

$$U = \operatorname{erfc} \frac{X_k}{2\sqrt{a\tau}} - \exp\left(\left(HX_k\right) + aH^2\tau\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{X_k}{2\sqrt{a\tau}} + H\sqrt{a\tau} \right); \quad (13)$$

$$U_{1a} = U(X_{k1}), \quad X_{k1} = R - x;$$

$$U_{2a} = U(X_{k2}), \quad X_{k2} = R + x, \quad H = \frac{\alpha\tau}{\lambda}.$$

Используя (12) для плоской стенки, формулу для куба определяем как произведение значений θ_1 для координат x , y и z [2]

$$\theta = 1 - \theta_1^3. \quad (14)$$

Формулы (10)...(14) в дальнейшем могут применяться для вычисления градиентов температуры t'_{ix} в уравнении баланса теплоты.

ЛИТЕРАТУРА

1. О снижении нормы расхода топлива в регенеративных печах с движущимся продуваемым слоем при производстве извести из кальцита CaCO_3 / В. А. Седнин, А. П. Нещенчук, А. Г. Кожевников, И. В. Мельников // Энергетика... (Изв. высш. учеб. заведений и энерг. объединений СНГ). – 2004. – № 2. – С. 48–54.

2. Лыков А. В. Теория теплопроводности. – М.: Высш. шк., 1967.

Представлена кафедрой
ПТЭиТ

Поступила 10.05.2004

УДК 621.382

РАСЧЕТ ДИФфуЗИИ ПРИМЕСЕЙ В КРЕМНИИ

Канд. техн. наук, доц. БОНДАРЕВ В. А.

Белорусский национальный технический университет

Диффузия примесей в кремнии – чрезвычайно важный процесс, который определяет параметры полупроводниковых приборов. До настоящего времени физически обоснованные эффективные методы расчета диффузии в твердых телах не найдены. Поэтому технологи разрабатывают новые диффузионные процессы в основном с применением дорогостоящих экспериментов, что часто исключает оптимизацию полупроводниковых приборов.

Методы расчета основаны на точных аналитических решениях, впервые полученных автором для уравнения диффузии. Так как такие решения всегда гарантируют выполнение закона сохранения массы, полученные формулы не требуют дополнительных доказательств или экспериментальных

проверок, что является преимуществом аналитических формул. Кроме того, аналитические решения могут применяться при очень больших изменениях технологических параметров и поэтому надежно предсказать результаты многих новых технологий.

Публикации в этой области свидетельствуют о том, что методы расчета и алгоритмы, предлагаемые авторами, вовсе не имеют физических обоснований [1]. Специалисты отмечают, что многочисленные компьютерные программы, основанные на таких алгоритмах, абсолютно бесполезны [2]. Численные алгоритмы, полученные без доказательств их сходимости к решениям нелинейных задач диффузии, всегда приводят к большим неустрашимым ошибкам. В таких случаях сходимость результатов с решениями может быть также проверена с помощью других алгоритмов. Однако расчеты свидетельствуют о том, что, например, в существующих численных алгоритмах при использовании средних квадратичных коэффициентов диффузии вместо их средних арифметических значений расхождение результатов может составлять 80...90 % и более. При этом не существует никаких условий для определения правильных результатов. Это означает, что при разработке коммерческих программ нарушается закон сохранения массы. Такие нарушения фундаментальных физических законов абсолютно недопустимы. Поэтому в настоящее время разработка физически обоснованных и эффективных программ требует участия специалистов в области подобных расчетов.

Аналитические формулы позволяют также находить коэффициенты диффузии, которые определяют скорость диффузионных процессов и учитывают влияние физических условий. В настоящее время предлагаются многочисленные программы, которые не содержат алгоритмов для определения коэффициентов диффузии. Поэтому реальные коэффициенты диффузии не известны, что также исключает полезные расчеты.

Как известно, расчет диффузии примесей в твердых телах обычно основывается на проверке баланса массы примесей, что является основным физическим условием, которое определяет величину потоков примеси в различных точках. В соответствии с законом сохранения массы скорость изменения концентрации примеси за единицу времени C'_i равна изменению потока примеси q в данной точке. При этом значения C'_i определяются уравнением диффузии, которое является уравнением баланса массы:

$$C'_i = (D_1 C'_x)'_x + (D_2 C'_y)'_y + (D_3 C'_z)'_z, \quad (1)$$

где D_1, D_2, D_3 – коэффициенты диффузии в направлениях x, y, z соответственно; t – время.

