

Finansējuma saņēmēja nosaukums
Latvijas Universitāte

Īstenotā projekta nosaukums
„Jaunas matemātiskās modelēšanas instrumentu sistēmas izstrāde funkcionālo nano- un mikroelektronikas pusvadītāju materiālu ražošanas tehnoloģijām”

Īstenotā projekta Nr.
2011/0002/2DP/2.1.1.1.0/10/APIA/VIAA/085

Projekta LU reģistrācijas Nr.
ESS2011/121

Projekta zinātniskais vadītājs
Dr.-Phys., asoc. prof. Andris Muižnieks

Atskaite par periodu 01.07.2012. – 31.12.2012.

1. Ievads

Projekta ietvaros tiek izveidoti nanomērogu, kinētiskie un mikroskopiskie modeļi, kas papildinās makroskopisko matemātisko modeļu un programmu sistēmu, kas tiek izmantota funkcionālo un pusvadītāju materiālu ražošanas tehnoloģiju matemātiskajā modelēšanā. Tas ļauj analizēt gan tehnoloģisko procesu makroskopiskos, gan nanomērogu, kinētiskos un mikroskopiskos procesus, gan to saistību.

Pārskata periodā tika strādāts pie sekojošām aktivitātēm:

2. Nanomērogu procesu modeļiem atbilstošo skaitlisko metožu izstrāde (2011.g. 4. kvartāls – 2013.g. 1. kvartāls);
3. Nanomērogu procesu modelēšanas rezultātu vidējošanas metodikas izstrāde, sagatavojot lokālas parametrizētus nepārtrauktas vides sakarības makroskopiskajiem modeļiem; atbilstošo skaitlisko metožu izstrāde (2012.g. 2. kvartāls – 2013.g. 2. kvartāls);
4. Nanomērogu modeļu un makroskopisko modeļu sasaiste, izmantojot hierarhisko daudzņēmrogu modelēšanas pieeju. Makroskopisko modeļu modifikācija, lai tie spētu integrēt nanomērogu modeļu rezultātus kā parametrizētas nepārtrauktās vides sakarības; atbilstošo skaitlisko metožu izstrāde. Aprēķinu piemēri (2012.g. 2. kvartāls – 2013.g. 3. kvartāls).

Pārskata periodā tika galvenokārt strādāts pie 3. aktivitātes, kurā tika izstrādāta metodika, kura ļauj molekulārās dinamikas simulācijas rezultātus (atomārais mērogs) vidējot, izmantojot Vulfa konstrukciju. Vidējošanas rezultāti tika izmantoti, lai iegūtu Voronkova leņķiskās diagrammas, kas kā lokālas parametrizētus nepārtrauktas vides sakarības var tikt izmantotas kristālu augšanas makroskopiskajiem modeļiem

Pārskata periodā iegūtie rezultāti tika prezentēti konferencē Vācijā 2012. gada novembrī „12. Kinetikseminar & 8. Workshop Angewandte Simulation in der Kristallzuechtung, Potsdam, 20.-21.11.2012” piecos mutiskajos referātos.

- 1) Molecular dynamics verification of Voronkov's models for the shape of a growing silicon crystal. Andrejs Sabanskis, Girts Barinovs, Andris Muiznieks.
- 2) 2D modeling of Argon flow heat transfer influence in FZ silicon crystal growth. Andrejs Sabanskis, Andris Muiznieks.
- 3) Crystal shape 2D modeling for transient CZ crystal growth. Kristaps Bergfelds, Andrejs Sabanskis, Andris Muiznieks.
- 4) 3D calculation of the shape of melt free surface in FZ silicon crystal growth. Matīss Plāte, Armands Krauze, Andrejs Sabanskis, Andris Muiznieks.
- 5) 3D modelling of radial resistivity variation in FZ process grown crystal and comparison with experiment. Kirils Surovovs, Karlis Janisels, Matiss Plate, Andrejs Sabanskis, Andris Muiznieks.

