

02;15

Нейросетевой метод восстановления начального профиля концентрации примеси при ионном послойном анализе

© Д.В. Широкопад, Г.В. Корнич

Запорожский национальный технический университет, Запорожье,
Украина
E-mail: slejpnir@zntu.edu.ua

Поступило в Редакцию 15 октября 2015 г.

Предлагается новый подход к решению задачи восстановления концентрационного профиля примеси при ионном послойном анализе. Алгоритм восстановления профиля основан на использовании искусственной нейронной сети. Входные значения для сети — поверхностные концентрации примеси в последовательные моменты времени послойного анализа. Искусственная нейронная сеть натренирована на разные толщины примесного слоя и глубины его залегания, а также на разные значения параметров используемого в данной модели диффузионно-подобного уравнения ионного перемешивания.

Распыление поверхности твердых тел при бомбардировке атомными частицами имеет широкое применение как в академических исследованиях, так и в различных технологических приложениях. Несмотря на то что задача восстановления начального профиля концентрации примеси по глубине при ионном послойном анализе возникла с появлением теории распыления и соответствующих экспериментальных результатов [1,2], поиск эффективных методов ее решения актуален и сейчас. Целью работы является демонстрация принципиальной возможности использования нейросетевого подхода к решению подобных задач, а также исследование распознаваемости профиля при изменении параметров распыления и перемешивания.

В модели используется нейронная сеть с одним скрытым слоем [3,4]. Моделирование распыления кристалла реализуется с помощью диффузионно-подобного уравнения ионного перемешивания [5].

Поток ионов бомбардирует образец с внедренным примесным слоем. В начальный момент времени примесный профиль концентрации имеет

прямоугольную форму по глубине образца с постоянной начальной относительной концентрацией, нормированной на единицу. Эволюция примеси под действием ионного пучка описывается уравнением диффузии с конвективным слагаемым, граничными условиями третьего рода и однородной ограниченной областью перемешивания [6–7]:

$$\begin{cases} \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + V \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}, \\ \frac{I Y_1}{N} C(0, t) = D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} + VC(0, t), \\ D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=L} + VC(L, t) = VC(L + Vt, 0), \\ C(x, 0) = C_0(x), \end{cases} \quad (1)$$

где x — координата, отсчитываемая от текущей поверхности образца в глубину мишени; t — время бомбардировки; D — коэффициент перемешивания; I — плотность бомбардирующего пучка ионов; L — размер области перемешивания; Y_1 — коэффициент распыления примеси; Y_2 — коэффициент распыления матрицы; V — скорость движения распыляемой поверхности. Для решения уравнения (1) используется схема Кранка–Николсона с приведением его к решению трехдиагональной системы линейных уравнений [8].

Процесс моделировался в течение 80 с. При численном решении производилось равномерное разбиение мишени на 200 точек по глубине x и 400 точек по времени t . Для тренировки нейронной сети использовались первые 300 точек поверхностной концентрации в зависимости от времени, поскольку затем примесь практически полностью распыляется. Далее для восстановления начального профиля концентрации примеси использовалась искусственная нейронная сеть (ИНС) прямого распространения [9]. Входными сигналами для нейронной сети выступали значения поверхностного профиля концентрации примеси в разные моменты времени. В качестве выходных сигналов используются координаты переднего и заднего края, изначально предполагаемого в данной модели, прямоугольного слоя примеси.

