

Рисунок 2. Пример работы алгоритма адаптации математической модели

Основные проблемы при создании точной математической модели возникают из-за большой погрешности датчиков измерения технологических параметров, их невысокой надежности, отказов каналов связи, большого запаздывания при передаче информации по уровням управления, отсутствия возможности измерения параметров во всех точках технологического процесса, необходимых для адекватной работы математических моделей. Все это приводит к излишней идеализации модели сложного технологического процесса. Для оценки достоверности используются сравнение измеренного значения параметра с его значением, рассчитанным по математической модели. Однако параметры реального процесса являются нестационарными, что приводит к ошибкам при расчетах по модели. Для устранения указанного недостатка необходимо применять методы адаптации. Предлагаемый алгоритм позволяет производить адаптацию математической модели в реальном времени.

Алгоритм начинает работу со сбора текущих параметров  $A_j$ ,  $B_j$ ,  $C_j$ , необходимых для составления математической модели и расчета значения контролируемого параметра  $P_j$ . Одновременно происходит снятие значения контролируемого параметра с резервированных датчиков  $P_i^u$ ,  $P_{i+1}^u$ . В последующей обработке участвует только то значение, которой достоверно  $P_i^{u,d}$ . Достоверность полученных значений проверяется экспертной системой. При первом измерении предполагается, что датчик гарантированно выдает достоверное значение. Расхождение значений полученных от достоверного датчика и рассчитанного с помощью математической моделью является параметром адаптации  $K_s$ . Полученный параметр адаптации применяется для расчета адаптивного значения в следующий момент опроса датчиков  $P_j^a$ . Параметр

адаптации постоянно корректируется, адаптируя математическую модель в реальном времени. Алгоритм адаптации представлен на рис.1 Пример работы данного алгоритма представлен на рис.2, из которого видно, что параметр адаптации  $K$  изменяется на каждом шаге измерений, обеспечивая повышение точности расчетов по математической модели.

Таким образом, предложенный алгоритм адаптации математической модели обеспечивает повышение достоверности технологической информации в резервированных каналах.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТЖИГА РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ЛИТИИ СОДЕРЖАЩЕМ КРЕМНИИ

Богатов Н.М., Коваленко М.С.

Кубанский государственный университет,  
Краснодар

Радиационные дефекты являются одной из причин деградации кремниевых полупроводниковых приборов. Возрастающие требования к радиационной стойкости стимулируют создание математических моделей с целью анализа возможностей восстановления параметров этого материала.

Атомы лития взаимодействуют с радиационными дефектами в кремнии. В работе рассчитано изменение концентрации вторичных радиационных дефектов (ВРД) в течение изотемпературного отжига литий содержащего кремния. Модель кинетики дефектообразования включает 2 этапа. На первом этапе ВРД образуются под действием ионизирующих частиц с энергией  $E$ , интенсивностью потока  $I_0$  за время облучения  $t_f$  при температуре  $T_{об}$ . На втором этапе ионизирующее излучение отсутствует, проводится отжиг при температуре  $T_{от} > T_{об}$ , малоподвижные комплексы  $LiO$  распадаются, а свободные атомы  $Li$  пассивируют вторичные радиационные дефекты, концентрации

которых уменьшаются и выходят на стационарные значения.

Временная зависимость концентраций ВРД описывается системой уравнений квазихимических реакций. В кремнии, выращенном методом Чохральского, эта система приводится к виду

$$\frac{dN_A}{dt} = G_V I_1 N_{O(I)} - (G_{Si} I_2 + 2K_{Li,A} N_{Li}) N_A, \quad (1)$$

$$\frac{dN_E}{dt} = G_V \gamma_{V,P/V,O} I_1 N_{P(S)} - (G_{Si} \gamma_{Si,E/Si,A} I_2 + K_{Li,E} N_{Li}) N_E, \quad (2)$$

