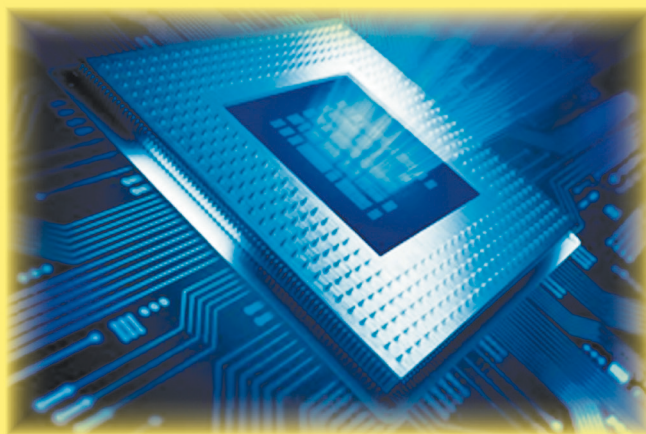


МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В материаловедении электронных компонентов

МММЭК-2023

Материалы V Международной конференции



ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Информатика
и Управление
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



НИИМЭ
НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ЭЛЕКТРОНИКИ

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ
МАТЕРИАЛЫ
И ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА
ИНФОРМАЦИОННЫХ
И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
СИСТЕМ

23-25 октября 2023г. г. Москва Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Вычислительный центр Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
факультет вычислительной математики и кибернетики
Научный совет РАН «Фундаментальные проблемы элементной базы
информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов для их создания»
Консорциум «Перспективные материалы и элементная база информационных
и вычислительных систем»

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ в материаловедении электронных компонентов МММЭК–2023

Материалы V международной конференции
23–25 октября 2023 г., Москва

MATHEMATICAL MODELING in materials science of electronic components ICM3SEC–2023

Proceedings of the international conference
October 23–25, 2023 Moscow, Russia



МОСКВА – 2023

УДК 519.6.517.958.533.6

ББК 22.2.2218

М34



<https://elibrary.ru/vlrnq>

Ответственный редактор:

К. К. Абгарян – д-р.физ.-мат.наук, главный научный сотрудник,
руководитель отдела ФИЦ ИУ РАН

Математическое моделирование в материаловедении электрон-
М34 **ных компонентов.** МММЭК–2023. 23–25 октября 2023 г., Москва :
Материалы V Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс,
2023. – 172 с. : ил.

ISBN 978-5-317-07069-4

<https://doi.org/10.29003/m3614.978-5-317-07069-4>

Сборник включает в себя научные работы, отражающие современные мировые достижения в области материаловедения электронных компонентов и представляет новые методы математического моделирования и программные решения для разработки прикладных программных систем.

Для специалистов в области вычислительного материаловедения, прикладной математики, математического моделирования, проектирования и автоматизации изделий наноэлектроники, разработчиков современных прикладных программных систем, аспирантов и студентов старших курсов университетов и технических вузов.

Ключевые слова: математическое моделирование, вычислительное материаловедение, прикладная математика, дизайн материалов, электронные компоненты, наноэлектроника, прикладные программные системы, нейроморфные системы.

УДК 519.6.517.958.533.6

ББК 22.2.2218

Mathematical modeling in materials science of electronic component.
ICM3SEC–2023. October 23–25, 2023, Moscow : Proceedings of the
international conference. – Moscow : MAKES Press, 2023. – 172 p.

ISBN 978-5-317-07069-4

<https://doi.org/10.29003/m3614.978-5-317-07069-4>

The book includes scientific works reflecting modern achievements in the field of materials science of electronic components and presents new methods of mathematical modeling and software solutions for the development of applied software systems.

For specialists in the field of computational materials science, applied mathematics, mathematical modeling, design and automation of nanoelectronic products, developers of modern applied software systems, graduate and postgraduate students.

Key words: mathematical modeling, computational materials science, applied mathematics, materials design, , nanoelectronics, applied software systems, neuromorphic systems.

Статьи публикуются в авторской редакции.

