

УДК 533.924

Моделирование задач нанофотоники и получения нанопленок: кинетический код LRnLA/Nano

В. Д. Левченко, Г. И. Змиевская, А. Л. Бондарева, А. В. Закиров

Разработан высокопроизводительный программный кинетический комплекс программ LRnLA/Nano (Локально-рекурсивный нелокально-асинхронный) для решения широкого круга задач нанофизики, включая нанофотонику, спинтронику, наномодификацию поверхности, а также физики плазмы и плазмоподобных сред. Приведены два примера применения данного кода. Распространение электромагнитных волн в наноматериалах моделируется в реальной трехмерной геометрии, причем приведен пример расчета поля в среде со сложным пространственным распределением диэлектрической проницаемости (в фотонном кристалле). Рассмотрено формирование зародышей кристаллических нанопорошков как суперпозиция столкновительных и флуктуационных процессов на неравновесной стадии фазового перехода конденсации паров в плазме разряда и кристаллизации карбида кремния.

PACS: 61.46.Hk

Ключевые слова: высокопроизводительный комплекс программ, нанооптика, фотонный кристалл, неравновесный фазовый переход, порошки карбида кремния, комплексная плазма.

Введение

Вычислительный эксперимент в физике плазмы как новый раздел науки возник на пересечении интересов математической физики, вычислительной математики и физики плазмы. Труды Ю. С. Сигова [1] заложили основу дискретных моделей плазмы и плазмоподобных сред и легли в основу построения кинетических плазменных комплексов программ для решения задач умеренной и сильной плазменной турбулентности. Объектно-ориентированная модель плазмы позволила получить фундаментальные результаты по кинетике нелинейного взаимодействия частиц с когерентными волновыми пакетами в открытых пучково-плазменных системах.

Проблемы вычислительной нанофизики связаны с использованием эффективных алгоритмов двухмерной и трехмерной декомпозиции пространства [2] для современных многопроцессорных компьютеров. Преимущество школы отечественной вычислительной физики плазмы [1] привело к созданию кинетического комплекса

программ LRnLA/Nano (Локально-рекурсивный нелокально-асинхронный). Программный комплекс LRnLA/Nano предназначен для проведения прямого полномасштабного моделирования существующих, разрабатываемых и перспективных наноструктурированных сред и сложных систем наноразмерных объектов в целях изучения механизмов и объяснения наблюдаемых свойств, поиска оптимальных конфигураций, проверки или обеспечения требуемых свойств. Комплекс предназначен для решения задач в области нанооптики, спинтроники, наномодификации поверхности методом численного моделирования. Программный комплекс LRnLA/Nano обеспечивает возможность:

моделирования наноструктуры с числом элементов не менее 10^{12} ;

эффективных вычислений не менее 50 % относительно теоретического пика;

быть изоэффективным при параллельных расчетах на кластере не менее 100 узлов.

В процессе разработки комплекса LRnLA/Nano были получены важные результаты при решении нелинейных задач [3—5]. Релятивистские параллельные электромагнитные комплексы программ [4] получили развитие в решении задачи генерации филаментационной структуры магнитного поля в лазер-плазменном взаимодействии (кинетический 3D3V комплекс программ SUR/MP). Исследование кильваторных волн, возникающих при проникновении лазерного импульса в подкритическую плазму, проведено в [5]. Создание объектно-ориентированной модели плазмы [1, 2] позволило также разработать кинетическую модель пылевой

Левченко Вадим Дмитриевич, ведущий научный сотрудник.
Змиевская Галина Ивановна, ведущий научный сотрудник.
Бондарева Анна Леонидовна, старший научный сотрудник.
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН.
Россия, 125047, Москва, Миусская пл., 4.
Тел. 8 (499) 250-79-04. E-mail: zmig@mail.ru, bal310775@yandex.ru
Закиров Андрей Владимирович, аспирант.
Московский физико-технический институт.
Россия, 141700, г. Долгопрудный МО, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 25 сентября 2011 г.

© Левченко В. Д., Змиевская Г. И., Бондарева А. Л.,
Закиров А. В., 2012

плазмы в шестимерном фазовом пространстве (3D3V) [1, 6], отличие которой от существующих вычислительных моделей состоит не только в размерности конфигурационного пространства (3D), но и в оригинальном методе эффективного вычисления заряда на пыли и самосогласованного электростатического поля пылевой плазмы с учетом этого заряда. Кинетический комплекс программ позволил оценить влияние пылевого слоя в приэлектродном слое дивертора ТЯР [7] на рассеяние потока плазмы в трансверсальном движении ионов направлении, а распределение пыли по размерам при образовании зародышей конденсации распыленного металла материала стенок ТЯР на неравновесной стадии формирования зародышей пыли, т. е. на временах менее 10^{-4} с, было оценено в [8].

