

4. The Practical Handbook of Genetic Algorithms. Applications / Ed. L. D. Chambers. – Florida : CRC Press, 2000. – Vol. I. – 520 p.
5. Beni G. Swarm Intelligence / G. Beni, J. Wang // Annual Meeting of the Robotics Society: Proceedings of Seventh International Conference. – Tokyo : RSJ Press, 1989. – P. 425–428.
6. Bonabeau E. Swarm Intelligence: From Natural to Artificial Systems / E. Bonabeau, M. Dorigo, G. Theraulaz. – New York : Oxford University Press, 1999. – 320 p.
7. De Castro L. N. Artificial Immune Systems. Part I. Basic Theory And Applications / L. N. De Castro, F. J. Von Zuben. – Technical Report No. Rt Dca 01/99. – Brazil : Feec/Unicamp, 1999. – 95 p.
8. Dorigo M. The Ant System: Optimization by a colony of cooperating agents / M. Dorigo, V. Maniezzo, A. Colomi // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. – 1996. – Part B, № 26(1). – P. 29–41.
9. Прогрессивные технологии моделирования, оптимизации и интеллектуальной автоматизации этапов жизненного цикла авиадвигателей: Монография / А. В. Богуслаев, Ал. А. Олейник, Ан. А. Олейник и др.; под ред. Д. В. Павленко, С. А. Субботина. – Запорожье : Мотор Сич, 2009. – 468 с.
10. Sumpter D. J. Formalising the Link between Worker and Society in Honey Bee Colonies / D. J. Sumpter, D. S. Broomhead // Lecture Notes In Computer Science: Proceedings of the First International Workshop on Multi-Agent Systems and Agent-Based Simulation. – MABS'98, LNAI, 1998. – P. 95–110.
11. Passino K. M. Biomimicry of bacterial foraging for distributed optimization and control / K. M. Passino // IEEE Control System Magazine. – 2002. – № 3 (22). – P. 52–67.
12. Madigan M. T. Biology of Microorganisms / M. T. Madigan, J. M. Martinko, J. Parker. – New Jersey : Prentice Hall, 1997. – 1036 p.
13. Berg H. C. Random Walks in Biology / H. C. Berg. – Princeton : Princeton University Press, 1993. – 164 p.
14. Tripathy M. Transmission Loss Reduction Based on FACTS and Bacteria Foraging Algorithm / M. Tripathy, S. Mishra, L. L. Lai, Q. P. Zhang // Proceedings of 9th International Conference of Parallel Problem Solving from Nature. – Heidelberg : Springer, 2006. – P. 222–231.
15. Analysis And Design Of Intelligent Systems Using Soft Computing Techniques / Ed. Melin P., Castillo O. R., Ramirez E. G., Kacprzyk J. – Heidelberg : Springer, 2007. – 855 p.
16. Mishra S. A hybrid least square-fuzzy bacterial foraging strategy for harmonic estimation / S. Mishra // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 2005. – № 1(9). – P. 61–73.
17. Kim D. H. Bacterial Foraging Based Neural Network Fuzzy Learning / D. H. Kim, C. H. Cho // Proceedings of the 2nd Indian International Conference on Artificial Intelligence (ICAI-2005). – Pune : ICAI, 2005. – P. 2030–2036.

Надійшла 18.02.2010

Олейник А. А.

МУЛЬТИАГЕНТНЫЙ МЕТОД С КОСВЕННОЙ СВЯЗЬЮ МЕЖДУ АГЕНТАМИ

Исследован метод оптимизации на основе мультиагентного подхода. Разработан мультиагентный метод с косвенной связью между агентами, предусматривающий выполнение дополнительных этапов отбора, скрещивания и мутации. Проведены эксперименты по решению задач оптимизации многомерных нелинейных функций, что позволило исследовать эффективность предложенного метода.

Ключевые слова: агент, генетические операторы, мультиагентный метод, оптимизация, целевая функция.

Oliiynk A. O.

MULTIAGENT METHOD WITH INDIRECT COUPLING BETWEEN AGENTS

The optimization method based on multiagent approach has been investigated. A multiagent method with indirect coupling between agents is developed, providing execution of additional stages of selection, crossover and mutation. Experiments have been made aimed at solving the problems of multidimensional nonlinear functions optimization, which made it possible to evaluate efficiency of the proposed method.

Key words: agent, genetic operators, multiagent method, optimization, efficiency function.

