAs первичными атомами Ga с энергией а), б) 60 кэВ; в) 100 кэВ. Точками отмечены места расположения точечных дефектов. Черные области неправильной формы – субкластеры радиационных дефектов. По осям отложены координаты проекций точечных дефектов и субкластеров. За начало координат выбрана точка старта первичного атома, получившего энергию при взаимодействии с нейтроном. Для случая энергии 60 кэВ показаны каскады: а) с невыделенными субкаскадами; б) с выделенными

Указанная задача относится к известному классу задач и решается методом «перебора». Поскольку вычисления отдельных расстояний не связаны друг с другом, то весь процесс хорошо распараллеливается и использование суперкомпьютерных технологий позволяет существенно ускорить процесс. Последнее важно для оптимизации конструкции полупроводниковых структур за счет подбора толщины и химического состава слоев полупроводник.



а)



б)

Рис. 32. а) Проекция на плоскость, перпендикулярную границе раздела, типичного каскада смещений, образованного в GaAs первичным атомом Ga с энергией 100 кэВ; б) соответствующее распределение расстояний между дефектами в кластере

В различных условиях облучения распределение размеров субкластеров и расстояний между ними имеет колоколообразный профиль (рис. 33, 34), сре-

занный со стороны малых расстояний и размеров, что определяется процессами стабилизации дефектов, о чем речь пойдет ниже.

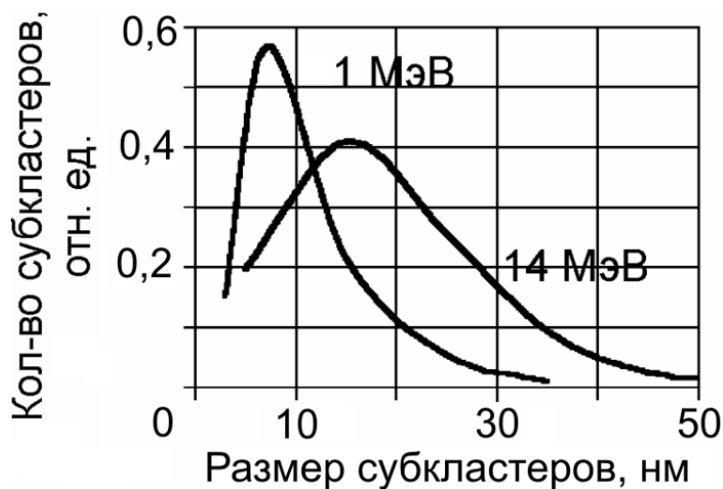


Рис.33. Распределение СКРД в GaAs по размерам при энергиях внедряемого атома Ga, соответствующих облучению нейтронами с энергией ~1 МэВ и 14 МэВ [65]

Средний размер субкластеров в случае собственных первичных атомов составляет около 11 нм при облучении нейтронами спектра деления и около 17 нм в случае нейтронов с энергией 14 МэВ. При этом в зависимости от масс внедряемых атомов, даже при одинаковой исходной энергии, размеры субкластеров могут отличаться в несколько раз.

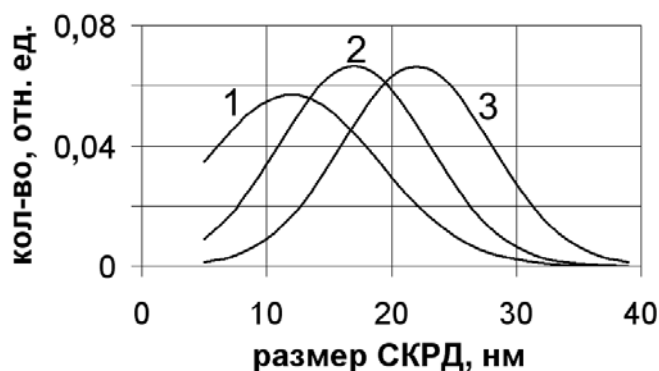


Рис. 34. Распределение расстояний между СКРД, образованными при внедрении в GaAs первичного атома с энергией: 1 — 50 кэВ; 2 — 100 кэВ; 3 — 150 кэВ

Средний размер субкластеров в случае собственных первичных атомов составляет около 11 нм при облучении нейтронами спектра деления и около 17 нм в случае нейтронов с энергией 14 МэВ. При этом в зависимости от масс внедряемых атомов, даже при одинаковой исходной энергии, размеры субкластеров могут отличаться в несколько раз.

3.1.5. Расчет фрактальной размерности кластеров радиационных дефектов, образующихся в GaAs при нейтронном облучении

Как упоминалось ранее, разупорядоченные области являются фрактальными структурами. Фрактальная размерность кластера радиационных дефектов может характеризовать в комплексе результат взаимодействия первичного атома и материала, в котором происходит дефектообразование. Такая характеристика важна для сопоставления конечного числа используемых на сегодняшний день полупроводниковых структур, предназначенных для изготовления полупроводниковых приборов. Важно, что сопоставление производится не с точки зрения электрических параметров приборов, а позволяет оценить устойчивость к радиационному воздействию.

Для проверки данного предположения рассчитывалась фрактальная размерность кластеров, образованных в различных полупроводниках разными первичными атомами.