Модель фазового перехода 1-го рода (на флуктуационной стадии) с учетом заряда и химического состава кластеров зародышей и ее алгоритмическая реализация требуют решения систем квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений математической физики в частных производных второго порядка [8—12] или стохастического аналога столкновительных и флуктуационно обусловленных процессов, а также привлечения комплекса программ пылевой плазмы [7] для самосогласованного определения температуры поверхности расплавленной капли в разряде (тип которого должен быть выбран в результате большого объема численных экспериментов, проясняющих связь параметров плазмы и фазового перехода). Сначала моделируется конденсация паров, содержащих Si в плазме, потом капли расплава взаимодействуют с углеродосодержащим газом, а затем происходит кристаллизация SiC в объеме или на поверхности субстрата. Численные методы, примененные при моделировании блистеринга [13] и аморфизации поверхности в радиационных потоках, деградации многослойных технологических зеркал [14], могут быть модифицированы и использованы при решении задач твердофазной эпитаксии карбида кремния, модель которой разрабатывается.

Возможности вычислительного комплекса LRnLA/Nano позволяют решить перспективную задачу моделирования движения плазмы в двигателе Холла в самосогласованных электромагнитных полях (модель 3D3V) в реальной геометрии за разумное время расчета. Оценка эффективности программного комплекса и первые результаты получены в 2011 г. [15].

В данной работе приведен пример расчета поля в среде со сложным пространственным распределением диэлектрической проницаемости (в фотонном кристалле). Формирование зародышей

кристаллических нанопорошков рассмотрено как суперпозиция столкновительных и флуктуационных процессов на неравновесной стадии фазового перехода конденсации паров в плазме разряда и кристаллизации карбида кремния.

Пример моделирования задач нанофотоники: моделирование волновода на основе двухмерного фотонного кристалла

Приведем более подробно пример расчета с помощью программного комплекса LRnLA/Nano волновода на основе двухмерного фотонного кристалла. Фотонным кристаллом принято называть такие оптические структуры, в которых показатель преломления периодически меняется в пространстве. При попадании света на такую структуру может происходить его полное отражение либо поглощение в зависимости от частоты света. Длина волны света в этом случае должна быть соизмерима с периодом изменения показателя преломления в фотонном кристалле. Фотонный кристалл имеет запрещенную зону для некоторого набора частот, т. е. при определенных частотах скорость распространения волны равна нулю и, таким образом, волновой пакет, падающий на фотонный кристалл, будет иметь коэффициент отражения, близкий к 1. На основе этих свойств с помощью фотонных кристаллов можно конструировать различные фильтры и волноводы.

Уравнения модели волновода на основе фотонного кристалла

Программный комплекс предназначен для численного решения уравнений Максвелла в пространственно-временной области без токов и зарядов с помощью явной разностной схемы FDTD 2-го порядка точности по пространству и времени:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (1)$$

Эти первые уравнения Максвелла дополняются материальными уравнениями, связывающие \mathbf{E} с \mathbf{D} и \mathbf{H} с \mathbf{B} . Закон связи определяет модель среды, которую предполагается исследовать вычислительными средствами.

Далее перечислим основные возможности и особенности, которые имеет программный комплекс.

Модели среды. На данный момент имеется возможность моделировать бездисперсионные диэлектрики, диэлектрики с дисперсией Друде и Лоренца. Также имеется возможность моделировать проводники как частный случай модели Друде, а также материалы с отрицательным показателем преломления. Данный программный комплекс так-

же позволяет моделировать материалы, имеющие тензорные диэлектрическую и магнитную проницаемости (что соответствует материалам с анизотропными свойствами).

Граничные условия. В программном комплексе реализованы граничные условия отражения и поглощающие граничные условия PML. При этом параметры PML подбираются оптимальным образом в зависимости от требований задачи.

Диагностика. В рамках программного комплекса разработаны различные методы диагностики и обработки результатов. В случае необходимости выполняется расчет распределения энергии, вектора Пойнтинга либо потока энергии через заданную поверхность. Также возможно получение Фурье-преобразования рассчитанного распределения электромагнитного поля по времени и пространству.