Искусственная нейронная сеть реализована на базе сети с одним скрытым слоем с сигмоидальной функцией активации. Нейронная сеть состоит из 300 нейронов на входном слое, 25 нейронов на скрытом слое и 2 нейронов на выходном слое. Каждый вход сети соединен со всеми скрытыми нейронами, а результат работы каждого скрытого нейрона подается на вход каждому из нейронов-выходов (рис. 1). Оптимальное количество нейронов на скрытом слое определялось эмпирическим

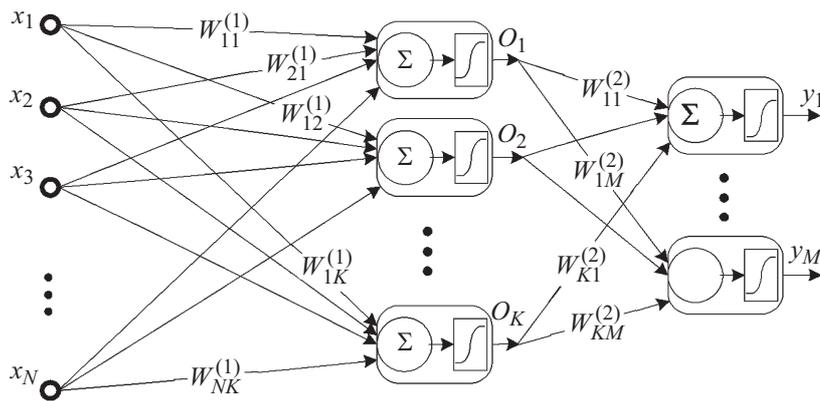


Рис. 1. Структура нейронной сети.

путем с учетом роста объема вычислений. Также экспериментально была подобрана величина шага, как компромисс между сохранением устойчивости сети и временем ее обучения. Весовые коэффициенты $W^{(1)}$ определялись методом обратного распространения ошибки, весовые коэффициенты $W^{(2)}$ — по правилу Видроу–Хоффа [10]. Алгоритм обратного распространения ошибки представляет собой градиентный спуск в многомерном пространстве весов.

В качестве обучающей выборки был создан набор из 360 модельных образцов, в которых варьируются глубина залегания примеси, плотность бомбардирующего пучка и коэффициент распыления примеси. В обучающей выборке глубина залегания примеси изменялась от 54 до 70.2 Å, плотность бомбардирующего потока варьировалась от $1 \cdot 10^{15}$ до $1.5 \cdot 10^{15}$ ion/(cm² · s). Коэффициент распыления примеси принимал значения от 1 до 2 atom/ion. При этом значения других параметров уравнения перемешивания были следующие: $L = 5.4 \cdot 10^{-7}$ cm, $Y_2 = 1.0$ atom/ion, $N_0 = 4.47 \cdot 10^{22}$ cm⁻³, где N_0 — концентрация атомов меди в мишени. Коэффициент ионного перемешивания оценивался как $D = 10^{-31} \cdot I$ cm²/s, скорость движения распыляемой поверхности $V = I \cdot Y_2 / N_0$.

Обучение сети происходило в течение нескольких часов на обычной рабочей станции. При этом проходило более 500 тысяч эпох.