Так как коэффициенты диффузии D обычно значительно зависят от концентрации C , это уравнение оказывается сильно нелинейным. Как известно, аналитические и численные методы решения этого уравнения пока не разработаны, что усложняет разработку диффузионных технологий.

Возможности получить аналитические решения нелинейного уравнения диффузии (1) зависят от выбора математических функций. Такие решения и формулы для расчета диффузионных процессов впервые получены с помощью математических функций $C(x, y, z, t)$, которые удовлетворяют трехмерному уравнению (1), а также начальным и граничным условиям.

Функции $C(x, y, z, t)$, пригодные для расчета диффузии примесей, могут быть выбраны следующим образом. Рассмотрим изменение концентрации примеси в направлении x за единицу времени C'_t . Как следует из (1), C'_t определяется одномерным нелинейным уравнением диффузии

$$C'_t = (DC'_x)'_x. \quad (2)$$

Дифференцирование уравнения Фика $q = -DC'_x$ для потока примеси в направлении x

$$q'_x = -DC''_{xx} - D'_x C'_x \quad (3)$$

показывает, что изменение потока примеси q'_x , которое вызывает изменение концентрации примеси C'_t в точке x , определяется двумя функциями. Изменение потока DC''_{xx} обусловлено изменением градиента концентрации примеси C'_x , тогда как слагаемое $D'_x C'_x$ вызывается изменением коэффициента диффузии D'_x в направлении x при заданном градиенте концентрации C'_x в точке x . При этом предполагается, что коэффициенты D являются известными функциями концентрации $D = D(C)$, которые находятся экспериментально.

В соответствии с условиями (2) и (3) функции $C = C(x, t)$, пригодные для решения уравнения диффузии (3), выбираем такими, чтобы они удовлетворяли линейному уравнению диффузии

$$C'_t = DC''_{xx}. \quad (4)$$

Подобный выбор является обоснованным, так как согласно физическим условиям, рассмотренным выше, изменение потока DC''_{xx} определяется балансом массы (4) и производными C'_x и C''_{xx} , которые имеют место в данной точке x . Коэффициенты диффузии D имеют другие значения в разных точках x и t . Если коэффициенты диффузии D известны, то при использовании некоторых функций $C(x, t)$ можно вычислить величину $D'_x C'_x$ в уравнении диффузии (2) и выражении (3).

Это означает, что выбранные выше функции $C = C(x, t)$ определены таким образом, что они удовлетворяют нелинейному уравнению (2). Функции $C(x, t)$, которые могут быть использованы для решений уравнения (4), детально исследованы в математической физике [3]. Функции $C = C(y, t)$ и $C = C(z, t)$, которые соответствуют потокам в направлениях y и z и удовлетворяют нелинейному уравнению (1), определяются аналогично.

При рассмотренных условиях выбранные выше функции могут быть использованы для вычисления скорости изменения концентрации C'_t для различных моментов времени t из уравнения (1). Тогда из физических условий в соответствии с законом сохранения массы находим

$$C_2 = C_1 + \int_{t_1}^{t_2} C'_t dt. \quad (5)$$

Это означает, что концентрация примеси C_2 для любых моментов времени t может быть вычислена интегрированием производной C'_t , которая

численно равна скорости изменения концентрации. Важно отметить, что такой расчет возможен только при использовании специальных функций $C = C(x, y, z, t)$, которые в состоянии обеспечивать выполнение закона сохранения массы в уравнениях баланса массы (1) и (2). Очевидно, что в этом случае выражение (5) является аналитическим интегральным решением нелинейных уравнений диффузии (1) и (2).

Многие функции, применяемые автором, могут быть использованы для вычисления приближений снизу C_a и сверху C_b к решению, что позволяет упростить расчеты кривых распределения примесей. В этом случае значения концентрации примеси C_2 в точках x и t определяются при условии, когда приближения C_a и C_b совпадают. Такие расчеты приводят к результатам, практически очень близким к точным значениям C_2 , которые можно определить при помощи интеграла (5). При этом приближения сверху и снизу к решению могут быть вычислены аналитически, что значительно сокращает время расчета.

Как следует из изложенного выше, физически обоснованные подходы к решению нелинейных уравнений (1) и (2), основаны на использовании известных математических функций, которые обычно применяются только в решениях линейного уравнения теплопроводности. Важно отметить, что для решений линейного уравнения (4) можно использовать суперпозицию различных решений и некоторые суммы функций $C = C(x, t)$, рассмотренных ранее.

