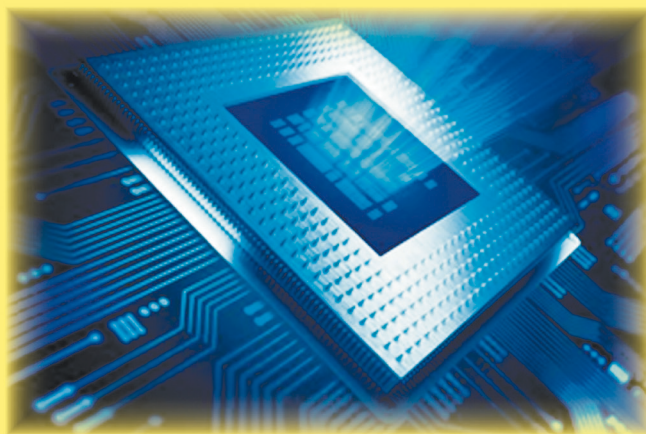


МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

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 нанoeлектроники, 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, нанoeлектроника, 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 : MAK S 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

STUDY OF FERROELECTRIC SWITCHING PROCESS IN HAFNIUM OXIDE AND HZO CRYSTALS

K.K.Abgaryan¹, A.A. Zhuravlev¹, D. L. Reviznikov¹

*¹Federal Research Centre “Computer Science and Control” (FRCCSC),
of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44,
119333 Moscow, Russia*

Abstract. paper is dedicated to study of ferroelectric switching process in hafnium oxide and HZO crystals using quantum mechanical methods.

Key words: ferroelectrics, hafnium oxide, HZO, quantum mechanical simulation, polarization.

УДК 548.55

<https://doi.org/10.29003/m3587.MMMSEC-2023/64-67>

МОДЕЛИРОВАНИЕ МГД-ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ТЕЧЕНИЕ РАСПЛАВА КРЕМНИЯ В ПРОЦЕССЕ ЧОХРАЛЬСКОГО

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*

¹ИПМех РАН, г. Москва

Аннотация. Обсуждается применение вращающегося магнитного поля (ВМП) в технологии выращивания кристаллов полупроводников из расплава методом Чохральского, в том числе рассматриваются и применяются для верификации результатов данной работы известные данные физического моделирования течений электропроводящего раствора КОН в цилиндрическом тигле в ВМП. Рассматривается математическая модель гидродинамических процессов применительно к выращиванию монокристаллов кремния диаметром 100 мм на установке Редмет-30, оснащенной ВМП-магнитом. Приводятся результаты теста расчетного профиля азимутальной скорости с данными измерений в растворе КОН. В виде диаграммы устойчивости обобщаются результаты параметрических исследований устойчивости течений расплава в зависимости от частоты и величины индукции ВМП.

Ключевые слова: рост кристалла, магнитная гидродинамика, моделирование.

Введение

Конструктивная реализация трехфазного магнитогидродинамического (МГД)-вращателя состоит в горизонтальном размещении относительно тигля трех катушек со сдвигом в горизонтальном направлении под углом 120° , подводимая мощность и частота тока в обмотке катушек могут варьироваться. В простейшем случае катушки соединяются трехфазным автотрансформатором, работающим на уровне сетевой частоты 50 Гц. Согласно обзору [1], в технологических экспериментах с МГД-вращателем обнаружены три характерных структуры полосчатой примесной неоднородности в выращенных кристаллах: 1 – малые значения питающего магниты тока не приводят к искажению хаотической структуры полос; 2 – средние значения тока приводят к их упорядочению; 3 – большие значения тока приводят к появлению на поверхности слитка периодически расположенных микрополос с большим расстоянием между ними, чем при малых и средних значениях тока (50 вместо 70 мк). При более высоких скоростях вращения кристалла и действии МГД-вращателя в последнем режиме возможно получение плоского фронта кристаллизации при отсутствии промежуточных полос и межполосных участков. В [2] проведены измерения скорости вращения расплава в ВМП.