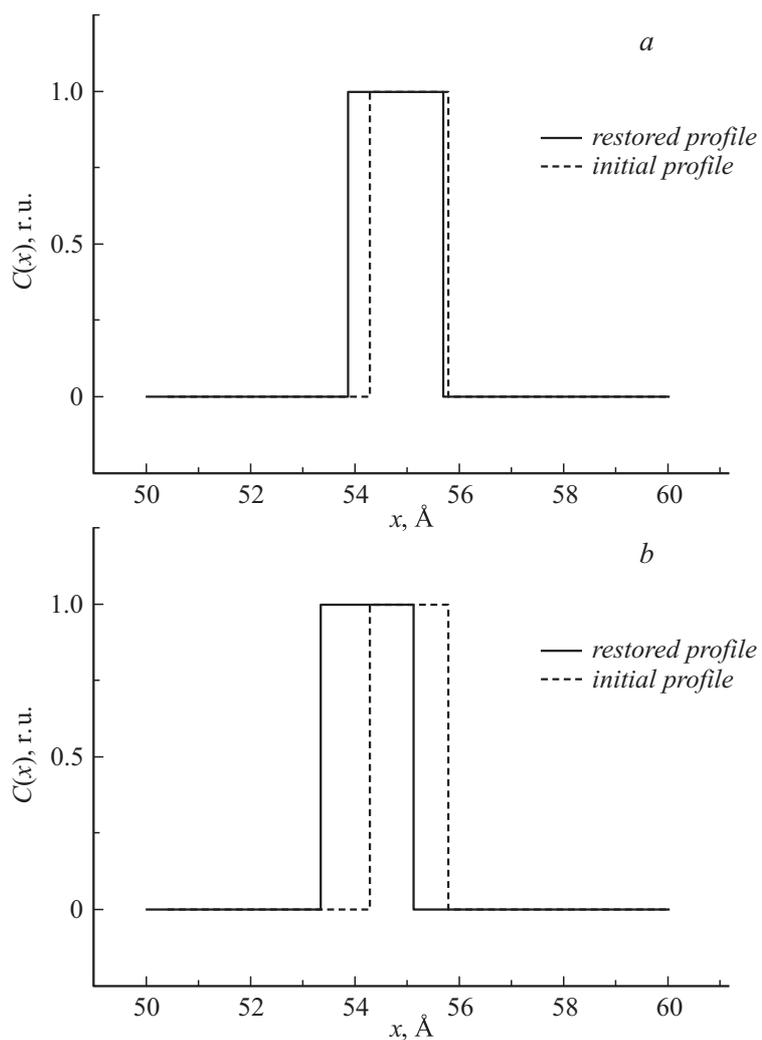
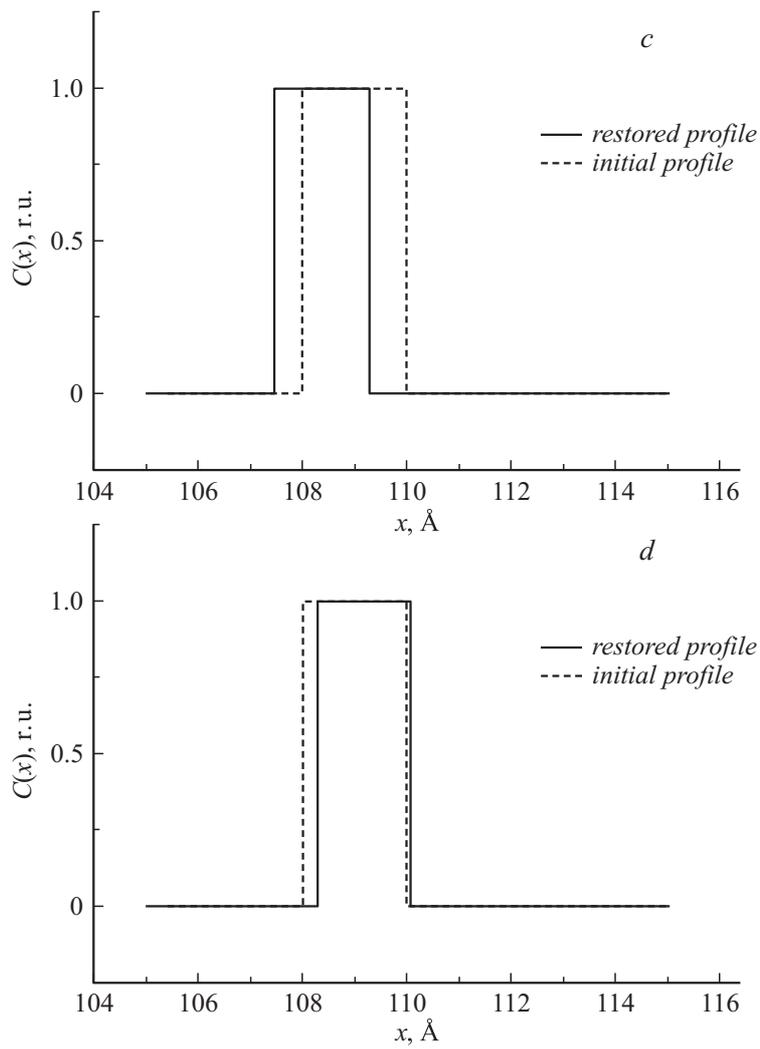