Как показано в математической физике, такие необходимые функции $C = C(x, t)$, которые часто являются решениями линейного уравнения диффузии (4), могут быть определены с помощью известных функций источников [3]

$$U = (Dt)^{-1} \exp(-x^2/4Dt). \quad (6)$$

При этом целесообразно также использовать различные интегралы от функций (6). Выбор класса таких функций обычно следует из физических условий для данного диффузионного процесса. Для вычисления потоков примеси в направлениях y и z функции (6) определяются аналогичным образом.

В существующих программах, основанных на вычислении интегралов (5) с помощью конечно-разностных схем, вместо функций $C = C(x, y, z, t)$ авторы применяют ломаные кривые, что приводит к ошибкам в уравнениях баланса массы (1), (2). Попытки доказать сходимость таких схем к решениям задач и минимизировать ошибки оказываются безуспешными, несмотря на усилия специалистов. В коммерческих программах очень важные слагаемые $D'_x C'_x$, $D'_y C'_y$ и $D'_z C'_z$ в уравнениях (1)...(3) не вычисляются и при использовании нереальных ошибочных коэффициентов диффузии D интегралы (5) находятся для различных произвольных значений C' , которые не имеют физического смысла [1, 4].

Некоторые результаты расчета распределений бора, имплантированного в кремний, представлены в табл. 1. Получены они с помощью аналитического интегрального решения (5) и значений скорости изменения концентрации C'_2 , которые вычислены с использованием функций (6), удовле-

творяющих уравнению диффузии (2). При этом для различных значений x и t также находятся рассмотренные ранее приближения снизу C_a и сверху C_b , что значительно сокращает время вычислений. При расчете кривых распределения бора некоторые точки рассчитываются с помощью вариационных функционалов, которые разработаны и физически обоснованы автором для решения уравнений диффузии и теплопроводности [5, 6]. Подобные алгоритмы упрощают вычисления некоторых промежуточных точек.

Таблица 1

Температура отжига составляет 920 °С; продолжительность процесса – 40 мин; X – координата, мкм; $C \cdot 10^{-19}$ – концентрация бора в кремнии, $1/\text{см}^3$; $C_0 \cdot 10^{-19}$ – начальная концентрация бора после имплантации, $1/\text{см}^3$					
X	0,01	0,05	0,10	0,15	0,20
C	0,953	1,091	1,183	2,352	3,187
C_0	0,536	0,693	0,962	1,184	4,072
X	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45
C	5,242	4,852	2,345	1,162	0,437
C_0	6,377	6,150	1,173	0,287	0,107
X	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70
C	0,1854	0,0736	0,0392	0,0214	0,0154
C_0	0,0652	0,0386	0,0207	0,00462	0,0092

Представленные результаты рассчитаны с помощью реальных коэффициентов диффузии D , которые определены экспериментально. При этом коэффициенты D могут учитывать влияние многих важных физических и технологических условий (влияние других примесей, образование кластеров, температуру отжига и др.). В коммерческих же программах расчеты выполняются с использованием ошибочных коэффициентов диффузии D . Расчеты показывают, что отношение значений таких коэффициентов к их реальным значениям могут составлять 3...4 и более.

Кроме того, эти коэффициенты не учитывают влияние различных технологических параметров, а также микрофизических процессов, так как выбираются без экспериментов. В то же время они должны определяться только с помощью экспериментальных результатов.

Как показывает анализ, в существующих численных алгоритмах вместо коэффициентов диффузии D фактически используются различные множители, которые выбираются произвольно и значительно отличаются от реальных значений D . В этой ситуации коммерческие программы фактически оказываются попытками представить некоторые экспериментальные результаты с помощью ошибочных численных схем. Очевидно, что при значительных изменениях физических условий подобные алгоритмы становятся непригодными для оптимизации диффузионных технологий и рассматриваются как бессмысленные [2].

Необходимость использования в расчетах уравнения диффузии (2) и других физически обоснованных соотношений постоянно отмечается в литературе [7]. Однако авторы избегают фундаментальных физически обос-

нованных уравнений диффузии [1, 4]. В таких программах ошибки вызваны нереальными уравнениями Фика

$$q = -DC'_x + mEC, \quad (7)$$

где m – подвижность примесей; E – напряженность электрического поля.

В соответствии с (7) значительный поток $q = mEC$ в направлении x может возникать при условии, когда градиент концентрации, соответствующий производной C'_x в данной точке, равен нулю. Это противоречит экспериментам, а также второму началу термодинамики, и поэтому не имеет физического смысла. При условии $C'_x = 0$ такой поток может быть вызван химическими реакциями или некоторыми фиктивными источниками массы, которые не существуют в природе.