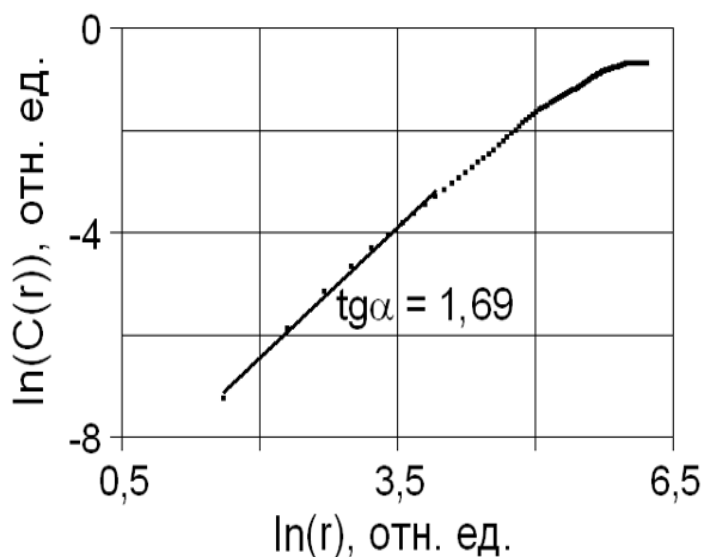


Рис. 35. Иллюстрация расчета фрактальной размерности кластера, образованного первичным атомом Ga в GaAs при воздействии нейтронов спектра деления. Тангенс угла наклона прямой определяет размерность. Обозначения осей соответствуют п. 3.1.3

При различных энергиях первичных атомов значения размерности кластера, образованного первичным атомом галлия, попадали в интервал 1,65...2, атомом алюминия – 1,45...1,9, золота – 1,8...2,2. По-видимому, чем тяжелее

первичный атом, тем больше, в среднем, фрактальная размерность КРД, образованных в выбранном материале. Однако, разброс размерностей кластеров, рассчитанных подобным образом, превышает отличие между средними значениями. Тем более, что расчетные точки (рис. 35) ложатся на прямую лишь в некоторых диапазонах расстояний, что определяет произвол в наклоне прямой, а следовательно, и найденном значении фрактальной размерности КРД. Кроме того, при проведении лишь нескольких численных экспериментов выяснилось, что кластеры, образованные в более легких материалах более тяжелыми первичными атомами, могут иметь практически ту же фрактальную размерность, что и КРД, формирующиеся при движении в более тяжелом материале более легкого первичного атома. Глубоких исследований распределений фрактальной размерности кластеров не проводилось, т.к. в процессе расчетов были найдены ситуации, опровергающие высказанное предположение об однозначном соответствии фрактальной размерности КРД типу материала и первичного атома каскада.

Размерность не характеризует также наличие выделенных субкластеров в КРД. Однако, было обнаружено, что увеличение фрактальной размерности соответствует большей концентрации дефектов в каскаде, что согласуется с представлениями о том, что размерность фрактала не определяет его количественных параметров, но характеризует степень заполнения им пространства.

3.1.6. Стабилизация кластера радиационных дефектов в GaAs

Формирование первичного каскада смещений атомов материала сопровождается значительным разогревом вещества внутри дефектной области [21]. Далее индуцируется сложный многоступенчатый процесс стабилизации кластера, включающий диффузию межузельных атомов и вакансий, образование дивакансий и различных комплексов с атомами примеси (кислорода, углерода, доноров и др.).

В первом приближении дивакансии, в отличие от вакансий, можно считать неподвижными. Тогда процесс стабилизации кластера будет определяться соотношением характерных времен диффузии вакансий и их реакции друг с другом. При высокой скорости образования дивакансий кластер «застынет» в форме, близкой к исходной. В противном случае диффузия вакансий приведет к «разбеганию» КРД (или СКРД).

Времена диффузии вакансий и образования дивакансий можно оценить как

$$\tau_d \approx L^2/D_V, \quad (3.2)$$

$$\tau_{VV} \approx 1/(\alpha_{VV}N_{V0}), \quad (3.3)$$

где L - характерный размер скопления вакансий, D_V - коэффициент их диффузии, α_{VV} - вероятность элементарного акта реакции $V + V \rightarrow V_2$, а N_{V0} - концентрация вакансий в максимуме. Оценки по формулам (3.2), (3.3) показывают, что ядра субкластеров, имеющие размеры больше 30-40 Å, в GaAs являются «застывающими» и в совокупности образуют стабильные кластеры радиационных дефектов. Более мелкие СКРД распадаются.

Отметим, что в общем случае помимо диффузии необходимо рассматривать дрейф междоузельных атомов и вакансий в электрическом поле кластера, однако в случае легированных эпитаксиальных слоев GaAs стабилизация кластера происходит быстрее, чем его зарядка.

В среднем при облучении GaAs нейтронами с энергией 1,5 МэВ образуется 3...10 устойчивых субкластеров, которые могут перекрываться или располагаться отдельно. ОПЗ субкластеров объединяются в единое целое, которое препятствует движению низкоэнергетичных электронов, а высокоэнергетичные электроны могут пролетать между субкластерами.

Результаты измерений размеров КРД в зависимости от методики эксперимента дают величины 20...50 нм, т.е. при количестве СКРД в кластере от 3 до 10 штук средний размер субкластера составляет 5...17 нм, что совпадает с приведенными выше результатами расчетов.

