



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 21 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Аверина Т.А., [Змиевская Г.И.](#),
[Бондарева А.Л.](#), Хилков С.А.

Решение уравнений
стохастического аналога
неравновесной стадии
фазового перехода и
пористость карбида кремния

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Решение уравнений стохастического аналога неравновесной стадии фазового перехода и пористость карбида кремния / Т.А.Аверина [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 21. 37 с. doi:[10.20948/prepr-2016-21](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-21)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-21>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

**Т.А. Аверина, Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева,
С.А. Хилков**

**Решение уравнений стохастического аналога
неравновесной стадии фазового перехода
и пористость карбида кремния**

Москва — 2016

Т.А. Аверина, Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева, С.А. Хилков

Решение уравнений стохастического аналога неравновесной стадии фазового перехода и пористость карбида кремния

Пористость в тонких слоях образца, состоящего из карбида кремния и металла, возникает при радиационных повреждениях кристаллической решетки. Вакансионно-газовые дефекты (ВГД) образуются при фазовом переходе, модель которого представлена кластеризацией зародышей ВГД и броуновским движением их кластеров. Устойчивыми численными методами решены системы стохастических уравнений Ито для траекторий ВГД, изучены функции распределения (ФР) по размерам ВГД в декартовой системе координат решетки и оценены локальные напряжения в слое карбида кремния, вызываемые пористостью

Ключевые слова: стохастические уравнения Ито, флуктуации, фазовый переход, пористость, кинетические уравнения, неравновесные процессы.

T.A. Averina, G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva, S.A. Khilkov

Solution of stochastic analog equation during non-equilibrium stage of phase transition and silicon carbide porosity

The porosity in the thin layer sample consisting of silicon carbide and metal occurs when radiation damages the crystal lattice. Vacancy-gas defects (VGDs) are formed during the phase transition, whose model is presented clustering VGDs nuclei and Brownian motion of clusters. The Ito stochastic equations system for VGDs trajectories solved using stable numerical methods and distribution functions (DFs) of sizes in the Cartesian coordinates of the lattice studied as well as local stresses in the layer of silicon carbide, due to porosity evaluated.

Key words: stochastic equations Ito fluctuations, phase transition, porosity, kinetic equations, non-equilibrium processes.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 14-01-0078, 15-01-05052, 14-01-00340 и Совета по грантам Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (проект НШ–5111.2014.1).

Оглавление

Введение	3
Методы решения стохастических дифференциальных уравнений.....	6
Модель образования нанопор (блистеров) и используемые приближения	12
Обсуждение результатов	21
Заключение.....	35
Благодарности.....	36
Список литературы.....	36

Введение

Радиационные потоки, действующие на поверхность образца, создают в тонких поверхностных слоях облучаемого материала дефекты кристаллической решетки. Возникают вакансионные поры, которые заполняются инертным газом радиационных потоков, происходит фазовый переход (ФП) 1-го рода, когда образование пор подобно конденсации жидкости из пара. Постоянство воздействия радиационного потока создает условия «открытой физической системы». Процессы образования вакансионно-газовых дефектов (ВГД) в кристаллической решетке металлов, полупроводников или диэлектриков подобны конденсации жидкости или кристаллизации расплава. На начальной стадии ФП быстропротекающие столкновительные процессы формируют зародыши новой фазы и в результате флуктуаций размера зародыша в системе «пар-жидкость или пар-кристалл», а также «вакансии-пора в кристаллической решетке» происходит кластеризация зародыша ФП. В кинетической модели ФП на стадии образования зародышей эти процессы характеризуются функциями распределения (ФР) зародышей по размерам и декартовым координатам пространства, в котором изучается процесс, изменение ФР – описывается уравнениями кинетической теории в частных производных или стохастическими уравнениями Ито–Стратоновича [1-4]. Процесс образования дефектов кристаллической решетки в форме вакансионно-газовых пузырьков, или блистеринг, возникающий при воздействии радиационных потоков на материалы, изучен в меньшей степени, чем точечные радиационные дефекты, в частности в карбиде кремния [13, 14]. Возникновение и эволюция размеров дислокаций и петель дислокаций в материалах моделировалось методами молекулярной динамики (МД) [15, 16], где обратили внимание на сложность проблемы. Результаты, полученные методом МД (имеющим ряд ограничений принципиального свойства, которые подробно проанализированы в работе [15]), стимулируют рассмотрение задачи другими методами, например, стохастической молекулярной динамики или методами стохастического аналога. В методе МД потенциалы взаимодействия между частицами (в том числе потенциал «погруженного атома») никаким образом не привязывают к физическим причинам, вызывающим взаимодействие, не учитываются стохастические свойства больших ансамблей траекторий для описания движения дислокаций уравнениями Ньютона, но тем не менее делаются важные шаги в изучении протяженных дефектов твердого тела под механической нагрузкой и др.

Численный метод стохастического аналога [2-4] неравновесных физико-химических процессов позволяет решать уравнения математической физики параболического типа в частных производных. В [17] используется идея Я.Б. Зельдовича [5], касающаяся образования и изменения размера зародыша при конденсации пара, а именно, зародышеобразование можно представить случайным процессом $\{g(t), t \geq 0\}$, моделирующим диффузию в фазовом

пространстве размеров кластеров зародышей $\{G\}$, $\forall g_i \in \{G\}$, $i=1, \dots, I$; индексом i обозначены все размеры кластеров в единице объема. В кинетической модели образования пор в условиях «открытой физической системы» не используется равновесное распределение зародышей по размерам (Слезова-Лифшица), также как и приближенно-аналитические оценки размеров зародышей, хорошо известные теоретикам. Однако в ряде приложений требуется численное решение кинетических уравнений, описывающих фазовый переход на начальной стадии, когда образуются зародыши новой фазы и происходит нестационарная кластеризация зародышей. Неравновесные ФР зародышей кластеров по размерам используются для анализа флуктуационно - неустойчивой начальной стадии ФП.

Флуктуационная стадия фазового перехода представлена моделью: суперпозицией нескольких случайных процессов. Различие характерных времен их протекания позволяет расщепить задачу на последовательно решаемые задачи

1) диффузия в фазовом пространстве размеров кластеров или кластеризация зародышей

2) броуновское движение центров масс кластеров. Расчет ФР зародышей ВГД по размерам и декартовым координатам в расчетной области при заданных начальных и граничных условиях производится при заданном потоке вакансий с облучаемой границы и заданном потоке атомов инертного газа (мономеров) как условие «открытой системы».

Постоянными полагаются величины

1) давления ВГД в решетке, P_v , P_g , которые связаны с величиной флуенса потока ионов инертного газа на его поверхность,

2) температуры, T , образца и

3) пересыщения (вакансий S_v и мономеров S_g), в качестве упрощающего задачу приближения задано ослабление потока мономеров инертного газа при переходе из слоя $3C-SiC$ в слой Mo образца, не учтены также сложные физико-химические процессы на границах слоев.

Траектории ВГД в кристаллических решетках слоев представлены случайными Марковскими процессами и описываются уравнениями Ито-Стратоновича для стохастических динамических переменных координат $\{g, x, y, z\}$. Броуновское движение ВГД (здесь блистеров или пузырьков газа) в решетках карбида кремния и металла происходит под действием потенциала косвенного упругого взаимодействия зародышей дефектов через возмущение акустических фононов кристаллической решетки, в узлах или междоузлиях которой находятся ВГД, деформирующие решетку кристалла. В металле существенную роль играет другой вид дальнедействующего взаимодействия ВГД через фриделевские осцилляции электронной плотности [7,8]; вид потенциалов взаимодействия для слабоанизотропной решетки был выведен методом диаграмм Фейнмана, и авторами [7,8] была исследована кластеризация дефектов легкой примеси при понижении температуры образца. В работах

[1, 3, 9-12] коэффициенты, регулирующие вклад косвенного упругого дальнего действия, зависят от плотности ВГД дефектов.

Учет дальнедействующих потенциалов позволяет ставить вопрос о конкретизации причин, вызывающих самоорганизацию зародышей дефектов кристаллической решетки или пористости ВГД при воздействии постоянного потока ионов инертного газа на поверхность многослойных структур покрытия при температурах, характерных для высокотемпературного блистеринга.

Численное моделирование кинетики образования пористости актуальна для задач оптимизации процесса твердофазной эпитаксии карбида кремния [11,12], а также нанесения тонкопленочного защитного покрытия, которое применимо или будет использовано для материалов, эксплуатируемых в экстремальных условиях, например, для стенок сопла плазменного двигателя космических аппаратов, материалов ТЯР и др. Часто как упрочняющий материал используется карбид кремния в связи с его специфическими свойствами, в частности высокой температурой плавления и высокой химической стойкостью. Кроме того, карбид кремния представляет собой высокотемпературный радиационно-стойкий полупроводник, поэтому приборы на его основе потенциально способны обеспечить характеристики, недостижимые для других материалов. В настоящее время широко используются для изготовления полупроводниковых приборов (в основном это высоковольтные диоды Шоттки и мощные СВЧ MESFET-транзисторы) только два политипа карбида кремния из более чем 170 известных: это 4H-SiC и 6H-SiC. Для силовых полупроводников предпочитают политип 4H-SiC благодаря большей подвижности в нем электронов. Возникновение пористости в материалах может приводить к развитию микротрещин, механизмы физических процессов в которых тесно связаны с нанофлюидикой, с теоретическими вопросами кинетики флуктуаций и неравновесных фазовых переходов. Моделирование ФП методом стохастического аналога направлено на исследование механизмов неравновесных процессов образования зародышей ФП в кристаллической решетке карбида кремния при имплантации ионов газа на характерных временах ~ 10-100мс при постоянных температуре образца, давлении имплантированных частиц и пересыщении. В качестве примера расчета рассматривается поток ионов инертного газа, Xe^{++} , действующего на покрытие «карбид кремния-монослой изоляции-молибден (*3C-SiC/Mo*)» в температурном диапазоне от 1155 К до 1735 К и в диапазоне доз облучения от 10^{14} до 10^{18} см⁻². Результаты расчетов иллюстрируют образование ВГД в течение сотен микросекунд в тонком слое карбида кремния, нанесенном на слой металла.

В работе рассматриваются уравнения (кинетические и стохастические) модели ФП, физические предпосылки их вывода, приводятся алгоритмы решения систем стохастических уравнений Ито-Стратоновича — аналогов неравновесных явлений, описываемых кинетическими уравнениями Колмогорова-Феллера и Эйнштейна-Смолуховского.

Методы решения стохастических дифференциальных уравнений

Математическая модель блистеринга и ее вычислительная реализация требуют решения систем квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений математической физики в частных производных второго порядка. Квазилинейные кинетические уравнения Колмогорова-Феллера для эволюции размера блистера и уравнение Эйнштейна-Смолуховского для перемещения броуновской частицы решаются с помощью метода стохастического аналога [2,4,5,6], который основан на теоремах, согласно которым кинетические уравнения однозначно связаны с СДУ Ито [5], а плотность переходной вероятности $f(X,t)$ марковского случайного процесса (МП) $\{X(t), t \geq 0\}$, являющегося решением СДУ Ито, интерпретируется как ФР, входящая в соответствующее кинетическое уравнение. В связи с этим рассмотрим несколько методов решения СДУ.

Общий подход

Задача Коши для стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) в смысле Ито записывается в виде

$$dY(t) = a(Y, t)dt + \sigma(Y, t)dW(t), \quad Y(t_0) = Y_0, \quad (9)$$

где $Y(t)$ является непрерывным случайным процессом размерности n ; $W(t)$ – m -мерный стандартный винеровский процесс; $a(Y, t)$ – n -мерная вектор-функция; $\sigma(Y, t)$ – матричная функция размера $n \times m$. Начальное состояние системы задается случайным вектором Y_0 . Если матрица $\sigma(Y, t)$ дифференцируема, то задаче Коши для СДУ (9) в смысле Ито соответствует задача Коши для СДУ в смысле Стратоновича

$$dY(t) = H(Y, t)dt + \sigma(Y, t) \circ dW(t), \quad Y(t_0) = Y_0, \quad (10)$$

где

$$H(Y, t) = a(Y, t) - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma(Y, t)}{\partial Y} \sigma(Y, t),$$

$$\left(\frac{\partial \sigma(Y, t)}{\partial Y} \sigma(Y, t) \right)_i = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial \sigma_{ij}(Y, t)}{\partial y_k} \sigma_{kj}(Y, t).$$

Уравнения (9) и (10) эквивалентны. Одномерная функция плотности вероятности $p(Y, t)$ решения этих СДУ удовлетворяет прямому уравнению Колмогорова:

$$\frac{\partial p(Y, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial y_i} \left[a_i(Y, t) p(Y, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \left[b_{ij} p(Y, t) \right] \quad (11)$$

$$p(Y, t_0) = \psi_0(Y_0),$$

где ψ_0 – функция плотности вероятности распределения фазовых координат Y_0 в начальный момент времени t_0 , $B = \sigma\sigma^T$, $b_{ij} = \sum_{k=1}^m \sigma_{ik}\sigma_{jk}$ – матрица диффузии. В двумерном случае, $n=m=2$,

$$B = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2 & \sigma_{11}\sigma_{21} + \sigma_{12}\sigma_{22} \\ \sigma_{11}\sigma_{21} + \sigma_{12}\sigma_{22} & \sigma_{22}^2 + \sigma_{21}^2 \end{pmatrix};$$

в трехмерном случае $n=m=3$,

$$B = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 & \sigma_{11}\sigma_{21} + \sigma_{12}\sigma_{22} + \sigma_{13}\sigma_{23} & \sigma_{11}\sigma_{31} + \sigma_{12}\sigma_{32} + \sigma_{13}\sigma_{33} \\ \sigma_{11}\sigma_{21} + \sigma_{12}\sigma_{22} + \sigma_{13}\sigma_{23} & \sigma_{21}^2 + \sigma_{22}^2 + \sigma_{23}^2 & \sigma_{21}\sigma_{31} + \sigma_{22}\sigma_{32} + \sigma_{23}\sigma_{33} \\ \sigma_{11}\sigma_{31} + \sigma_{12}\sigma_{32} + \sigma_{13}\sigma_{33} & \sigma_{21}\sigma_{31} + \sigma_{22}\sigma_{32} + \sigma_{23}\sigma_{33} & \sigma_{31}^2 + \sigma_{32}^2 + \sigma_{33}^2 \end{pmatrix}.$$

Если задано уравнение (11) с симметричной положительно определенной матрицей B , то элементы матрицы $\sigma(Y, t)$ можно найти, пользуясь разложением Холецкого. В этом случае получается нижняя треугольная матрица $\sigma(Y, t)$ со строго положительными элементами на диагонали:

$$\sigma_{ii} = \sqrt{b_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \sigma_{ik}^2}; \quad \sigma_{ij} = \frac{1}{\sigma_{jj}} \left(b_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{ik}\sigma_{jk} \right), \quad j < i, \quad i=1, \dots, n.$$

В двумерном случае $n=m=2$,

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{b_{11}} & 0 \\ \frac{b_{21}}{\sqrt{b_{11}}} & \sqrt{b_{22} - \frac{b_{21}^2}{b_{11}}} \end{pmatrix};$$