Кроме того, уравнения диффузии

$$C'_t = (DC'_x)'_x + Rn \quad (8)$$

в существующих программах также ошибочны, так как содержат ошибочное слагаемое Rn [1, 4], которое, с точки зрения физики, соответствует фиктивным источникам примесей. Такие нереальные источники не используются в физически обоснованных уравнениях (1) и (2) и не существуют в природе. Поэтому при использовании уравнений (8) компьютерные программы часто оказываются неприемлемыми. Такая ситуация может быть подтверждена с помощью расчетов, которые показывают, что попытки минимизировать отмеченные выше ошибки в существующих алгоритмах с помощью известных численных схем оказываются безнадежными.

Имеющие методы расчета процессов переноса основаны на формальном выборе функций, которые удовлетворяют дифференциальным уравнениям. В численных схемах эти функции заменяются произвольными ломаными кривыми. При использовании формальных подходов некоторые математики не в состоянии проанализировать все возможные потоки примеси, поэтому пытаются найти простые универсальные функции, которые могут описать процессы диффузии в целом. В то же время оказывается, что функций с такими свойствами не существует. Поэтому расчеты должны выполняться с помощью уравнений баланса массы (2) для отдельных потоков примеси.

Высокая эффективность новых алгоритмов обеспечена применением математических функций, которые удовлетворяют уравнениям диффузии (1) и (2). Это позволяет исключить проверку баланса массы в различных точках. Поскольку уравнения (1) и (2) определяют баланс массы, они неизбежно гарантируют выполнение закона сохранения массы для всех значений x и t .

ЛИТЕРАТУРА

1. М О П-С Б И С. Моделирование элементов и технологических процессов. – М.: Радио и связь, 1988.
2. Б у б е н н и к о в А. Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М.: Высш. шк., 1989.
3. К а р с л о у Г., Е г е р Д. Теплопроводность твердых тел. – М.: Наука, 1964.
4. S s u r g e m 4, Компьютерная программа для моделирования диффузионных технологий: Компания Silvaco International.

5. Бондарев В. А. Вариационная формулировка задачи нестационарной теплопроводности // ИФЖ. – 1992. – № 1. – Т. 62.

6. Bondarev V. A. Variational method for solving non-linear problems of unsteady-state heat conduction // Int. J. Heat Mass Transfer. – Vol. 40, No. 14. – Pergamon, Oxford, 1997.

7. Технология СБИС. – М.: Мир, 1986.

Представлена кафедрой ПТиТ

Поступила 29. 04. 2004

УДК 66.041.5:662.613.5

ПРОМЫШЛЕННЫЕ ПЕЧИ В ПРОБЛЕМЕ СНИЖЕНИЯ ВЫБРОСОВ ОКСИДОВ АЗОТА

Докт. техн. наук, проф. СОРОКА Б. С.

Институт газа НАН Украины

Загрязнение окружающей среды при использовании топлива в металлургическом производстве. Нормирование выбросов. В металлургическом производстве используются разнообразные топливные агрегаты энергетического и технологического назначения – от котлов и газотурбинных установок (ГТУ) до разнообразных технологических печей. В качестве топлива в металлургии применяются все существующие виды топлив: минеральное (твердое, жидкое и газообразное) и искусственное (технологическое). В связи с этим металлургическое производство является важнейшим загрязнителем окружающей среды.

Вместе с тем передовые металлургические компании развивают собственное производство таким образом, чтобы не только обеспечивать выполнение постоянно ужесточаемых национальных и международных (ЕС) экологических стандартов, но и часто руководствуются собственными, более строгими нормативами. Примером такой фирмы может служить «Lurgi Lentjes Service» (Германия) (табл. 1). В качестве нормируемых компонент здесь представлены оксиды азота NO_x и углерода CO , а также дисперсные (пылевые) частицы [1].

Важнейшими источниками образования NO_x являются высокотемпературные процессы, особенно в печах, где окислитель-воздух или воздух, обогащенный кислородом, подогревают до высоких температур (до 500 °С и более). По-видимому, именно повышение температуры воздуха горения, обеспечивая высокую энергетическую эффективность нагревательных печей, вызвало превышение $[\text{NO}_x]$ по сравнению с нормативами на выходе из печей станов 850 и 320/150 Белорусского металлургического завода [2]. Горелочные устройства этих печей, поставленные в 1980-х гг., не обеспечивали пониженные концентрации $[\text{NO}_x]$ даже в условиях холодного окислителя, а в реальных условиях эксплуатации при высоком подогреве воз-