

О РЕШЕНИИ ОДНОЙ КОНТАКТНОЙ ЗАДАЧИ ЖИДКОСТЬ — УПРУГАЯ ПЛАСТИНА

Г. В. ГАДИЯК, Ж. Л. КОРОБИЦЫНА

Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия

e-mail: juk@lchd.nsc.ru

The flow of viscous incompressible fluid takes place in time varying region. One of fluid boundaries is partially free, partially is covered by elastic plate. One plate edge is hinge fixed, the other edge is free. Numerical simulation of the plate deflection under effect of motion of the free plate edge which coordinated with fluid motion is presented in this work.

Одним из процессов, входящих в технологию производства интегральных схем, является термическое окисление кремния. Известны различные подходы к численному моделированию этого процесса. В качестве простейшей модели использовался квадратичный закон роста пленки окисла в зависимости от времени окисления, константы его определялись в соответствии с экспериментальными данными [1]. Кинетика роста окисла кремния воспроизводилась также посредством численного интегрирования одномерного уравнения диффузии окислителя в окисле SiO_2 [2].

Численное моделирование локального окисления кремния, при котором часть пленки покрыта нитридной маской и образуемый окисел имеет достаточно сложную форму (типа “птичьего клюва”), потребовало применения более сложных двумерных моделей. Обзор работ по этой тематике дан, например, в [3–10]. В различных диапазонах температур окисел может рассматриваться как упругое тело, упруго-пластическое, либо как вязкая жидкость.

В данной работе используются жидкостные модели движения окисла — в приближениях вязкой и идеальной жидкостей. Процесс окисления можно представить как квазистационарный, состоящий из трех этапов: диффузии окислителя в окисле кремния до границы кремний-окисел, где происходит реакция окисления, и последующих движения окисла и деформации нитридной маски за счет того, что объем образовавшегося окисла больше объема прореагировавшего кремния (рис. 1).

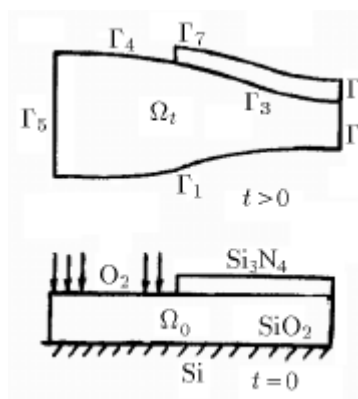


Рис. 1.

Процесс деформации нитридной маски моделируется как прогиб упругой пластины в результате взаимодействия ее с жидкостью. По своей сути эта задача является контактной задачей. Она представляет интерес и с точки зрения анализа математических моделей, и с точки зрения разработки численных алгоритмов, реализующих эти модели. Ниже приводится описание модели процесса окисления кремния, вычислительного алгоритма и численных расчетов. Достаточно полное описание алгоритма и его апробирования содержится в работе [11].

В постановке задачи, выборе численного алгоритма и в последующих обсуждениях результатов деятельную помощь оказал д.ф.-м.н., профессор Г. Г. Черных. Авторы сердечно благодарны ему.

1. Постановка задачи

Сформулируем постановку задачи; она близка к рассмотренной в [3].

1.1. Диффузия окислителя. К прогибу нитридной маски этот процесс имеет опосредованное отношение, поэтому, не вдаваясь в подробности, отметим лишь, что для математического описания его привлекается двумерное параболическое уравнение с кусочно-постоянными коэффициентами и соответствующими начальными и краевыми условиями [11].

1.2. Течение окисла. Рассматривались две модели — идеальной и вязкой жидкостей. Идеальная жидкость ($\nu = 0$):

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \text{grad} \mathbf{V} = -\frac{1}{\rho} \text{grad} P; \quad \text{div} \mathbf{V} = 0; \quad (1)$$

вязкая жидкость ($\nu \neq 0$):

$$\nu \Delta \mathbf{V} = \frac{1}{\rho} \text{grad} P; \quad \text{div} \mathbf{V} = 0; \quad (2)$$

$\mathbf{V} = (u, v)$ — скорость, P — давление, $\rho = \text{const}$ — плотность, ν — кинематическая вязкость окисла; (1) — уравнение Эйлера, (2) — уравнение Стокса. Они следуют из уравнений Навье — Стокса.