УДК 621.315.592

Таланин В. И.¹, Таланин И. Е.², Семикина М. Ю.³¹Д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой Классического частного университета (г. Запорожье)²Канд. физ.-мат. наук, профессор Классического частного университета (г. Запорожье)³Старший преподаватель Классического частного университета (г. Запорожье)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПЕРВИЧНЫХ РОСТОВЫХ МИКРОДЕФЕКТОВ В БЕЗДИСЛОКАЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Представлена математическая модель и компьютерная программа расчета для процесса образования первичных ростовых микродефектов в бездислокационном монокристалле кремния на основе диссоциативного процесса диффузии.

Ключевые слова: ростовые микродефекты, бездислокационный монокристалл кремния, первичные ростовые дефекты, гетерогенный механизм дефектообразования.

ВВЕДЕНИЕ

Образующиеся в процессе роста бездислокационного монокристалла кремния ростовые микродефек-

ты определяют не только исходную дефектную структуру монокристаллов, но и последующие процессы трансформации этой структуры в результате

технологических воздействий. Поэтому исследование механизма образования таких дефектов помогает решить проблему управления дефектной структурой кристалла и проблему фундаментальных взаимодействий точечных дефектов.

На сегодняшний день подходы к решению проблемы дефектообразования в монокристалле кремния можно разделить на две группы: теоретические и экспериментальные. К первой группе относится широко распространенная модель динамики точечных дефектов [1, 2], основой которой является модель В. Воронкова [3, 4]. Основа модели Воронкова – признание критичной роли процесса «быстрой рекомбинации» собственных точечных дефектов около фронта кристаллизации. Модель динамики точечных дефектов предполагает образование в процессе охлаждения кристалла в узком температурном интервале ниже 1200 °С межзельных дислокационных петель и вакансионных микропор в различных областях кристалла в зависимости от температурных условий роста. Кроме того, предполагается, что образование всех видов микродефектов имеет гомогенный характер и игнорируется процесс взаимодействия собственных точечных дефектов с атомами примеси [2]. В модели динамики точечных дефектов неявно предполагается, что в зависимости от соотношения V/G (V – скорость роста кристалла, G – осевой температурный градиент) образующиеся в температурном интервале 1420...1200 °С дефекты представляют собой либо малые вакансионные микропоры, либо малые межзельные дислокационные петли [3].

Ко второй группе относятся подходы, связанные с экспериментальными исследованиями физической природы и характеристик ростовых микродефектов [5]. На основании экспериментальных исследований был построен качественный гетерогенный механизм образования и трансформации ростовых микродефектов, который базируется на следующих положениях [6]:

- рекомбинация собственных точечных дефектов вблизи температуры плавления ничтожна из-за наличия рекомбинационного барьера;

- распад пересыщенного твердого раствора собственных точечных дефектов во время охлаждения кристалла проходит по двум механизмам: вакансионному и межзельному;

- фоновые примеси кислорода и углерода принимают непосредственное участие в образовании и трансформации ростовых микродефектов.

Основные положения гетерогенного механизма находятся в противоречии с теоретическими положениями

модели Воронкова. Недостатком гетерогенного механизма является отсутствие теоретической (математической) модели образования дефектов как в температурном интервале 1420...1200 °С, так и в температурном интервале 1200...900 °С.

Целью настоящей работы является обоснование теоретической модели гетерогенного механизма образования ростовых микродефектов как результата взаимодействия «примесь – собственный точечный дефект».

Различия в физической сущности образования первичных и вторичных ростовых микродефектов дают возможность рассматривать дефектную структуру бездислокационных монокристаллов кремния в рамках гетерогенного механизма образования и трансформации ростовых микродефектов как структуру, состоящую из двух подсистем: подсистемы первичных ростовых микродефектов (включает в себя взаимодействие «примесь – собственный точечный дефект») и подсистемы вторичных ростовых микродефектов (включает в себя взаимодействие «собственный точечный дефект – собственный точечный дефект») [7].

Исходя из анализа кинетических процессов взаимодействий примесей, в качестве математической модели образования подвижных комплексов можно выбрать приближение сильного комплексообразования модели последовательной диффузии, которая допускает простую физическую интерпретацию и наиболее адекватна рассматриваемой физической модели. В условиях гетерогенного механизма образования и трансформации ростовых микродефектов речь может идти о модели последовательной диффузии, когда собственные точечные дефекты можно рассматривать как компонент, находящийся в начальный момент времени в объеме образца, а фоновые примеси – как компонент на границе образца и вводимый в образец. При этом не делается различия между диффузией примеси вглубь с поверхности образца и выделением из пересыщенного твердого раствора [8].

