

Обнаружена монотонно возрастающая плотность поверхностных состояний на границе полупроводник — диэлектрик в промежуточной области между тонким и толстым окислами (области «птичьего клюва»).

Авторы выражают благодарность Ф. Р. Фазылову за первые обсуждения рассмотренной проблемы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tasch Alf., Chatterjee P. K., Fu H.-S. The hic RAM cell concept // IEEE Trans.—1978.—ED-25, N 1.—P. 33.
2. Hawkins G. A., Trabka E. A., Nielsen R. Z. Characterization of generation currents in solid-state imagers // IEEE Trans.—1985.—ED-32, N 9.—P. 1806.
3. Grove A. S., Fitzgerald D. J. Surface effects on $p-n$ junctions: characteristic of surface space-charge regions under non-equilibrium conditions // Solid State Electron.—1966.—9, N 8.—P. 783.
4. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов.—М.: Мир, 1984.—Т. 1.
5. Кольдяев В. И., Пензин О. Ю., Шахова О. Н. Моделирование методом неподвижного заряда основных характеристик элементов СБИС на основе МДП-транзисторов // Автометрия.—1988.—№ 3.
6. Whelan M. V. Electrical behaviour of defects at a thermally oxidized silicon surface // Phil. Res. Rep. Suppl.—1970.—N 6.—P. 35.
7. Van Overstraeten R. J., Mertens R. P. Heavy doping effects in silicon // Solid State Electron.—1987.—30, N 11.—P. 1077.
8. Nauka K., Lagowski J., Gatos H. C. New intrinsic gettering process in silicon based on interactions of silicon interstitials // J. Appl. Phys.—1986.—60, N 2.—P. 615.
9. Slavka J. Excess carrier recombination center distribution in implanted and annealed silicon // Phys. Stat. Sol. (a).—1986.—94.—P. 353.
10. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям.—М.: Наука, 1976.
11. Кольдяев В. И., Пензин О. Ю. Моделирование кинетики переноса заряда в системе МДП-структур с учетом поверхностных состояний и флуктуаций поверхностного потенциала // Автометрия.—1986.—№ 5.
12. Кольдяев В. И., Мороз В. А., Назаров С. А. Двумерное моделирование легирования и окисления кремния // Автометрия.—1988.—№ 3.
13. Hawkins G. A. Lateral profiling of interface states along the sidewalls of channel-stop isolation // Solid State Electron.—1985.—28, N 9.—P. 945.
14. Hawkins G. A. Generation currents from interface states in selectively implanted MOS-structures // Solid State Electron.—1988.—31, N 2.—P. 181.

Поступила в редакцию 21 ноября 1991 г.

УДК 517.5

В. П. Гинкин

(Обнинск Калужской обл.)

МЕТОД НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА

Предложен вариант метода неполной факторизации для решения систем линейных уравнений с семидиагональными матрицами коэффициентов, получающимися при аппроксимации трехмерных уравнений эллиптического типа. Метод быстро гасит гладкие компоненты ошибок, а ошибку, равную константе, обращает в нуль за одну итерацию. Доказана коэффициентная устойчивость метода. Расчеты показали высокую эффективность метода для систем уравнений с симметричными и несимметричными матрицами коэффициентов и различным типом граничных условий.

Пусть дано уравнение

$$A\varphi = f, \quad (1)$$

где A — разностный аналог трехмерного уравнения эллиптического типа, имеющий вид

$$A\varphi = -a\varphi_{i-1} - b\varphi_{k-1} - c\varphi_{i+1} - d\varphi_{k+1} - r\varphi_{i-1} - q\varphi_{i+1} + p\varphi, \\ i = \overline{1, N1}, \quad k = \overline{1, N2}, \quad l = \overline{1, N3}. \quad (2)$$

Предполагается, что граничные условия уже учтены в коэффициентах уравнения (2), так что

$$a_{1,k,l} = c_{N1,k,l} = 0, \quad b_{i,1,l} = d_{i,N2,l} = 0, \quad r_{i,k,1} = q_{i,k,N3} = 0.$$

Предполагается также наличие диагонального преобладания

$$p \geq a + b + c + d + r + q, \quad (3)$$

где строгое неравенство имеет место хотя бы в одной точке области.

Метод неполной факторизации для решения уравнения (1) имеет вид

$$(\gamma A + B)\varphi^j = \gamma f + B\varphi^{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, \quad (4)$$

где γ — нормировочный коэффициент; B — оператор такой, чтобы $\gamma A + B$ можно было факторизовать, т. е. представить в виде произведения двух операторов более простой структуры, чем A .