Использование оптимизации расчетов. Расчет проходит с высокой эффективностью благодаря использованию локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов, в соответствии с которым граф зависимостей разностной схемы обходится наиболее оптимальным образом. Это позволяет достигать производительности, близкой к пиковой, и получать 100%-ное распараллеливание при расчетах на многоядерных системах.

Дополнительно существенная оптимизация достигается при использовании индексации значений-характеристик среды (коэффициентов разностной схемы) в точках. В некоторых случаях можно получить дополнительное ускорение благодаря использованию набора инструкций процессора для работы с векторизованными данными (SSE, AVX).

Интерфейс. Имеется графический интерфейс для задания основных параметров расчета. Для задания модели среды необходимо правильным образом задать соответствующие функции C++. Программный комплекс подразумевает также использование системы RACS. Система RACS (Results & Algorithms Control System — система контроля результатов и алгоритмов) обеспечивает упрощенное создание интерфейса приложения численного моделирования; автоматический перенос кода приложения и запуск серий расчетов на разнородных распределенных вычислительных системах в асинхронном режиме; многопараметрический поиск и комплексную обработку результатов.

Для визуализации трехмерного поля используется утилита arr3D, с помощью которой можно удобно рассмотреть данные о поле в интересующий момент времени.

Результаты моделирования волновода на основе двухмерного фотонного кристалла

В качестве примера покажем трехмерное моделирование распространения электромагнитной волны по волноводу на основе фотонного кристалла. Фотонный кристалл состоит из диэлектрических цилиндров, расположенных в кубической решетке с периодом a (рис. 1). Снизу около входа в волновод расположен источник волн (размер источника довольно мал), который генерирует волновой пакет с частотой ω , причем $\omega a / (2\pi c) = 0,38$ (c — скорость света в вакууме). Это частота соответствует запрещенной зоне данного фотонного кристалла.



Рис. 1. Двухмерный волновод в моделируемом пространстве фотонного кристалла. Диэлектрическая проницаемость цилиндров $\epsilon = 11$, диаметр $0,4a$

На рис. 2 представлены картины распределения электромагнитного поля в различные моменты времени. Здесь хорошо видно, что волновой пакет практически полностью изгибается в соответствии с геометрией волновода и выходит из него практически без потерь. Такое поведение не характерно для классических волноводов, для которых существуют принципиальные ограничения на изгиб. Фотонные кристаллы таким образом представляют широкие возможности для управления световыми потоками, что открывает большие преимущества для их использования по сравнению с обычными оптическими волноводами.

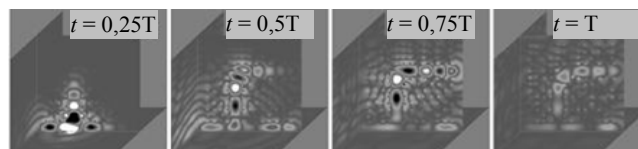


Рис. 2. Распространение волны по волноводу с изгибом на 90° в различные моменты времени.

Показано трехмерное распределение компоненты электрического поля, параллельной осям цилиндров фотонного кристалла.

Черный и белый цвета соответствуют максимальному значению (положительному и отрицательному, соответственно). Серый цвет — нулевое значение электрического поля

Пример моделирования задачи нанотехнологии: получение нанопленок карбида кремния

Структуры нанопокровов со свойствами алмазоподобного материала — карбида кремния SiC — и условия их формирования можно моделировать с помощью программного комплекса LtnLA/Nano, в основе которого лежит объектно-ориентированная модель плазмы и плазмоподобных сред. Важную роль в расчетах тонких мелкокристаллических пленок играют фазовые переходы (конденсации, кристаллизации, плавления) на начальной стадии, когда формируются зародыши новой фазы в условиях "открытой системы", которыми являются технологические параметры процесса синтеза карбида кремния. Математическая модель требует решения систем квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений математической физики в частных производных второго порядка методом стохастического аналога физико-химических процессов, т. е. когда решаются системы стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) Ито, которые описывают нелинейную стадию зародышеобразования как броуновское движение (БД) и стохастическую диффузию в фазовом пространстве размеров кластеров зародышей или кластеризацию. При этом изменение их химического состава происходит в результате столкновений молекул газа с кластерами и описывается как скачкообразный марковский процесс (МП), для которого также записаны уравнения Ито [8, 9], эквивалентные уравнениям больцмановского типа.

Начальная стадия нанесения покрытия представлена численной моделью образования островков-зародышей бездефектных тонких пленок карбида кремния SiC, являющегося термостойким материалом электроники и/или упрочняющим покрытием.