Начальные условия: $\mathbf{V} = \mathbf{0}$. Сформулируем краевые условия:

$$\Gamma_1: \quad \mathbf{V} = -(1 - \alpha) V_s \cdot \mathbf{n}; \quad \Gamma_2, \Gamma_5: \quad u = 0; \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0; \quad (3)$$

$$\Gamma_3: \quad \nu \neq 0: u = 0; \quad v = \frac{\partial W}{\partial t}; \quad \nu = 0: \quad u \cdot n_1 + v \cdot n_2 = \frac{\partial W}{\partial t} n_2; \quad (4)$$

$$\Gamma_4: \quad \frac{dF}{dt} = 0; \quad \text{или} \quad f_t + u f_x = v \quad \text{— кинематическое условие,} \quad (5)$$

$F = y - f(x, t) = 0$ — уравнение Γ_4 .

Динамическое условие на свободной границе при $\nu \neq 0$ имеет вид

$$\begin{aligned} \left(-(P - P_A) + 2\nu\rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) n_1 + \nu\rho \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_2 &= -\frac{\gamma_1}{R} n_1, \\ \nu\rho \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_1 + \left(-(P - P_A) + 2\nu\rho \frac{\partial v}{\partial y} \right) n_2 &= -\frac{\gamma_1}{R} n_2; \end{aligned}$$

при $\nu = 0$: $P = P_A$. Здесь $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ — единичный вектор внешней нормали к Γ_4 , P_A — давление в газовой среде; γ_1 — коэффициент поверхностного натяжения, R — радиус кривизны свободной поверхности.

На Γ_1 задается поток окисла, возникающий за счет окисления кремния, V_s задает скорость роста окисла; $\alpha = 0.44$ — коэффициент объемного расширения. На Γ_2, Γ_5 задаются условия симметрии. Граница жидкость-нитридная маска, Γ_3 , моделируется как прогиб тонкой пружой нерастяжимой (нулевая продольная скорость) пластины. По своей сути — это контактная задача. Для жидкости Γ_3 будем рассматривать как твердую границу, что при $\nu \neq 0$ приводит к равенству скоростей жидкости и пластины, записанных в (4), а для $\nu = 0$ эти условия формулируются как равенство проекций скоростей на нормаль. Здесь W — прогиб пластины, Γ_4 — свободная граница [12–14].

1.3. Деформация нитридной маски.

Этот процесс моделируется как прогиб упругой нерастяжимой одномерной пластины под действием движения конца пластины Γ_7 , согласованного с движением жидкости,

$$G \frac{\partial^4 W}{\partial x^4} + \frac{\gamma}{g} \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = 0 \quad (6)$$

с начальными и краевыми условиями в точках Γ_6, Γ_7 :

$$W(x, 0) = 0; \quad \Gamma_6: \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} = 0; \quad \frac{\partial W}{\partial t} = 0; \quad \Gamma_7: \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} = 0; \quad \frac{\partial W}{\partial t} = v |_{\Gamma_1}. \quad (7)$$

Здесь $G = \frac{Eh^2}{12(1 - \nu_1^2)}$, E — модуль Юнга, ν_1 — коэффициент Пуассона, h — толщина пластины, γ — удельный вес, g — ускорение свободного падения. На Γ_6 формулируются условия симметрии, на Γ_7 — условия согласования движения маски с движением окисла. При численном решении задача осложняется тем, что движение границы Γ_7 , свободного конца пластины, должно быть согласовано также с движением свободной поверхности жидкости.

2. Алгоритм численного решения задачи

Введением характерных масштабов длины, скорости и плотности переменные величины задачи безразмериваются. В уравнениях, приведенных к безразмерному виду, будут фигурировать число Пекле Pe , число Рейнольдса Re и число Вебера We .