Пусть $\gamma A + B = MN$, где операторы M и N имеют вид

$$MZ = Z - \alpha Z_{i-1}, \quad (5)$$

$$N\varphi = \varphi - \beta\varphi_{k-1} - \delta\varphi_{k+1} - \mu\varphi_{i-1} - \nu\varphi_{i+1} - \xi\varphi_{i+1}. \quad (6)$$

Произведение операторов MN содержит четыре дополнительных члена по сравнению с оператором A :

$$R\varphi = \alpha(\beta_{i-1}\varphi_{i-1,k-1} + \delta_{i-1}\varphi_{i-1,k+1} + \mu_{i-1}\varphi_{i-1,l-1} + \nu_{i-1}\varphi_{i-1,l+1}). \quad (7)$$

Оператор B обязательно содержит эти члены, но может содержать также и другие члены с семиточечного шаблона, на котором определен оператор A . Выберем оператор B в виде $B = R - S$, где S — компенсирующий оператор вида

$$S\varphi = \tau\alpha \left[\beta_{i-1}(\varphi_{i-1} + \varphi_{k-1} - \varphi) + \delta_{i-1}(\varphi_{i-1} + \varphi_{k+1} - \varphi) + \right. \\ \left. + \mu_{i-1}(\varphi_{i-1} + \varphi_{l-1} - \varphi) + \nu_{i-1}(\varphi_{i-1} + \varphi_{l+1} - \varphi) \right], \quad (8)$$

$\tau \geq 0$ — итерационный параметр. Тогда оператор B примет вид

$$B\varphi = (R - S)\varphi = \alpha \{ \beta_{i-1}[\varphi_{i-1,k-1} - \tau(\varphi_{i-1} + \varphi_{k-1} - \varphi)] + \dots \}. \quad (9)$$

При $\tau = 1$ оператор B обращает в нуль функцию ошибки, не зависящую от индекса i либо от индексов k, l , в том числе ошибку, равную константе во всей области.

Разлагая в ряд Тейлора $B\varphi$ при $\tau = 1$, получим для каждой из четырех комбинаций, входящих в (9), оценку

$$\varphi_{i-1,k-1} + \varphi - \varphi_{i-1} - \varphi_{k-1} \cong 0(h^2).$$

Это значит, что на множестве гладких функций оператор MN аппроксимирует исходный оператор A .

Выражения для коэффициентов уравнений (4) — (6) получаются из сопоставления операторов MN и $\gamma A + B$ и имеют вид

$$\gamma = \left[p - a \frac{\xi_{i-1} - \omega_{i-1}}{1 - \omega_{i-1}} \right]^{-1}; \\ \alpha = \frac{\gamma a}{1 - \omega_{i-1}}; \quad \xi = \gamma c; \quad (10)$$

$$\begin{aligned}\beta &= \gamma b + \tau \alpha \beta_{i-1}; & \delta &= \gamma a + \tau \alpha \delta_{i-1}; \\ \mu &= \gamma r + \tau \alpha \mu_{i-1}; & \nu &= \gamma q + \tau \alpha \nu_{i-1},\end{aligned}$$

где

$$\beta + \delta + \mu + \nu + \xi \leq 1. \quad (12)$$

Доказательство теоремы производится по индукции и здесь не приводится. Условия (11), (12) означают коэффициентную устойчивость операторов M и N .

Для обращения оператора N (6) на каждом i -м слое используется метод параболических прогонок, предложенный в [1] и изложенный также в [2].

В табл. 1 приведены значения спектрального радиуса оператора перехода $\rho = \text{srg}[(A+B)^{-1}B]$ описанного выше метода для разностного аналога оператора Лапласа в кубической области с равномерной сеткой $N1 = N2 = N3 = n$. На двух противоположных гранях куба задавались условия Дирихле, на остальных — условия Неймана.

Из таблицы видно, что наиболее высокая скорость сходимости, отвечающая наименьшим значениям ρ , достигается при $\tau = 1$. Число итераций, требуемое для уменьшения начальной ошибки в ϵ^{-1} число раз, вычисляется по формуле $J = \lg \epsilon / \lg \rho$. Видно, что при $\tau = 0$ J квадратично зависит от n : $J \approx 0,14n^2 |\lg \epsilon|$, а при $\tau = 1$ зависимость J от n линейная: $J = 0,82n |\lg \epsilon|$.

Изложенный выше метод был использован в программе расчета трехмерного реактора в диффузионном приближении ВОЛГА [3] и показал высокое быстродействие в условиях сильно меняющихся коэффициентов исходного разностного уравнения.

