

ТРЕК 2D – ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННАЯ ПРОГРАММА МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

А.В. Леонтьев, Ю.А. Леонтьев, В.А. Новиков
Белгосуниверситет, Минск, Беларусь, Leontyev@bsu.by

В работе обсуждается алгоритм и демоверсия программы TREK 2D для расчета траекторных параметров заряженных частиц в твердом теле на основе метода Монте-Карло. Обсуждается выбор среды программирования, архитектура программы, построение базы данных материалов электронной техники, а также графический интерфейс пользователя.

Введение

Метод Монте-Карло (МК) широко используется для моделирования ионного легирования и физического распыления металлов, полупроводников и диэлектриков уже более двадцати лет [1]. Причем, в последнее время он получает все большее распространение в связи с гигантским скачком в производительности современных ПЭВМ, что отводит на второй план его основной недостаток – огромный объем математических вычислений. Наиболее известной программой, реализующими метод МК в применении к задачам ионного легирования материалов электронной техники, являются TRIM(SRIM), обновленные версии которой периодически выкладываются на сайте www.srim.org. Программный комплекс GEANT 4 [3,4] является альтернативой комплексу SRIM и позволяет решать широкий круг задач ядерной физики. Названные программные комплексы ориентированы на проведение демонстрационных расчетов, их исходные коды закрыты и пользователи используют их как черные ящики. Такие программы можно использовать в основном только для рутинных расчетов, не требующих детального описания особенностей ион-атомных взаимодействий. В тоже время, возникает необходимость внесения различных физических корректировок при описании взаимодействия заряженных частиц в зависимости от типа химических связей, агрегатного состояния вещества и ряда прочих деталей ион-атомного взаимодействия. Поэтому, целью настоящей работы является разработка эффективного алгоритма реализации метода МК для решения задач ионного легирования широкого круга материалов электронной техники и написание тестового варианта программного комплекса. Для достижения поставленной цели необходимо решить ряд ниже перечисленных задач: выбор оптимальной среды программирования; построение удобного для пользователя интерфейса; базовый алгоритм должен допускать возможность замены устаревших физических допущений. Исходя из изложенного выше, была выбрана платформа .Net 2.0, среда программирования Microsoft Visual Studio 2005 и язык C#. Этот набор технологий и программных продуктов предоставляет разработчику гибкую, высокопроизводительную и современную среду разработки [4-6].

Архитектура программы

Архитектура разработанного программного комплекса TREK 2D представлена ниже на рис.1.

База данных (БД). База данных материалов является одним из важнейших компонентов при-

ложения, так как круг материалов, используемых в современной микро- и наноэлектронике, постоянно расширяется. Эти материалы по своим физико-химическим свойствам относятся к различным группам и поэтому, разрабатываемая программа должна иметь как обширный список сгруппированных материалов, входящих в базу данных, так и удобную и эффективную логику для доступа и обработки данных, а также поддержку возможности ее беспрепятственного развития в дальнейшем. Поэтому программа использует SQLite(<http://sqlite.org>), представляющую автономную SQL базу данных, обладающую следующими возможностями: бесплатная; открытый исходный код, поддержка транзакций; вся база данных находится в одном файле на жестком диске.

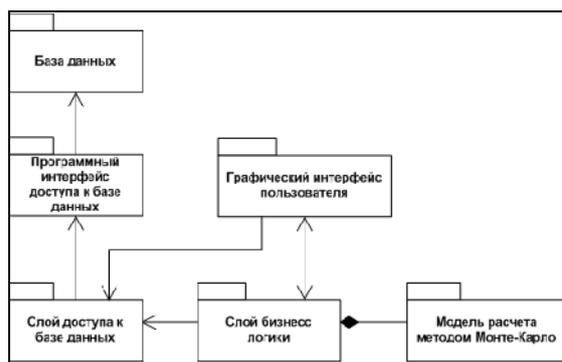


Рис.1. Архитектура программы TREK 2D

Программный интерфейс доступа к базе данных. Предоставляет программную реализацию интерфейса доступа к БД, включает основные операции для работы с БД: открытие соединения, выполнение запроса, создание считывателя данных, выполнение, сохранение, отмену транзакций, закрытие соединения.

Уровень доступа к данным (Data Access Layer). Слой программы, который предоставляет упрощенный способ доступа к данным, хранящимся в базе данных. Используется другими слоями программы для доступа к и манипулированию данными из базы, скрывая все детали связанные с этим процессом.