В программном комплексе предусмотрены расчеты зародышеобразования карбида кремния и др. материалов, предназначенных для нанесения тонких пленок:

модель конденсации паров Si и C в плазме разряда с образованием заряженных капель и порошков 3C—SiC [10—12];

зародышеобразование SiC с учетом химических реакций C (углерода газовой фазы) с последующим рассмотрением эволюции островков зародышей расплава Si на субстрате Si(100);

фазовый переход кристаллизации на стадии образования зародышей кристаллических политипов карбида кремния (3C—SiC, 4H—SiC, 6H—SiC);

твердофазная эпитаксия поликристаллического карбида кремния при образовании пористости субстрата Si в результате блистеринга.

В работе представлены примеры расчетов, отвечающих моделям 2 и 3, причем в рамках

методик [9—12], т. е. на временах порядка 1 мкс, а процессы нанесения тонкопленочных покрытий с заданными свойствами, представленными в моделях 1—4, могут быть рассчитаны другими программами комплекса.

Модели 2 и 3 относятся к задачам кинетической теории БД с учетом столкновительных и флуктуационно обусловленных процессов [8—12]. Статистически эквивалентные кинетической задаче квазилинейные СДУ Ито и Ито—Стратоновича решаются модифицированными численными методами, в основе которых лежат: устойчивый численный метод решения линейных СДУ [16—18], который является методом второго порядка точности с бесконечной областью устойчивости, и метод стохастического аналога [8, 9] физико-химических процессов в газах и плазме.

Уравнения модели получения нанопленок карбида кремния

Таким образом, моделируется флуктуационная неустойчивость фазового перехода 1-го рода, когда формируются зародыши новой фазы в условиях "открытой системы", которыми являются технологические параметры процесса синтеза карбида кремния.

Уравнение Колмогорова для роста/деградации и перемещения зародышей по поверхности субстрата записывается следующим образом:

$$\frac{\partial f(g, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{L}f(g, \mathbf{r}, t) + \Omega - Q + \hat{I}[C', C, t], \quad (3)$$

где $f(g, \mathbf{r}, t)$ — функция распределения (ФР) зародышей-островов (кристаллов) по размерам g в единичных несжимаемых объемах молекул SiC, координатам на субстрате \mathbf{r} ;

Ω — источники мономеров;

Q — стоки;

интегро-дифференциальный оператор \hat{I} учитывает столкновения молекул газа с субстратом и островками, зависит от скоростей молекул (C' , C) углеродосодержащего газа (учет химических реакций при столкновении в стохастических моделях см. в [8, 9]).

Составной оператор \hat{L} можно выразить как суперпозицию операторов

$$\hat{L} = \hat{L}_{1d} + \hat{L}_{2d}, \quad (4)$$

где \hat{L}_{1d} — оператор роста/деградации зародыша; \hat{L}_{2d} — оператор БД кластеров зародышей.

Оператор \hat{I} зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц, дифференциального и полного сечения столкновений, углов столкновений и др. ФР частиц газа, формирующего химиче-

ский состав кластера, обозначим как $f_1(t, C, C')$, где C и C' — скорость молекулы до и после химической реакции. Граничные условия для учета столкновений при решении (3), (4) получаем после вычисления функции $f(g, \mathbf{r}, t)$, интегрируя которую, находим S_1 как $S_S = S_1 + S_2$. Здесь S_S — расчетная область, S_1 — площадь поверхности островков, граничащая с углеродосодержащим газом (СО или СН₄). При этом можно записать выражение для S_1 в виде:

$$S_1 = \int \Psi \cdot f(g, \mathbf{r}, t, C) \cdot g^{2/3} dg,$$

где Ψ — фактор формы островка. Очевидно, что S_2 — площадь подложки, свободная от площади проекции островков-зародышей на S_S .

Оператор \hat{L} в уравнении (3) является суперпозицией операторов кластеризации зародышей \hat{L}_1 и БД \hat{L}_2 . Для уравнения Колмогорова—Феллера оператор \hat{L}_1 выражается в следующем виде:

$$\hat{L}_{1d} = \frac{\partial}{\partial g} \left[D_g(g, t) \frac{\partial}{\partial g} \right] + \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial g} \left[D_g(g, t) \frac{\partial \Delta\Phi(g, \mathbf{r}, t)}{\partial g} \right], \quad (5)$$

- где k — постоянная Больцмана;
- g — размер кластера зародыша;
- $D_g(g, t)$ — коэффициент диффузии в фазовом пространстве размеров зародышей;
- T — температура;
- $\Delta\Phi(g, \mathbf{r}, t)$ — термодинамический потенциал образования зародышей (энергия Гиббса);
- \mathbf{r} — радиус-вектор центра масс зародыша в декартовых координатах.

