

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**

УДК 519.6 : 533.9

**ЭФФЕКТИВНЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ
ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ
В МОНОСИЛАНОВОЙ ПЛАЗМЕ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА *****В. А. Вшивков, Г. Г. Лазарева, А. В. Снытников***Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск
E-mail: snytav@ssd.sccc.ru*

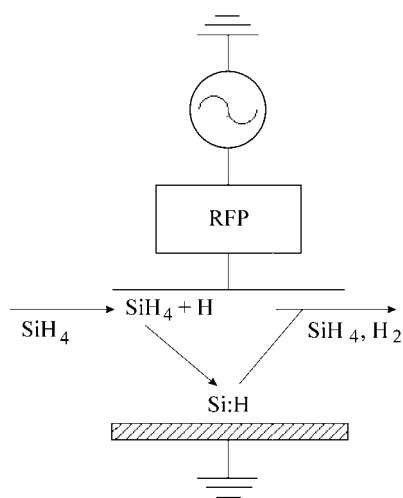
Представлена численная модель процессов в моносилановой плазме тлеющего разряда, предназначенная для моделирования работы реактора плазменного осаждения. Рассмотрен один тип ионов. Ионная и электронная компоненты плазмы моделируются кинетическими уравнениями со столкновениями. Создан эффективный параллельный алгоритм для моделирования процессов в моносилановой плазме и приведены его основные характеристики. Результаты численного моделирования с помощью используемой модели адекватны данным, полученным в ходе физических экспериментов.

Введение. Интерес к моносилановой (SiH_4) плазме тлеющего разряда, возникающей в плазмохимических реакторах низкого давления при осаждении тонких пленок гидрогенизированного аморфного кремния ($\alpha\text{-Si:H}_4$), определяется широким применением этих пленок в качестве технологического материала в микроэлектронике. Для организации стимулированного плазмой осаждения тонких пленок $\alpha\text{-Si:H}_4$ из газовой фазы часто используют планарные плазмохимические реакторы с двумя параллельными электродами [1], схема одного из реакторов приведена на рис. 1.

Численные модели, применяемые для исследования низкотемпературной (в частности, силановой) плазмы делятся на три группы по методу решения кинетического уравнения Больцмана. Это уравнение может быть решено либо разностным методом, либо путем интегрирования его моментов (гидродинамический подход), либо путем разбиения плазмы на крупные модельные частицы (кинетический подход) [2–12].

* Работа выполнена при поддержке Российско-голландских проектов NWO-GRID (контракт NWO-RFBS 047.016.007) и NWO-Plasma (контракт NWO-RFBS 047.016.018), программы СО РАН по суперЭВМ, программы Рособразования «Развитие научного потенциала ВШ» (проект РНП.2.2.1.1.3653), Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 08-01-00615, № 08-01-00622).

Рис. 1. Схема реактора плазменного осаждения. Высокочастотный источник энергии (RFP – Radio Frequency Power) соединен с набором плоскопараллельных электродов. Смесь газов, содержащая силан и водород, находится между электродами



Разностный метод решения уравнения Больцмана подходит только для тестовых задач очень небольшой размерности. При решении пространственной двумерной задачи необходимо использовать четырехмерную сетку, что затруднительно, а решение разностным методом трехмерной задачи почти невозможно.

Гидродинамические модели [2–4] включают в себя решение моментов уравнения Больцмана (уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии) по времени и пространству. Эти расчеты дополняются вычислением функции распределения электронов. Коэффициенты переноса для электронов и константы скорости для химических реакций вычисляются по функции распределения электронов. Гидродинамический подход позволяет решать задачи высокой размерности (двух-, трехмерные) вследствие большей скорости вычислений, хотя и дает меньшую точность по сравнению с кинетическим. Такой подход более экономичен, тем не менее он может быть использован только при давлении свыше 200 мТорр, так как предполагается локальное равновесие между электронами и электрическим полем.