Уровень бизнес логики (Business Logic Layer). Уровень обработки данных. Он использует методы уровня доступа к данным, для получения данных, а затем в нем происходит физическая обработка(моделирование) для последующего отображения в графическом интерфейсе, или сохранения в удобном формате результатов. Основной составляющей данного слоя является Модель расчета методом Монте-Карло.

Модель расчета методом Монте-Карло

Диаграмма классов построенной модели расчета методом МК представлена ниже на рис.2.

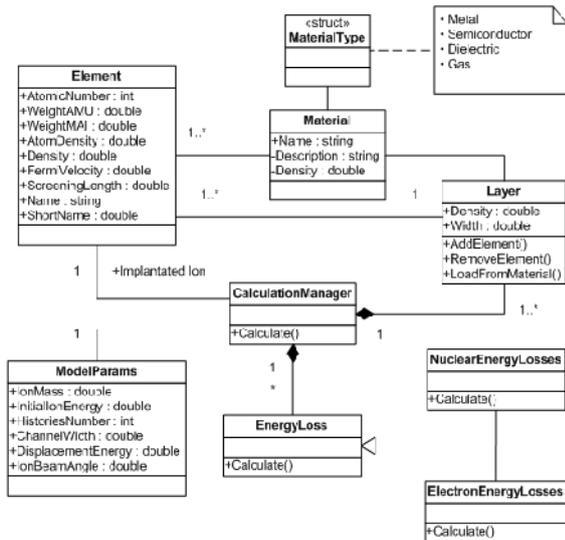


Рис.2. Диаграмма классов программы TREK 2D

Основным классом расчетной модели является *CalculationManager*, в этот класс инкапсулирована вся логика расчета методом Монте-Карло задачи ионной имплантации. В качестве входных данных *CalculationManager* принимает имплантируемый ион, мишень и параметры расчета (*ModelParams*). Мишень представляет собой массив слоев. Каждый слой состоит из массива элементов периодической таблицы Менделеева, процентного содержания элемента в слое, плотности слоя и его ширины. Ограничение на количество задаваемых слоев и числа элементов в них отсутствуют. За конструирование мишени отвечает класс *LayerManager*, который предоставляет необходимые методы графическому интерфейсу, а в начале расчета передает *CalculationManager* созданную мишень. Параметры расчета задаются пользователем в процессе работы с графическим интерфейсом и включают в себя: начальную энергию имплантируемого иона (*InitialEnergy*), шаг сетки моделирования (*ChannelWidth*), пороговую энергию смещения (*DisplacementEnergy*), число псевдо историй (*HistoriesNumber*), угол падения ионов на мишень (*IonBeamAngle*). Важной частью построенной модели является использование различных методов расчета энергетических потерь. В физике ион-атомных столкновений различают два типа потерь – неупругие (взаимодействие с электронной подсистемой) и упругие (взаимодействие с ядерной подсистемой). Модель расчета должна позволять легко конфигурировать различные физические модели этих процессов. Для решения этой задачи вводится абстрактный класс *EnergyLoss*, и два абстрактных класса наследуемых от него – *ElectronEnergyLoss* и *NuclearEnergyLoss* описывающие неупругие и упругие потери. От этих классов наследуются конкретные реализации методов.

CalculationManager содержит массив *EnergyLoss*, в который включаются конкретные классы,

описывающие используемые методы расчета энергетических потерь. Во время расчета, *CalculationManager* проходит по всем *EnergyLoss* для каждого иона, вызывая метод *Calculate*, рассчитывая потери энергии. Таким образом, мы можем расширять функционал модели введением дополнительных классов, описывающих различные модели расчета как упругих, так и неупругих потерь энергии. На рисунке 3, представлено использование описанной расчетной модели в алгоритме работы программы.

Графический интерфейс пользователя

Графический интерфейс является одной из самых важных составляющих хорошей программы, поскольку для пользователей удобство работы с программой является одной из основных составляющих выбора. К сожалению, при создании большинства научных программ графическому интерфейсу уделяется недостаточно внимания. Зачастую, научные программы имеют интерфейс командной строки, а если и имеют графический интерфейс пользователя, то он либо изобилует кричащими красками, либо обладают сложной, трудно понимаемой, далекой от привычной концепцией дизайна. Кроме того, часто пользователь предпочитает отказаться от использования программы еще на этапе установки, потому что программа не использует стандартные, привычные механизмы, а требует от пользователя прочтения дополнительной информации.

Для решения этой проблемы был создан, простой, понятный и привычный для пользователей Windows приложенный интерфейс. Скриншот главного окна программы представлен на рис.3.