Более подробно энергия Гиббса образования зародышей фазового перехода 1-го рода описана в более ранних работах авторов [9—14].

Оператор \hat{L}_2 в уравнении Эйнштейна—Смолуховского для БД кластера с переменной массой можно представить в следующем виде:

$$\hat{L}_{2d} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[D_r \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{M_g \gamma} \right], \quad (6)$$

- где D_r — коэффициент диффузии на поверхности;
- γ — диссипативный фактор;
- $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}$, U — самосогласованный потенциал косвенного упругого взаимодействия зародышей между собой и дефектами решеток типа дислокаций, границ зерен и т. д. Потенциал

U — дальнодействующий, знакопеременный, релаксирующий через возмущение акустических фононов в предположении слабой анизотропии решетки.

Стохастический аналог процессов кластеризации, БД и взаимодействие газа с кластером может быть записан в виде СДУ Ито для стохастической динамической переменной X , которой в задаче может быть размер зародыша, координаты его центра масс, рассматриваемые аддитивно, а также скорости молекул газа, сталкивающиеся с зародышем и изменяющие его химический состав:

$$X = X_0 + \underbrace{\int_{t_0}^t H(X, \tau) d\tau + \int_{t_0}^t \sigma(X, \tau) dW(\tau)}_{\text{диффузионный}} + \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} d\tau A_n^\alpha(\xi_m^\alpha(\tau))}_{\text{столкновительный}}, \quad m = 1, \dots, N_{\alpha'}, \quad (7)$$

$$X|_{t=0} = X_0 = X(t=0), \quad t \in [t_0, T_{\text{finish}}], \quad n = 0, \dots, N,$$

где $dW(t)$ — приращение винеровского случайного процесса, N — число шагов по времени.

Модель упрощенно представлена так: в заданных точках поверхности S_S ($400a \times 400a$, a — параметр решетки) происходит кластеризация зародышей расплава Si при постоянных температуре T и давлении паров (мономеров) p , затем под действием потенциала $U(x, y, z)$ упругого взаимодействия зародышей через возмущение акустических фононов решетки происходит БД кластеров, их столкновения, приводящие к скачкообразному изменению размера одного из зародышей (при восстановлении второго по модели). Случайным образом выбирается момент времени t_n и в течение $\{t_n \div t_{n+1}\}$ происходят столкновения с кластерами расплава. На основе модели скачкообразных МП или решения системы СДУ Ито по точечной мере для вычисления скорости после столкновения и числа частиц, столкнувшихся с поверхностью кластера, получаем значение определяющего параметра, которое имеет вид:

$$\xi_{n+1}^\alpha = \xi_n^\alpha + \int_{t_n}^{t_{n+1}} d\tau A_n^\alpha(\xi_m^\alpha(\tau)), \quad (8)$$

$$m = 1, \dots, N_{\alpha'}, \quad n = 0, 1, \dots, N_t,$$

- где $N_{\alpha'}$ — число моделирующих частиц;
- ξ_m^α — значение МП в момент τ или скорость частицы с номером m (сорта α) в момент времени t_n ;
- N_t — число временных шагов;
- A_n^α — стохастический оператор столкновения, изменяющего скорость молекулы $C \rightarrow C'$ в момент времени t_n .

Стохастический оператор находим в алгоритме с учетом вероятности распределения его параметра (шага по времени Δt_q) из интервала $\{t_{n+1} - t_n\}$:

$$P\{\Theta_q \leq \tau\} = F(\tau) = 1 - \exp\{-\lambda(C_{q-1})\tau\}. \quad (9)$$

По случайному числу R_1 (из набора равномерно распределенных чисел на интервале $[0, 1]$) определяется Θ_q по формуле $\Theta_q = -\frac{\ln(1 - R_1)}{\lambda(C_{q-1})}$, затем вы-

числяется $\Delta t_q = \Delta t_{q-1} + \Theta_q$, на котором вектор состояния модели изменится из-за столкновений, т. е. появятся скорости C' и ФР $f_1(t, C)$. Здесь λ — частота столкновений всех частиц модели всех сортов и др. (для простоты здесь не приводятся детали реализации скачкообразного МП и вид СДУ Ито [9]).