Pārskata periodā ir sagatavota iesniegšanai publikācija žurnālam „Journal of Crystal Growth” (ELSEVIER):

G. Barinovs, A. Sabanskis, A. Muiznieks. „Construction of angular Voronkov diagrams for silicon using molecular dynamics simulations”.

2. Galveno rezultātu kopsavilkums

Mikroskopiskie aprēķini tika veikti izmantojot molekulārās dinamikas metodi, tika lietota pakete LAMMPS, skat. att. 1. Aplūkotā silīcija atomu (apmēram 7000 atomu) sistēma ir parādīta attēlā 2. Tika izstrādāta metode molekulārās dinamikas rezultātu vidējošanai, lai iegūtu dotajai kristalogrāfiskajai orientācijai atbilstošu Vulfa konstrukciju, skat. att. 3. Attēlā 4. ir parādīta Heringa vienādojuma grafiskā risināšana izmantojot iegūto Vulfa konstrukciju. Grafiskā risinājuma rezultāts ir Voronkova leņķiskā diagramma, kas ir parādīta att. 5. Lai varētu Voronkova diagrammas izmantot, tika turpināts darbs pie makroskopiskās kristalizācijas procesa modelēšanas, makroskopisks nestacionārs kristāla formas aprēķins Czochralski kristālu audzēšanas procesā ir parādīts 6. att.

Molecular dynamics using LAMMPS

Equations of motion

- Newton's second law

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}$$

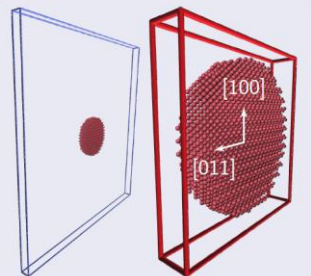
Potential

- $\mathbf{F}_i = -\frac{d}{d\mathbf{r}_i} V$
- $V = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$

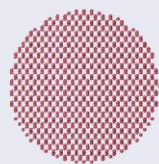
- Potential – **Stillinger-Weber** three-body potential
- Boundary conditions – **periodic**
- The system is **melted** and then **frozen** to avoid result dependence on initial conditions
- **Initial shape** is close to the final one for faster convergence
- **Atom count** – ca. 7,000
- **Timestep** 1 fs = 10^{-15} s
- **Averaging time** 10 ns = 10^{-8} s (i.e., 10^7 time steps)

Att. 1. Molekulārās dinamikas metodes pamatideja un raksturīgie parametri.

System set-up



- Initial geometry – cylindrical, diamond structure
- Thickness – ca. 1.5 nm
- Atom count – ca. 7,000

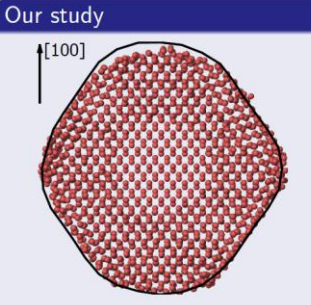


- Diameter – about 8 nm
- Central atoms – fixed
- Inner layer
 - initial stage – no thermostat
 - final stage – Langevin thermostat
- Outer layer
 - initial stage – Langevin thermostat
 - final stage – no thermostat

Att. 2. Aplūkotā silīcija atomu sistēma molekulārās dinamikas aprēķiniem.