В кинетическом подходе [5–8] определяются зависящие от времени и координат решения уравнения Больцмана, которые дают возможность вычислить распределения скорости электронов и ионов. Уравнение решается с помощью комбинации метода частиц и статистических методов (метод Монте-Карло [7]). Кинетические модели в меньшей степени зависят от эмпирических предположений и дают более точные результаты, чем гидродинамические модели.

Для решения некоторых задач (в частности, исследования структуры приэлектродных слоев) комбинация метода частиц и метода Монте-Карло требует значительных затрат машинного времени. В связи с этим в работе [9] исследовался упрощенный кинетический подход для описания движения электронов. Функция распределения электронов находится с помощью так называемого двучленного приближения, которое можно использовать, если полное транспортное сечение рассеяния много больше сечения неупругого рассеяния. Там же проведен анализ применимости двучленного приближения в неоднородных полях.

Гибридные модели [10–12] применяют кинетический подход при расчете движения электронов и ионов по всей области разряда и при вычислении коэффициентов переноса заряженных частиц. В то же время гидродинамический подход используется для расчета плотности заряженных частиц и распределения электрического поля. Гибридные модели были разработаны для моделирования достаточно сложных химических процессов в газовых разрядах. Коэффициенты переноса и константы скорости реакций электро-

нов с молекулами рассчитываются кинетически, при этом плотность частиц и изменения электрического поля вычисляются с помощью гидродинамического подхода. В настоящее время наиболее часто гибридные модели используются в задачах моделирования плазмы с включением молекулярных газов, так как эти модели объединяют в себе точность кинетического подхода, высокую размерность и малое время расчета, характерные для гидродинамических моделей.

В данной работе рассматривается кинетическая модель процессов в моносилановой плазме тлеющего разряда. Цель предлагаемой работы – решение проблемы больших вычислительных затрат, характерных для моделей кинетического типа, путем реализации модели на многопроцессорном вычислительном комплексе. Из анализа основных характеристик параллельного алгоритма видно, что с ростом размерности задачи сохраняется время ее решения при соответствующем увеличении количества процессоров. Результаты численного моделирования с помощью используемой модели адекватны данным, полученным в ходе физических экспериментов.

Постановка задачи. Рассмотрим кинетическое уравнение Власова, дополненное уравнением Пуассона для потенциала, в аксиально-симметричной постановке в безразмерной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \text{St} \{f\}, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -4\pi\rho,$$

где \mathbf{x} – координата (в цилиндрической системе координат $\mathbf{x} = \{r, 0, z\}$); ρ – плотность; \mathbf{v} – скорость; \mathbf{E} – напряженность электрического поля; Φ – потенциал; f – функция распределения частиц; $\text{St} \{f\}$ – столкновительный член.

Столкновительный член при решении уравнения Власова методом частиц в ячейках не вычисляется явно (как не вычисляется явно и функция распределения): он добавлен в уравнение Власова для подтверждения того, что движение частиц происходит со столкновениями.

Плотность заряда ρ в уравнении Пуассона вычисляется на каждом временном шаге суммированием по частицам. Так, для ячейки с номером i по радиусу и номером k по координате z

$$\rho_{i,k} = \sum_{j=1}^{N_j} q_j D_{i,k}(r_j, z_j), \quad 1 < i < N_R, 1 < k < N_Z,$$

где N_j – полное число частиц; N_R и N_Z – число узлов сетки по радиусу и по координате z соответственно; q_j – заряд частицы; r_j и z_j – радиус и координата z ; $D_{i,k}(r, z)$ – ядро метода частиц [13, 14], определяющее способ распределения заряда частицы между четырьмя узлами сетки, образующими ячейку i, k . В данной работе использовано РС-ядро [14]. Это означает, что за пределами ячейки i, k ядро $D_{i,k}(r, z)$ равно нулю, внутри ячейки производится билинейная интерполяция.