в трехмерном случае $n=m=3$,

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{b_{11}} & 0 & 0 \\ \frac{b_{21}}{\sqrt{b_{11}}} & \sqrt{b_{22} - \frac{b_{21}^2}{b_{11}}} & 0 \\ \frac{b_{31}}{\sqrt{b_{11}}} & \frac{(b_{32} - \frac{b_{31}b_{21}}{b_{11}})}{\sqrt{b_{22} - \frac{b_{21}^2}{b_{11}}}} & \sqrt{b_{33} - \frac{b_{31}^2}{b_{11}} - \frac{(b_{32} - \frac{b_{31}b_{21}}{b_{11}})^2}{b_{22} - \frac{b_{21}^2}{b_{11}}}} \end{pmatrix}.$$

Для численного решения СДУ в смысле Стратоновича (10) будут использованы обобщенные методы типа Розенброка

$$Y_{k+1} = Y_k + [I - \frac{h_k}{2} \frac{\partial H}{\partial Y}(Y_k)]^{-1} [h_k H(Y_k) + \sqrt{h_k} \sum_{j=1}^n \sigma_{\cdot j}(Y_k) \xi_{jk} + \frac{h_k}{2} \sum_{i, j_1, j_2=1}^n \frac{\partial \sigma_{\cdot j_2}}{\partial y_i} \sigma_{i j_1}(Y_k) \xi_{j_1 k} \xi_{j_2 k}] \quad (12)$$

и двухстадийный метод без вычисления производных матрицы σ

$$\begin{aligned}
Y_{k+1} &= Y_k + [I - \frac{h_k}{2} \frac{\partial H}{\partial Y}(Y_k)]^{-1} [h_k H(Y_k) + h_k H(Y_{k+1}^p)] + \sqrt{h_k} \sum_{j=1}^n (\sigma_{\cdot j_2}(Y_k) + \sigma_{\cdot j_2}(Y_{k+1}^p)) \xi_{jk}, \\
Y_{k+1}^p &= Y_k + \sigma(Y_k) \sqrt{h_k} \xi_k.
\end{aligned} \tag{13}$$

Здесь Y_k – численное решение (9) в узле сетки t_k , шаг интегрирования $h_k = t_{k+1} - t_k$, $\xi_k = (\xi_{1k}, \dots, \xi_{nk})^T$ – вектор независимых между собой нормальных случайных величин с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией; $\sigma_{\cdot j}^{(l)}$ обозначает j -й столбец матрицы $\sigma^{(l)}$, I – единичная матрица, $\frac{\partial a^{(l)}}{\partial Y}$ – матрица Якоби.

Кинетическое уравнение Колмогорова-Феллера для флуктуационного зародышеобразования имеет вид

$$\frac{\partial f_r(g, t)}{\partial t} = \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial g} \left[D_g(g, t) f_r(g, t) \frac{\partial \Delta \Phi(g, r, t)}{\partial g} \right] + \frac{\partial}{\partial g} \left[D_g(g, t) \frac{\partial f_r(g, t)}{\partial g} \right] + S_\alpha - Q, \tag{14}$$

$$f_r(g, 0) = f_{0g}, \quad \left. \frac{df_r(g, t)}{dg} \right|_{g=2} = 0, \quad f_r(g, t) \Big|_{g < 2} = 0.$$

Для случая $S_\alpha = 0$, $Q = 0$. Если из физических соображений

$$\frac{\partial}{\partial g} \left[\frac{\partial D_g(g, t)}{\partial g} f_r(g, t) \right] = 0, \tag{*}$$

то уравнению (14) соответствует СДУ в смысле Стратоновича

$$dg(t) = -\frac{D_g(g, t)}{kT} \frac{\partial \Delta \Phi(g, r, t)}{\partial g} dt - \frac{1}{2} \frac{\partial D_g(g, t)}{\partial g} + \sqrt{2D_g(g, t)} \circ dW(t), \quad g(t_0) = g_0 \tag{15}$$

Если (*) не выполнено, то уравнению (14) соответствует СДУ в смысле Стратоновича

$$dg(t) = -\frac{D_g(g, t)}{kT} \frac{\partial \Delta \Phi(g, r, t)}{\partial g} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial D_g(g, t)}{\partial g} + \sqrt{2D_g(g, t)} \circ dW(t), \quad g(t_0) = g_0$$

Уравнение Эйнштейна–Смолуховского с массой зародыша $M_g(t)$, полученной из уравнения (14), записывается в виде:

$$\frac{\partial f_g(r, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{F(r, t)}{M_g \gamma} f_g(r, t) \right] - \frac{\partial}{\partial r} \left[D_r(r, t) \frac{\partial f_g(r, t)}{\partial r} \right], \tag{16}$$

$$f_g(r, 0) = f_{0r}, \quad f_g(r, t) \Big|_{x=xleft} = f_g(r, t) \Big|_{x=xright}, \quad f_g(r, t) \Big|_{y=yleft} = f_g(r, t) \Big|_{y=yright}.$$

Если из физических соображений

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\partial D_r(r, t)}{\partial r} f_g(r, t) \right] = 0, \tag{**}$$

то уравнению (13) соответствует СДУ в смысле Стратоновича

$$dr(t) = \left(\frac{F(r,t)}{M_g \gamma} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_r}{\partial r} \right) dt + \sqrt{2D_r(r,t)} dW(t). \quad (17)$$

Если (**) не выполнено, то уравнению (13) соответствует СДУ в смысле Стратоновича

$$dr(t) = \left(\frac{F(r,t)}{M_g \gamma} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_r}{\partial r} \right) dt + \sqrt{2D_r(r,t)} dW(t)$$

Таким образом, кинетическим уравнениям (14), (16) соответствуют СДУ в смысле Стратоновича (15), (17). Рассмотрим столкновения частиц газа со стенками поры. Уравнение больцмановского типа описывает парные столкновения в газе, которые приводят к химическим реакциям:

$$\frac{\partial f_{coll}(\vec{c}, t)}{\partial t} = K(f_{coll}), \quad (18)$$

здесь c_1, \dots, c_N – скорости сталкивающихся частиц, \vec{c}_{ij} – относительная скорость сталкивающихся частиц,

$$S_\alpha = \int_{\Gamma} \int f_r(\vec{c}, t) [\delta(c - \bar{c}) - \phi(\bar{c}, t, \theta)] \pi(\bar{c}, t, \theta) d\theta d\bar{c}, \quad Q = Q(f_{coll}),$$

где δ – дельта-функция Дирака, а функции ϕ, π и множество $\Gamma \in R$ определяются типом химической реакции. Уравнениям (14) и (18) соответствуют СДУ, объединяющее непрерывную и пуассоновскую составляющие:

$$dg(t) = -\frac{D_g(g,t)}{kT} \frac{\partial \Delta \Phi(g,r,t)}{\partial g} dt - \frac{1}{2} \frac{\partial D_g(g,t)}{\partial g} + \sqrt{2D_g(g,t)} \circ dW(t) + \int_{\Gamma} \phi(c(t^-), t^-, \theta) \nu(d\theta \times dt), \quad g(t_0) = g_0, \quad (19)$$

где функция ϕ определяются типом химической реакции ν – пуассоновская случайная мера на $\Gamma \times [0, T_{finish}]$ с характеристической мерой Π в фазовом пространстве скоростей частиц газа, сталкивающихся со стенкой поры, $\Pi(\Gamma) < \infty$; $c(t^-)$ – значение функции в точке t слева. При численном моделировании решения СДУ (11) требуется моделирование неоднородной пуассоновской меры ν , являющейся частным случаем пуассоновского ансамбля.

Метод 1. Рассмотрим более простой случай, когда пуассоновская мера ν является однородной. Алгоритм моделирования траекторий процесса $g(t)$: (предварительно для каждой траектории моделируем значения моментов химических реакций $\tau_1, \dots, \tau_l < T_{finish}$ по формуле $\tau_s = \tau_{s-1} + \zeta_s$, $\tau_0 = 0$ где ζ_s – независимые случайные величины с плотностью $p(x) = \Pi(\Gamma) \exp(-\Pi(\Gamma)x)$, (по формуле $\zeta_s = -\ln \alpha_s / \Pi(\Gamma)$, α_s – независимые равномерно распределенные на интервале $(0,1)$ случайные величины);

0) $k := 0$; моделируем g_0 согласно заданным начальным значениям;

1) решаем уравнение (15) на интервале $[\tau_k, \tau_{k+1}]$ численным методом с шагом h и находим g_{k+1} в момент τ_{k+1} , при этом шаг должен быть согласован с интенсивностью перехода, например, $h \leq 0.1/\Pi(\Gamma)$;

2) $k := k + 1$;

3) моделируем случайную величину θ согласно плотности $p(x) = \pi(x)/\Pi(\Gamma)$, тогда $g_k := g_k + c(g_k, \tau_k, \theta)$;

4) если $\tau_k < T$, то переходим к п. 1, иначе процесс моделирования траектории завершается.

С использованием метода максимального сечения данный алгоритм обобщается для случая неоднородной пуассоновской меры ν .

Метод 2. Разработан новый метод решения СДУ для случая моделирования физических процессов, имеющих существенно разные характерные времена. Рассмотрим асимптотически несмещенный метод с 1-м порядком среднеквадратической сходимости для произвольных систем СДУ и со 2-м – для систем СДУ с одним шумом, а также в случае систем СДУ с постоянной матрицей σ :

$$y_{n+1} = y_n + \left(I - \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} \frac{h}{2} (f(y_n) + f(\bar{y}_{n+1})) + \frac{\sqrt{h}}{2} (\sigma(y_n) + \sigma(\bar{y}_{n+1})) \zeta_n, \quad (20)$$

где $\bar{y}_{n+1} = y_n + \sqrt{h} \sigma(y_n) \zeta_n$;

$$y_{n+1} = y_n + \left(I - \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} \left[hf(y_n) + \sqrt{h} \sigma(y_n) \zeta_n + \frac{h}{2} \frac{\partial \sigma}{\partial y}(y_n) \sigma(y_n) \zeta_n^2 \right]. \quad (21)$$

Метод (20) не требует вычисления производной матрицы σ . Методы (20) и (21) являются асимптотически несмещенными с любым шагом $h > 0$. Метод (21) можно записать в виде

$$y_{n+1} = y_n + \left(I - \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} K(h, y_n, \zeta_{n+1}), \quad h = t_{n+1} - t_n = T/L; \quad n=0, \dots, L-1; \quad t_0 = 0;$$

$$K(h, y_n, \zeta_{n+1}) = hf(y_n) + \sqrt{h} \sigma(y_n) \zeta_{n+1} + \frac{h}{2} \frac{\partial \sigma}{\partial y}(y_n) \sigma(y_n) \zeta_{n+1}^2, \quad \zeta_0 = 0,$$

Для того чтобы построить для него двухуровневую модификацию, задачу Коши для системы СДУ в смысле Стратоновича следует переписать в виде

$$dy^{(r)}(t) = f^{(r)}(y) dt + \sigma^{(r)}(y) \circ dw(t), \quad y^{(r)}(t_0) = y_0^{(r)}, \quad (22a)$$

$$dy^{(g)}(t) = f^{(g)}(y) dt + \sigma^{(g)}(y) \circ dw(t), \quad y^{(g)}(t_0) = y_0^{(g)}, \quad (22b)$$

где

$$y(t) = \begin{pmatrix} y^{(r)}(t) \\ y^{(g)}(t) \end{pmatrix}, \quad f(y) = \begin{pmatrix} f^{(r)}(y) \\ f^{(g)}(y) \end{pmatrix}, \quad \sigma(y) = \begin{pmatrix} \sigma^{(r)}(y) \\ \sigma^{(g)}(y) \end{pmatrix}.$$

n_r – размерность векторов $y^{(r)}$ и $f^{(r)}$, а n_g – размерность векторов $y^{(g)}$ и $f^{(g)}$. Матрицы $\sigma^{(r)}(y)$, $\sigma^{(g)}(y)$ имеют размерности $n_r \times n_w$ и $n_g \times n_w$

соответственно. Если для решения уравнений (22b) требуется шаг τ , более мелкий, чем шаг h , необходимый для решения системы уравнений (22a) ($h = m\tau$, где m – некоторое натуральное число), то можно использовать двухуровневую модификацию метода (21):

$$y_{n+1}^{(r)} = y_n^{(r)} + [I - \frac{h}{2} \frac{\partial f^{(r)}}{\partial y^{(r)}}(y_n)]^{-1} K^{(r)}(h, \zeta_{n+1}, y_n), \quad (23a)$$

$$y_{n+\frac{i+1}{m}}^{(g)} = y_{n+\frac{i}{m}}^{(g)} + [I - \frac{\tau}{2} \frac{\partial f^{(g)}}{\partial y^{(g)}}(y_{n+\frac{i}{m}})]^{-1} K^{(g)}(\tau, \eta_{n+\frac{i+1}{m}}, y_{n+\frac{i}{m}}), \quad i = 0, \dots, m-1, \quad (23b)$$

где

$$K^{(r)}(h, \zeta_{n+1}, y_n) = hf^{(r)}(y_n) + \sqrt{h} \sum_{j=1}^{n_w} \sigma_{\bullet j}^{(r)}(y_n) \zeta_{j,n+1} + \frac{h}{2} \sum_{l=1}^{n_r} \sum_{j_1, j_2}^{n_w} \frac{\partial \sigma_{\bullet j_2}^{(r)}}{\partial y_l^{(r)}} \sigma_{l j_1}^{(r)}(y_n) \zeta_{j_1, n+1} \zeta_{j_2, n+1},$$

$$K^{(g)}(\tau, \eta_{n+\frac{i+1}{m}}, y_{n+\frac{i}{m}}) = g^{(g)}(y_{n+\frac{i}{m}}) + \sum_{j=1}^{n_w} \sigma_{\bullet j}^{(g)}(y_{n+\frac{i}{m}}) \eta_{j, n+\frac{i+1}{m}} + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{n_r} \sum_{j_1, j_2}^{n_w} \frac{\partial \sigma_{\bullet j_2}^{(g)}}{\partial y_l^{(z)}} \sigma_{l j_1}^{(g)}(y_{n+\frac{i}{m}}) \eta_{j_1, n+\frac{i+1}{m}} \eta_{j_2, n+\frac{i+1}{m}},$$

$$y_{n+\frac{i+1}{m}}^{(r)} = y_n^{(r)},$$

где $\sigma_{\bullet j}^{(r)}$ означает j -й столбец матрицы $\sigma^{(r)}$. Случайные величины $\zeta_{j, n+1}$, $n = 0, \dots, L-1$; $j = 1, \dots, n_w$ являются независимыми стандартными нормальными случайными величинами, $\zeta_{j, n+1} \in N(0, 1)$. Случайные вектора $\eta_{n+\frac{i+1}{m}}$, $i = 0, \dots, m-1$, представляют приращения броуновского моста $B(t)$ (т.е.

$$B\left(t_{n+\frac{i+1}{m}}\right) = B\left(t_{n+\frac{i}{m}}\right) + \eta_{n+\frac{i+1}{m}}, \text{ заданного в точках } B(t_n) \text{ и } B(t_{n+1}). \text{ Случайные}$$

величины $B_j\left(t_{n+\frac{i}{m}}\right)$ являются нормальными случайными величинами со следующими параметрами:

$$B_j\left(t_{n+\frac{i}{m}}\right) \in N\left(B_j(t_n) + \frac{\left(t_{n+\frac{i}{m}} - t_n\right)}{(t_{n+1} - t_n)} [B_j(t_{n+1}) - B_j(t_n)], \frac{\left(t_{n+\frac{i}{m}} - t_n\right) \left(t_{n+1} - t_{n+\frac{i}{m}}\right)}{(t_{n+1} - t_n)} \right), \quad j = 1, \dots, n_w$$

и моделируются по формуле

$$B_j\left(t_{n+\frac{i}{m}}\right) = \sqrt{\frac{i(m-i)\tau}{m}} \xi_{ji} + \frac{i\sqrt{h}}{m} \zeta_{j, n+1},$$

где ξ_{ji} – независимые стандартные нормальные случайные величины, $\xi_{ji} \in N(0,1)$. Тогда приращения вычисляются по формуле:

$$\eta_{j, n+\frac{i+1}{m}} = B_j \left(t_{n+\frac{i+1}{m}} \right) - B_j \left(t_{n+\frac{i}{m}} \right),$$

или

$$\eta_{j, n+\frac{i+1}{m}} = \frac{\sqrt{(i+1)(m-i-1)}\xi_{j,i+1} - \sqrt{i(m-i)}\xi_{ji}}{\sqrt{m}} + \frac{\sqrt{h}}{m}\zeta_{j,n+1},$$

$$i = 0, \dots, m-1, \quad j = 1, \dots, n_w,$$

считая $\xi_{j0} = 0$.