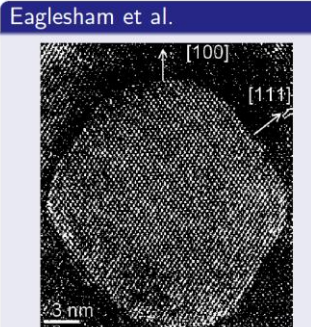
Equilibrium shape

Our study



- Colored balls – snapshot of a MD simulation
- Solid line – averaged equilibrium shape

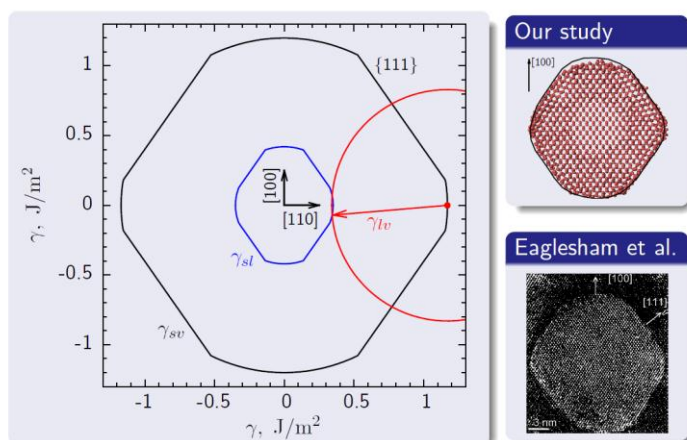
Eaglesham et al.



- Experimentally obtained equilibrium shape of voids in silicon crystal

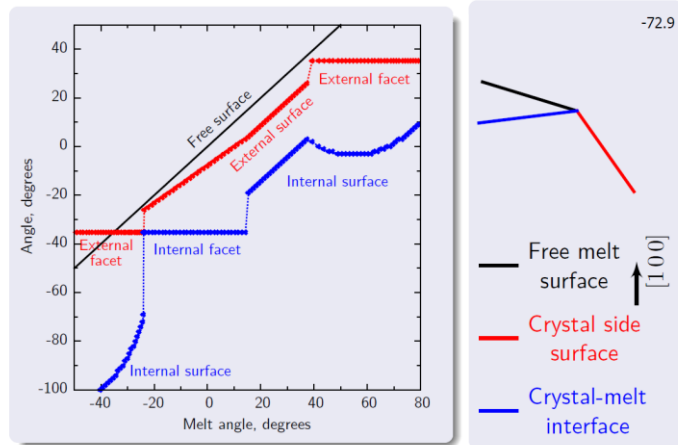
Att. 3. Molekulārās dinamikas rezultātu vidējošana, Vulfa konstrukcijas iegūšana un salīdzinājums ar eksperimenta rezultātiem no literatūras.

Wulff construction



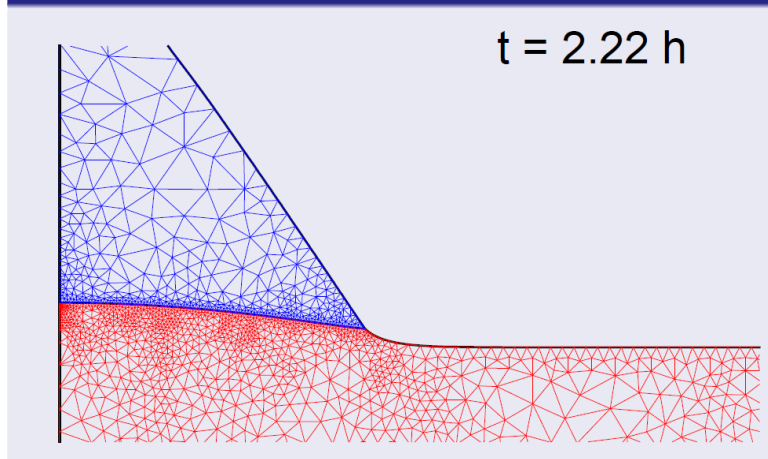
Att. 4. Heringa vienādojuma grafiskā risināšana izmantojot iegūto Vulfa konstrukciju.

Voronkov angular diagram



Att. 5. Grafiskā risinājuma rezultāts - Voronkova leņķiskā diagramma.

Boundary shape change and mesh generation



Att. 6. Makroskopisks nestacionārs kristāla formas aprēķins Czochralski kristālu audzēšanas procesā.