Моделирование воздействия МГД-вращателя

Предполагается, что определяющую роль играют гидродинамические процессы в расплаве. Движение расплава кремния описывается уравнениями Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости, которые решаются совместно с уравнением переноса тепла. Периодическое изменение магнитной индукции от МГД-вращателя предполагается по следующей формуле: $B^{(\phi)} = B_0(z)\cos(\omega_0 t + \phi_0)$, что характеризуется следующими безразмерными параметрами: $Ha = R_s B_0 \sigma^{1/2} (\nu\rho)^{-1/2}$ – числом Гартмана и $Re_R = \omega_0 R_s^2 / \nu$ – магнитным числом Рейнольдса, где: σ – электропроводность кремния, B_0 – амплитуда изменения магнитного поля и ω_0 – его угловая частота. При этом в уравнения Навье-Стокса для радиальной и осевой компонент скорости (u , w) и момента азимутальной скорости (M) соответственно добавляются соответствующие компоненты объемной силы в виде следующих слагаемых:

$$F_B^u = \frac{-0.5Ha^2 u}{Re} B_0(z)^2, \quad F_B^w = \frac{Ha^2 w}{Re} B_0(z)^2, \quad F_B^M = \frac{0.5Ha^2}{Re} \left(\frac{Re_R r}{Re} - \frac{M}{r} \right) B_0(z)^2.$$

Рассмотрены результаты математического моделирования применительно к устройству для электромагнитного вращения при выращивании кристаллов кремния на установке Редмет-30: радиусы кристалла – $R_s = 5$ см и тигля – $R_c = 13.5$ см, высота расплава – $H = 15.5$ см. Обнаружено, что осевая пространственная ВМП неоднородность приводит к изменению структуры течения. Отмечается смещение максимума в распределении азимутальной компоненты скорости к боковой стенке тигля с увеличением чисел Na и Re_R . В зависимости от их значений в расплаве реализуются стационарные и колебательные режимы течения. При ВМП воздействии расплав вращается в направлении вращения магнитного поля, исключение составляет его слой вблизи боковой стенки тигля, где возникает вертикальный каскад вихрей. Возможная неустойчивость структуры течения в ВМП обусловлена торможением вынужденного движения в пограничном пристеночном слое, причем область неустойчивости меридионального движения сосредоточена вблизи боковой стенки тигля. При увеличении Na и Re_R отмечается рост максимального значения момента азимутальной скорости и смещение положения ее максимума к боковой стенке.

Выводы

Построенная диаграмма устойчивости течений включает известные асимптотические решения для малых и больших значений числа Гартмана, которые подтверждают расчетные результаты данной работы. Рекомендуются оптимальные параметры ВМП для промышленного процесса выращивания монокристаллов кремния по методу Чохральского.

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

Список использованных источников

1. Шашков Ю.М. Методы выращивания монокристаллов и пленок материалов твердотельной электроники // Итоги науки и техники. Электроника. М.: ВИНТИ, 1988. Т. 18. С. 184–216.
2. Архипова Л.В., Кескюла В.Ф., Кильк А.О. Экспериментальное определение скорости вращения расплава во вращающемся магнитном поле // Тр. Таллинского политехнического института. Таллин: ТПИ. 1983. № 655. С. 18–25.

SIMULATION OF MHD-INFLUENCE ON SILICON MELT FLOW IN CZOCHRALSKI PROCESS

N.A. Vererzub, A.I. Prostomolotov

Abstract. The applications of rotating magnetic field (RMF) in semiconductor crystals growth technology from a melt by Czochralski method are discussed, including the known data of physical modeling of an electrically conductive KOH solution flows in a cylindrical crucible under RMF are considered and verified. Mathematical model of hydrodynamic processes is considered in relation to silicon single crystal growth in 100 mm diameter on Redmet-30 furnace equipped by RMF-magnet. The test results of calculated azimuth velocity profile with the measured data in KOH solution are presented. The results of parametric studies of melt flows stability in depending on the frequency and magnitude of RMF induction are summarized in the stability diagram.

Key words: crystal growth, magnetic hydrodynamics, modeling.

УДК 004.94

<https://doi.org/10.29003/m3588.MMMSEC-2023/67-69>

ВЛИЯНИЕ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ И СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ Ge(111) НА ДИФФУЗИЮ АТОМОВ Ge

Жачук Руслан Анатольевич,

*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,
zhachuk@gmail.com, +7 (952) 911-44-50*

Латышев Александр Васильевич,

*д.ф.-м.н., академик РАН¹,
latyshev@isp.nsc.ru,*

Coutinho José,

*PhD, principal researcher²,
jose.coutinho@ua.pt*

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Россия

² Department of Physics & I3N, University of Aveiro, Campus Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal

Аннотация. С помощью расчетов на основе теории функционала плотности исследовано влияние упругих деформаций и структуры поверхности Ge(111) на диффузию адсорбированных атомов Ge. Из полученных данных следует, что скорости диффузии Ge на поверхностях Ge(111) со структурами 5×5 и 7×7 должны быть близкими. Установлено,