В методе (23) можно обойтись без моделирования броуновского моста. Но в этом случае, прежде чем моделировать $y_{n+1}^{(r)}$, нужно сначала смоделировать $n_w \times m$ независимых стандартных нормальных случайных величин ξ_{ji} и

в формулах (12) полагать $\eta_{j, n+\frac{i+1}{m}} = \sqrt{\tau}\xi_{j,i+1}$, $i = 0, \dots, m-1$;

$$\zeta_{j,n+1} = \sqrt{\frac{\tau}{h}}(\xi_{j1} + \dots + \xi_{jm}), \quad j = 1, \dots, n_w.$$

Модель образования нанопор (блистеров) и используемые приближения

Моделирование фазового перехода в кристаллической решетке включает в себя рассмотрение блистеринга (образования ВГД или пузырьков-блистеров) в тонких слоях металла и полупроводника в условиях «открытой» физической системы, состоящей из кристаллической решетки без дефектов и имплантируемых вакансий и точечных газовых дефектов, «открытость» поддерживается постоянством моноэнергетического потока инертного газа, создающего условия для кластеризации точечных дефектов. Неравновесные процессы, формирующие кластеры ВГД вызывают флуктуационную неустойчивость ФП.

Будем рассматривать образование ВГД в форме микропор, рост или деградацию размеров которых можно представить случайным процессом — диффузией в фазовом пространстве размеров кластеров, как начальную неравновесную стадию ФП 1-го рода.

Модель кластеризации зародышей новой фазы (ВГД кристаллической решетки полагаются броуновскими частицами сферической формы с переменной массой) характеризуется числом дефектов g в кластере или

$\{g(t), t > 0\}$ здесь дополнена моделью БД ВГД, возникающего в материалах при радиационном повреждении под действием только косвенного упругого взаимодействия ВГД в решетке.

Число ВГД, используемое в численном эксперименте на основе модели ФП, зависит от свойств решеток слоев и плотности потока имплантируемого инертного газа, энергии ионов и модели вакансий на облучаемой поверхности образца) в отличие от макроскопических моделей диффузии, зависящей от градиентов температуры или давления, поскольку флуктуационная стадия ФП отражает кинетику зародышеобразования ВГД и относится к другим пространственно-временным масштабам.

Координаты ВГД в начальный момент времени задаются в декартовой системе координат с центром внутри одного из двух слоев в случае рассмотрения образца 3C-SiC/Mo, для осей 0X и 0Y, по которым заданы периодические граничные условия. На облучаемой поверхности образца задано начало координат для оси 0Z, условия на границе между слоями в модели задаются либо условием монослойной изолирующей мембраны, либо шероховатостью поверхности, расстояния до ступенек которой задается фрактальным распределением расстояний от необлучаемой границы образца.

Формирование структур пористости в тонких слоях образца в модели разделено на решение задач кластеризации ВГД в единице объема слоя и установление ФР ВГД по размерам, число таких расчетов свойств материала в слое задается моделью, основным фактором которой служит анализ изменения свободной энергии Гиббса, зависящей от температуры образца, пересыщения ВГД и упругих свойств решетки, в зависимости от размера зародыша ВГД, по условию вывода уравнения Колмогорова-Феллера считаются неизменными.

Уравнения для модели БД в форме Эйнштейна-Смолуховского сформулированы для 3D случая для координат ВГД (x, y, z) с варьируемыми для разных вариантов численного эксперимента граничными условиями, и для движения центров масс ВГД, распределение по размеру ВГД, рассчитанное в задаче о кластеризации, учитывается в расчете смещений ВГД и сосредоточены в центрах масс. Характерные времена процесса миграции БЧ в тонких слоях образца, на порядок отличаются от процесса кластеризации, что позволяет расщепить решение задач БД и кластеризации. Накопление ВГД в материалах слоев приводит к локальным напряжениям от в решетках слоев образца и на границах, представляющих интерес для теории образования трещин и дислокаций и сравниваются с начальным прогнозируемым уровнем напряжения, создаваемого несоразмерностью параметров решеток слоев на пространственно-временных масштабах сравнимых с градиентами сил косвенного упругого взаимодействия ВГД друг с другом, границами образца (облучаемой, необлучаемой, межслойными) учтенными в модели потенциалами, выведенными с помощью диаграмм Фейнмана, для взаимодействия через возмущение колебаний акустических фононов решетки

дефектами и фриделевских колебаний электронной плотности решеток слоев, моделируемых численно.

Смещения ВГД со скоростью БД под действием косвенных упругих сил много больше смещений в решетке за счет возникающих ускорений (случай «передемпфированного осциллятора»). Ионы инертного газа нейтрализуются в нескольких приповерхностных монослоях решетки, и поэтому рассматриваются нейтральные атомы внедренного газа. Для кластеризации вакансий заряд учитывается в модели свободной энергии Гиббса. Неупругие столкновения ВГД приводят к скачкообразному изменению размера кластера g , для которого существует стохастический аналог в форме уравнения Ито, алгоритмы решения которых приведены выше.

Кинетические уравнения модели

Уравнение Колмогорова-Феллера для модели кластеризации зародышей газовых пузырьков в решетке позволяет найти изменение размера вакансионно-газового дефекта /ВГД/ в точке с координатой \vec{r} , ($|\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$). Оно имеет вид (применимо и для формирования вакансионных пор):

$$\frac{\partial f_r(g,t)}{\partial t} = L_1 f_r(g,t) + L_2 f_r(g,t) + S_\alpha(f_\alpha) + \Omega_{bv}, \quad (24)$$

$$L_1 = \frac{\partial \left[D_g(g,t) \frac{\partial}{\partial g} \right]}{\partial g}, \quad L_2 = \frac{1}{kT} \frac{\partial \left[D_g(g,t) \frac{\partial \{\Delta\Phi(g, \vec{r}, t)\}}{\partial g} \right]}{\partial g}, \quad f_r(g,0) = f_{0g}, \quad \left. \frac{df_r(g,t)}{dg} \right|_{g=2} = 0, \quad f_r(g,t)|_{g < 2} = 0.$$

Постоянный поток инертного газа образует $S_\alpha(f_\alpha)$ – источник частиц, формирующих зародыш, f_α – функция распределения мономеров газа и/или вакансий, $f_r(g,t)$ – ФР ВГД по размерам в точке с координатой \vec{r} , f_{0g} – ФР ВГД по размерам в точке с координатой \vec{r} в начальный момент времени, g – размер блистера, измеряемый в единичных несжимаемых объемах атомов ксенона, Ω_{bv} – оператор столкновения и рекомбинации ВГД и вакансий, T – температура слоя, k_B – постоянная Больцмана, $D_g = D_{g0} \cdot \langle g \rangle^{2/3}$ – функционал-коэффициент диффузии в пространстве размеров. Здесь $\langle g \rangle = \int_{g=2} g f(g, \vec{r}, t) dg$ – математическое

ожидание размера зародыша в точке с координатой \vec{r} , рассчитанное в соответствии с ФР. D_{g0} – коэффициент, зависящий от радиуса внедренного атома (или вакансии), поверхностного натяжения на границе “вакансионно-газовый пузырек–решетка”, модуля сдвига материала (модуля жесткости), параметра материала решетки, частоты колебания атома решетки. $\Delta\Phi(g, \vec{r}, t)$ – функционал-коэффициент уравнения (1), свободная энергия Гиббса образования зародыша, в котором учитываются разность химических потенциалов фаз, форма зародыша, поверхностное натяжение на границе «газ в ВГД–материал подложки», упругая реакция решетки на образование зародыша,

неравнозначность узлов и междоузлий кристаллической решетки для образования ВГД, разрывы связей решетки в результате роста ВГД, а также напряжение (в частности напряжение от несоответствия параметров решеток материалов слоёв) в точке центра масс ВГД. На рис. 1 в качестве примера представлена зависимость свободной энергии Гиббса (кДж/моль) блистера, расположенного в кремнии, от размера блистера в атомах ксенона (g) и глубины – от межслойной границы Si/Mo (z, параметр решетки материала слоя, в данном случае кремния). Наблюдаемые локальные минимумы связаны с $\Delta\Phi$, и при $z \rightarrow 0$ (межслойная граница) с $\Delta\Phi_d$.

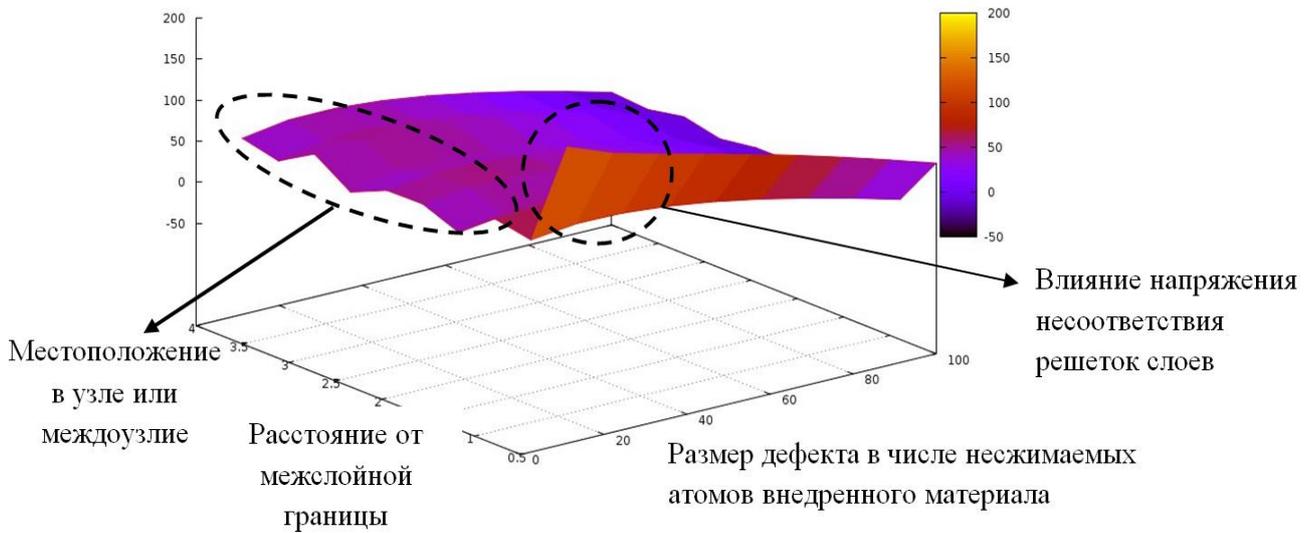


Рис. 1. Представлена зависимость свободной энергии Гиббса (кДж/моль) блистера, расположенного в кремнии, от размера блистера в атомах ксенона (g) и глубины – от межслойной границы Si/Mo (z измеряется в параметрах решетки материала слоя, в данном случае кремния).

Уравнение Эйнштейна–Смолуховского для БД учитывает математическое ожидание массы зародыша $M_g(t)$ (броуновской частицы), полученное из уравнения (24) на предыдущем шаге, и записывается в виде:

$$\frac{\partial f_g(\vec{r}, t)}{\partial t} = L_3 f_g(\vec{r}, t) + L_4 f_g(\vec{r}, t) - Q,$$

$$L_3 = \frac{\partial \left[D_r(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right]}{\partial \vec{r}}, \quad L_4 = - \frac{\partial \left[\frac{\vec{F}(\vec{r}, t)}{M_g \gamma} \right]}{\partial \vec{r}},$$

$$f_g(\vec{r}, t)|_{t=0} = f_{0r}, \quad (25)$$

$$f_g(\vec{r}, t)|_{x=x_{\text{left}}} = f_g(\vec{r}, t)|_{x=x_{\text{right}}}, \quad f_g(\vec{r}, t)|_{y=y_{\text{left}}} = f_g(\vec{r}, t)|_{y=y_{\text{right}}},$$

ФР БЧ с массой M_g по координатам кристаллической решетки обозначена в (25) $f_g(\vec{r}, t)$, где \mathbf{r} – радиус-вектор кластера в ортогональной системе координат

($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$) в расчетной области: 872 нм × 872 нм × (13 нм SiC + 31,5 нм Mo). Q – сток мономеров и блистеров; согласно работе [25] стоками для дефектов в твердом теле являются границы всех видов (межфазная, под облучением, необлучаемая граница), также дислокации и границы зерен.

$F_x = -\frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x}$, здесь $U(x, y, z)$ — потенциал коллективного косвенного взаимодействия блистеров между собой, с границами и дефектами решеток, выведенный в предположении слабой анизотропии решетки:

$$U(\mathbf{r}) = U_{ij}(\mathbf{r}) + U_{\text{surf}}(\mathbf{r}) + U_{\text{ph}}(\mathbf{r}) + U_{\text{pore}}(\mathbf{r}). \quad (26)$$

$i \neq j$, $i, j = 1 \dots N$ – номер дефекта в модели.