3.2. Характеристики области пространственного заряда СКРД в GaAs

Рассмотрим структуру области пространственного заряда (ОПЗ) кластера, которая является потенциальным барьером для носителей заряда, а, следовательно, и центром их рассеяния. На основании расчетов по модели Госсика оценим размеры ОПЗ субкластера, а также расстояние между субкластерами, через которое горячие электроны могут в некоторых случаях проникать «сквозь» кластер, состоящий из нескольких субкластеров комплексов точечных радиационных дефектов. Важно, что для решения поставленной задачи нет необходимости детально исследовать весьма сложные процессы внутри ядра субкластера, возникающего в GaAs. Необходимо лишь оценить зависимость потенциала от координаты в ОПЗ субкластера.

Предполагалось, что СКРД имеет сферическую форму, что, как показывают результаты моделирования формы СКРД в GaAs, оправдано. Согласно модели Госсика [23], в центре такого образования находится нейтральное ядро, обогащенное дивакансиями, радиуса r_0 , ядро окружено тонкой оболочкой радиуса r_1 , состоящей из комплексов вакансий с примесью (рис. 36).

Это образование находится внутри области пространственного заряда радиуса r_2 , размеры которой зависят от концентрации носителей в ненарушенной матрице кристалла. Ранее такая модель применялась для всего КРД целиком [22], но очевидно, что подобный подход может быть применен и для каждого отдельного СКРД. Использование модели Госсика для описания ОПЗ СКРД позволяет получить значительно более точные результаты при моделировании рассеяния горячих электронов на СКРД методом Монте-Карло. Такая задача ресурсоемка и наиболее эффективно ее решать можно лишь с использованием суперкомпьютерных технологий. Важной особенностью этого этапа вычислений является привлечение для описания потоков электронов в полупроводниковых приборах других физических моделей, основанных на гидродинамических подходах к моделированию. Методология этого подхода описана в отдельном учебном пособии.

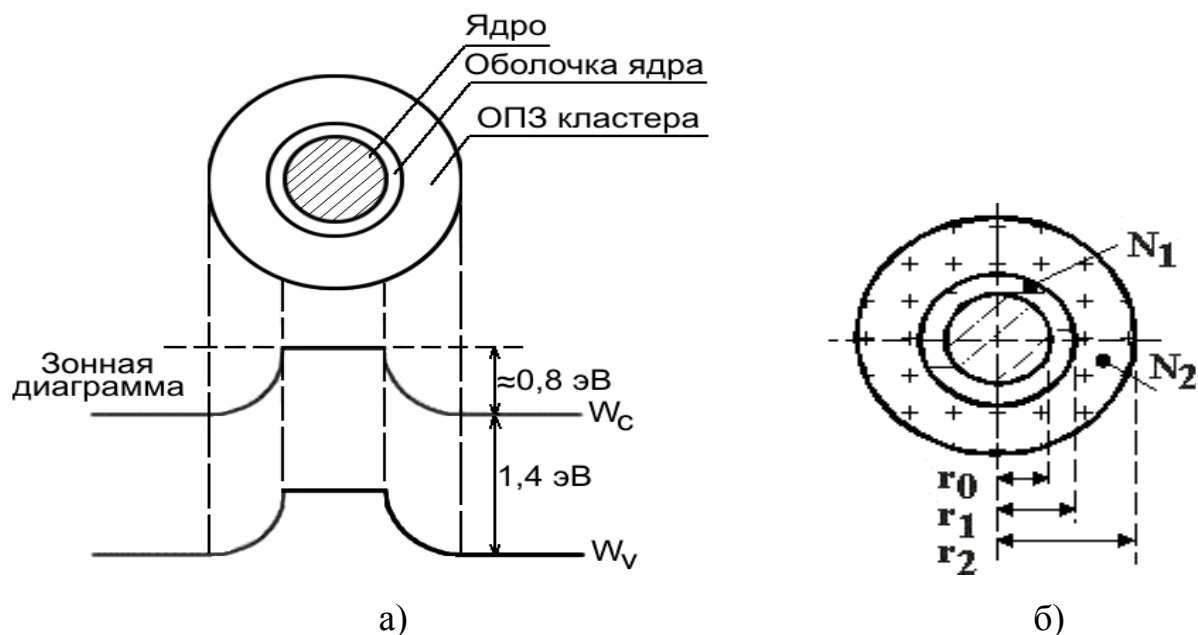


Рис. 36. Структура СКРД в полупроводнике n-типа (модель Госсика [23]): радиус внутреннего ядра – r_0 ; радиус поврежденной области – r_1 ; радиус области пространственного заряда – r_2 ; концентрация заряженных радиационных дефектов – N_1 ; концентрация ионов доноров – N_2

Распределение потенциала в СКРД и его окрестностях описывает уравнение Пуассона [23] :

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = -\frac{4\pi}{\varepsilon} r^2 Q(r), \quad (3.4)$$

где r – радиус-вектор; $Q(r)$ – плотность заряда; ε - диэлектрическая проницаемость материала.

Правая часть уравнения (3.4) в общем случае включает заряд как неподвижных центров, так и подвижных носителей, т.е. рассматривая для определенности полупроводник n-типа, имеем:

$$Q(r) = -q(n(r) + N_t^- - N_t^+), \quad (3.5)$$

где $N_t^{+, -}$ - концентрация положительно и отрицательно заряженных центров, $n(r)$ – переменная концентрация свободных электронов, зависящая от $\phi(r)$.