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Математическая модель процесса образования первичных ростовых микродефектов была сформулирована на основе диссоциативного процесса диффузии примесей. Полное решение задачи о последовательной диффузии компонента A в образец, однородно легированный компонентом B с учетом комплексообразования $A + B \leftrightarrow AB$, было приведено в работе [9].

Искомое уравнение диффузии рассматривалось в виде

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} \left[\left(N_A - N_B - k + \sqrt{k^2 + 2k(N_A + N_B) + (N_A - N_B)^2} \right) \right]' + 2\lambda N_A' &= 0 \\ \frac{1}{2} \left[\left(N_B - N_A - k + \sqrt{k^2 + 2k(N_A + N_B) + (N_A - N_B)^2} \right) \right]' + 2\lambda d^2 N_B' &= 0 \end{aligned} \right\} (1)$$

где $\lambda = \frac{x}{2\sqrt{D_A \cdot t}}$ – подстановка Больцмана, штрих обозначает дифференцирование по λ , $d^2 = D_A/D_B$,

D_A, D_B – коэффициенты диффузии компонентов; N_A, N_B – полные концентрации компонентов; $k(T)$ – константа реакции комплексообразования. Начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned} N_A(x, 0) &= 0; \\ N_B(x, 0) &= N_B(\infty); \\ N_A(0, t) - Q(0, t) &= H_A(0); \\ \frac{\partial}{\partial x} [N_B(x, t) - Q(x, t)]_{x=0} &= 0. \end{aligned}$$

Решение задачи диффузии компонента A в полубесконечный образец, однородно легированный компонентом B , при условии отсутствия испарения компонента B из образца и наличия свободного компонента A на границе образца языком полных компонентов имеет вид:

$$H_A = N_A - Q = \begin{cases} (N_A(0) - N_{B1}) \left[1 - \frac{\operatorname{erfc}(\lambda/d_A)}{\operatorname{erfc}(\lambda_0/d_A)} \right], & \lambda \leq \lambda_0; \\ 0, & \lambda > \lambda_0, \end{cases} (2)$$

$$H_B = N_B - Q = \begin{cases} 0, & \lambda \leq \lambda_0; \\ N_B(\infty) \left[1 - \frac{\operatorname{erfc}(\lambda/d_B)}{\operatorname{erfc}(\lambda_0/d_B)} \right], & \lambda > \lambda_0, \end{cases} (3)$$

$$Q = \begin{cases} N_{B1}, & \lambda \geq \lambda_0; \\ N_{B1} \frac{\operatorname{erfc}(\lambda/d_Q)}{\operatorname{erfc}(\lambda_0/d_Q)}, & \lambda < \lambda_0, \end{cases} (4)$$

$$\begin{aligned} N_{B1} T(\lambda_0/d_Q) &= N_B(\infty) T(\lambda_0/d_B); \\ N_{B1} T(\lambda_0/d_Q) &= \{N_A(0) - N_{B1}\} S(\lambda_0/d_A), \end{aligned} (5)$$

где $T(x) = \frac{\exp(-x^2)}{\sqrt{\pi x} \operatorname{erfc}(x)}$; $S(x) = \frac{\exp(-x^2)}{\sqrt{\pi x} \operatorname{erf}(x)}$; $N_A(0) - N_{B1} = H_A(0)$.

В условиях физической модели (гетерогенного механизма образования ростовых микродефектов) было принято, что компонент A является фоновой примесью (кислорода или углерода), а компонент B – собственные точечные дефекты (вакансии или собственные междуузельные атомы). Для вакансионного механиз-