Для перехода к безразмерным переменным в качестве основных характерных параметров были выбраны: заряд $e_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл; длина $L_0 = 1$ см; масса $M_0 = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г; энергия $E_0 = 1$ эВ. На их основе могут быть получены характерные величины: скорость частиц $v_0 = \sqrt{2E_0/M_0} = 5,9 \times$

$\times 10^7$ см/с; время $t_0 = L_0/v_0 = 1,68 \cdot 10^{-8}$ с; плотность $\rho_0 = \Phi_0/4\pi L_0^2 = 5,3 \cdot 10^{-4}$ г/см³; потенциал $\Phi_0 = L_0 M_0 v_0/e_0 t_0 = 2/3 \cdot 10^{-2}$ В и частота $F_0 = 1/t_0 = 5,44 \cdot 10^7$ Гц.

Переход от безразмерных величин к реальным физическим величинам (например, для сравнения с результатами эксперимента) осуществляется следующим образом. Пусть t – безразмерное время, t_ϕ – реальное физическое время. Тогда физическое время будет получено из безразмерного путем его умножения на характерную величину времени t_0 :

$$t_\phi = t t_0.$$

Аналогично можно получить другие величины. (Далее в тексте используются безразмерные величины, если не указаны единицы измерения.)

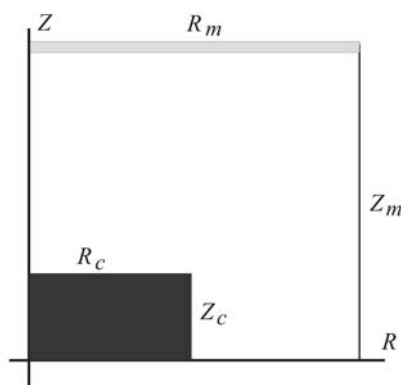
Для уравнения Пуассона задаются следующие граничные условия. На ВЧ-электроде (рис. 2) потенциал изменяется со временем как $u_{\text{ВЧ}} = u_0 \cos \omega t + u_0$ (u_0 – амплитуда потенциала, ω – частота ВЧ-поля), на заземленном электроде потенциал равен нулю, на боковой стенке нормальная производная потенциала равна нулю.

Граничные условия для частиц: на электродах электроны и ионы поглощаются, от стенок частицы отражаются.

В начале расчета модельные частицы распределяются по области равномерно (как электроны, так и ионы), так что плотность заряда равна нулю. Внутри заземленного электрода частиц нет, плотность заряда в нем всегда равна нулю. Распределение скоростей частиц задается максвелловским с начальной температурой $T \sim 0,03$ эВ и вычисляется с помощью функции g05dde библиотеки NAG [15].

При тестировании численной модели использованы параметры экспериментальной установки из [1]: диаметр ВЧ-электрода 22 см, расстояние между электродами 2,5 см (между ВЧ-электродом и заземленным электродом вдоль оси Z на рис. 2), размер заземленного электрода 23×23 см, диаметр подложки (в центре заземленного электрода) 7,5 см. Параметры разряда: частоты 13,56 и 58,0 МГц, давление 0,17 Торр (22,0 Па) и 0,056 Торр (7,5 Па). ВЧ-мощность (мощность, выделяемая высокочастотным тлеющим разрядом в данной установке) от 5 до 30 Вт. Поток силана 28 стандартных кубических сантиметров в минуту (термин «стандартные» означает, что кроме скорости течения заданы еще определенные температура и давление газа, за стандартные условия обычно принимают температуру 273,15 К и давление 100 кПа). Таким образом, на рис. 2 $R_m = 11$ см, $Z_m = 2,5$ см, $R_c = 3,75$ см, $Z_c = 0,5$ см. Пространство между электродами (кроме разряда) заполнено нейтральным газом (силаном), степень ионизации газа 10^{-6} .

Рис. 2. Расчетная область: R_m – размер по радиусу (ВЧ-электрод), Z_m – размер по осевой координате (боковая стенка), R_c – радиус, Z_c – высота заземленного электрода. Ось Z соответствует вертикальному направлению в реальной установке. Черный прямоугольник – заземленный электрод



Следует отметить, что не все физические величины используются в расчетах. Так, мощность является результатом расчета, на который оказывают влияние почти все остальные параметры, по значению мощности можно оценивать правильность расчета в целом. Давление газа определяет его плотность (температура 273,15 К), которая учитывается при расчете столкновений.