Результаты моделирования получения нанопленок карбида кремния

Приведены результаты моделирования получения нанопленок карбида кремния для следующей модели: получение заряженных расплавленных капелек кремния в плазме радиочастотного разряда с их последующим ростом/деградацией и насыщением углеродом (карбидизацией), затем осаждение капелек SiC на подложку и их дальнейший рост/деградация, перемещение по поверхности, слияние и т. д. В начальный момент времени в плазме разряда образуются зародыши кремния, которые в дальнейшем растут/разрушаются и насыщаются углеродом с образованием заряженных капелек карбида кремния до заданного содержания углерода в зародыше карбида кремния. После чего моделируется осаждение капелек карбида кремния на подложку Si(100) с нейтрализацией и кристаллизацией зародышей различных политипов (3C—SiC, гексагональных: 4H—SiC, 6H—SiC), а также получением зародышей без выделенной внутренней структуры. При этом считается, что при осаждении на поверхность скорость заряженных расплавленных капелек карбида кремния равна 0, т. е. процессами разделения зародыша на несколько частей при контакте с поверхностью подложки и разбрызгиванием этих частей пренебрегаем. Модель не предусматривает описание процесса закалки, так как предполагается мгновенное скачкообразное изменение температуры зародышей при осаждении их из плазмы разряда на поверхность подложки.

В представленной работе температура паров в плазме разряда выше температуры подложки на 300 К. Процесс карбидизации рассматривается только в плазме разряда, а именно, считается, что

при осаждении на поверхность состав зародыша не изменяется. В качестве примера приведем ФР зародышей кристаллизации кубического и гексагонального политипов и зародышей без выделенной внутренней структуры при температуре ниже точки фазового перехода этого типа.

Как известно, карбид кремния имеет более 200 политипов. Процесс образования зародыша карбида кремния зависит от ряда величин: атомной структуры того или иного политипа; объема, входящегося на атом в данном политипе; фактора формы; различного количества и протяженности ребер, что сказывается на энергии Гиббса образования зародыша; различия химических потенциалов фаз; поверхностного натяжения на границах "зародыш—плазма", "зародыш—поверхность подложки", "поверхность подложки—плазма"; образования зародыша над узлом или междоузлем; химического состава зародыша. На данном этапе моделирования корреляционными связями между отдельными слоями зародыша карбида кремния, различными для разных политипов, пренебрегается, так как для учета корреляционных связей надо решать дополнительную задачу оптимизации расположения слоев для данного политипа.

Для дальнейшего рассмотрения важно, что известны параметры внутренней структуры политипов зародышей карбида кремния (3C—SiC, 4H—SiC, 6H—SiC) или зародышей без выделенной внутренней структуры (постоянная решетки 3C—SiC равна 4,36 Å; постоянные решетки 4H—SiC равны 3,07 и 10,05 Å, соответственно; постоянные решетки 6H—SiC равны 3,07 и 15,11 Å, соответственно; внутри кристалла энергии связей 241 кДж/моль для Si—C и 189 кДж/моль для Si—Si), а также форма поверхности зародышей-кристаллов. Поэтому рассчитываются соответствующие, зависящие от размера зародыша коэффициенты, входящие в модель энергии Гиббса образования зародыша, решается задача (3). В результате, в зависимости от содержания углерода происходит определение политипа кристалла и количество зародышей, ему отвечающее.

Для сравнения ФР зародышей политипов SiC с несколькими соотношениями концентраций Si/C в твердой фазе использованы неравенства:

$$\Delta\Phi_{\text{расплавленного зародыша}} \geq \Delta\Phi_{3\text{C-SiC}},$$

$$\Delta\Phi_{3\text{C-SiC}} < \Delta\Phi_{\text{гексагон}} \Rightarrow \text{образуется } 3\text{C-SiC},$$

$$\Delta\Phi_{\text{расплавленного зародыша}} > \Delta\Phi_{3\text{C-SiC}},$$

$$\Delta\Phi_{3\text{C-SiC}} \geq \Delta\Phi_{\text{гексагон}} \Rightarrow \text{образуется гексагональный},$$

$$\Delta\Phi_{\text{расплавленного зародыша}} < \Delta\Phi_{3\text{C-SiC}},$$

$$\Delta\Phi_{\text{гексагон}} \Rightarrow \text{твердая фаза без наблюдаемого порядка}.$$