В области решения задачи Ω_t , зависящей от времени, вводится локально-эйлерово-лагранжева система координат $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{t})$, связанная с движением Γ_1 и $\Gamma_3 \cup \Gamma_4$, аналогичная рассмотренной в [14],

$$\bar{t} = t; \quad \bar{x} = x; \quad \bar{y} = \frac{(y - f_2)}{(f_1 - f_2)},$$

$y = f_1(x, t)$ — уравнение $\Gamma_3 \cup \Gamma_4$, $y = f_2(x, t)$ — уравнение Γ_1 (рис. 1). При этом область Ω_t преобразуется в прямоугольник $Q = \{(\bar{x}, \bar{y}), \bar{x} \in [0; L]; \bar{y} \in [0, 1]\}$. В результате замены переменных преобразуются и дифференциальные операторы задачи.

Численное решение осуществляется методом конечных разностей. На областях изменения переменных $(\bar{t}; \bar{x}; \bar{y})$ строятся равномерные сетки. Соответственно генерируется сетка на Ω_t . Значения искомых сеточных функций соотносятся с разными точками ячеек: C, P — с центрами ячеек, u — с серединами вертикальных, v — с серединами горизонтальных сторон ячеек. Дифференциальные операторы аппроксимируются со вторым порядком по x, y во внутренних узлах и с первым порядком по t .

Для ясности понимания алгоритма решения контактной задачи опишем кратко алгоритм решения всей задачи. Для численного решения задачи диффузии используется схема стабилизирующей поправки [15]. Численное решение уравнений Навье — Стокса осуществляется по явной схеме Чорина [16]. Реализация ее различна для идеальной и вязкой жидкостей: для идеальной жидкости она используется как нестационарная система определения $P^{n+1}, \mathbf{V}^{n+1}$ и границ области $\Omega_{t_{n+1}}$ при $t = t_{n+1}$. Для вязкой жидкости зависимость P, \mathbf{V} от времени выражается только через зависимость области решения от времени, и схема Чорина используется только как итерационная.

Реализация краевых условий для контактной задачи теснейшим образом связана с реализацией краевых условий на свободной границе, различные подходы к которой имеются, например, в [17, 18]. Алгоритм, используемый в настоящей работе, состоит в следующем. Из разностных уравнений, аппроксимирующих условия на свободной границе, исключается P , затем компонента скорости u выражается через компоненту v , и это выражение подставляется в разностное уравнение, аппроксимирующее уравнение неразрывности (2). В результате для определения v в узлах сетки на Γ_4 получается система линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. В качестве краевых условий для ее решения используются значения $v|_{\Gamma_3 \cup \Gamma_4}$ и $v|_{\Gamma_3 \cup \Gamma_4}$. Далее по найденным значениям v вычисляются значения u и P .

Задача о прогибе пластины введением новых искомых функций сводится к системе двух уравнений второго порядка. Для нее используется неявная дивергентная разностная схема второго порядка точности, решение ее определяется методом матричной прогонки.

Общий алгоритм решения задачи состоит в следующем. На каждом временном слое решается параболическое уравнение для концентрации C окислителя в окисле. По значениям C на Γ_1 вычисляется скорость роста окисла V_s , определяются значения u, v на Γ_1 и перестраивается Γ_1 . Во вновь полученной области реализуется схема Чорина, что дает значения u, v во внутренних узлах области. После этого вычисляются u, v на Γ_2, Γ_5 ; происходит расчет прогиба пластины и определение u, v на Γ_3 , затем вычисляются u, v на Γ_4 . Для повышения точности решения задачи о прогибе пластины необходимо на Γ_3 переходить к более мелкой сетке с интерполяцией достаточно высокого порядка точности значений u, v , полученных во внутренних узлах области. Это очень существенный момент в решении контактной задачи.

Далее алгоритм для идеальной и вязкой жидкостей разделяется. Для идеальной жидкости: определение нового положения Γ_3, Γ_4 — построение новой области $\Omega_{t_{n+1}}^k$ и сетки на ней, k — номер итерации. Затем переход к вычислению нового приближения P_{n+1}^{k+1} и \mathbf{V}_{n+1}^{k+1} , то есть реализуется итерационный процесс вычисления P_{n+1} по области и краевым условиям. Для вязкой жидкости схема Чорина используется как итерационная, и область $\Omega_{t_{n+1}}$ перестраивается только по завершении итераций.