Численные методы решения уравнений Власова и Пуассона. На каждом временном шаге процесса моделирования решаются уравнения Власова и Пуассона. Уравнение Власова решается для ионной и электронной компонент плазмы с помощью метода частиц в ячейках [16].

Для описания различных процессов столкновения, представленных в уравнении Власова членом $St\{f\}$, используется метод нулевых столкновений (null collision technique) [14]. Частицы имеют три компоненты скорости: радиальную, тангенциальную (направленную по касательной к окружности) и z -компоненту, которые изменяются в результате столкновений. Несмотря на то что движение частиц происходит лишь в двух направлениях (по радиусу и по координате z), в ходе столкновений частиц может изменяться и третья (тангенциальная) компонента скорости.

В соответствии с методом нулевых столкновений не отслеживаются парные столкновения модельных частиц. Это означает, что для модельного электрона не разыскивается близко расположенный модельный ион, с которым электрон может столкнуться, и не рассматривается столкновение именно этой пары модельных частиц. Каждая модельная частица без привлечения других таких же частиц может в течение отрезка времени испытывать столкновение и отклоняться на некоторый угол. Этот угол отклонения будет усреднением углов отклонения частиц в реальной плазме за то же самое время.

Для расчета компонент скорости модельной частицы после столкновения вводится локальная сферическая система координат с центром в самой частице и осью, направленной вдоль вектора скорости. Угол рассеяния частицы отсчитывается от оси и определяется выражением

$$\theta(x) = \sqrt{1 - \tau \ln(1 - \xi)},$$

где τ – временной шаг; ξ – случайное число с нормальным распределением. Полярный угол сферической системы координат φ (направление рассеяния частицы) вычисляется как случайное число с нормальным распределением на отрезке от 0 до 2π .

Вначале определяется частица, с которой сталкивается электрон. Если случайное число ξ с равномерным распределением соответствует условию

$$\xi < n_0 / (n_0 + n_i),$$

где n_0 – плотность нейтралов, n_i – плотность ионов, то происходит столкновение с нейтралом. Плотность нейтралов (фоновый нейтральный газ) постоянна, плотность ионов вычисляется по модельным частицам-ионам аналогично определению плотности заряда. Вероятность столкновения

$$p = 1 - \exp(-|\mathbf{v}| \tau \sigma n_i),$$

где $|\mathbf{v}|$ – модуль скорости частицы; σ – полное сечение столкновения электрона с нейтралом, представляющее собой сумму сечений всех возможных стол-

кновительных процессов (в этом случае σ_i – сечения ионизации и σ_{el} – сечения упругого столкновения). Наличие либо отсутствие столкновения определяется по вероятности p (путем сравнения вероятности со случайным числом с равномерным распределением). Сечения столкновения зависят от энергии частицы. В расчете использовались экспериментально полученные значения сечений столкновения [6, 8, 10, 11].

Далее необходимо определить, какой из возможных процессов будет происходить. Если случайное число ξ с равномерным распределением соответствует условию

$$\xi < \sigma_i / (\sigma_i + \sigma_{el}),$$

то происходит процесс ионизации, создается пара частиц (электрон и ион) с энергиями как при начальном распределении ($T \sim 0,03$ эВ). Аналогично можно рассматривать и другие процессы, например рекомбинацию, упругое и неупругое столкновения.

Таким образом, число частиц в ходе расчета меняется. Поскольку расчет производится на многопроцессорном компьютере, то может возникнуть ситуация, когда один из процессоров будет перегружен частицами. Каждый процессор рассчитывает столкновения и порождает новые частицы независимо от других процессоров, и теоретически может случиться, что у какого-то процессора на порядок больше ионизаций. В ходе проведенных вычислительных экспериментов перегрузки одного из процессоров не возникало, загрузка оставалась равномерной с точностью до 10 % частиц. Причина этого заключается в том, что область расчета не разделена по пространству между процессорами, а частицы разделены между процессорами равномерно без учета их положения в области. У всех процессоров одна и та же область, те же поля, одинаковые датчики случайных чисел (хотя и выдающие разные числа, но с тем же распределением) и т. д.