Рассмотрено влияние состава зародыша карбида кремния на размер зародыша. Ранее [19] уже проведены численные эксперименты по формированию зародышей расплава кремния в плазме радиочастотного разряда (давление — 0,35 Па, температура паров Si в зоне реакции — 1500 К, частота разряда — 13,56 МГц, состав газовой смеси — 30 долей аргона и 1 доля силана). Поэтому в качестве начального распределения капелек кремния по размерам берется равномерное распределение капелек с радиусом, расположенном равномерно в интервале [5,5; 6,3 Å]. При этом радиус капельки кремния $R_{drop} = r_{\text{Si}} \sqrt[3]{g}$, где $r_{\text{Si}} = 1,32 \text{ Å}$ — радиус атома кремния. В качестве начальных условий эволюции островков различных политипов карбида кремния на кремнии использованы распределения зародышей капелек карбида кремния в плазме разряда по размерам $f(g, t=T_{fin})$, причем использована оценка математического ожидания среднего размера капель SiC $\langle g \rangle(t) =$

$$= \frac{1}{N_G} \int f(g, t) g^2 dg, \text{ где } N_G \text{ — число зародышей,}$$

T_{fin} — окончание расчета распределения капель расплава в разряде. Считается, что при этом зародыши распределены по поверхности равномерно.

Модель кристаллизации не предусматривает задания темпа охлаждения расплава и согласования температуры капель расплава с режимом закалки. Температура зародыша на поверхности Si(100) снижена мгновенно на 300 К. Отметим, что температура плавления массивного образца Si (подложки) 1415 °С, а температура плавления массивного образца SiC 2830 °С. Однако температура плавления наноразмерных зародышей SiC будет ниже, но существенно выше температуры плавления подложки, что позволяет представить модель кристаллизации на подложке капелек SiC на подложке Si(100).

Формирование ФР зародышей расплава SiC (процесс карбидизации) представляет самостоятельную задачу, результаты которой используются в качестве начальных процентных содержаний углерода в карбиде кремния и начальных условий

распределения зародышей SiC по числу атомов в них g . На рис. 3 приведены зависимости ФР $f(g, T_{fin})/f_0$ зародышей гексагональных политипов от линейного размера основания (в Å) при заданном содержании углерода в карбиде кремния. На графиках (рис. 3—5) содержание углерода приведено в долях относительно полного, соответствующее стандартному химическому составу, содержания углерода в карбиде кремния, т. е.

$$\frac{c_{\text{C-nucl}}}{c_{\text{C-SiC}}}. \text{ Здесь } c_{\text{C-SiC}} \text{ — концентрация углерода в}$$

карбиде кремния, соответствующая стандартному химическому составу, $c_{\text{C-nucl}}$ — концентрация углерода в зародыше карбида кремния. При этом стандартное содержание C в SiC составляет 0,98. На рис. 4 приведены зависимости ФР зародышей 3C—SiC (кубический политип) от ребра квадрата — основания (в Å) при тех же условиях, при которых проведены расчеты для 4H, 6H—SiC (см. рис. 3). На рис. 5 приведены зависимости ФР зародышей SiC без выделенной внутренней структуры от линейных размеров оснований (диаметра круга — основания) в Å при различном содержании углерода в карбиде кремния. Графики рис. 3—5 представлены для момента окончания флуктуационной стадии фазового перехода с длительностью 10^{-4} с.

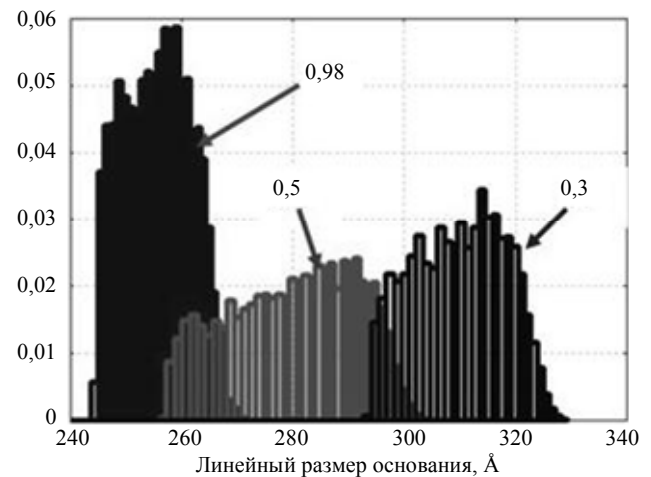


Рис. 3. Зависимости ФР зародышей для политипа 6H—SiC от линейных размеров оснований в Å при различном содержании углерода в карбиде кремния.