В ядре разупорядоченной области уровень Ферми закреплен в предельном положении и в GaAs находится примерно на 0,6 эВ выше потолка

валентной зоны. Таким образом для концентрации свободных электронов $n_0=10^{14}-10^{18} \text{ см}^{-3}$ $q\phi(r) \gg kT$, поэтому зарядом подвижных носителей можно пренебречь. Тогда в приближении резкого $p-n$ – перехода мы получим распределение плотности пространственного заряда, соответствующее модели Госсика [23].

Решая уравнения Пуассона, получаем:

$$\begin{aligned} \phi(r) &= \phi_0, \text{ если } 0 < r \leq r_0, \text{ где} \\ \phi_0 &= \frac{4}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} \left[N_1 \left(\frac{3}{2} \{r_0^2 - r_1^2\} + \frac{r_1^3 - r_0^3}{r_2} \right) + N_2 \left(\frac{r_2^2 - r_1^2}{2} + \frac{r_1^2(r_1 - r_2)}{r_2} \right) \right]; \\ \phi(r) &= A_1 r^2 + \frac{B_1}{r} + C_1, \text{ если } r_0 < r \leq r_1, \text{ где} \\ A_1 &= \frac{2}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} N_1, \quad B_1 = \frac{4}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} N_1 r_0^3, \\ C_1 &= \frac{4}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} \left[N_1 \left(-\frac{3}{2} r_1^2 + \frac{r_1^3 - r_0^3}{r_2} \right) + N_2 \left(-\frac{r_1^3}{r_2} + \frac{r_2^2 - 3r_1^2}{2} \right) \right]; \\ \phi(r) &= A_2 r^2 + \frac{B_2}{r} + C_2, \text{ если } r_1 < r \leq r_2, \text{ где} \\ A_2 &= -\frac{2}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} N_2, \quad B_2 = -\frac{4}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} \left[N_1 (r_1^3 - r_0^3) + N_2 r_1^3 \right], \\ C_2 &= \frac{4}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} \left[N_1 \frac{r_1^3 - r_0^3}{r_2} + N_2 \left(\frac{r_2^2}{2} + \frac{r_1^3}{r_2} \right) \right]; \\ \phi(r) &= 0, \text{ если } r_2 < r. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Для нахождения характеристик разупорядоченной области необходимыми условиями являются требование равенства зарядов внутренней и внешней частей слоя пространственного заряда и связь значений концентраций положительных и отрицательных зарядов с высотой потенциального барьера ϕ_0 соотношением из теории резкого $p-n$ – перехода. Система уравнений принимает вид [6, 11, 25]

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_0 = \frac{4}{3} \frac{\pi q}{\varepsilon} \left[N_1 \left(\frac{3}{2} \{r_0^2 - r_1^2\} + \frac{r_1^3 - r_0^3}{r_2} \right) + N_2 \left(\frac{r_2^2 - r_1^2}{2} + \frac{r_1^2(r_1 - r_2)}{r_2} \right) \right], \\ N_1(r_1^3 - r_0^3) = N_2(r_2^3 - r_1^3), \\ \varphi_0 = \frac{k_B T}{q} \ln \left(\frac{N_1 N_2}{n_i^2} \right), \end{array} \right. \quad (3.6, a)$$

где n_i – собственная концентрация носителей заряда.

По известному значению потенциала в центре КРД (φ_0) и концентрации заряженных центров в среде ($N_2 = N_d$ – концентрация доноров) с помощью третьего соотношения системы нелинейных уравнений определялась концентрация заряженных центров внутри области (N_1). По известным значениям N_1 , N_2 , r_1 и φ_0 проводилось решение системы из двух первых уравнений системы и находились значения r_0 и r_2 .

Облучение нейтронами приводит к закреплению уровня Ферми вблизи $\varphi_0 = (E_V + 0,6)$ эВ, но будет зависеть от концентрации дефектов в ядре СКРД (10^{18} - 10^{19} см⁻³ в зависимости от размеров и формы СКРД). Зависимости рассчитанных значений r_0 , r_1 , r_2 и φ_0 от концентрации легирующей примеси приведены на рис. 37, а зависимости потенциала и радиальной составляющей напряженности электрического поля от расстояния до центра СКРД на рис. 38.

Как следует из рисунков, изменение положения уровня Ферми в ядре ведет к изменению потенциала вблизи ядра. Это будет сказываться на сечении рассеяния наиболее горячих носителей, которые могут подлетать близко к самому ядру и взаимодействуют с ним за счет короткого «удара». Напротив, холодные электроны будут обтекать кластеры радиационных дефектов диффузионным образом, так как если бы ядро кластера представляло собой вкрапление полупроводника другого типа, за счет чего был бы образован шарообразный p-n переход.