Использованные изображения получены из открытых источников.

ISBN 978-5-317-07069-4

© Авторы, 2023

© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2023

Abstract. In this work, molecular dynamics modeling of the processes of self-annealing of filament structures in memristors based on a-SiO₂ films of different stoichiometry and subjected to ion irradiation was performed.

Key words: SiO₂, ion implantation, memristor, imperfection, molecular dynamics, self-annealing, clustering, stochasticity.

УДК 548.55

<https://doi.org/10.29003/m3607.MMMSEC-2023/133-136>

СОПРЯЖЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ И ТЕРМООБРАБОТКЕ БЕЗДИСЛОКАЦИОННОГО МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Верезуб Наталия Анатольевна,

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,

verezub@ipmnet.ru

Простомолотов Анатолий Иванович,

д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник¹,

aprosto@inbox.ru

¹ИИПМех РАН, г. Москва

Аннотация. Рассматривается комплекс вопросов, связанных с оптимизацией процесса выращивания монокристаллов кремния методом Чохральского и процесса быстрой высокотемпературной обработки (БТО) вырезаемых пластин из этих монокристаллов. Для оптимизации температурного поля в выращиваемом монокристалле в тепловом узле монтируются специальные конструкции теплового экрана. Тепловая оптимизация конструкции такого теплового узла осуществляется на основе интегрированной тепловой математической модели. Дефектообразование рассчитывается на основе диффузионно-рекомбинационного приближения для вакансий и межузельных атомов кремния. Для процесса БТО рассчитываются профили концентрации вакансий, плотности и размер вакансионных кластеров по толщине пластины.

Ключевые слова: рост кристалла, термообработка, дефекты, моделирование.

Введение

Для метода Чохральского вопросы влияния различных сборок теплового экрана на температурное поле в растущем монокристалле кремния являются актуальными. Этому посвящен ряд

патентов ведущих фирм-производителей монокристаллического кремния. Их важность особенно актуальна для выращивания бездислокационных монокристаллов кремния большого диаметра с контролируемой природой, размером и распределением первичных ростовых микродефектов. Для теплового узла отечественной установки Редмет-90М предложена специальная конструкция теплового экрана с его водяным охлаждением [1]. В данной работе рассмотрена тепловая оптимизация конструкции этого теплового узла на основе интегрированной математической модели с использованием комплекса программ Crystmo/Marc. При моделировании дефектообразования во время выращивания монокристалла и при БТО пластин кремния для расчета концентраций вакансий и межузельных атомов кремния применялась диффузионно-рекомбинационная модель, которая была дополнена расчетом образования вакансионных кластеров в соответствии с моделью.

Моделирование тепловых процессов

Фрагмент расчетной модели Редмет-90М с такого типа экранами приведен на рис. 1.

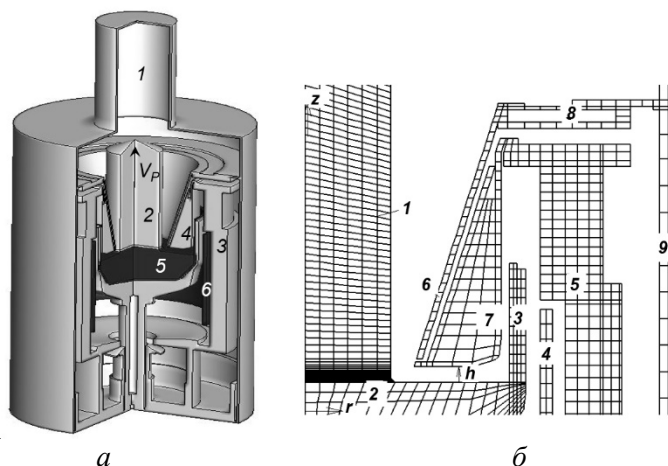


Рис. 1. Схема установки Редмет-90М (а):