Рис. 2. Значения координат восстановленного и оригинального начального профиля концентрации для случаев: *a* — $I = 1.5 \cdot 10^{15}$ ion/(cm² · s), $Y_1 = 1.8$ atom/ion; *b* — $I = 1.25 \cdot 10^{15}$ ion/(cm² · s), $Y_1 = 1$ atom/ion; *c* — $I = 1.5 \cdot 10^{15}$ ion/(cm² · s), $L = 30$ Å; *d* — $I = 1.25 \cdot 10^{15}$ ion/(cm² · s), $L = 54$ Å.

**Рис. 2** (продолжение).

Результаты тестирования сети приведены на рис. 2, *a, b*. Видно, что сеть демонстрирует хорошие результаты на тестирующем множестве.

Также сеть обучалась на выборке из 300 образцов, в которой варьируются глубина залегания примеси, размер области перемешивания и плотность бомбардирующего пучка ионов. В обучающей выборке глубина залегания примеси изменялась от 100 до 109 Å, размер области перемешивания варьируется от 20 до 100 Å. Плотность бомбардирующего потока принимала значения, указанные выше для первого набора экспериментов. Тестирование сети для данного случая (рис. 2, *c, d*) также показывает высокую точность восстановления начального профиля примеси.

Таким образом, в работе исследована возможность использования нейросетевого подхода к задаче восстановления начального профиля концентрации примеси при ионном послойном анализе в рамках использования диффузионной модели ионного перемешивания. Погрешность полученных результатов была в пределах 2% от общего размера мишени, что превышало точность существующих методов [11]. Также нейронная сеть показала устойчивость к изменениям в параметрах ионного распыления и перемешивания. Данные результаты позволяют говорить о перспективности применения элементов искусственного интеллекта в программном обеспечении промышленных и исследовательских установок, используемых для анализа компонентного состава приповерхностного слоя твердых тел методом ионного послойного анализа.

Список литературы

- [1] King B.V. // Nucl. Instr. Meth. B. 1985. V. 7/8. N 2–3. P. 793–797.
- [2] Carter G. // Nucl. Instr. Meth. B. 1989. V. 36. N 4. P. 404–411.
- [3] Хайкин С. Нейронные сети: полный курс. 2-е изд.: Пер. с англ. М.: Издат. дом „Вильямс“, 2006. 1104 с.
- [4] Dumin O.M., Dumina O.O., Shyrokorad D.V. // Proc. 3rd European Conference on Antennas and Propagation (Eucap-2009). Berlin. Germany. March 23–27. 2009. P. 235–238.
- [5] Littmark U., Hofer W.O. // The Theory of Recoil Mixing in Solids. Thin Film and Depth Profile Analysis. Berlin: Springer-Verlag, 1984. P. 159.
- [6] King B.V., Tonn D.G., Tsong I.S.T. // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1984. V. 27. P. 103.

- [7] *Kornich G.V., Betz G., Bazhin A.I.* // NIM. B. 1999. B. 152. P. 437.
- [8] *Hamming R.W.* Numerical Methods for Scientists and Engineers. 2nd ed. Mineola: Dover Publications, 1987. 752 p.
- [9] *Widrow B.* // Proc. IEEE. 1990. V. 78. N 9. P. 1415–1442.
- [10] *Shirokorad D.V., Dumin A.N., Dumina O.A., Katrich V.A.* // Telecommun. Radio Eng. 2011. V. 70. N 10. P. 873–881.
- [11] *Miccio L.A., Kummali M.M., Montemartini P.E.* et al. // J. Chem. Phys. 2011. V. 135. P. 064704.