Потеря энергии электрона при столкновении с ионом или нейтральным атомом вычисляется по формуле

$$\Delta\varepsilon = \frac{2m}{M}(1 - \cos\varphi),$$

где m – масса электрона, M – масса иона или атома.

Следуя методике [14], приведем процедуру вычисления скорости частицы после столкновения. Для простоты будем искать скорость частицы в декартовой системе координат. Для расчета столкновений необходимо определить три компоненты скорости. Пусть вначале скорость частицы имеет вид $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$. После столкновения модуль и отдельные компоненты скорости частицы будут иметь следующий вид:

$$|\mathbf{v}^1| = |\mathbf{v}| \begin{cases} 1 + (1 - \cos\theta), & t < 0,5, \\ 1 - (1 - \cos\theta), & t \geq 0,5, \end{cases}$$

$$v_x^1 = |\mathbf{v}^1| (\cos\theta \cdot \cos\alpha + \sin\theta \cdot \sin\varphi \cdot \sin\alpha),$$

$$v_y^1 = |\mathbf{v}^1| [\cos\beta(-\cos\theta \cdot \sin\alpha + \sin\theta \cdot \sin\varphi \cdot \cos\alpha) + \sin\beta \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi],$$

$$v_z^1 = |\mathbf{v}^1| [-\sin\beta(-\cos\theta \cdot \sin\alpha + \sin\theta \cdot \sin\varphi \cdot \cos\alpha) + \cos\beta \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi],$$

где t – случайное число с нормальным распределением; θ – угол между первоначальным \mathbf{v} и новым \mathbf{v}^1 векторами скорости частицы; φ – угол поворота нового вектора скорости \mathbf{v}^1 вокруг оси вращения, определяемой направлением \mathbf{v} ; α и β – углы, которые первоначальный вектор скорости частицы образует с плоскостями XY и XZ соответственно:

$$\cos\alpha = \frac{v_x}{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}}, \quad \sin\alpha = \frac{v_y}{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}},$$

$$\cos\beta = \frac{v_y}{\sqrt{v_z^2 + v_y^2}}, \quad \sin\beta = \frac{v_z}{\sqrt{v_z^2 + v_y^2}}.$$

Начальное распределение скоростей частиц задавалось максвелловским с температурой электронов $T \sim 0,03$ эВ.

Напряженность электрического поля \mathbf{E} вычисляется как градиент потенциала. Уравнения движения модельных частиц интегрируются с помощью схемы с перешагиванием [13]. Дискретный аналог уравнения Пуассона

$$\frac{1}{h_R^2 r_{i-1/2}} (r_{i-1} \Phi_{i-3/2, k-1/2} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2} + r_i \Phi_{i-1/2, k+1/2}) + \frac{1}{h_Z^2} (\Phi_{i-1/2, k-1/2} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2} + \Phi_{i-1/2, k+1/2}) = -4\pi\rho_{i-1/2, k-1/2}$$

решается методом последовательной верхней релаксации (ПВР). Этот метод выбран потому, что расчетная область имеет неправильную форму (см. рис. 2) и фактически состоит из двух подобластей: первая подобласть $Z_c < z < Z_m$ над заземленным электродом и вторая подобласть $0 < z < Z_c$, $R_c < r < R_m$.

Единственной возможностью решить уравнение Пуассона в такой области является разделение ее на подобласти прямоугольной формы с перекрытием границ (в данном случае для первой подобласти использовалось $Z_c - 5h_Z < z < Z_m$ и для второй $-0 < z < Z_c + 5h_Z$ и $R_c < r < R_m$, т. е. захватывались «лишние» пять ячеек сетки) и решение уравнения отдельно в каждой подобласти. Значения потенциала на границе разделения подобластей неизвестны, но для его расчета в каждой подобласти значения должны быть заданы, например, нулевыми. После окончания итераций в каждой подобласти значения потенциала на границе разделения вычисляются в каждой из подобластей и, возможно, будут различными. Тогда производится обмен граничными значениями потенциала и итерации в каждой подобласти повторяются. Процесс повторяется до тех пор, пока значения потенциала на границе разделения подобластей не будут совпадать с точностью до параметра сходимости (в данном случае 10^{-6}).