Потенциал дальнедействующий, знакопеременный, реализующийся через возмущение акустических фононов решеток обоих слоев и через фриделевские осцилляции электронной плотности, которые в случае сферической поверхности Ферми зависят от фермиевского импульса электронов, плотности их состояний на поверхности Ферми и др. $U_{ij}(\mathbf{r})$ соответствует косвенному взаимодействию блистеров друг с другом, $U_{\text{surf}}(\mathbf{r})$ – взаимодействию блистера со всеми поверхностями слоистой структуры (механизм взаимодействия тот же), включая облучаемую поверхность, $U_{\text{ph}}(\mathbf{r})$ – с дефектами решетки типа дислокаций, границ зерен, $U_{\text{pore}}(\mathbf{r})$ – потенциал взаимодействия блистер–пора для пористой среды. По x и y используются периодические граничные условия на функцию распределения /ФР/ и потенциал взаимодействия блистеров друг с другом в материалах решеток. На нижней необлучаемой границе ФР $f(\mathbf{r}, t) = 0$. Также выполнено условие: разность потенциалов при подходе к межфазной границе со стороны разных слоев меньше потенциала в каждом слое $U|_{\text{Mo}} - U|_{\text{SiC}} = \Delta U < U|_{\text{Mo}}, U|_{\text{SiC}}$. Модель дальнедействующего знакопеременного потенциала косвенного упругого взаимодействия кластеров между собой адаптирована к конкретным условиям ориентации кристалла относительно потока. Ниже приведен вид потенциала взаимодействия блистер–блистер, аналогичный потенциалам, выведенным и используемым в [7-8]:

$$U_{ij}(x, y, z) = \sum_{i \neq j}^N \left[\underbrace{b_r \left[\frac{3}{5} \frac{(x_i - x_j)^4 + (y_i - y_j)^4 + (z_i - z_j)^4}{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^4} \right]}_{\substack{\text{возмущение акустических} \\ \text{фононов решетки}}} + \underbrace{\frac{a_r \cos(c_r |\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3}}_{\substack{\text{фриделевские осцилляции} \\ \text{электронной плотности}}} \right] \quad (27)$$

b_r , a_r , c_r – параметры модели решетки соответствующего слоя. Следует учитывать, что для металлов a_r и b_r больше, чем для полупроводников, а для диэлектриков a_r практически равно нулю.

Отметим, что используемый потенциал взаимодействия различен не только в разных слоях образца (полупроводник или металл), но и в разных кристаллографических плоскостях одного слоя.

На рис. 2 приведено значение потенциала в некоторых сечениях образца. Значение потенциала приведено в условных единицах потенциала взаимодействия, которым считаем потенциал взаимодействия двух точечных легких дефектов, находящихся друг от друга на расстоянии 100 параметров решетки материала (в данном случае молибдена). Потенциал приведен для двуслойного образца с размерами $438 \text{ нм} \times 438 \text{ нм} \times 44 \text{ нм}$, состоящего из слоя $3C\text{-SiC}$ (под облучением) толщиной 14 нм и слоя Mo толщиной 30 нм. Температура образца 1600К, доза облучения 10^{15} ион/см². Число траекторий 10^4 .

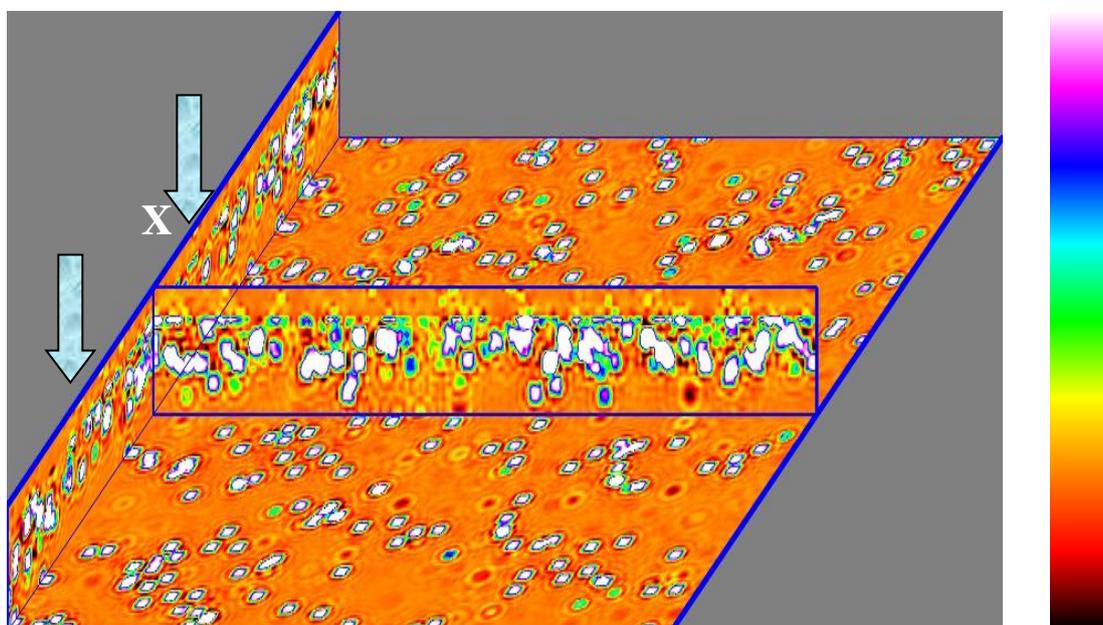


Рис. 2. Иллюстрация потенциала взаимодействия блистеров между собой и с границами образца в произвольном сечении в момент окончания расчета. Шкала соответствия цвета и значений приведена на правой стороне рисунка.

Для изучения влияния потенциала косвенного упругого взаимодействия дефектов друг с другом, облучаемой, необлучаемой и межслойной границами образца на рис. 3 приведено сравнение карт равных значений потенциала в начальный момент времени, когда дефекты были распределены равномерно по размерам и координатам всего образца, и в момент окончания флуктуационной стадии, когда процесс кластеризации дефектов выходит на постоянную скорость. В момент окончания расчета самосогласованный потенциал взаимодействия дефектов, рассчитанный по (6)-(7), приобретает ярко выраженную структуру, характерную для образования структур дефектов.

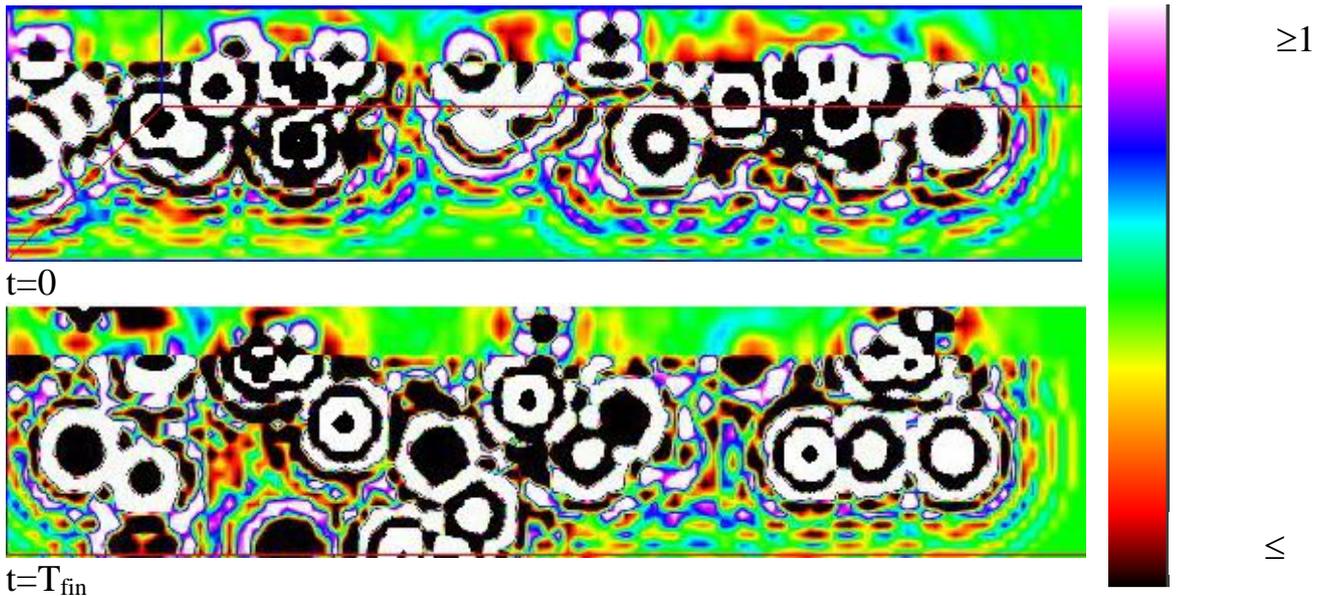


Рис. 3. Иллюстрация изменения потенциала взаимодействия блистеров между собой и с границами образца в некотором сечении образца. Шкала соответствия цвета и значений приведена на правой стороне рисунка. $T_{fin}=10^{-4}$ с. $=10^3 \Delta t_r$, $\Delta t_r=5\Delta t_g$, здесь Δt_r – временной шаг для вычисления перемещения блистера, Δt_g – временной шаг для вычисления размера блистера.

В течение фазового перехода первого рода блистеры находятся под воздействием напряжений, связанных как с облучением поверхности образца, так и с несоответствием параметров решеток слоев образца. При этом блистеры создают потенциал взаимодействия друг с другом, с межслойной, облучаемой и необлучаемой границами. Созданный таким образом коллективный потенциал взаимодействия вынуждает блистеры изменить свое положение в пространстве решетки (согласно уравнениям (1), (5)), что, в свою очередь, приводит к изменению потенциала взаимодействия. Такое самосогласование приводит к самоорганизации дефектов вначале в квазирешетку пузырьков, отличную от решетки материала слоя, а затем и к возникновению и развитию зародышей трещин.

Диффузия ВГД в кристаллической решетке происходит под действием потенциала коллективного косвенного упругого взаимодействия дефектов решетки через возмущение акустических фононов решеток и фриделевских осцилляций электронов. Следует отметить, что диффузия ВГД в матрице кристаллической решетки определяется без использования приближенных диффузионных моделей, в которых коэффициент диффузии зависит от напряжений и градиентов температур. Более того, определение диффузии ВГД согласно формуле Эйнштейна-Смолуховского для диффузии БЧ $D_r = D_{r0} \cdot \left(1 + \alpha \left(\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \right)\right)$ как раз и приводит к зависимости определенной таким образом диффузии от напряжений в образце (температура в предлагаемой

модели считается неизменной). $\langle r \rangle$ – математические ожидания координаты \vec{r} , $(|\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2})$, $\langle r^2 \rangle$ – математическое ожидание квадрата координаты \vec{r} ВГД размером $\langle g \rangle$. D_{r0} – параметр модели, зависящий от свободной энергии Гиббса образования зародыша $\Delta\Phi(g, \vec{r}, t)$, α – параметр модели. Применение метода стохастического аналога к данной задаче подразумевает решение четырех стохастических дифференциальных уравнений /СДУ/ Ито-Стратоновича для каждой из стохастических динамических переменных g, x, y, z с помощью не менее 10^6 траекторий винеровских процессов. Метод стохастического аналога основан на теоремах, согласно которым кинетические уравнения однозначно связаны с СДУ Ито, а плотность переходной вероятности $f(X, t)$ марковского случайного процесса (МП) $\{X(t), t \geq 0\}$, являющегося решением СДУ Ито, интерпретируется как ФР, входящая в соответствующее кинетическое уравнение.

Модифицированный метод решения систем СДУ

Для решения систем взаимосвязанных стохастических дифференциальных уравнений был модифицирован один из методов Розенброка [18] – асимптотически аппроксимации первых двух моментов [17]. Приведем схему расчета шагов по времени (индекс n) размера g блистера и глубины его нахождения z для i -ой траектории случайного Марковского процесса как суперпозиции процессов $\{g(t)\} \cup \{z(t)\}$:

$$\begin{pmatrix} g \\ z \end{pmatrix}_{n+1}^i = \begin{pmatrix} g_{n+0.9} \\ z_n \end{pmatrix}^i + \left[\hat{I} - \begin{pmatrix} \frac{h_g}{2} \frac{\partial H_{n+0.9}^i}{\partial g} \\ \frac{h_z}{2} \frac{\partial H_{zn}^i}{\partial z_i} \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{pmatrix} K_{(n+0.9)g} \\ K_{nz} \end{pmatrix}^i \quad (28),$$

$$K_{(n+0.9)g}^i = h_g H_{(n+0.9)g}^i + \sqrt{h} \sigma_{(n+0.9)g}^i \xi_{(n+0.9)g} + \frac{h_g}{2} \frac{\partial \sigma_{(n+0.9)g}^i}{\partial g} \sigma_{(n+0.9)g}^i \xi_{(n+0.9)g}^2,$$

$$K_{nz}^i = h H_{zn}^i + \sqrt{h_z} \sigma_{zn}^i \xi_{zn} + \frac{h_z}{2} \frac{\partial \sigma_{nz}^i}{\partial z} \sigma_{nz}^i \xi_{nz}^2.$$

Здесь учтено, что временной шаг для изменения размера $h_g = 0.1h_r$, где $h_r = h_z = h_x = h_y$ – временной шаг для изменения координат блистера внутри кристаллической решетки. I – единичная матрица.

$$H_{(n+0.9)g}^i = -\frac{1}{kT} D_g^i(g_{n+0.9}^i, t_n) \frac{\partial \Delta\Phi^i(g_{n+0.9}^i, x_n^i, y_n^i, z_n^i, t_n)}{\partial g_{n+0.9}^i} - \frac{1}{2} \frac{\partial D^i(g_{n+0.9}^i, t_n)}{\partial g_{n+0.9}^i},$$

$$\sigma_{(n+0.9)g}^i = \frac{1}{q} \sqrt{2D_{n+0.9}^i(g_{n+0.9}^i, t_n)}. \quad (29)$$

$$H_{zn}^i = \frac{1}{M(g_{n+1}^i)\gamma} \cdot \frac{\partial U^i(x_n^i, y_n^i, z_n^i)}{\partial z} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{zn}^i}{\partial z} \xi_{zn}^2,$$

$$\sigma_{zn}^i = \frac{1}{q} \sqrt{2D_{zn}^i},$$

$$D_{gn} = D_{g0} g_n^{2/3}, \quad \sigma_{zn} = \frac{1}{q} \sqrt{2D_{zn}}$$

$$H_{gn} = -\frac{1}{kT} D_{gn}(g_n, t_n) \frac{\partial \Delta \Phi(g_n, t_n)}{\partial g_n} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{gn}(g_n, t_n)}{\partial g_n},$$

q – интенсивность шума.

Локальная погрешность данного метода может быть записана в виде:

$$\delta_{g(n+1)} = \frac{h_g^{3/2}}{2} \xi_{gn} \left\{ \frac{\partial \sigma_{gn}}{\partial g} H_{gn} + \frac{1}{3} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{gn}}{\partial g^2} \sigma_{gn}^2 + \left(\frac{\partial \sigma_{gn}}{\partial g} \right)^2 \sigma_{gn} \right] \xi_{gn}^2 \right\} + O(h_g^2),$$

$$\sigma_{gn} = \frac{1}{q} \sqrt{2D_{gn}} = \frac{g_n^{1/3}}{q} \sqrt{2D_{g0}}, \quad \frac{\partial \sigma_{gn}}{\partial g} = \frac{1}{3q} g_n^{-2/3} \sqrt{2D_{g0}}, \quad \frac{\partial^2 \sigma_{gn}}{\partial g^2} = -\frac{2}{9q} g_n^{-5/3} \sqrt{2D_{g0}},$$

$$\delta_{z(n+1)} = \frac{h_z^{3/2}}{2} \xi_{zn} \left\{ \frac{\partial \sigma_{zn}}{\partial g} H_{zn} + \frac{1}{3} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{zn}}{\partial g^2} \sigma_{zn}^2 + \left(\frac{\partial \sigma_{zn}}{\partial g} \right)^2 \sigma_{zn} \right] \xi_{zn}^2 \right\} + O(h_z^2),$$

Следует подчеркнуть, что в уравнениях Колмогорова–Феллера и Эйнштейна–Смолуховского присутствуют функционал-коэффициенты: $D_g(g_n)$ – коэффициент диффузии в пространстве размеров, $D_z(g_{n+1}, z_n)$ – коэффициент диффузии в направлении, перпендикулярном межслойной поверхности – вдоль координаты z вглубь образца, $\Delta \Phi(g_n, x_n, y_n, z_n)$ – изменение свободной энергии Гиббса образования блистера, $U(g_{n+1}, x_n, y_n, z_n)$ – потенциал косвенного взаимодействия блистеров друг с другом и границами образца. Эти уравнения решаются взаимосвязано. Поскольку СДУ задано в форме Ито–Стратоновича, то $\xi_n = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \cos(2\pi \alpha_2)$ – последовательность нормально распределенных независимых случайных чисел с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, α_1 и α_2 – случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0; 1]$. Локальные погрешности, определенные по формуле (30), составляют 0,00001 % от среднего значения рассчитываемой величины.