3. Численные расчеты

Расчеты проводились при различных значениях входных параметров: $Pe \in [10^{-2}, 10^2]$, $Re \in [10^{-19}, 10^{-15}]$ и $We \simeq 10^{-24}$. Численная реализация каждой из задач тестировалась отдельно на специальных тестах. Все расчеты проводились на последовательности сеток. Задача о прогибе пластинки тестировалась на полиномиальном тесте.

Для жидкости проведена серия тестовых расчетов решения задачи без пластинки, при этом движение свободной границы Γ_4 с точностью до величин порядка погрешности аппроксимации совпадало с движением нижней границы Γ_1 . Для идеальной жидкости также в качестве тестовой задачи со свободными границами использовалась “задача о вытягивании иглы” [19, с. 67], имеющая точное решение. На достаточно подробных сетках результаты численных расчетов с точностью до третьего знака совпадали с точным решением.

Для полностью сформулированной задачи проведены сравнительные расчеты моделей вязкой и идеальной жидкостей при различных значениях параметров задачи. Отличие результатов расчетов формы окисла одних и тех же вариантов не превышало погрешности аппроксимации. Проведено сравнение с экспериментальными данными и с расчетами авторов, использующих другие модели и другие численные методы [5–8] и [20]. На рис. 2 представлены результаты сравнения численных расчетов по модели идеальной жидкости с расчетами [20], полученными с применением моделей вязкого и вязкоупругого окислов методом конечных элементов.

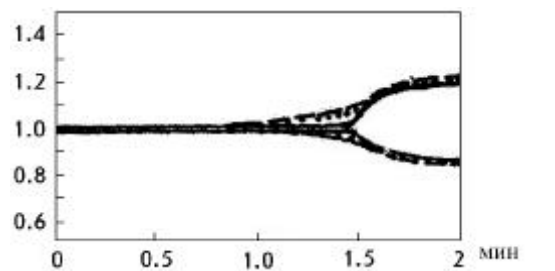


Рис. 2. Сравнение формы окисла с данными из [20]; --- — модель вязкого окисла; — — модель вязкоупругого окисла [20]; ··· — расчеты по модели идеальной жидкости.

Расчеты проведены при следующих данных: длина окисла $L = 2$ мкм; длина маски 1.5 мкм; начальная толщина окисла 0.02 мкм, конечная — 0.325 мкм; $D = 0.04 \frac{\text{МКМ}^2}{\text{с}}$; $K = 0.5 \frac{\text{МКМ}}{\text{с}}$; $N = 4.5 \cdot 10^{-10} \text{МКМ}^{-3}$; $H = 10^4 \cdot 2.78 \frac{\text{МКМ}}{\text{с}}$; $h = 0.02$ мкм; $E = 2 \cdot 10^{12} \frac{\text{Г}}{\text{МКМ} \cdot \text{с}}$; $\gamma = 1.5 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Г}}{\text{МКМ}^3}$ удельный вес нитридной маски; $\nu_1 = 0.3$; $\gamma_1 = 10^5 \frac{\text{Г}}{\text{с}^2}$; сетки $17 * 7$, $33 * 7$; $\tau = 100$ с; время окисления 100 минут; температура окисления 800°C ; давление $P_A = 10$ атм.

Анализ значительного количества численных расчетов позволяет сделать следующие выводы. Для моделирования кинетики процесса окисления, когда анализируются только скорость роста окисла и его форма, можно использовать как модель идеальной жидкости, так и модель вязкой жидкости. В целом рассмотренная численная модель, как пример контактной задачи, позволяет получать достоверные результаты динамики роста окисла, удовлетворительно соответствующие экспериментальным данным и численным результатам авторов, использующих другие модели процесса окисления.