Рассмотрим также задачу с несимметричным оператором A , аппроксимирующим уравнение вида

$$-\Delta \varphi + g \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = 0,$$

с теми же граничными условиями, что и в предыдущем случае. Параметр τ зададим равным нулю или единице. В табл. 2 приведены зависимости спектрального радиуса ρ оператора перехода от g при $n = 10$.

Уменьшение спектрального радиуса ρ с ростом g при $0 < g < 2n$ объясняется уменьшением коэффициента a в уравнении (2). В предельном случае при $a = 0$ метод неполной факторизации (5), (6) становится безытерационным, т. е. $\rho = 0$. При

Т а б л и ц а 1
Зависимость спектрального радиуса ρ
оператора перехода от числа узлов n
и итерационного параметра τ

n	τ				
	0,0	0,3	0,6	0,9	1,0
10	0,84	0,83	0,80	0,68	0,75
15	0,91	0,92	0,91	0,85	0,83
20	0,96	0,95	0,95	0,91	0,87

Т а б л и ц а 2
Зависимость спектрального радиуса ρ
оператора перехода от g
при $n = 10$, $\tau = 0$ и $\tau = 1$

g	$\tau = 0$	$\tau = 1$
-20	0,0	0,86
-10	0,56	0,84
-1	0,84	0,77
0	0,84	0,75
1	0,84	0,72
10	0,56	0,34
20	0,0	0,0

$g > 20$ в рассмотренном выше примере коэффициенты a , b , r становятся отрицательными и итерационный процесс расходится.

При $g < -n$ схема с $\tau = 0$ сходится лучше, чем схема с $\tau = 1$. Поэтому в практических задачах параметр τ следует задавать равным 0 при $g < -n$ и равным 1 при $g \geq -n$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гинкин В. П. Метод параболических прогонок для решения двумерных уравнений эллиптического типа. — Обнинск, 1981. — (Препр. ФЭИ-1153).
2. Гадиак Г. В., Гинкин В. П., Обрехт М. С., Шварц Н. Л. Программа расчета стационарных характеристик МДП-транзистора MOS-1 // Автотметрия. — 1987. — № 1.
3. Гинкин В. П., Будникова Г. Г. ВОЛГА — программа трехмерного расчета реактора в малогрупповом диффузионном приближении. — Обнинск, 1984. — (Препр. ФЭИ-1583).

А. А. Андросенко, П. А. Андросенко, С. Г. Розин, А. А. Ярошевич

(Москва — Минск)

ВОЗМОЖНОСТИ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ BRAND ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ИОНОВ

Описаны структура и возможности комплекса программ для моделирования методом Монте-Карло процесса переноса ионов. Приведены результаты расчетов, подтверждающие работоспособность программного комплекса.

Введение. Оптимальное решение многих вопросов, связанных с проблемами переноса ионизирующих излучений, невозможно без знания подробных дифференциальных характеристик радиационных полей, порождаемых этими излучениями. Обеспечение же необходимой точности при решении уравнения переноса возможно, как правило, лишь при подробном описании реальной трехмерной геометрии исследуемого объекта и при детальном учете информации о взаимодействии излучения с веществом, что наиболее корректно может быть выполнено в рамках метода Монте-Карло.

К настоящему моменту в СНГ на базе метода Монте-Карло разработано несколько машиннонезависимых программных комплексов, обладающих широкими возможностями для решения задач переноса излучений практически без упрощений реальной физической задачи. Существующие программные средства ориентированы, как правило, лишь на решение задач переноса нейтронов и (или) фотонов. Однако использование метода Монте-Карло для моделирования процесса переноса ионов обладает рядом достоинств, присущих только этому методу. Главное из них — возможность учитывать физические явления непосредственно. Кроме того, можно рассматривать многокомпонентные и многослойные мишени, в том числе сложной трехмерной геометрии, что позволяет точно моделировать реальные ситуации.

Предполагая справедливым для заряженных частиц приближение линейной теории переноса, авторы расширили возможности программного комплекса (ПК) BRAND, ориентированного на возможно точное решение (не)стационарного уравнения переноса нейтронов и фотонов в условиях реальной трехмерной геометрии. Представляемая версия является дальнейшим развитием версии [1], и новое в ней — физический модуль, описывающий в предположении парных взаимодействий процесс распространения ионов в веществе. Наличие в комплексе универсального геометрического модуля позволяет практически без упрощений представлять геометрию исследуемого объекта,