Обсуждение результатов

Рассмотрим результаты моделирования блистеринга в системе, состоящей из слоя $3C\text{-SiC}$ толщиной в 30 параметров решетки $3C\text{-SiC}$ и слоя молибдена (Mo) толщиной 100 параметров решетки Mo . Облучение ведется ионами ксенона Xe^{++} с энергией 5кэВ. Температура 1200К, доза облучения 10^{15} см^{-2} . Падение по нормали к поверхности.

Кинетические функции распределения

На рис. 4-7 представлена ФР блистеров в зависимости от размеров блистеров и глубины от облучаемой поверхности в различные моменты времени. Размер блистера измеряется в критических размерах g_{cr} для SiC , которые определяются из условия $\Delta\Phi/\partial g|_{g=g_{cr}}=0$ пренебрегая локальными экстремумами на поверхности равных значений свободной энергии Гиббса. $T_{fin}=10^{-4} \text{ с.}=10^3 \Delta t_r$, $\Delta t_r=5\Delta t_g$, здесь Δt_r – временной шаг для вычисления перемещения блистера, Δt_g – временной шаг для вычисления размера блистера. В расчете использовано 10^4 траекторий.

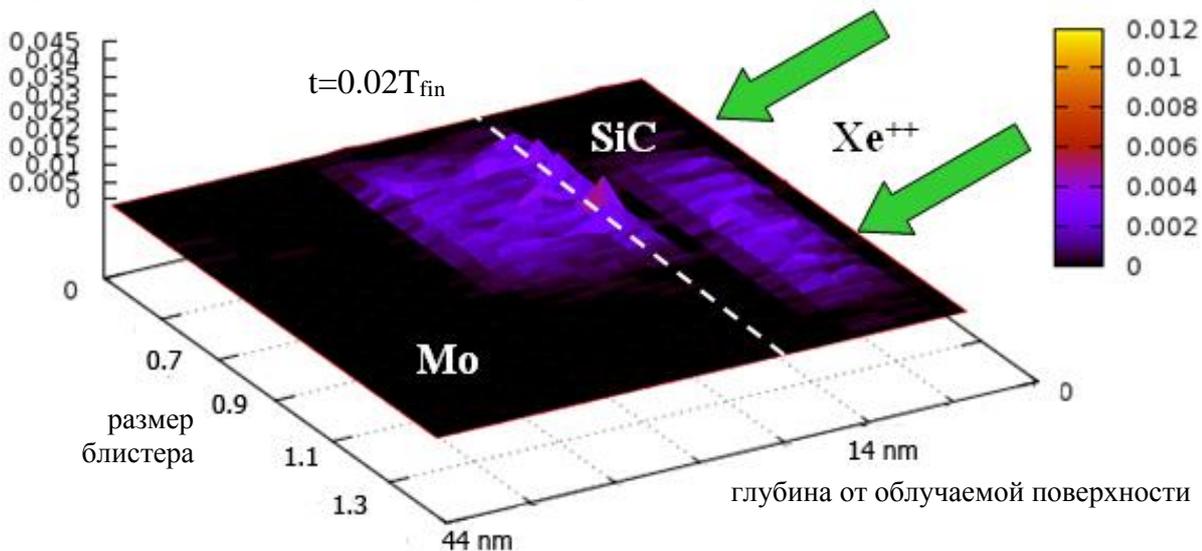


Рис.4. ФР блистеров в зависимости от размеров блистеров и глубины от облучаемой поверхности в момент времени $t=0.02T_{fin}$

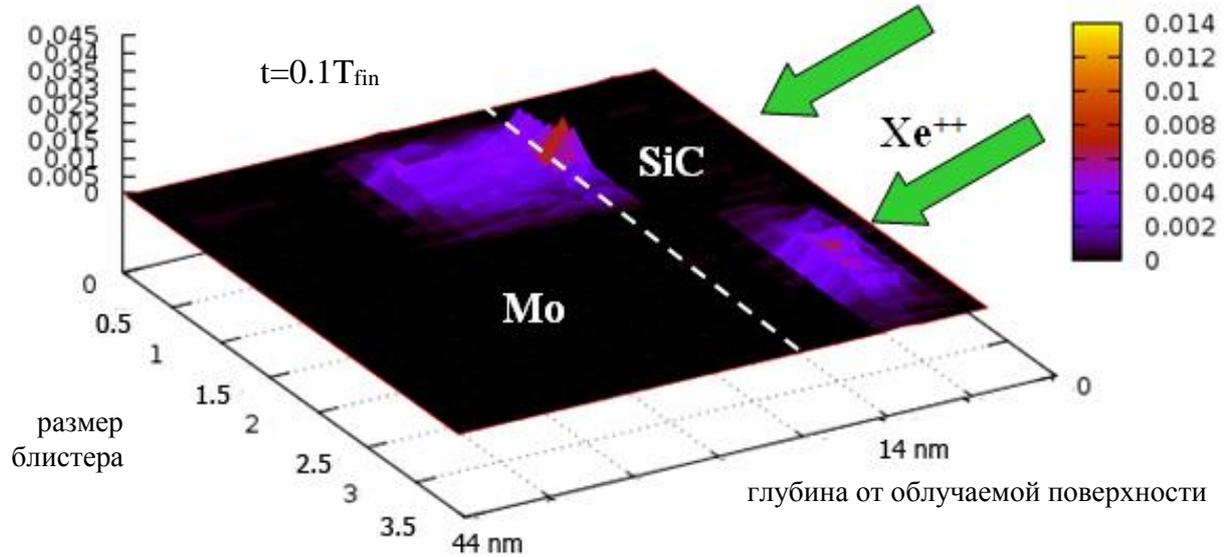


Рис.5. ФР блистеров в зависимости от размеров блистеров и глубины от облучаемой поверхности в момент времени $t=0.1T_{fin}$

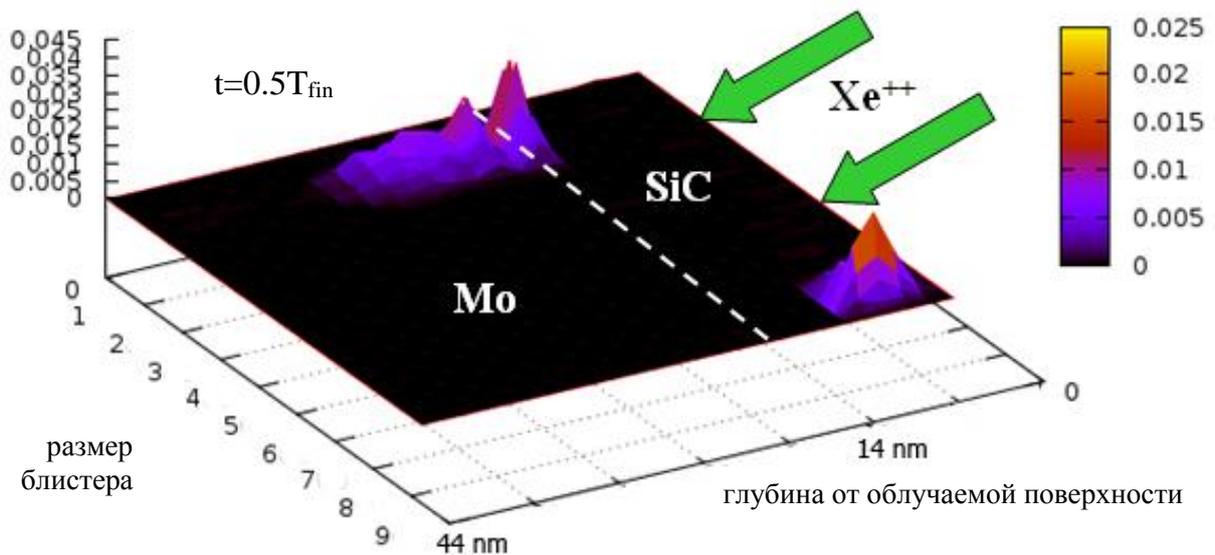


Рис. 6. ФР блистеров в зависимости от размеров блистеров и глубины от облучаемой поверхности в момент времени $t=0.5T_{fin}$

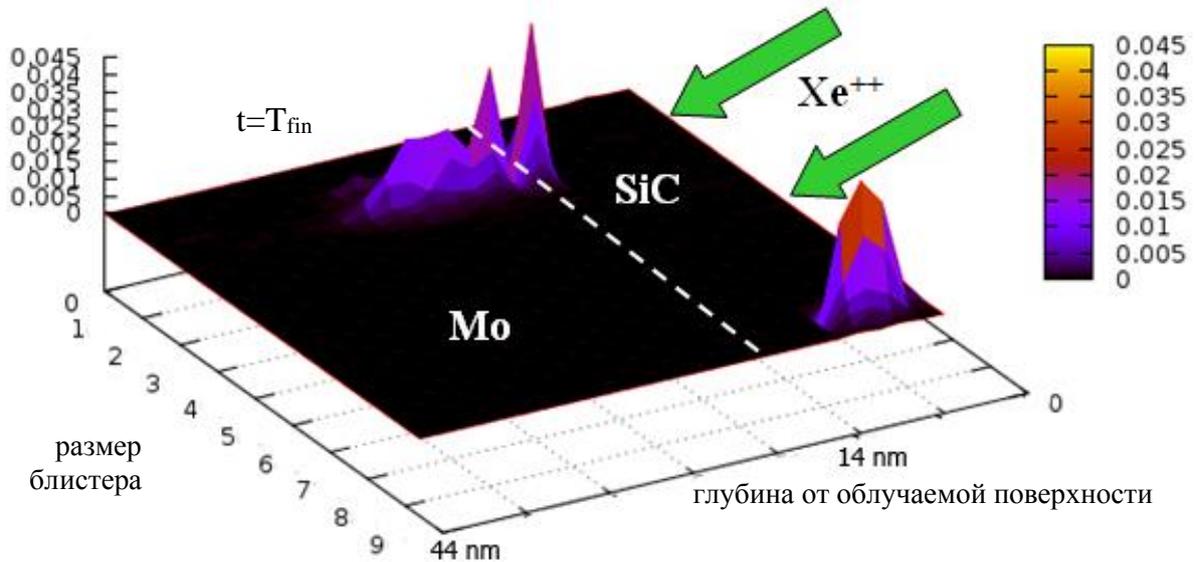


Рис. 7. ФР блистеров в зависимости от размеров блистеров и глубины от облучаемой поверхности в момент времени $t=T_{fin}$

Пористость образца

Пористость слоя образца вычисляется с использованием ФР зародышей ВГД $f_b(g_b, x, y, z)$ и ФР вакансий $f_v(g_v, x, y, z)$:

$$por = \frac{4\pi(r_{at} + r_v)^3}{3V_l} \int (g_b^3 f_b(g_b, x, y, z) + g_v^3 f_v(g_v, x, y, z)) dg dx dy dz,$$

где r_{at} – радиус внедренного атома, g_b – размер ВГД (1), r_v – радиус вакансии, g_v – размер вакансии, V_l – объем слоя.

Часто наноструктурированный полупроводник можно рассматривать как однородную оптическую среду, обладающую эффективным показателем преломления, отличным от показателей преломления веществ, образующих наноструктуру. Согласно теории Максвелла-Гарнетта связь между пористостью por и диэлектрической проницаемостью пористой среды ε

$$\varepsilon = \varepsilon_{mtr} \left[1 - \frac{3por(\varepsilon_{mtr} - \varepsilon_{incl})}{2\varepsilon_{mtr} + \varepsilon_{incl} + por(\varepsilon_{mtr} - \varepsilon_{incl})} \right],$$

где ε_{incl} диэлектрическая проницаемость сферического включения – ВГД, ε_{mtr} диэлектрическая проницаемость материала слоя.

На рис. 8 и 9 приведены зависимости суммарных площадей вакансионно-газовых пор (единица измерения $10^{-6} \text{ м}^2/\text{м}^3$) в молибдене (рис. 8) и карбиде кремния (рис. 9) с объемами $0.25 \text{ мкм} \times 0.25 \text{ мкм} \times 0.1 \text{ мкм}$ от времени. Облучение Xe^{++} с энергиями 7 кэВ и дозами 10^{15} см^{-2} с бислоем карбид кремния/молибден с размерами порядка $0.5 \text{ мкм} \times 0.5 \text{ мкм} \times 0.1 \text{ мкм}$. Время окончания численного эксперимента соответствует 0.5 мс.

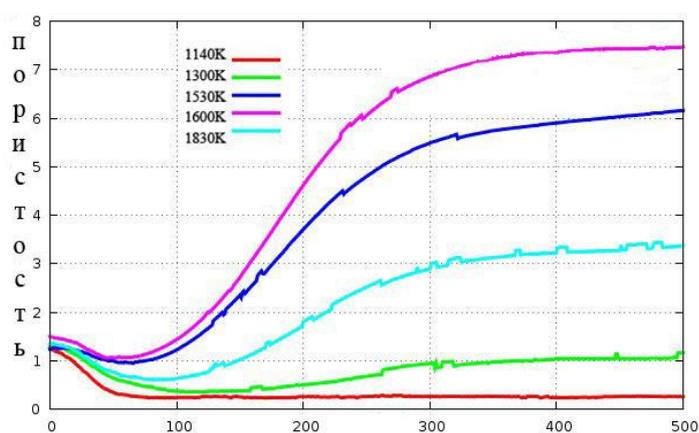


Рис. 8. Изменение площади вакансионно-газовых пор, измеренная в $10^{-6} \text{ м}^2/\text{м}^3$, расположенных в молибдене при облучении бислоя карбид кремния (под облучением) / молибден ионами ксенона. Время измеряется в шагах алгоритма. $T_{\text{fin}}=0.5 \text{ мс}=500 \tau_g$

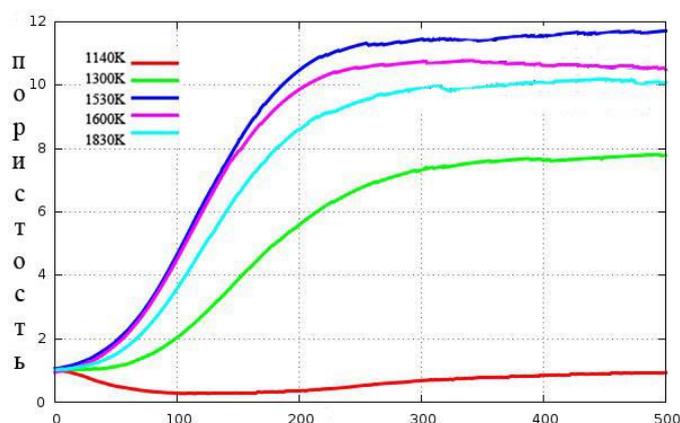


Рис. 9. То же, что на рис. 8, для слоя карбида кремния. Время измеряется в шагах алгоритма. $T_{\text{fin}}=0.5 \text{ мс}=500 \tau_g$

На рис. 8 и рис. 9 ярко выражена нелинейная зависимость суммарной внутренней площади вакансионно-газовых дефектов (как в виде одиночных ВГД, так и в виде протяженных структур дефектов) от времени и температуры, что является существенным фактором при создании пористой среды как основы для одномерного фотонного кристалла. Такой вид зависимости связан с суперпозицией сразу нескольких факторов: нелинейностью изменения размера одиночного неточечного ВГД от температуры, введением в рассмотрение вакансионной подсистемы, что существенно замедляет течение процесса относительно ранее рассмотренных случаев при отсутствии в рассмотрении вакансионной подсистемы, и формированием протяженных структур дефектов, обнаруженных в слоях образца с помощью проведенного перколяционного анализа дефектов в образце. Образование протяженных структур дефектов является предпосылкой развития трещин.