1 – корпус; 2 – кристалл; 3 – боковой экран; 4 – околористалльный экран; 5 – расплав; 6 – нагреватель; фрагмент расчетной модели ТУ с околористалльным тепловым экраном (б): 1 – кристалл; 2 – расплав; 3 – тигель; 4 – нагреватель; 5 – боковой экран; 6 ÷ 8 – сборка околористалльного экрана; 9 – водоохлаждаемая стенка камеры; h – удаление экрана от поверхности расплава

Расчет основан на сопряжении глобальной радиационно-кондуктивной модели для всего объема теплового узла с трехмерной гидродинамической моделью для расплава в приближении Навье–Стокса–Буссинеска. В анализе конвективного движения расплава учитывается вынужденная конвекция от вращения кристалла и тигля и тепловая гравитационная конвекция, их параметрами являются гидродинамические критерии. Моделирование процессов дефектообразования

Дефектообразование рассчитывается на основе диффузионно-рекомбинационного приближения для вакансий и межузельных атомов кремния. Для процесса БТО рассчитываются профили концентрации вакансий, плотности и размер вакансионных кластеров по толщине пластины. Рассматриваемая задача касается анализа возможности получения бездефектного слоя в пластинах бездислокационного монокристаллического кремния при БТО. Предполагается возможность эффективного воздействия на профиль распределения плотности кислородных преципитатов по толщине путем управления аналогичными профилями распределения вакансий и межузельных атомов. Анализируются экспериментальные зависимости суммарной плотности дефектов по толщине пластины для образцов, подвергшихся БТО и последующим термообработкам, полученные разными методами и профиль плотности вакансионных кластеров, рассчитанный в данной работе. Установлено, что распределение расчетной плотности вакансионных кластеров достаточно хорошо соответствует экспериментальным данным в приповерхностном слое.

Выводы

Применительно к установке Редмет-90М показана эффективность влияния на тепловое поле и дефектообразование специальной сборки теплового экрана. Сделаны практически значимые оценки скорости вращения тигля и позиции теплового экрана. Результаты расчетов вакансионной кинетики и агломерации при БТО позволили выбрать оптимальный термический режим, обеспечивающий резкое снижение плотности вакансионных кластеров вблизи поверхности пластины, которые подтверждены экспериментальными данными.

Работа выполнена по теме госзадания ИПМех РАН (№ 123021700045-7).

Список использованных источников

1. Простомолотов А.И., Вереzub Н.А. Механика процессов получения кристаллических материалов. 2023. Изд. Дом НИТУ «МИСиС» Москва, 568 с.

CONJUGATED MODELING OF DEFECT FORMATION DURING GROWTH AND HEAT ANNEALING OF DISLOCATION-FREE SILICON SINGLE CRYSTALS

N.A. Vererzub, A.I. Prostomolotov

Abstract. The optimization of Czochralski silicon single crystal growth and the rapid thermal annealing (RTA) of cut wafers from these crystals are considered. Special thermal shields are mounted in hot zone for optimization of temperature field in growing single crystal. Thermal optimization of such hot zone is carried out on the basis of an integrated thermal mathematical model. Defect formation is calculated on basis of the diffusion-recombination approximation for vacancies and interstitial silicon atoms. The RTA profiles of vacancy concentrations, densities, sizes of vacancy clusters are calculated along wafer's thickness.

Key words: crystal growth, thermal annealing, defects, modeling.

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m3608.MMMSEC-2023/136-140>

УПОРЯДОЧЕННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АТОМОВ ФОСФОРА НА ПОВЕРХНОСТИ СИЛИЦЕНА: DFT РАСЧЕТЫ

Прохоренко Анастасия Валерьевна,

научный сотрудник^{1,3},

aitrva@pni.edu.ru

Гниденко Антон Александрович,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1,2},

Чибисов Андрей Николаевич,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник^{1,3},

Чибисова Мария Анатольевна,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1,3}

¹Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск

²ХФИЦ ФГБУН Институт материаловедения ДВО РАН, г. Хабаровск

³Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск

Аннотация. В данной работе с помощью квантово-механических расчётов исследовано поведение атомов фосфора на поверхности дву-