Для области, имеющей такую неправильную форму, невозможно использовать наиболее быстрые прямые методы (в частности, метод преобразова-

ния Фурье). Более быстрые, чем ПВР, итерационные методы (например, метод сопряженных градиентов) применять нет необходимости, так как расчет потенциала занимает менее 5 % расчетного времени.

Метод последовательной верхней релаксации оказывается в данном случае эффективным благодаря незначительным изменениям плотности заряда в течение одного временного шага. Если взять потенциал, рассчитанный на предыдущем временном шаге, в качестве начального итерационного приближения, необходимо сделать лишь несколько итераций для достижения сходимости. Так как пространство моделирования разделено на две прямоугольные подобласти, итерации выполняются отдельно в каждой подобласти до тех пор, пока

$$\varepsilon = \max_{i,k} \left| \Phi_{i,k}^n - \Phi_{i,k}^{n-1} \right| < 10^{-6}, \quad 1 < i < N_{R_1}, \quad 1 < k < N_{Z_1}.$$

Здесь n – номер итерации; i и k – номера узла сетки по r и z ; N_{R_1} и N_{Z_1} – число узлов сетки по радиусу и координате z для первой подобласти. Аналогично ставится условие и для второй подобласти.

Затем происходит обмен значениями потенциала на границе разделения подобластей и продолжение этого процесса до достижения сходимости во всей области.

Результаты численного моделирования. Для проверки правильности физических результатов был проведен вычислительный эксперимент с использованием по 500 тыс. модельных ионов и модельных электронов и расчетной сетки из 100 узлов по радиусу и 140 узлов по координате z . Шаг по времени $\tau = 0,01$ (0,16 нс). Частота ВЧ-поля $\omega = 1000$ (58 МГц), потенциал на ВЧ-электроре задан по формуле $u_{\text{ВЧ}} = u_0 \cos \omega t + u_0$, потенциал $u_0 = 3,0$, масса иона была 31,0, заряд иона SiH_3^+ равен единице. Целью эксперимента было выяснение зависимости потока ионов на заземленный электрод от выделяемой мощности. Результаты этих расчетов в сравнении с результатами эксперимента [1] приведены на рис. 2.

Мощность разряда в вычислительном эксперименте определяется как приращение энергии всех модельных частиц за один временной шаг, среднее по всему времени расчета.

На рис. 3 видно, что характер зависимости тока от мощности в вычислительном эксперименте тот же, что и в реальном физическом эксперименте. Различия частично объясняются неполным соответствием геометрий расчетной области и экспериментальной установки.

Программа, реализующая такие численные методы, была распараллелена: частицы равномерно распределены между процессорами (независимо от положения частицы в области). Таким образом, каждый процессор содержит определенную долю плотности заряда, которая рассчитывается покомпонентным суммированием плотностей заряда по всем процессорам. Пусть $\rho_{i,k}^m$ – плотность заряда на процессоре с номером m . Тогда полная плотность заряда вычисляется как

$$\rho_{i,k} = \sum_{m=1}^{N_p} \rho_{i,k}^m, \quad 1 < i < N_R, \quad 1 < k < N_Z,$$

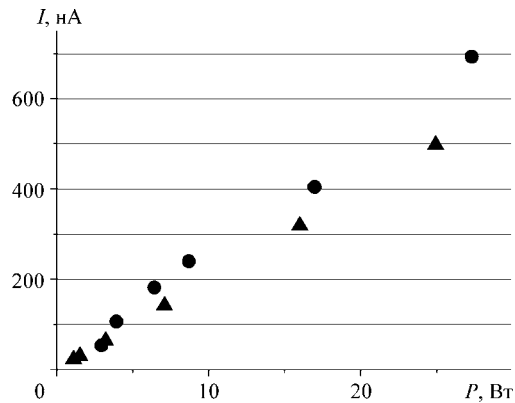


Рис. 3. Зависимость расчетного (▲) потока ионов на заземленный электрод от мощности для частоты 58 МГц в сравнении с экспериментом (●)

где N_P – число процессоров; N_R и N_Z – число узлов сетки по радиусу и координате z .