Как видно из рис. 8 и 9, варьируя параметры обработки (длительность воздействия и температуру), можно в широких пределах управлять пористостью слоев образца (получая даже пористость несколько ниже начальной) и, следовательно, управлять оптическими свойствами системы (диэлектрической проницаемостью, а значит, и показателем преломления и величиной двулучепреломления). Кроме того, в используемом подходе

увеличивается эффективность таких нелинейно-оптических процессов, как преобразование оптической частоты и самовоздействие света, за счет: во-первых, искусственного двулучепреломления пористых полупроводников, обусловленного анизотропией взаимодействия потоков ионов с поверхностью и анизотропией порообразования (см. рис. 11 и рис.12), что делает возможным осуществление синхронного процесса генерации гармоник, и, во-вторых, локализацией света в ансамблях наночастиц (в рассматриваемом случае ВГД), что приводит к увеличению времени жизни фотона.

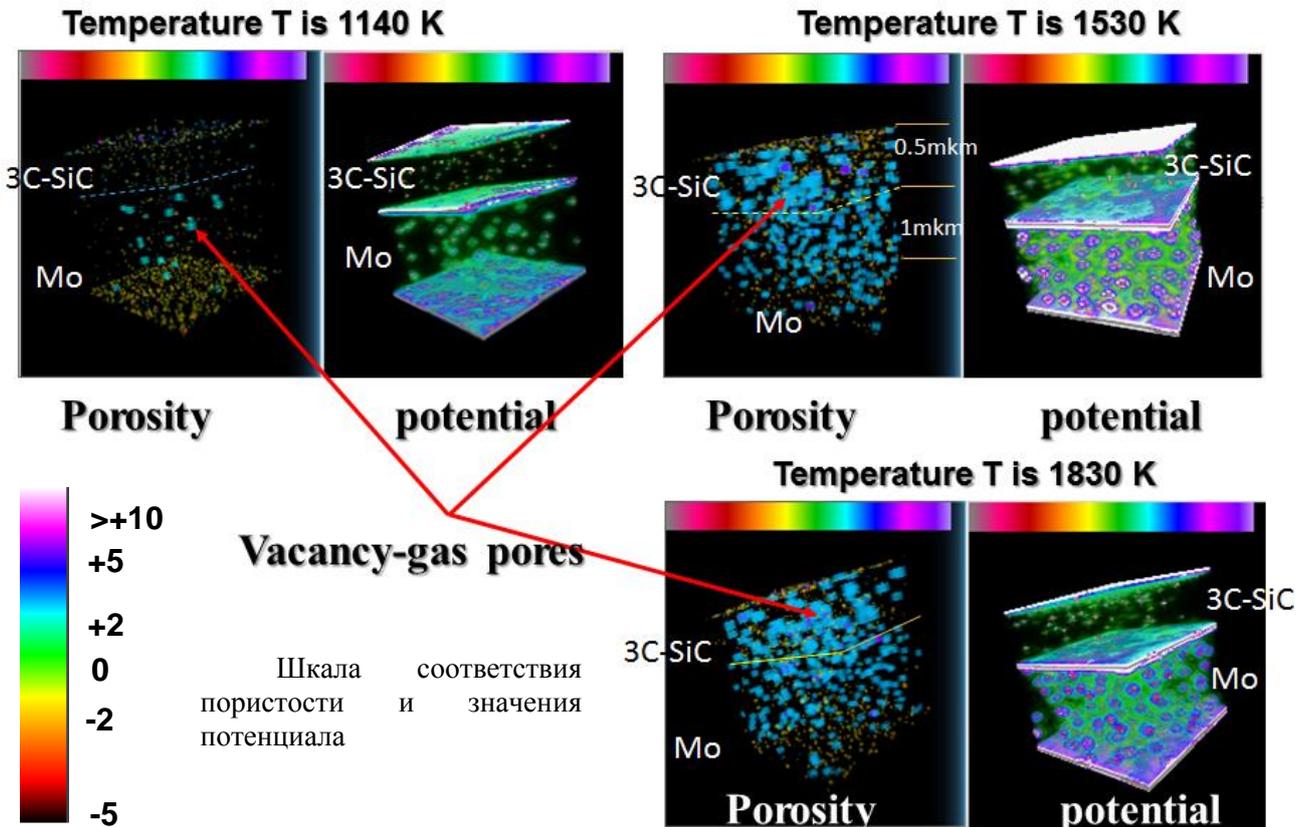


Рис. 10. Представлено соответствие между пористостью слоев образца и потенциалом взаимодействия дефектов для нескольких температур. Потенциал нормирован на $\left(\frac{N_e V_F(2k_F)}{2\pi\epsilon^2} + W_{elastic} \right) \frac{\Omega}{kT}$, где Ω – объем элементарной ячейки Mo, k_F^- – фермиевский импульс электронов, N_e – плотность их состояний, ϵ – диэлектрическая проницаемость материала, $V_F(2k_F)$ – фурье-компонента потенциала взаимодействия электрона с точечным дефектом, $W_{elastic} \sim$ модулю упругости материала, k – постоянная Больцмана, T – температура.

На рис. 11 и 12 приведена пористость в бислое $3C\text{-SiC}/\text{Mo}$ с размерами $1\text{ мкм} \times 1\text{ мкм} \times 1.5\text{ мкм}$ при облучении карбида кремния ионами ксенона с энергией 7 кэВ, доза облучения 10^{15} см^{-2} , температура 1500К. Время окончания численного эксперимента соответствует 0.5 мс для рис. 11 и 1.5 мс – для рис. 12. На рис. 12 хорошо заметны развитие протяженных структур дефектов вдоль границы раздела слоев и начало формирования протяженных структур дефектов перпендикулярно границе раздела слоев. Таким образом, из сравнения рис. 11 и 12 можно сделать вывод о том, что формирование протяженных структур дефектов происходит в несколько этапов: неупорядоченное распределение ВГД в слоях субстрата, формирование квазирешетки ВГД внутри решеток слоев субстрата, развитие протяженных структур дефектов вдоль границы раздела и развитие протяженных структур дефектов перпендикулярно границе раздела слоев.

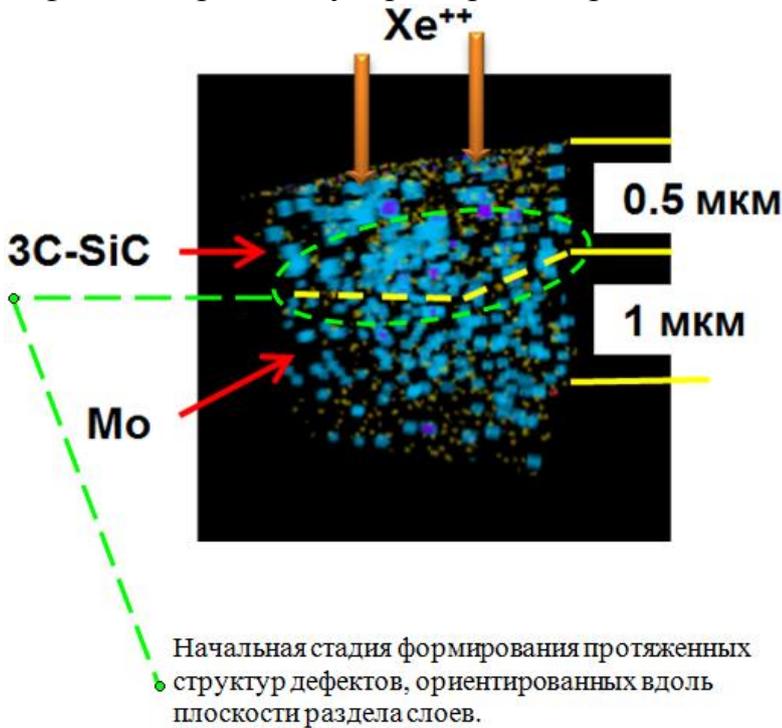


Рис. 11 Пористость бислоя $3C\text{-SiC}/\text{Mo}$. Синий и голубой цвета соответствуют газовым кластерам, красный и оранжевый – вакансионным. Время 0.5 мс

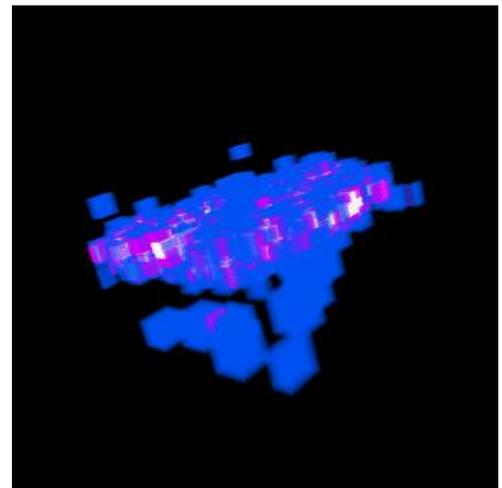


Рис. 12. Пористость бислоя $3C\text{-SiC}/\text{Mo}$. Время 1.5 мс

Зависимость пористости и напряжений, возникающих в бислое, от температуры носит нелинейный характер, что иллюстрирует рис. 13.

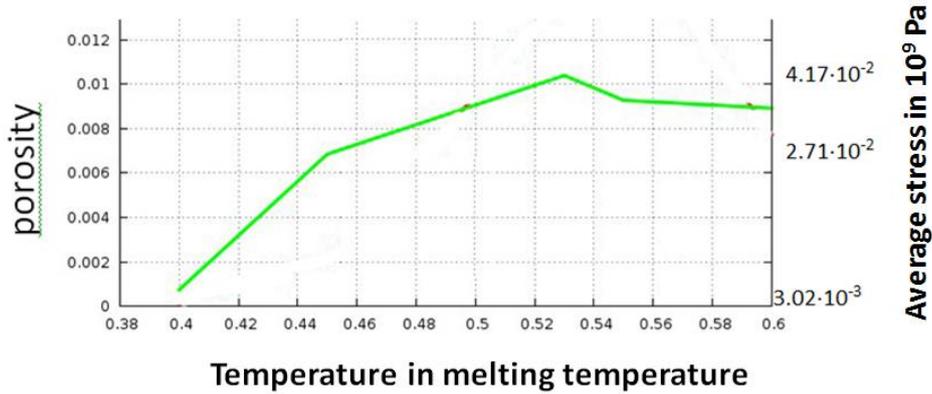


Рис. 13. Зависимость пористости (левая шкала) и напряжений (правая шкала), возникающих в слое карбида кремния бислоя $3C-SiC/Mo$ с размерами $1 \text{ мкм} \times 1 \text{ мкм} \times 1.5 \text{ мкм}$ при облучении карбида кремния ионами ксенона с энергией 7 кэВ , доза облучения 10^{15} см^{-2} . Время 0.5 мс . Пористость определена как отношение суммарного объема пор к объему карбида кремния.

Напряжения, возникающие в двуслойном образце

Для того чтобы определить, не являются ли напряжения, возникающие в рассматриваемом образце, критическими (приводящими к разрушению), рассчитаем напряжения, создаваемые блистерами, и напряжения, возникающие за счет несоответствия параметров решеток слоев. Возможным изгибом образца пренебрегаем.

В общем виде напряжение, создаваемое в точке (x, y, z) одним блистером, находящимся в точке с координатами (x_i, y_i, z_i) и средним размером $\langle g_i \rangle$ аналогично [19-22] можно записать как

$$\sigma_i = 0.195 r_{at}^2 \frac{\mu_{cd} b_b}{1-\nu} \frac{\frac{1}{3} \ln(\langle g_i \rangle) + \ln\left(\frac{r_{at}}{b_b}\right) + \frac{4\pi\sigma_{surf}}{\mu_{cd} b_b}}{\left((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2\right)^{3/2}} \langle g_i^{2/3} \rangle, \quad (37)$$

где r_{at} – радиус внедренного атома, μ_{cd} – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, b_b – вектор Бюргерса, σ_{surf} – поверхностная энергия, расстояния от блистера до точки с координатами (x, y, z) и r_{at} измеряются в метрах.

Таким образом, напряжение, создаваемое блистерами, в j -слое при облучении ионами Xe^{++} вычисляется по формуле:

$$\sigma_j = \sigma_0 \times \int \left[\sum_i \left(\frac{0.33 \ln(g_i) + A_\sigma}{\left((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2\right)^{3/2}} (g_i)^{2/3} \right) + \sum_i \left((g_i)^{2/3} (0.33 \ln(g_i) + A_\sigma) \right) \right] dx dy dz, \quad Pa. \quad (38)$$

где $\sigma_0 = 0.195 r_{at}^2 \frac{\mu_{cd} b_b}{(1-\nu) a_m^3}$ измеряется в ГПа, (39)

$$A_{\sigma} = \ln\left(\frac{r_{at}}{b_b}\right) + \frac{4\pi\sigma_{surf}}{\mu_{cd}b_b},$$

если вектор Бюргерса b_b для материала неизвестен, его

можно приблизительно вычислить по формуле $b_b = \frac{a_m}{\sqrt{2}}$, где a_m – параметр решетки облучаемого материала. В формулах (37)-(39) (x,y,z) – координаты точки, в которой не находится блистер, но принадлежащей рассматриваемому слою j , (x_i,y_i,z_i) – координаты центра масс i -го блистера с средним размером $\langle g_i \rangle$, рассчитанным по $f(g_i, x, y, z, j, t)$ ФР блистеров. Как видно из (39), расстояния в формуле (38) являются безразмерными (измеряются в единицах параметров решетки материала слоя).

Используемые в расчетах величины приведены в таблице 1.

Таблица 1

Материал	Модуль сдвига μ_{cd} , Па	Коэф. Пуассона на ν	Параметр решетки a_m Å (10^{-10} м)	вектор Бюргерса b_b , Å (10^{-10} м)	Поверх. энергия σ_{surf} , Дж/м ²	Радиус атома Хе, м, Å (10^{-10} м)
<i>Mo</i>	$(122 \div 129) \times 10^9$	0.3	3.147	2.23	2.63	2.18
<i>3C-SiC</i>	171×10^9	0.145	4.36	2.18	1.	
<i>Ni</i>	73.5×10^9	0.33	3.524	2.3	1.94	
<i>Si</i>	79.9×10^9	0.266	5.4307	3.84	0.736	

Значения параметров σ_0 и A_{σ} в (38) для некоторых материалов (для которых проводилось численное моделирование) при облучении их ионами He^{++} и в предположении нейтрализации ионов в нескольких приповерхностных слоях решетки приведены в таблице 2.