$$\frac{dN_K}{dt} = G_{Si} \gamma_{Si,C/Si,A} I_2 N_{C(S)}, \quad (3)$$

$$\frac{dN_{SiB}}{dt} = G_{Si} \gamma_{Si,B/Si,A} I_2 N_{B(S)} - G_V \gamma_{V,SiB/V,O} I_1 N_{SiB}, \quad (4)$$

$$\frac{dN_W}{dt} = G_W - 2K_{Li,W} N_{Li} N_W, \quad (5)$$

$$\frac{dN_{LiW}}{dt} = 2K_{Li,W} N_{Li} N_W - K_{Li,LiW} N_{Li} N_{LiW}, \quad (6)$$

$$\frac{dN_{Li_2W}}{dt} = K_{Li,LiW} N_{Li} N_{LiW}, \quad (7)$$

$$\frac{dN_{LiA}}{dt} = G_V g_{V,LiO/V,O} I_1 N_{LiO} + 2K_{Li,A} N_{Li} N_A - (G_{Si} \gamma_{Si,LiA/Si,A} I_2 + K_{Li,LiA} N_{Li}) N_{LiA}, \quad (8)$$

$$\frac{dN_{Li_2A}}{dt} = K_{Li,LiA} N_{Li} N_{LiA}, \quad (9)$$

$$\frac{dN_{LiE}}{dt} = K_{Li,E} N_{Li} N_E, \quad (10)$$

$$\frac{dv_{ev} N_{do}}{dt} = v_{vdo} G_{do} (v_{vdo}) - K_{Li,do(v_{ev})} N_{Li} v_{ev} N_{do}, \quad (11)$$

$$N_{do} = \begin{cases} G_{do} (v_{vdo}) t & \text{при } t \leq t_\Phi \\ G_{do} (v_{vdo}) t_\Phi & \text{при } t > t_\Phi \end{cases}, \quad (12)$$

$$N_{Li} = \gamma_{LiO/Li,O} I_3 \left[ \gamma_{LiO/Li,O} + N_{O(I)} + 2\gamma_{Li,A/Li,O} N_A + \gamma_{Li,LiA/Li,O} N_{LiA} + 2\gamma_{Li,W/Li,O} N_W + \gamma_{Li,LiW/Li,O} N_{LiW} + \gamma_{Li,E/Li,O} N_E + \gamma_{Li,do(v_{ev})/Li,O} v_{ev} N_{do} \right]^{-1}, \quad (13)$$

$$N_{LiO} = I_3 - N_{Li}, \quad (14)$$

$$N_{O(I)} = N_{O(I)}^0 - \left( N_A + N_K + N_{LiO} + N_{LiA} + N_{Li_2A} \right), \quad (15)$$

$$N_{P(S)} = N_{P(S)}^0 - (N_E + N_{LiE}), \quad (16)$$

$$N_{C(S)} = N_{C(S)}^0 - N_K, \quad (17)$$

$$N_{B(S)} = N_{B(S)}^0 - N_{SiB}, \quad (18)$$

$$I_1 = \left[ N_{O(I)} + \gamma_{V,P/V,O} N_{P(S)} + \gamma_{V,SiB/V,O} N_{SiB} + \gamma_{V,LiO/V,O} N_{LiO} \right]^{-1},$$

$$I_2 = \left[ N_A + \gamma_{Si,C/Si,A} N_{C(S)} + \gamma_{Si,B/Si,A} N_{B(S)} + \gamma_{Si,E/Si,A} N_E + \gamma_{Si,LiA/Si,A} N_{LiA} \right]^{-1},$$

$$I_3 = N_{Li}^0 - \left( N_{LiW} + 2N_{Li_2W} + N_{LiA} + 2N_{Li_2A} + N_{LiE} + (v_{vdo} - v_{ev}) N_{do} \right).$$