ма рассматривалось взаимодействие «кислород + вакансия» ($O + V$), для междуузельного механизма – «углерод + собственный междуузельный атом» ($C + I$) для нелегированных бездислокационных монокристаллов FZ-Si и CZ-Si. В расчетах были использованы следующие величины: $H_A(0) \text{ (см}^{-3}\text{)} = H_O(0) = 4 \cdot 10^{15}$ (FZ-Si); $H_A(0) \text{ (см}^{-3}\text{)} = H_O(0) = 8 \cdot 10^{16}$ (CZ-Si); $C_B \text{ (см}^{-3}\text{)} = C_V = 8,84 \cdot 10^{14}$; $D_A \text{ (см}^2\text{/с)} = D_O = 0,17 \exp(-2,54/kT)$; $D_B \text{ (см}^2\text{/с)} = D_V = 4 \cdot 10^{-5}$; $H_A(0) \text{ (см}^{-3}\text{)} = H_C(T_m) = 4 \cdot 10^{15}$ (FZ-Si); $H_A(0) \text{ (см}^{-3}\text{)} = H_C(0) = 1 \cdot 10^{16}$ (CZ-Si); $C_B \text{ (см}^{-3}\text{)} = C_I = 6,31 \cdot 10^{14}$; $D_A \text{ (см}^2\text{/с)} = D_C = 1,9 \exp(-3,1/kT)$; $D_B \text{ (см}^2\text{/с)} = D_I = 4,75 \cdot 10^{-4}$.

Приближенные аналитические выражения согласуются с гетерогенным механизмом образования ростовых микродефектов, и используемый математический аппарат позволяет учитывать и анализировать взаимодействие собственных точечных дефектов не только с фоновыми примесями кислорода и углерода, но и с другими примесями (переходных металлов, азота, водорода и др.), а также взаимодействия типа «примесь – примесь» [10].

2. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Первым этапом эксперимента является процесс формирования исходных данных для его проведения. Исходные данные, которые при необходимости могут изменяться, хранятся во внешнем файле. Константы, количество которых невелико, прописаны в самой программе. Затем поток данных направляется в блок расчета, где, в соответствии с вышеизложенными правилами обработки исходных значений, формируется результат расчета. Завершающим этапом работы программы является визуальное представление полученного результата и его дальнейший вывод. Вывод организован таким образом, что в одно окно формы выводятся все полученные данные в текстовом виде, а в другое – те же данные, только в графическом виде.

Минимальные системные требования для работы с программой:

- а) процессор – 700 МГц;
- б) оперативная память – 128 Мб;
- в) платформа – Microsoft .NET Framework 2.0;
- г) операционная система – Microsoft Windows XP/Vista.

В качестве среды разработки была использована среда Dev-C++ версии 4.9.8.0. Такой выбор обусловлен простотой самой среды, а также наличием в математической модели функций erf и erfc (2)–(5). Именно в среде Dev-C++ сложность реализации (синтаксиса) этих функций сведена к минимуму.

Функциональная часть главной формы сочетает в себе модуль ввода и проверки. При запуске программы появляется форма Form1, на которой располагаются меню, поля ввода исходных данных и кнопка «Расчитать». Главное меню содержит в себе такие подменю, как «Выход», «Помощь» и «О программе». Меню «Выход» завершает работу программы. При нажатии на кнопку меню «Помощь» открывается форма Help, а при нажатии кнопки меню «О программе» – форма About. Форма Help представляет собой инструкцию пользователя, вторая же содержит информацию о программе и ее разработчиках.

Выбор метода выращивания для кристалла кремния осуществляется за счет изменения содержимого области «Метод выращивания». При этом меняются и значения исходных данных в соответствии с выбранным методом. Эти значения устанавливаются программой по умолчанию и при желании их можно изменить.

На рис. 1 представлен интерфейс программы, а также исходные данные программы. Результат работы программы представлен на рис. 2.

При нажатии на кнопку «Расчитать» исходные данные проходят проверку на правильность ввода. Проверяется наличие данных в полях формы и соответствие их ограничениям (например, скорость роста при методе выращивания – БЗП должна быть в диапазоне от 1 до 9 мм/мин). При успешном прохождении проверки значения параметров передаются в форму Result для дальнейшего расчета. Если хотя бы одно значение введено неверно, то прохождение про-

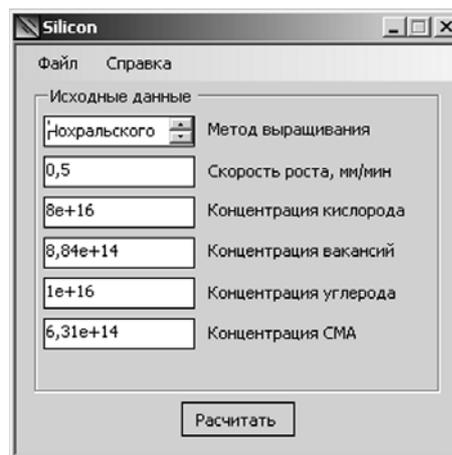


Рис. 1. Интерфейс программы Silicon

верки будет проведено повторно, при этом сопровождаясь сообщением об ошибке соответствующего параметра.