Уравнение Пуассона решается всеми процессорами (каждый процессор хранит всю расчетную область). Для организации межпроцессорных взаимодействий (суммирования плотностей заряда) используется библиотека MPI.

Параллельная программа опробована на кластерах Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН: МВС-1000М на базе процессора Alpha21264 и НКС-160 на базе процессора Itanium2. Частицы равномерно распределяются между процессорами, расчет поля дублируется на каждом процессоре. Для сетки 50×50 узлов и 1 млн. частиц (по 500 тыс. ионов и электронов) расчет движения и столкновений частиц занимает 95 % расчетного времени. При увеличении числа частиц эта доля становится еще больше, что объясняет значительное уменьшение времени расчета при увеличении числа процессоров (рис. 4).

Важно отметить, что распараллеливание проводится не только для того, чтобы уменьшить время счета. Основная задача заключается в том, чтобы путем увеличения числа частиц добиться снижения уровня численных статистических флуктуаций, которые вызваны небольшим числом модельных частиц в отдельной ячейке сетки. Для метода частиц в ячейках уровень численных флуктуаций оценивается как $L^{-1/2}$, где L – число частиц в ячейке [13]. Возможность увеличения числа частиц появляется за счет использования большего числа процессоров.

В таблице приведен уровень численных флуктуаций N потока ионов для различного числа модельных частиц, рассчитанный как модуль отно-

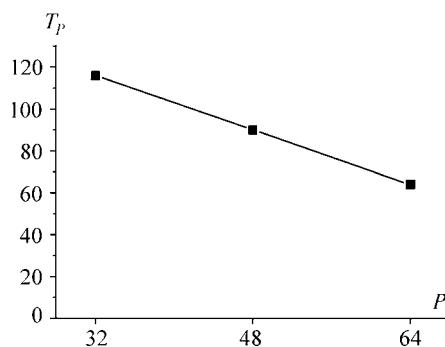


Рис. 4. Изменение времени счета в минутах при увеличении числа процессоров. Расчет проведен на кластере НКС-160, сетка 50×50 узлов, 100 млн. частиц, T_p – время счета с использованием P процессоров

шения отклонения потока ионов $f(t)$ от среднего значения $f_{cp}(t)$ к величине среднего значения:

$$N(t) = \max_{T_f - T_{ВЧ} < t < T_f} \left| \frac{f(t) - f_{cp}(t)}{f_{cp}(t)} \right|,$$

$$f_{cp}(t) = \frac{1}{T_{ВЧ}} \int_{t-0,1T_{ВЧ}}^{t+0,1T_{ВЧ}} f(x) dx,$$

Количество частиц, млн.	$N_{3Э}$	$N_{ВЧ}$
1	3,08	3,67
2	1,89	2,41
5	0,80	0,99
10	0,405	0,402
25	0,21	0,22

где $T_{ВЧ}$ – период колебаний ВЧ-поля ($1,2 \cdot 10^{-7}$ с). Усреднение происходит по $1/5$ периода высокочастотного поля, а поиск максимального значения численной флуктуации – по последнему в расчете периоду. Уровень численных флуктуаций N рассчитывался для потока ионов на заземленный электрод ($N_{3Э}$) и на ВЧ-электрод ($N_{ВЧ}$).

Из таблицы следует, что при увеличении числа процессоров (а также числа модельных частиц) для моделирования работы реактора плазменного осаждения можно добиться значительного снижения уровня статистических численных флуктуаций и таким образом повысить точность расчета.