Уравнения (1–18) содержат следующие переменные концентрации:  $N_A$  – А-центров,  $N_E$  – Е-центров,  $N_K$  – К-центров,  $N_{SiB}$  – комплексов SiB,  $N_W$  – дивакансий,  $N_{LiW}$  – комплексов LiW,  $N_{Li_2W}$  – комплексов  $Li_2W$ ,  $N_{LiA}$  – комплексов LiA,  $N_{Li_2A}$  – комплексов  $Li_2A$ ,  $N_{LiE}$  – комплексов LiE,  $N_{do}$  – областей разупорядочения с средним числом вакансий  $v_{ev}$ ,  $N_{Li}$  – атомов Li,  $N_{LiO}$  – комплексов LiO,  $N_{O(I)}$  – атомов внедрения кислорода,  $N_{P(S)}$  – атомов замещения фосфора,  $N_{C(S)}$  – атомов замещения углерода,  $N_{B(S)}$  – атомов замещения бора.

Коэффициенты вида  $\gamma_{U,X/Y,Z} = K_{U,X}/K_{Y,Z}$  ( $K_{X,Y}$  – константы прямых реакций дефектов типа X с дефектами типа Y) определялись из экспериментальных или теоретических данных;  $G_X$  – скорость генерации дефекта X рассчитывалась для каждого типа ионизирующих частиц. Модель применима в области температур, в которой комплексы, являющиеся продуктами квазихимических реакций, стабильны, поэтому константы обратных реакций не входят в уравнения (1–14), кроме того, зависимостью коэффициентов вида  $\gamma_{U,X/Y,Z}$  от температуры можно пренебречь.

Свойства материала зависят от начальных концентраций основных примесей: донорных атомов фосфора  $N_{P(S)}^0$ , лития  $N_{Li}^0$  и акцепторных атомов бора  $N_{B(S)}^0$ , – а также сопутствующих примесей кислорода  $N_{O(I)}^0$  и углерода  $N_{C(S)}^0$ .

Уравнения (1–18) решались численно. Для уравнений (1–11) задавались следующие начальные условия: на первом этапе:

$$N_A(0) = N_E(0) = N_K(0) = N_{SiB}(0) = N_W(0) = N_{LiW}(0) = N_{Li_2W}(0) = N_{LiA}(0) = N_{Li_2A}(0) = N_{LiE}(0) = v_{ev}(0) = 0;$$

на втором этапе

$$N_A(0) = N_A(t_\Phi), \quad N_E(0) = N_E(t_\Phi), \quad N_K(0) = N_K(t_\Phi), \\ N_{SiB}(0) = N_{SiB}(t_\Phi), \quad N_W(0) = N_W(t_\Phi), \quad N_{LiW}(0) = N_{LiW}(t_\Phi), \\ N_{Li_2W}(0) = N_{Li_2W}(t_\Phi), \quad N_{LiA}(0) = N_{LiA}(t_\Phi), \\ N_{Li_2A}(0) = N_{Li_2A}(t_\Phi), \quad N_{LiE}(0) = N_{LiE}(t_\Phi), \quad v_{ev}(0) = v_{ev}(t_\Phi).$$

В результате моделирования определены зависимости концентрации ВРД от начальной концентрации Li, температуры и времени отжига в кремнии n- и p-типа, облученном потоком электронов или протонов. Оптимальные значения концентрации лития, температуры и времени отжига, соответствующие условиям интенсивного облучения, позволяют существенно

повысить время жизни носители заряда в облученном кремнии.

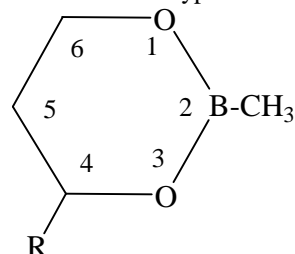
### КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ 2,4-ЗАМЕЩЕННЫХ 1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНОВ

Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Уфимский государственный  
нефтяной технический университет,  
Уфа