На первом этапе расчетной части программы объявляются все необходимые переменные, а также производится расчет параметров, которые носят статический характер. Алгоритм расчета построен в соответствии с гетерогенным механизмом образования микродефектов в кремнии и разделен на две ветви: вакансионную и межузельную. Первым производится расчет для вакансионной ветви. Параметр Choice определяет, в соответствии с каким методом выращивания монокристаллов кремния будет произведен расчет. Если значение этого параметра равно единице, то расчет производится для метода бестигельной

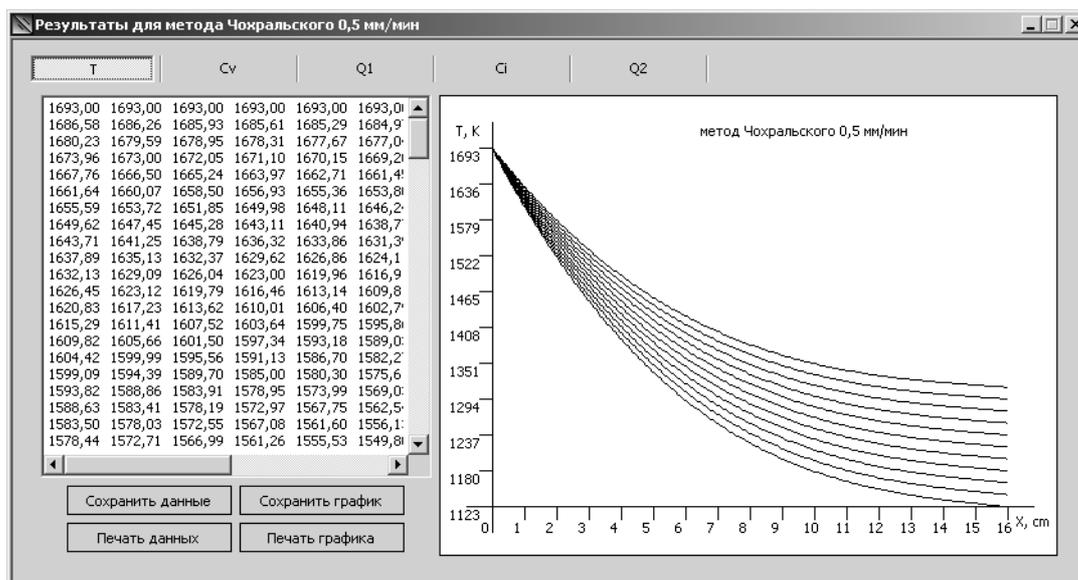


Рис. 2. Вывод результатов в программе

зонной плавки, в противном случае – для метода Чохральского. Необходимости в условии равенства параметра Choice двойке или любому другому значению, отличному от единицы, нет, так как еще на форме Form1 этот параметр может принять одно из двух значений, иначе не пройдет этап проверки.

Следующим шагом является главный цикл, в котором рассчитываются динамические величины, зависящие от длины кристалла и радиуса. Также в теле цикла производится вывод рассчитанных данных на вкладке формы Result. Для того, чтобы при построении графических зависимостей не возвращаться к расчетам, определены динамические массивы.

Далее следует расчетная часть для междоузельной ветви, во многом идентичная вакансионной ветви. Сначала определяются и рассчитываются параметры статического характера, соответствующие данной ветви гетерогенного механизма, затем запускается главный цикл. Главный цикл также содержит механизмы для вывода расчетных характеристик на вкладки формы Result.

За расчетами следует этап построения графических зависимостей. Сначала строятся кривые температурных характеристик $T(x)$, затем концентраций вакансий $C_V/C_V(0)$, комплексов $(O + V) C_{O1}/C_{O1}(0)$, концентраций собственных междоузельных атомов $C_I/C_I(0)$ и, наконец, комплексов $(C + I) C_{C2}/C_{C2}(0)$.

ВЫВОДЫ

Сформулирована математическая модель процесса образования первичных ростовых микродефектов на основе диссоциативного процесса диффузии. Рассмотрены случаи взаимодействия «кислород – вакансия» $(O + V)$ и «углерод – собственный междоузельный атом кремния» $(C + I)$ вблизи фронта кристаллизации для бездислокационных монокристаллов кремния, полученных методами бестигельной зонной плавки и Чохральского. Полученные приближенные аналитические выражения согласуются с гетерогенным механизмом образования ростовых микродефектов.