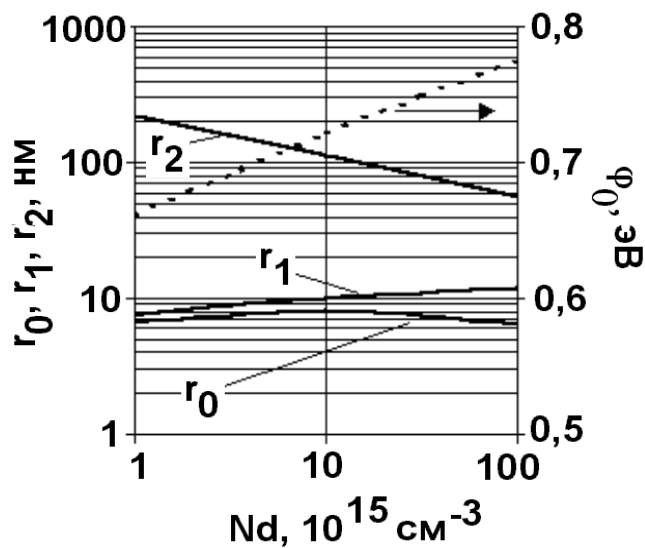


Рис. 37. Зависимости от концентрации легирующей примеси: радиусов поврежденной области - r_1 ; внутреннего ядра - r_0 ; слоя пространственного заряда - r_2 ; потенциала в центре КРД - ϕ_0

Как показывает расчет, в легированном n-GaAs электроны с энергиями выше 0,3-0,4 эВ могут проникать между субкластерами в каскаде смещений, образованном первичными атомами Ga или As с энергией более 80...120 кэВ. На рис. 39 приведены средние значения расстояний между субкластерами и распределения субкластеров в GaAs.

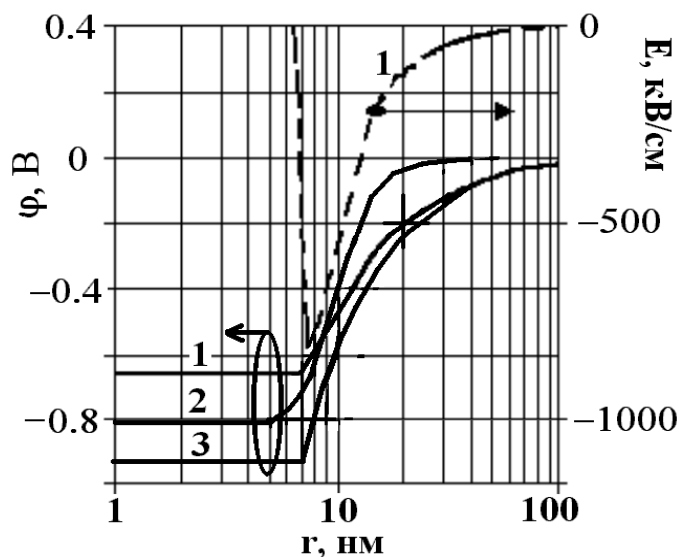


Рис. 38. Зависимости от координаты: потенциала - ϕ ; радиальной составляющей напряженности электрического поля - E . Координата отсчитывается от центра КРД. Исходная концентрация легирующей примеси: 1, 3 - 10^{15} см^{-3} ; 2 - $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Закрепление уровня Ферми в ядре: 1, 2 - $E_v + 0,6 \text{ эВ}$; 3 - $E_v + 0,9 \text{ эВ}$

Следует отметить, что поскольку разброс значений расстояний между субкластерами в кластере сравним со средним значением, то практически в каждом субкластере, образованном первичным атомом с энергией больше 60

кэВ, найдется «отверстие», через которое горячий электрон сможет проникнуть сквозь кластер.

На рис. 40 приведены изображения КРД, полученные в результате расчетов методом Монте-Карло. При проведении расчетов предполагалось, что быстрые нейтроны, которые в силу отсутствия заряда могут проникать в твердые тела на расстояния порядка десятков сантиметров, взаимодействуют с атомами мишени по всей глубине полупроводниковой структуры. В результат «лобового» столкновения нейтрона с атомом мишени последним передается энергия 10...1000 кэВ в зависимости от массы атома и энергии налетающего нейтрона (0.01...10 МэВ). В результате первичный атом возникает не у поверхности образца, как это получается при использовании технологии ионного легирования, а в глубине материала. В силу случайного характера движения нейтронов, порожденных например ядерным реактором, направления старта первичного атома так же имеют случайный характер.