Заключение. В данной работе представлена численная модель процессов в моносилановой плазме тлеющего разряда в аксиальной постановке. Ионная и электронная компоненты плазмы моделируются с помощью кинетического уравнения Власова со столкновениями, для расчета которых необходимо определить три компоненты скорости. Для получения более точных решений возникает необходимость в разработке параллельного алгоритма. Описана созданная параллельная версия программы моделирования процессов в моносилановой плазме на многопроцессорном вычислительном комплексе. Приведена зависимость потока ионов на заземленный электрод от мощности при частоте 58 МГц в сравнении с экспериментом. Численное моделирование проведено для параметров плазменного реактора [1]. Полученные результаты качественно соответствуют экспериментальным данным.

Авторы выражают благодарность Ю. Е. Горбачеву, А. С. Смирнову, К. Е. Орлову и В. В. Кржижановской за полезное обсуждение работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Абрамов А. С., Виноградов А. Я., Косарев А. И. и др.** Исследование ионной бомбардировки пленок аморфного кремния в процессе плазмохимического осаждения в высокочастотном разряде // ЖТФ. 1998. **68**, № 2. С. 52.
2. **Boeuf J. P., Pitchford L.** Two-dimensional model of a capacitively coupled rf discharge and comparisons with experiments in the gaseous electronics conference reference reactor // Phys. Rev. 1991. **E51**. P. 1376.
3. **Young F. F., Wu C. H.** Two-dimensional, self-consistent, three-moment simulation of RF glow discharge // IEEE Trans. Plasma Sci. 1993. **21**. P. 312.
4. **Gogolides E., Sawin H.** Continuum modeling of radio-frequency glow discharges. Pt. I. Theory and results for electropositive and electronegative gases // Journ. Appl. Phys. 1992. **72**. P. 3971.

5. **Sommerer T. J., Hitchon W. N. G., Harvey R. E. P., Lawler J. E.** Self-consistent kinetic calculations of helium rf glow discharges // *Phys. Rev.* 1991. **A43**. P. 4452.
6. **Surendra M., Graves D.** Particle simulations of radio-frequency glow discharges // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 1991. **19**. P. 144.
7. **Yan M., Goedheer W. J.** A PIC-MC simulation of the effect of frequency on the characteristics of VHF SiH₄/H₂ discharges // *Plasma Sources Sci. Technol.* 1999. **8**. P. 349.
8. **Kushner M. J.** A phenomenological model for surface deposition kinetics during plasma and sputter deposition of amorphous hydrogenated silicon // *Journ. Appl. Phys.* 1987. **62**, N 12, P. 4763.
9. **Швейгерт В. А.** Численное моделирование стационарной функции распределения электронов в слабоионизованном газе в неоднородных электрических полях // *ПМТФ*. 1989. № 5. С. 3.
10. **Sommerer T. J., Kushner M. J.** Numerical investigation of the kinetics and chemistry of RF glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂, He/CF₄/O₂, and SiH₄/NH₃ using a Monte Carlo-fluid hybrid model // *Journ. Appl. Phys.* 1992. **71**. P. 1654.
11. **Sommerer T. J., Kushner M. J.** Monte Carlo-fluid model of chlorine atom production in Cl₂, HCl, and CCl₄ radio-frequency discharges for plasma etching // *Journ. Vac. Sci. Technol.* 1992. **B10**. P. 2179.
12. **Ventzek P. L. G., Grapperhaus M., Kushner M. J.** Investigation of electron source and ion flux uniformity in high plasma density inductively coupled etching tools using two-dimensional modeling // *Journ. Vac. Sci. Technol.* 1995. **B12**. P. 3118.
13. **Березин Ю. Б., Вшивков В. А.** Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980.
14. **Birdsall C. K.** Particle-in-cell charged-particle simulations plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 1991. **19**, N 2. P. 65.
15. **Numerical Algorithms Group.** NAG Fortran Library // <http://www.nag.co.uk/numeric/FL/FLdocumentation.asp>
16. **Григорьев Ю. Н., Вшивков В. А., Федорук М. П.** Численное моделирование методами частицы-в-ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004.

Поступила в редакцию 28 ноября 2006 г.