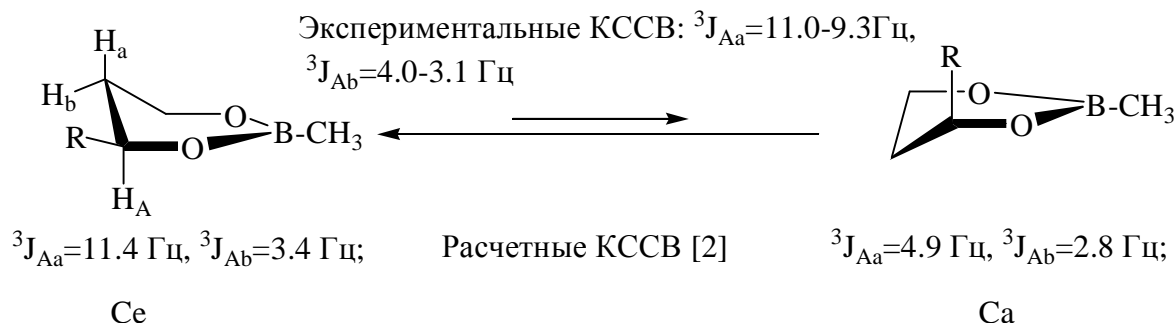
Интерес к строению циклических эфиров борных кислот обусловлен электронными и стерическими внутримолекулярными взаимодействиями, вызванными присутствием электронодефицитного атома бора и электронодонорных гетероатомов кислорода в одной молекуле [1-3]. Известно, что поверхность потенциальной энергии (ППЭ) таких молекул содержит минимумы, отвечающие конформерам *софы* с различной ориентацией заместителей в углеродной части кольца (*Ce*, *Ca*) и максимум, соответствующий 2,5-*твист*-форме (2,5-*T*) [4-6]. Целью настоящей работы является конформационный анализ 2,4-замещенных 1,3,2-диоксаборинанов **1-3** (выявление минимумов и максимумов на ППЭ и барьеров перехода между ними) с использованием спектроскопии ЯМР <sup>1</sup>H и компьютерного моделирования конформационной изме-

ризации методом Хартри-Фока в рамках эмпирического (ММ+), полуэмпирических (AM1 и PM3) и неэмпирических (STO-3G, 3-21G) приближений (программное обеспечение HyperChem [7]).



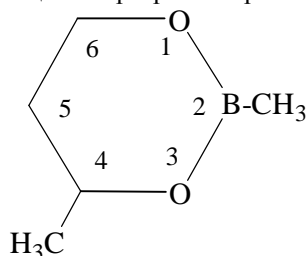
R=CH<sub>3</sub> (1), C<sub>5</sub>H<sub>11</sub> (2), C<sub>6</sub>H<sub>13</sub> (3)

Для молекул 4-алкил-1,3,2-диоксаборинанов, благодаря снижению числа несвязанных взаимодействий из-за плоской конфигурации тригонального атома бора, можно ожидать более высокого – по сравнению с однотипно замещенными 1,3-диоксанами – содержания альтернативного конформера. Это должно отразиться на параметрах конформационного равновесия (значения свободной конформационной энергии заместителя у атома C<sup>4</sup> ΔG<sup>0</sup> и расчетной высоты активационного барьера ΔE<sup>‡</sup>). Данные настоящей работы показывают, что для циклических эфиров **1-3** характерна равновесная форма *Ce*.



На примере эфира **1** показано (ММ+), что наиболее оптимальный маршрут инверсии кольца связан с изменением (сканированием) торсионного угла 1-6-5-4 (табл.1). Сканирование углов 1-2-3-4 и 3-4-6-1 к инверсии не ведет.

**Таблица 1.** Барьеры инверсии (ккал/моль) конформеров *Ce* ↔ *Ca* эфира (1)



Угол	2-3-4-5	3-4-5-6	1-6-5-4	2-1-6-5	2-3-5-6
ΔE <sup>‡</sup>	8.2	7.4	7.0	7.4	8.6
ПС	2,5-Т	2,5-Т	2,5-Т	2,5-Т	2,5-Т
Угол	2-1-5-4	2-1-6-4	2-3-4-6	1-2-3-5	4-5-6-2
ΔE <sup>‡</sup>	9.1	18.6	17.0	36.4	9.8
ПС	2,5-Т	2,5-Т	2,5-Т	C*	2,5-Т

\* Конформация *софы* с планарным фрагментом 3-4-5-6.