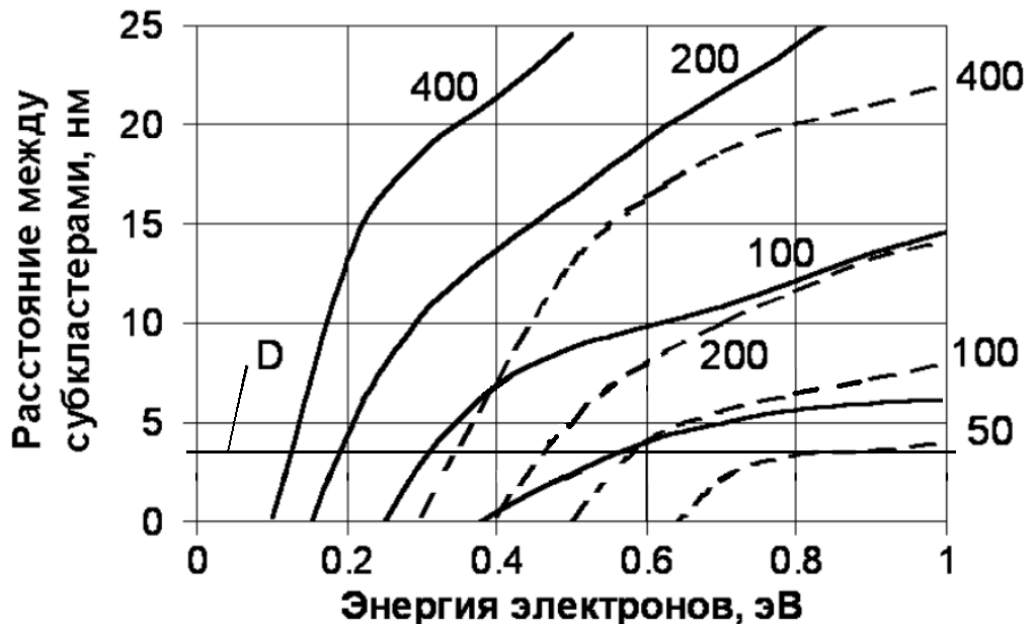


Рис. 39. Зависимости среднего расстояния между непрозрачными для электронов областями субкластеров от энергии электрона в n-GaAs: концентрация легирующей примеси $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ - (—); 10^{15} см^{-3} - (- - -). Цифрами указана энергия первичного атома Ga (в кэВ). D - размер зазора между кластерами при котором существенным становится квантовое отражение

На рис. 41 представлен результат графической обработки этого изображения. Убраны мелкие («разбежавшиеся») субкластеры, выделены области ядер и ОПЗ СКРД, соответствующие протеканию горячих и холодных электронов. В то время как для холодных электронов движение практически запрещено, горячие электроны могут проникать между ядрами СКРД.

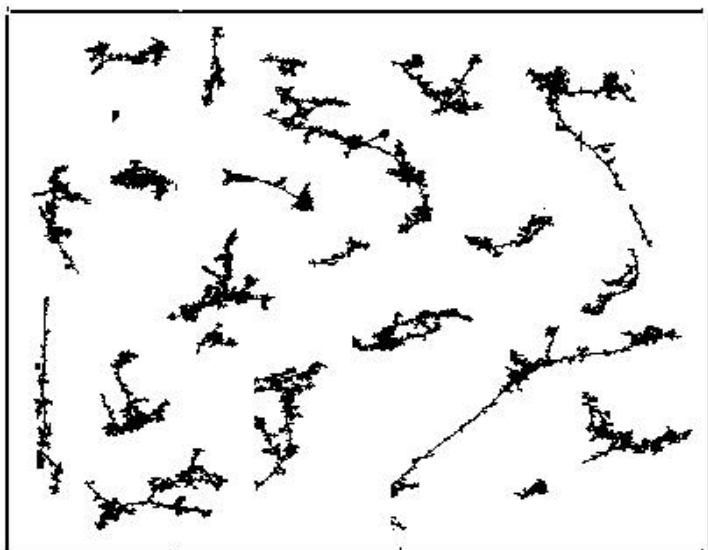


Рис. 40. Результат расчета методом Монте-Карло распределения кластеров в объеме 300х300х300 нм. На рисунке приведена проекция на переднюю грань воображаемого куба

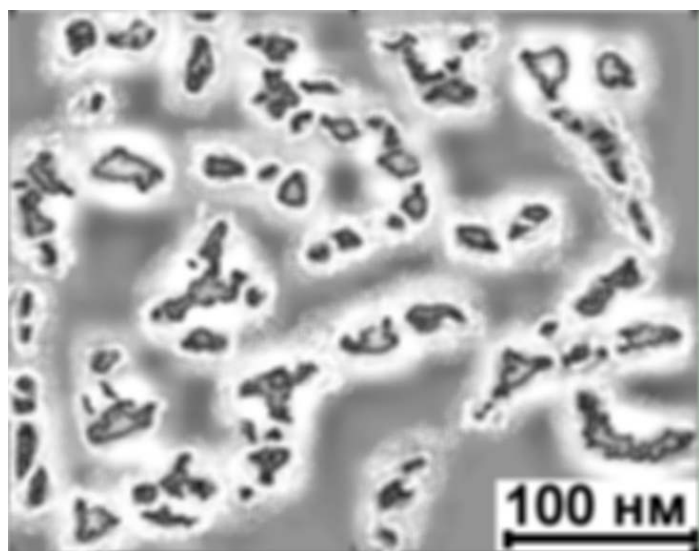


Рис. 41. Распределение СКРД после «разбегания» мелких субкластеров. Выделены островки потенциального рельефа, которые являются препятствием для всех электронов (черным). Холодные электроны могут двигаться только по темному фону, т.е. их движение практически подавлено. Белым фоном показаны ОПЗ СКРД, прозрачные для горячих электронов (с энергией >0.4 эВ)

Результат расчетов и «ручной» обработки, приведенный на рисунке 40 несет очень важный смысл, так как позволяет получить визуальное представление о характере поражения материала и геометрических особенностях траекто-

рий электронов, движущихся между атомами. Последнее позволяет описывать транспорт электронов используя классическое и/или квантовое приближения. Объяснение данных особенностей движения выходит за рамки этого пособия. Мы лишь отметим, что указанная задача ресурсоемка и требует специальных подходов для ее решения, в том числе использования высокопроизводительных вычислений.