Таблица 2

Материал	σ_0 , 10^9 Па	A_{σ}
Молибден <i>Mo</i>	11.6	1.2
Карбид кремния <i>3C-SiC</i>	4.9	0.34
Никель <i>Ni</i>	5.34	1.39
Кремний <i>Si</i>	2.42	-0.27

Кроме напряжений, вызываемых блистерами, рассматриваются еще напряжения, вызванные несоответствием параметров решеток слоев σ_d , которое в предположении протяженной границы и при учете только компоненты, соответствующей наибольшему значению тензора деформаций (значению, соответствующему деформации в направлении, перпендикулярном границе раздела слоев), рассчитывается следующим образом:

$$\sigma_d = 4\mu_{cd} \cdot \frac{(1+\nu)}{(1-\nu)} \cdot \frac{(a_m - a_s)^2}{(a_m + a_s)} \cdot \frac{1}{a_m} \cdot \frac{1}{|z - z_{gran}|}, \text{ Pa.} \quad (40),$$

$$\sigma_d = \sigma_{dl} \cdot \frac{1}{|z - z_{gran}|}, \text{ Pa}$$

где z_{gran} – глубина межслойной границы от поверхности под облучением, z – рассматриваемая глубина, z_{gran} и z – безразмерные величины (измеряются в параметрах решетки слоя), μ_{cd} , ν , a_m – модуль сдвига, коэффициент Пуассона и параметр решетки рассматриваемого слоя, a_s – параметр решетки соседнего слоя. В таблице 3 приведены значения σ_{dl} для двуслойных образцов, состоящих из различных материалов:

Таблица 3

Образец 3C-SiC/Mo	
σ_{dl} в молибдене $\sigma_{dl(Mo)} = 56.4 \cdot 10^9$ Па	σ_{dl} в 3C-SiC $\sigma_{dl(3C-SiC)} = 41.14 \cdot 10^9$ Па
Образец Mo/Ni	
σ_{dl} в молибдене $\sigma_{dl(Mo)} = 6.14 \cdot 10^9$ Па	σ_{dl} в никеле $\sigma_{dl(Ni)} = 3.53 \cdot 10^9$ Па
Образец Mo/Si	
σ_{dl} в молибдене $\sigma_{dl(Mo)} = 175 \cdot 10^9$ Па	σ_{dl} в кремнии $\sigma_{dl(Si)} = 61.7 \cdot 10^9$ Па

На рис. 14 показано соответствие напряжений, возникающих в сечении бислоя 3C-SiC/Mo с размерами 1 мкм × 1 мкм × 1.5 мкм при облучении карбида кремния ионами ксенона с энергией 7 кэВ, дозой облучения 10^{15} см⁻², температурой 1500К, и потенциала взаимодействия в том же сечении. Время окончания численного эксперимента соответствует 0.5 мс. Шкала соответствия цвета и напряжения приведена в правой части графика. Знак «-» соответствует растягивающим напряжениям решетки (за счет вакансионных кластеров дефектов), знак «+» – сжимающим (напряжения несоответствия параметров решеток слоев и напряжения за счет роста газонаполненных дефектов). Следует обратить внимание на возникновение растягивающих решетку напряжений (рис.14), что наблюдается в связи с учетом вакансионной подсистемы при решении системы СДУ Ито-Стратоновича. Кроме того, при анализе рис. 14 видно, что напряжения, создаваемые вакансионно-газовыми дефектами, сравнимы с напряжениями несоответствия параметров решеток слоев в момент окончания флуктуационной стадии образования и развития неточечных вакансионно-газовых дефектов (длительностью ~ 1 мс), и ими в течение данной стадии пренебрегать нельзя, что также необходимо учитывать при создании сред с пористостью, приближенной к упорядоченной, как основы для

одномерного фотонного кристалла.

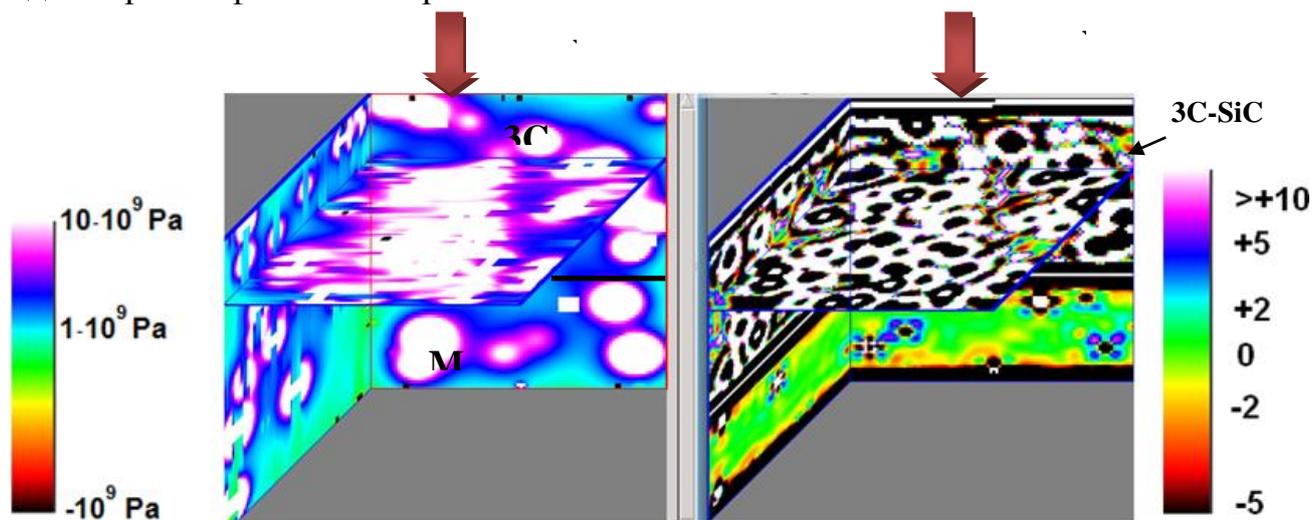


Рис. 14. Напряжения возникающие только от развития ВГД в некотором сечении бислоя $3C-SiC/Mo$, расположенном в Mo (слева), и потенциала взаимодействия в том же сечении (справа). Шкала соответствия цвета и значения напряжений расположена в левой части рисунка, а шкала соответствия цвета и потенциала взаимодействия – в правой части рисунка. Потенциал нормирован на то же, что и на рис. 10. Бислой имеет размеры $1\text{ мкм} \times 1\text{ мкм} \times 1.5\text{ мкм}$, облучение карбида кремния ионами ксенона с энергией 7 кэВ , доза облучения 10^{15} см^{-2} , температура 1500 К , время 1 мс .

В ряде задач, включая рассматриваемые, где присутствует граница между веществами с разными свойствами, необходимо учитывать ее сложную форму. В случае многослойных структур можно считать, что граница имеет фрактальную структуру. Это обусловлено технологическими процессами, в связи с которыми создать идеально ровную межслойную границу не представляется возможным. Поэтому было проведено исследование поведения образца с фрактальными и плоскими границами. Реализован алгоритм построения случайного фрактала Лебега. Примененный алгоритм обладает двумя отличительными особенностями:

1. повторяемость т.к. используется генератор псевдослучайных чисел,
2. малый объем потребляемой памяти, т.к. используемый генератор чисел позволяет не хранить случайные числа для каждого узла координатной сетки.

Рассмотрено изменение рельефа межслойной границы образца $3C-SiC/Mo$ с изолирующей монослойной прослойкой в течение флуктуационной стадии высокотемпературного блистеринга под действием ионов Xe^{++} с энергией 4 кэВ , дозой 10^{15} см^{-2} при температуре 1660 К (рис. 15). Шкала соответствия цвета и значений глубины межслойной границы от нижней необлучаемой границы приводится в нижней части рисунка. Межслойная граница задана фракталом Лебега, причем среднеквадратичное отклонение глубины границы

было задано равным 2 параметрам решетки молибдена (рис. 15а), поскольку в натуральных экспериментах и действующих приборах нельзя добиться идеально ровных поверхностей, но к этому стремятся, т.к. чем ближе поверхность раздела к плоской и чем тоньше изолирующая прокладка (с сохранением всех изолирующих свойств препятствующих в частности взаимной диффузии атомов материалов слоев, но пропускающей имплантируемые ионы), тем выше рабочие характеристики приборов. Исходя из вышесказанного можно предположить, что влияние фрактальности границы также будет несильным.

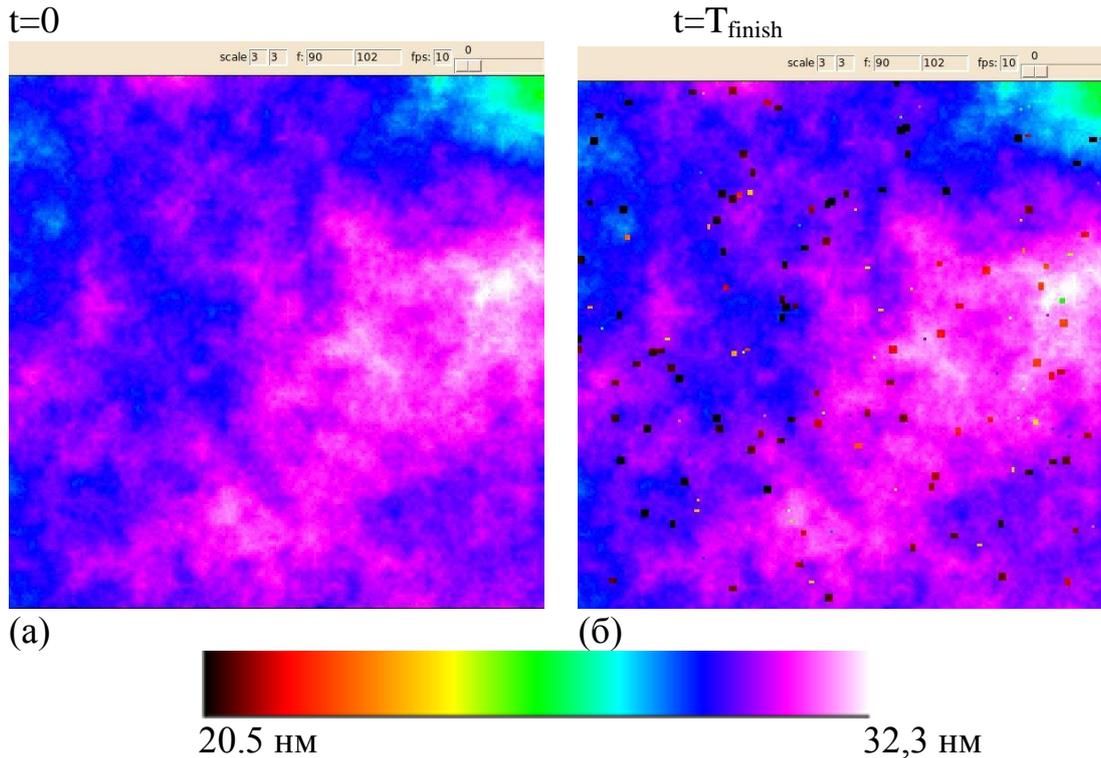


Рис. 15. Зависимость глубины межслойной границы от нижней необлучаемой границы в начальный момент времени (а) и в момент окончания расчета (б)

Функция распределения расстояний от нижней необлучаемой границы до межслойной границы в начальный (рис. 16а) и конечный (16б) моменты времени характеризует изменение рельефа границы.

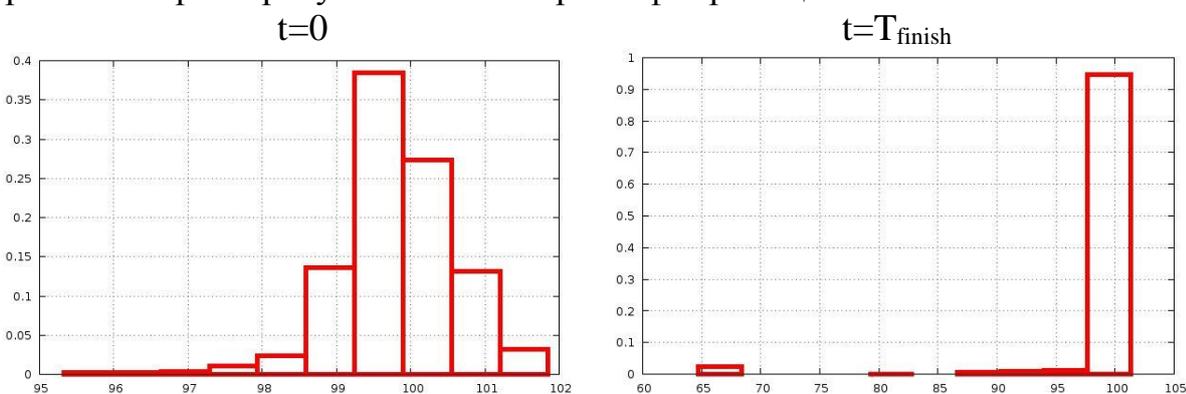


Рис. 16. Функция распределения расстояний от нижней необлучаемой границы до межслойной границы в начальный (а) и конечный моменты времени (б)

Как видно из этих графиков, рельеф границы в результате блистеринга становится более изрезанным.

Было проведено исследование изменения рельефа межслойной границы образца $3C-SiC/Mo$ с изолирующей монослойной прослойкой в течение флуктуационной стадии высокотемпературного блистеринга при тех же физических параметрах, что и для рис. 15-16, однако граница первоначально предполагалась идеально плоской. Результаты представлены на рис. 17.

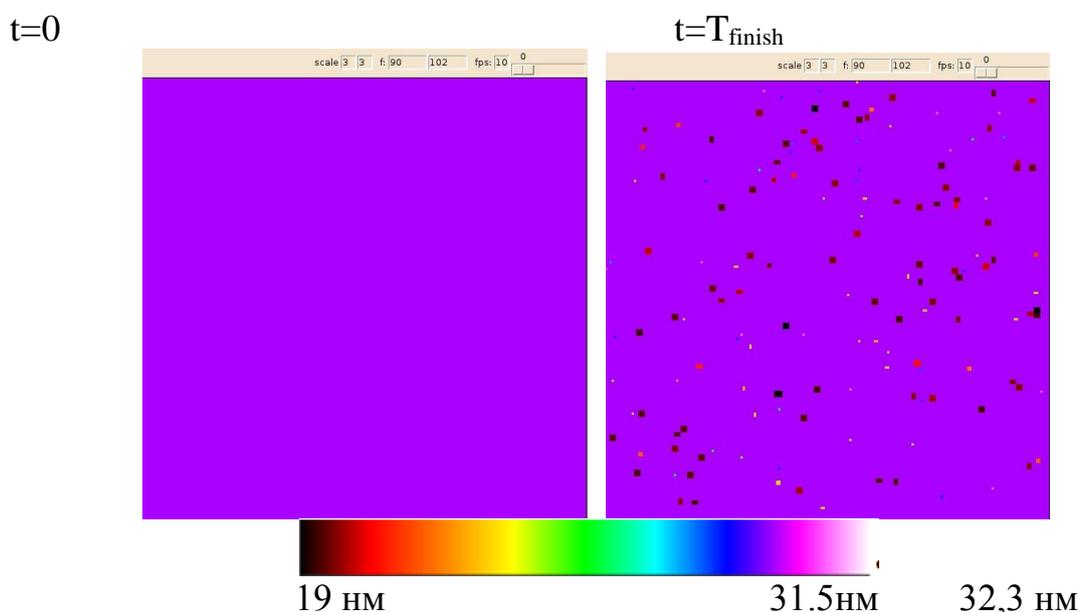


Рис. 17. Зависимость глубины межслойной границы от нижней необлучаемой границы в начальный момент времени (а) и в момент окончания расчета (б) в предположение идеально ровной границы.