Список литературы

- [1] DEAL B. E., GROVE A. C. General relationship for the thermal oxidation of Silicon // J. Appl. Physic. 1965. V. 36. No. 12. P. 3770–3778.
- [2] БУБЕННИКОВ А. Н., САДОВНИКОВ А. Д. Физико-технологическое моделирование субмикронных элементов кремниевых ССБИС // Зарубежная радиоэлектроника. М., 1987. С. 3–21.
- [3] CHIN D., OH S.-Y., HU C. M., DUTTON R. W. Two dimensional oxidation. // IEEE Trans. on Electron Devices. 1983. Vol. ED-30, № 7. P. 744–749.
- [4] ПОНСЕТ А. Finite-element simulation of local oxidation of Silicon // IEEE Trans. on Computer-aided design. 1985. Vol. Cad-4. № 1. P. 43–53.
- [5] МЕЙ Л., ДАТТОН Р., ХАНСЕН С. Моделирование полукристаллических кремниевых структур для процессов производства интегральных схем // Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. Под ред. Д. Миллера. М., 1989. С. 222–248.
- [6] БОРУКИ Л., СЛИНКМАН Д. Эффективная реализация метода конечных элементов для двумерного окисления и перераспределения примеси в кремнии // Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. Под ред. Д. Миллера. М., 1989. С. 147–158.

- [7] Фукума М. Последние разработки фирмы ДЕС в области моделирования приборов и процессов. // Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. Под ред. Д. Миллера. М., 1989. С. 17–27.
- [8] Кольдяев В. И., Мороз В. А., Назаров С. А. Исследование асимптотических свойств краевой задачи о легировании и окислении кремния // Автометрия. 1986. № 6. С. 11–19.
- [9] Груданов Н. Б., Верейкина М. Б., Сидоренко В. П. Двумерное моделирование локального окисления кремния // Изв. высш. учеб. заведений. Радиоэлектроника. 1989. Т. 32. № 9. С. 50–54.
- [10] Буренков А. Ф., Запольский С. А., Мозолевский И. Е. Численное моделирование локального окисления кремния // Поверхность: физика, химия, механика. 1989. № 3. С. 96–103.
- [11] Гадияк Г. В., Коровицына Ж. Л., Черных Г. Г. О численном моделировании локального окисления кремния // Вычислительные технологии. Новосибирск: Изд-е ИВТ СО РАН. 1992. Т. 6, № 3. С. 22–36.
- [12] Налимов В. И., Пухначев В. В. Неустановившиеся движения идеальной жидкости со свободной границей // Новосибирск: НГУ, 1975.
- [13] Пухначев В. В. Движение вязкой жидкости со свободными границами. Уч. пособие. Новосибирск: НГУ, 1989.
- [14] Пухначев В. В. Плоская стационарная задача со свободной границей для уравнений Навье — Стокса // ПМТФ. 1972. № 3. С. 91–102.
- [15] Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики // Новосибирск: Наука, 1967.
- [16] Пейре Р., Тейлор Т. Д. Вычислительные методы в задачах механики жидкости // Л. 1986.
- [17] Непомнящий А. А., Тарунин Е. Л. Двухполевой метод расчета течений вязкой жидкости со свободной поверхностью // Математические модели течений жидкости. Новосибирск, 1978. С. 197–206.
- [18] Белоцерковский О. М., Гушин В. А., Коньшин В. Н. Метод расщепления для исследования течений стратифицированной жидкости // ЖВМиМФ. 1987. Т. 27, № 4. С. 594–609.
- [19] Овсянников Л. В. Общие уравнения и примеры. // Задача о неустановившемся движении жидкости со свободными границами. Сб. работ теоретического отдела ИГ, СО АН СССР. Новосибирск: Наука, 1967. С. 3–75.
- [20] PENG J. P., SRINIVASAN G. R. Nonlinear viscoelastic modeling of thermal oxidation of SiO_2 // NASEC-ODE VII; Proc. of the Seventh Intern. Conf. on Numer. Anal. of Semiconductor Devices and Integrated Circuits. April 8–12, 1991. Colorado, USA. 1991. P. 89–92.