Об особенностях движения электронов в квантово-размерных областях между кластерами радиационных дефектов и границами гетеропереходов будет написано отдельное учебное пособие.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сфера применения параллельных вычислений, в частности, на графических процессорах, в вычислительной физике неуклонно расширяется. Это позволяет решать как уже существующие задачи с большей детализацией, так и ставить принципиально новые вычислительно сложные задачи. Представленная в данной работе одномерная квазигидродинамическая модель переноса носителей заряда в полупроводниковых приборах легко может быть обобщена на двумерный и трехмерный случай. При этом, по-видимому, более эффективной будет являться пространственная дискретизация методом конечных объемов, обладающая свойством естественной консервативности. Отметим, что расширение математической модели (введение новых уравнений, увеличение размерности задачи) не требует изменения постановки и решения системы дифференциально-алгебраических уравнений, а рост числа узлов расчетной сетки только увеличит эффективность параллельного алгоритма.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мырова Л.О., Чепиженко А.В. Обеспечение стойкости аппаратуры связи к ионизирующим и электромагнитным излучениям. -М.: Радио и связь, 1988. - 296 с.
2. Агаханян Т.М., Аствацатурьян Е.Р., Скоробогатов П.К. Радиационные эффекты в интегральных микросхемах. - М.: Энергоатомиздат, 1989. - 256 с.
3. Громов Д.В. Теоретический анализ и экспериментальное исследование функционирования сверхвысокочастотных интегральных схем на арсениде галлия при воздействии радиационных и электромагнитных излучений: Дис...док. техн. наук: 05.27.01 / Д.В.Громов. – Москва, 2001. – 445 с.
4. Аккерман А.Ф., Грудский М.Я., Смирнов В.В. Вторичное электронное излучение из твердых тел под действием гамма-квантов. - М.: Энергоатомиздат, 1986. - 168 с.
5. Бете Х. А., Ашкин Д. Экспериментальная ядерная физика. - М.: Изд. иностр. лит., 1955. - 142 с.
6. Вавилов В.С. Действие излучений на полупроводники. - М.: Физматгиз, 1963. - 264 с.
7. Эберт Г. Краткий справочник по физике. - М.: Физматгиз, 1963. – 552 с.
8. Аккерман А.Ф., Никитушев Б.М., Ботвин В.А. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. - Алма-Ата: Наука, 1972. - 163 с.
9. Вавилов В.С., Кекелидзе Н.П., Смирнов Л.С. Действие излучений на полупроводники. - М.: Наука, 1988. - 192 с.
10. Вавилов В.С., Ухин Н.А. Радиационные эффекты в полупроводниках и полупроводниковых приборах. - М.: Атомиздат, 1969. - 311 с.
11. Коноплева Р.Ф., Остроумов В.Н. Взаимодействие заряженных частиц высоких энергий с германием и кремнием. - М.: Атомиздат, 1975. - 128 с.
12. Винецкий В.Л., Холодарь Г.А. Радиационная физика полупроводников. - Киев: Наукова думка, 1979. - 332 с.

13. Корбетт Дж., Бургуэн Ж. Дефектообразование в полупроводниках // Точечные дефекты в твердых телах / Под ред. Болтакса Б.И. - М.: Мир, 1979. - 379 с.
14. Коршунов Ф.П., Богатырев Ю.В., Вавилов В.А. Воздействие радиации на интегральные микросхемы. - М.: Наука и техника, 1986. - 254 с.
15. Динс Д., Виньярд Д. Радиационные эффекты в твердых телах. - М.: Изд. иностр. лит., 1960. - 243 с.
16. Ланг Д. Радиационные дефекты в соединениях $A^{III}B^V$ // Точечные дефекты в твердых телах / Под ред. Болтакса Б.И. - М.: Мир, 1979. - 379 с.
17. Коноплева Р.Ф., Питвинов В.Л., Ухин Н.А. Особенности радиационного повреждения полупроводников частицами высоких энергий. - М.: Атомиздат, 1971. - 176 с.
18. Радиационные методы в твердотельной электронике. / Вавилов В.С., Горин Б.М., Данилин Н.С. и др. - М.: Радио и связь, 1990. - 184 с.
19. Физические процессы в облученных полупроводниках. / Под ред. Смирнова Л.С. - Новосибирск: Наука, 1977. - 253 с.
20. Голанд А. Современное изучение точечных дефектов в металлах. Избранные вопросы // Точечные дефекты в твердых телах / Под ред. Болтакса Б.И. - М.: Мир, 1979. - 379 с.
21. Томсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. - М.: Мир, 1971. - 367 с.
22. Bertolotti M. Characteristics of the disordering region in the semiconductors // J. Appl. Phys. - 1967. - № 12. - P. 2645-2649.
23. Gossik B.R. Disordered region in semiconductors bombarded by fast neutron // J. Appl. Phys. - 1954. - № 9. - P. 1214-1218.
24. Аствацатурьян Е.Р., Громов Д.В., Ломако В.М. Радиационные эффекты в приборах и интегральных схемах на арсениде галлия. - Минск: Университетское, 1992. - 219 с.