Рассмотрено влияние рельефа на образование протяженных структур дефектов, параллельных падающему потоку. Физические параметры

эксперимента взяты теми же, что и для рис. 15. Исходя из изначально введенного слабого отличия фрактальной границы от идеально ровной, можно предположить слабое влияние фрактальности. Однако серия расчетов подтвердила влияние фрактальности на образование структур дефектов в нанометровых слоях подложки. А именно, введение фрактальности увеличивает максимальную протяженность структур дефектов, параллельных падающему потоку, на 6 параметров решетки материала слоя (в рассматриваемом случае Mo) и в 2 раза увеличивает долю структур, имеющих длину вдоль направления падающего потока от 4 до 10 параметров решетки слоя.

Однако введение фрактала с большой амплитудой отклонений относительно среднего значения приводит к ухудшению условий образования протяженных структур дефектов с большой протяженностью. На рис. 18 представлено расстояние от нижней необлучаемой границы образца до межслойной границы в случае увеличенной начальной шероховатости межслойной границы (рис. 18а, задана дисперсия шероховатости межслойной границы, равная 33,3% толщины слоя $3C-SiC$) и для случая малой начальной шероховатости (рис. 18б, дисперсия шероховатости межслойной границы равна 6,7% толщины слоя $3C-SiC$).

Максимальные протяженности структур уменьшаются с увеличением дисперсии отклонения шероховатости межслойной границы от среднего значения глубины этой границы относительно необлучаемой границы образца. Однако в то же время вероятности обнаружения протяженных структур дефектов с длиной от 10 до 30 параметров решетки молибдена увеличиваются с увеличением шероховатости межслойной границы в течение флуктуационной стадии блистеринга.

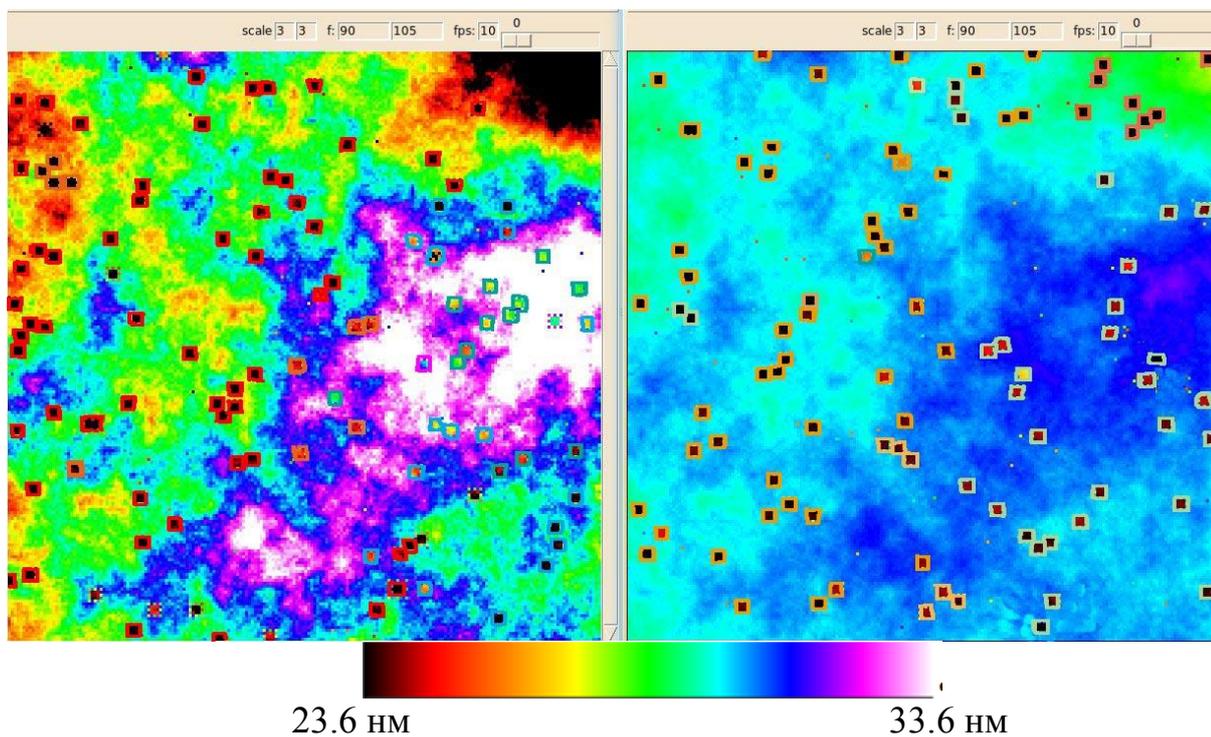


Рис. 18а

Рис. 18б

Интересна деградация межслойной границы с увеличением дозы. Так рис. 15, 17 приведены результаты для дозы 10^{15} см $^{-2}$, на рис. 19а – для дозы 10^{16} см $^{-2}$ и на рис. 19б – для дозы 10^{17} см $^{-2}$. Расчеты проведены в предположении отсутствия диффузии и реакций на границе, как если бы был нанесен мономолекулярный слой полиамида или другая пленка, через которую проходят только мономеры газа.

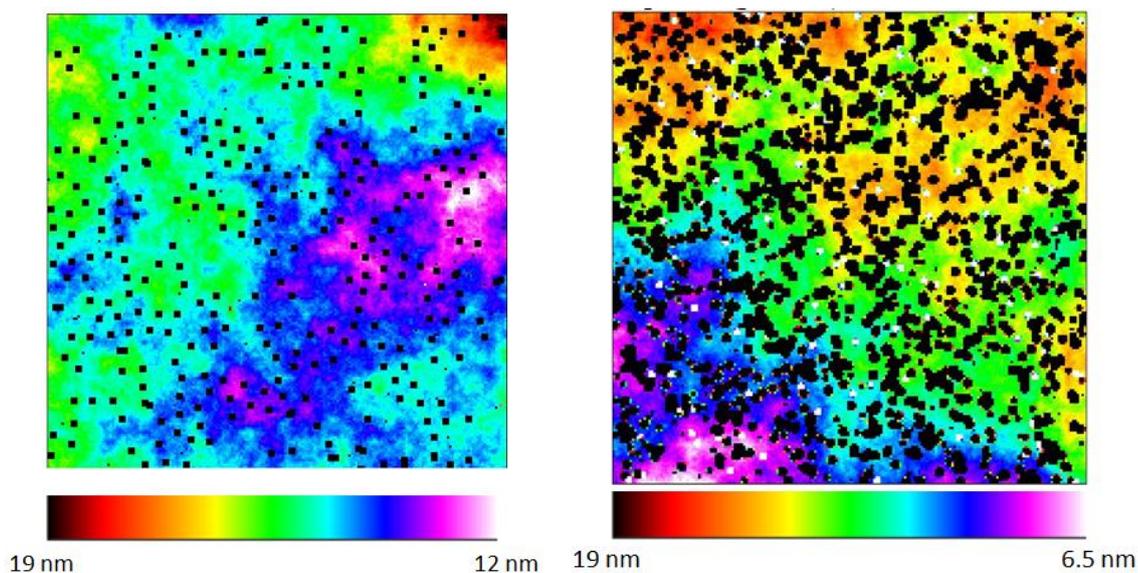


Рис. 19. Зависимость глубины межслойной границы $3C-SiC$ и Mo от границы, находящейся под облучением, в момент окончания флуктуационной стадии.

Заключение

Проведено численное моделирование флуктуационной стадии высокотемпературного блистеринга в двухслойном образце, состоящем из слоев $3C-SiC$ (под облучением) и Mo наноразмерных толщин на основе кинетических уравнений в частных производных с функциональными коэффициентами. Получены функции распределения дефектов по размерам и глубине слоев, по ним рассчитаны пористость слоев образца и напряжения, возникающие в результате развития блистеринга.

К окончанию флуктуационной стадии высокотемпературного блистеринга формируются слои повышенной пористости и напряжений как в слое Mo , так и в слое $3C-SiC$. Причем в отличие от двухслойного образца, состоящего из слоев Mo (под облучением) и Si наноразмерных толщин, в котором пористость в основном образуется в слое кремния [10,11], в двухслойном образце, состоящем из слоев $3C-SiC$ (под облучением) и Mo , при температуре образца 1200 К и дозе облучения 10^{15} ион/см слой максимальной пористости и напряжений находится в слое $3C-SiC$ вблизи межслойной границы, но отстоит от нее на 3,5 нм.

В двухслойном образце, состоящем из слоев $3C-SiC$ (под облучением) и Mo наноразмерных толщин наблюдается образование структур дефектов как перпендикулярных, так и параллельных падающему потоку.

К моменту окончания флуктуационной стадии высокотемпературного блистеринга вклад напряжений, создаваемых блистерами, уже не является пренебрежимо малым по сравнению с вкладом от напряжений, связанных с несоответствием параметров решеток слоев ($3C-SiC/Mo$).

Проведено сравнение характерных значений напряжений, вызванных несоответствием параметров решеток, для образцов, состоящих из нанометровых слоев различных материалов. Сравнение проводилось в предположении плоской протяженной границы, и сравнивались только компоненты, соответствующие наибольшему значению тензора деформаций (значению, соответствующему деформации в направлении, перпендикулярном границе раздела слоев).

Суммарные напряжения, осредненные по слою толщиной в 5 параметров решетки материала слоя ($3C-SiC$ или Mo), достигают значений 10^{12} Па, в то время как градиент напряжений достигает значения 10^{10} Па/м.

Численный эксперимент позволяет показать временную эволюцию развития дефектов в защитном слое.

Модель блистеринга [9] может быть также использована для описания прогнозирования деградации зеркал для EUV-литографии.

Благодарности

Авторы благодарят А.В. Иванова, В.Д. Левченко, И. Горячева за предоставленные программы визуализации результатов, Т.В. Левченко за плодотворные обсуждения.

Список литературы

1. Г.И. Змиевская. А.Л. Бондарева. Кристаллические островки тонких пленок полупроводника // Физика плазмы. 2011. том 37. № 1. С. 93–102.
2. Г.И. Змиевская. Модель флуктуационной стадии фазового перехода // Энциклопедия низкотемпературной плазмы (Сер. Б). Т. VII. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. Кн. 3.М.: Янус-К. 2009. С. 101-125.
3. Г.И. Змиевская. А.Л. Бондарева. Численное моделирование вакансионно-газовых дефектов поверхности твердого тела, возникающих после воздействия на неё горячей плазмы// Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Серия Б. Справочные приложения. базы и банки данных. Гл. редактор серии В.Е. Фортов. Том IX-3 Радиационная плазмодинамика. под редакцией В.А. Грибков. Москва. Янус-К. С. 474-499.
4. Г.И. Змиевская. В.А. Грибков. Экспериментальные и теоретические исследования кинетических процессов в сталкивающихся плазменных потоках и их приложения к физике лазеров// Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Серия Б. Справочные приложения. базы и банки данных. Гл. редактор серии В.Е. Фортов. Том IX-3 Радиационная плазмодинамика. под редакцией В.А. Грибков. Москва. Янус-К. С.512-540.
5. Я.Б. Зельдович. К теории образования новой фазы. кавитация // ЖЭТФ. 1942. Т. 12. № 11–12. С. 525.
6. Г.И.Змиевская, Т.В. Зиньковская. Численная модель образования кластеров// ДАН СССР. 1989. Т. 309(2). С. 301-305.
7. А.А. Берзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов. Диффузия легких атомов на поверхности кристалла и процессы кластеризации // ФТТ. 1996. Т. 38. № 5. С. 1349-1356.
8. А.И. Морозов, П.А. Овченков, А.С. Сигов. Взаимодействие дефектов в кристалле и процессы кластеризации // Дискретное моделирование плазмы. Сборник трудов ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР под ред. Сигов Ю.С.. М. 1990. С.183.
9. А.Л. Бондарева, Г.И. Змиевская. Островки тонкой пленки полупроводника и численный эксперимент // Поверхность. Рентгеновские. синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 10. С. 50-58.
10. А.Л. Бондарева, Г.И. Змиевская. Моделирование блистеринга в слоистых зеркалах. применяемых в литографии // Поверхность. Рентгеновские.

- синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 6. С. 26-33.
11. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva, V.V. Savchenko, T.V. Levchenko. Silicon Carbide Solid-Phase Epitaxy on a Microporous Substratum // Defect and Diffusion Forum Vols. 326-328 (2012) pp. 243-248.
 12. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva, V.V. Savchenko, T.V. Levchenko. Computer Simulation of the Origination Porosity // in book Numerical Analysis of Heat and Mass Transfer in Porous Media. 2012. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. ISBN: 978-3-642-30531-3.
 13. Е.В. Калинина. Влияние облучения на свойства SiC и приборы на его основе // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41. Вып. 7 С. 769-805.
 14. А.А. Лебедев, А.М. Иванов, Н.Б. Строкан. Радиационная стойкость SiC и детекторы жестких излучений на его основе // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. Вып. 2 С. 129-150.
 15. Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов. Метод классической молекулярной динамики: замысел и реальность // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2011. том 4. № 1. С. 31–58.
 16. В.И. Таланин, И.Е. Таланин. Применение диффузионной модели образования ростовых микродефектов для описания дефектообразования в термообработанных монокристаллах кремния // Физика твердого тела. 2013. том 55. вып. 2 С. 247-251.
 17. Г.И. Змиевская, Т.А. Аверина, А.Л. Бондарева Numerical solution of stochastic differential equations in the sense of Stratonovich in an amorphization crystal lattice model // Applied Numerical Mathematics International Conference Difference Schemes and Applications in Honor of the 90-th Birthday of Professor V. S. Ryaben'kii. 2015 V. 93. July 2015. P. 15–29
 18. Х. Розенброк, С. Стори Вычислительные методы для инженеров химиков.— М.: Мир, 1968.
 19. А.Г. Залужный, Ю.Н. Сокурский, В.Н. Тебус Гелий в реакторных материалах. — Москва: Энергоатомиздат, 1988.
 20. Л. Б. Беграмбеков Разрушение поверхности твердых тел при ионном и плазменном облучении. — Москва: МИФИ, 1987.
 21. Н.В. Плешивцев, А.И. Бажин Вспучивание и шелушение поверхности (блистринг и флекинг). — Москва: Вузовская книга, 1998.
 22. H. Ullmaier The influence of helium on the bulk properties of fusion reactor structural materials // Nuclear Fusion. — 1984. — Т. 24, № 8. — С. 1039-1083.