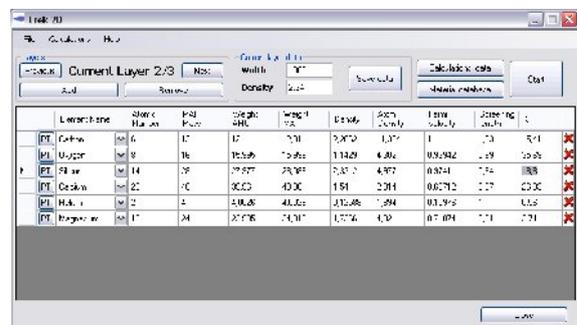


Рис.3. Скриншот главного окна программы TREK 2D

Тестирование комплекса

Физические модели, заложенные в представленном алгоритме будут подробно обсуждаться в отдельной работе. Для тестирования представленной программы будет разработана система тестов, включающая сравнение с расчетными и экспериментальными данными. Для проверки функциональности программы TREK 2D выбран программный комплекс SRIM 2008, близкий по заложенным физическим приближениям. Сравнивались следующие параметры: проецированный пробег (R_p), стандартное отклонение (ΔR_p), асимметрия (γ) и эксцесс (β) распределения, а также время проведения расчетов. В качестве пример рассмотрена следующая задача: имплан-

тация ионов B^+ , Ar^+ , Kr^+ и He^+ с энергией 100 кэВ в фоторезист, ориентировочная формула - $C_5H_8O_2$, плотность - 1.2 г/см³. Результаты тестирования приведены ниже в таблице 1, число псевдо историй выбрано 10000. Из табл.1 видно, что разброс рассчитанных величин незначителен, а быстродействие TREK 2D существенно выше.

Таблица 1.
Сравнение результатов расчета TREK2D и SRIM 2008.

B ⁺ (100 кэВ)					
Название программы	Rp, нм	ΔRp, нм	γ	β	Время, с
SRIM 2008	447.3	71.6	-1.04	5.25	536
TREK2D	485.5	94.0	-1.63	6.73	26
Ar ⁺ (100кэВ)					
SRIM 2008	149.3	35.7	-0.29	2.85	904
TREK2D	146.1	32.9	-0.33	2.89	33
Kr ⁺ (100кэВ)					
SRIM 2008	93.2	206	0.06	2.74	819
TREK2D	86.3	186	0.09	2.75	30
Xe ⁺ (100кэВ)					
SRIM 2008	79.2	14.7	0.14	2.82	905
TREK2D	72.0	13.1	0.10	2.82	26

Заключение

Разработана демоверсия программы моделирования ионного легирования материалов электронной техники имеющая дружественный для пользователя интерфейс, легко расширяемую базу материалов электронной техники, обладающая высоким быстродействием и возможностью использования различных физических приближений для описания ион-атомных столкновений в твердых телах.

Список литературы

1. Ziegler J.P, Biersack J.P., Littmark U. Stopping and Ranges of Ions in Solids. Perg. Pr. New York. 1985. - 321 p.
2. M.H.Mendenhall, R.A.Weller /An Algorithm for computing Screened Coulomb Scattering in Geant4//NIM, 2005,V.227, P.420-430.
3. M.H.Mendenhall, R.A.Weller /An algorithm for ab initio computation of the angle multiple scattering angular distribution//NIM, 1994,B93, P.5-10.
4. И.Труб. Объектно-ориентированное моделирование на С. Из-во: Питер, 2005 г., 416 с.
5. Ю.Колесов, Ю.Синеченков. Моделирование систем. Объектно-ориентированный подход. Из-во: BHV, 2006 г., 192 с.
6. Э.Гамма, Р.Хелм. Приемы объектно-ориентированного программирования. Паттерны проектирования. Из-во: Питер, 2009, 368 с.

TREK 2D – OBJECT ORIENTED PROGRAM FOR MODELING ION IMPLANTATION TECHNOLOGY

A.V. Leontyev, Y.A. Leontyev, V.A. Novikov
Belorussian State University, pr. Nezavisimosty, 4,220080, Minsk, Belarus
Tel. +375 17 2120880, E-mail: Leontyev@bsu.by

The article considers the algorithm and the demo version of the Trek 2D program which is used to calculate trajectory parameters of charged particles in solids based on the Monte Carlo method. The following aspects are discussed in the paper: choice of programming environment, program architecture, design of microelectronic materials database, and graphical user interface.