25. Зулиг Р. Радиационные эффекты в ИС на GaAs // Арсенид галлия в микроэлектронике / Под ред. Айнспрука Н., Уиссмана У. - М.: Мир, 1988. - С. 501-547.
26. Першенков В.С., Попов В.Д., Шальнов А.В. Поверхностные радиационные эффекты в элементах интегральных микросхем. - М.: Энергоатомиздат, 1988. - 256 с.
27. Ладыгин Е.А. Действие проникающей радиации на изделия электронной техники. - М.: Сов.радио, 1980. - 224 с.
28. Коршунов Ф.П., Богатырев Ю.В., Вавилов В.А. Воздействие радиации на интегральные микросхемы. – М.: Наука и техника, 1986. -254 с.
29. Biersak J.P. Computer simulation of sputtering // Nuclear instruments and methods in physic research. - 1987. - № 1. - P. 21-36.
30. Оболенский С.В. Предел применимости локально-полевого и квазигидродинамического приближения при расчетно-экспериментальной оценке радиационной стойкости субмикронных полупроводниковых приборов // Изв. вузов: Электроника. - 2002. - № 6. - С. 31-38.
31. Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2010. – 232 с.
32. Сандерс Д., Кэндрот Э. Технология CUDA в примерах: введение в программирование графических процессоров. – М.: ДМК Пресс, 2011. – 232
- Боресков А.В., Харламов А.А., Марковский А.А., Микушин Д.Н., Мортиков Е.В., Мыльцев А.А., Сахарных Н.А., Фролов В.А. Параллельные вычисления на GPU. Архитектура и программная модель CUDA. – М.: МГУ, 2012. – 336 с.
33. Воеводин В.В. Вычислительная математика и структура алгоритмов. – М.: МГУ, 2010. – 168 с.
34. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем. – М.: МГУ, 2010. – 544 с.
35. Корняков К.В., Кустикова В.Д., Мееров И.Б., Сиднев А.А., Сысоев А.В., Шишков А.В. Инструменты параллельного программирования в системах

- с общей памятью. – М.: МГУ, 2010. – 272 с.
- 36.Линев А.В., Боголепов Д.К., Бастраков С.И. Технологии параллельного программирования для процессоров новых архитектур – М.: МГУ, 2010. – 160 с.
- 37.Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2011. – 232 с.
- 38.Сандерс Дж., Кэндрот Э. Технология CUDA в примерах: Введение в программирование графических процессоров. – М.: ДМК Пресс, 2011. – 232 с.
- 39.Гречников Е.А., Михайлов С.В., Нестеренко Ю.В., Поповян И.А. Вычислительно сложные задачи теории чисел. – М.: МГУ, 2012. – 312 с.
- 40.Боресков А.В., Харламов А.А. Марковский Н.Д., Микушин Д.Н., Мортиков Е.В., Мыльцев А.А., Сахарных Н.А., Фролов В.А. Параллельные вычисления на GPU. Архитектура и программная модель CUDA. – М.: МГУ, 2012. – 336 с.
- 41.Гергель В.П. Современные языки и технологии параллельного программирования. – М.: МГУ, 2012. – 408 с.
- 42.Антонов А.С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP. – М.: МГУ, 2012. – 344 с.
- 43.Лыкосов В.Н., Глазунов А.В., Кулямин Д.В., Мортиков Е.В., Степаненко В.М. Суперкомпьютерное моделирование в физике климатической системы. – М.: МГУ, 2012. – 408 с.
- 44.Якобовский М.В. Введение в параллельные методы решения задач. – М.: МГУ, 2013. – 328 с.
- 45.Стронгин Р.Г., Гергель В.П., Гришагин В.А., Баркалов К.А. Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации – М.: МГУ, 2013. – 280 с.
- 46.Рутм Г., Фатика М. CUDA Fortran для ученых и инженеров. – М.: ДМК Пресс, 2014. – 364 с.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие виды излучений характерны для ядерного взрыва?
2. Какие виды излучений характерны для ядерных энергетических установок?
3. Какие виды излучений характерны для космического пространства?
4. Какие виды излучений используются в технологических процессах производства дискретных полупроводниковых приборов и интегральных микросхем?
5. В чем заключаются основные особенности взаимодействия нейтронов с веществом?
6. Чем отличается процесс ионизации вещества от дефектообразования и какими излучениями указанные процессы активизируются?
7. Что такое радиационные дефекты и какова их структура?
8. Чем кластеры радиационных дефектов отличаются от субкластеров?
9. Что такое модель Госсика?
10. В чем заключаются особенности физической модели процесса формирования радиационных дефектов?
11. В чем заключаются основные особенности проведения оптимизации полупроводниковой структуры с использованием методов параллельных вычислений?
12. Каковы подходы к организации процедуры вычислений с использованием процедуры параллельных вычислений?
13. Каковы особенности применения процедуры параллельных вычислений к задачам, решаемым методом Монте-Карло?
14. Когда выгодно применять процедуру параллельных вычислений?
15. Какова методика расчета фрактальной размерности радиационных дефектов?
16. Насколько велика и каким образом может быть рассчитана неоднородность распределения радиационных дефектов в кластерах и субкласте-

рах?

17. В чем заключается алгоритм анализа топологии кластеров радиационных дефектов?
18. Каковы характеристики области пространственного заряда кластеров радиационных дефектов?
- 19.

Екатерина Валерьевна **Волкова**
Сергей Владимирович **Оболенский**

**МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ
СТРУКТУРЫ КЛАСТЕРОВ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ.
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

Учебное пособие

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.

Подписано в печать . Формат 60×84 1/16.
Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура Таймс.
Усл. печ. л. . Уч-изд. л.
Заказ № . Тираж 20 экз.

Отпечатано в типографии Нижегородского госуниверситета
им. Н.И. Лобачевского
603600, г. Нижний Новгород, ул. Большая Покровская, 37
Лицензия ПД № 18-0099 от 14.05.01