Разработано приложение для программной реализации математической модели образования первичных ростовых микродефектов в бездислокационных монокристаллах кремния. Проведен численный расчет модели, подтвердивший основные положения гетерогенного механизма образования микродефектов.

Разработанный программный продукт предполагает высокую точность и скорость расчетов, а также представление данных в удобочитаемом виде. Основным преимуществом является совместимость формата импортируемого файла с программным комплексом Microsoft Office Excel. Это дает возмож-

ность накопления данных и представления их в графическом виде. Как следствие, такая база данных может послужить хорошей платформой для дальнейшего анализа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kulkarni M. S.* Quantification of defect dynamics in unsteady-state and steady-state Czochralski growth of monocrystalline silicon / *Kulkarni M.S., Voronkov V., Falster R.* // *J. Electrochem. Soc.* – 2004. – Vol. 151. – No. 5. – P. G663–G669.
2. *Sinno T.* Modeling microdefect formation in Czochralski silicon / *Sinno T., Brown R.A., Von Ammon W., Dornberger E.* // *J. Electrochem. Soc.* – 1998. – Vol. 145, № 1. – P. 302–318.
3. *Voronkov V. V.* Mechanism of swirl defects formation in silicon / *Voronkov V.V.* // *J. Cryst. Growth.* – 1982. – Vol. 59, № 3. – P. 625–642.
4. *Voronkov V. V.* Nucleation of oxide precipitates in vacancy-containing silicon / *Voronkov V.V., Falster R.* // *J. Electrochem. Soc.* – 2002. – Vol. 149. – P. G167.
5. *Talanin V. I.* Nucleation, growth and transformation of microdefects in FZ-Si / *Talanin V. I., Talanin I. E.* // *New Research on Semiconductors* / Ed. T. B.Elliot. – New York : Nova Sci. Publ., 2006. – P. 35–59.
6. *Talanin V. I.* Classification of microdefects in semiconducting silicon / *Talanin V. I., Talanin I. E.* // *Defect & Diffusion Forum.* – 2004. – Vol. 230–232, № 1. – P. 177–198.
7. *Talanin V. I.* Моделирование и свойства дефектной структуры бездислокационных монокристаллов кремния / *Таланин В. И.* // *Дні науки. Збірник тез доповідей.* – Запоріжжя: ЗИГМУ, 2007. – 275 с.
8. *Talanin V. I.* Взаимодействие точечных дефектов в процессе роста бездислокационных монокристаллов кремния / *Таланин В. И.* // *Известия вузов. Материалы электронной техники.* – 2007. – № 4. – С. 27–40.
9. *Булярский С. В.* Термодинамика и кинетика взаимодействующих дефектов в полупроводниках / *Булярский С. В., Фистуль В. И.* – М. : Наука, 1997. – 352 с.
10. *Talanin V. I.* About formation of grown-in microdefects in dislocation-free silicon single crystals / *Talanin V. I., Talanin I. E., Voronin A. A.* // *Can. J. Phys.* – Vol. 85, № 12. – P. 1459–1471.

Надійшла 22.02.2010
Після доробки 23.03.2010

Таланін В. І., Таланін І. Є., Семікіна М. Ю.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ УТВОРЕННЯ ПЕРВИННИХ РОСТОВИХ МІКРОДЕФЕКТІВ У БЕЗДИСЛОКАЦІЙНОМУ МОНОКРИСТАЛІ КРЕМНІЮ

Представлено математичну модель і комп'ютерну програму розрахунку для процесу утворення первинних ростових мікродфектів у бездислокаційному монокристалі кремнію на основі дисоціативного процесу дифузії.

Ключові слова: ростові мікродфекти, бездислокаційний монокристал кремнію, первинні ростові мікродфекти, гетерогенний механізм дефектоутворення.

Talanin V. I., Talanin I. E., Semikina M. Yu.

COMPUTER MODELING OF PRIMARY GROW-IN MICRODEFECTS FORMATION IN DISLOCATION-FREE SILICON MONOCRYSTALS

The mathematical model and computer program for primary growing microdefects formation process in a dislocation-free silicon monocrystal based on a dissociation diffusion process are represented in this article.

Key words: grow-in microdefects, dislocation-free silicon monocrystal, primary grow-in microdefects, heterogeneous defect formation mechanism.