По оси ординат отложена функция распределения зародышей $f(g, T_{fin})/f_0$ в момент окончания расчета (10^{-4} с). Гистограммы ФР построены с точностью $\sim 1,7 \text{ Å}$

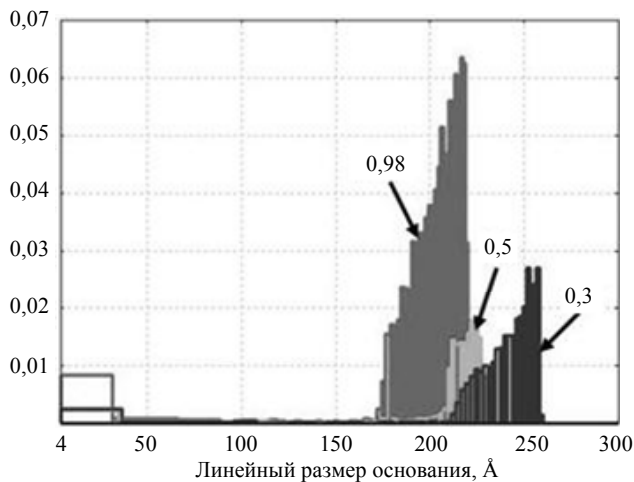


Рис. 4. То же, что на рис. 3, но для зародышей политипа 3С—SiC. Гистограммы ФР построены с точностью $\sim 2,5 \text{ \AA}$

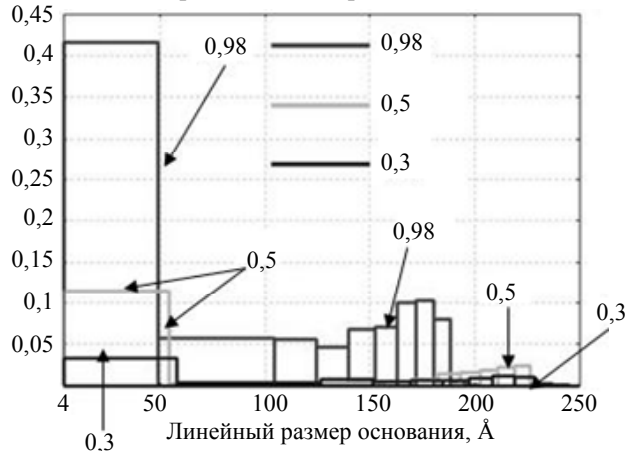


Рис. 5. То же, что на рис. 3, но для зародышей без выделенной внутренней структуры. Гистограммы ФР построены с точностью $\sim 2,5 \text{ \AA}$

Сумма ФР зародышей всех политипов с одним химическим составом (одинаковое, относительно стандартного, содержание углерода в карбиде кремния) нормирована на 1, т. е. для одного расчета с карбидизацией до одного химического состава сумма ФР различных политипов составляет 1, что можно выразить в виде соотношения

$$\frac{1}{N_{real}} \int f(g) dg = 1.$$

Здесь f — функция распределения зародышей, осредненная по поверхностям субстрата и зародыша, в зависимости от линейного размера основания R ; размер поверхности Si(100) составляет $2,172 \cdot 10^{-7} \times 2,172 \cdot 10^{-7} \text{ \AA}$; N_{hexag} — число зародышей гексагональных политипов; N_{3C-SiC} — число зародышей кубического политипа; N_{am} — число зародышей без выделенной внутренней структуры; $N_{hexag} + N_{3C-SiC} + N_{am} = N_{real}$, где N_{real} — число траекторий случайного процесса; линейный размер основания кристаллических политипов

$R_{cr} = a \sqrt[3]{g/4}$, g — размер зародыша карбида кремния в числе атомов кремния и углерода в нем; a — параметр решетки основания. Для 3С—SiC этот параметр $a = 4,36 \text{ \AA}$, для политипов 4Н и 6Н—SiC это значение в расчетах принято $3,07 \text{ \AA}$, для зародышей без выделенного внутреннего порядка линейный размер основания определяется по формуле

$$R_{am} = a_{am} \sqrt[3]{\frac{4}{3} \pi \beta g},$$

где a_{am} — модельный параметр, определяемый как $a_{am} = r_{Si} + r_C + \Delta_r \approx 3,5 \text{ \AA}$ ($r_C = 0,91 \text{ \AA}$), β — фактор формы.

Для всех результатов расчетов, приведенных на графиках рис. 3—5, начальное распределение капелек кремния одинаково, но различается содержание углерода в карбиде кремния относительно стандартного. Число траекторий, используемых в каждом расчете, — 10^6 .

Как видно из рис. 3—5, при насыщении зародышей углеродом происходит уменьшение линейных размеров оснований зародышей, т. е. покрытие становится более мелкокристаллическим. Кроме того, с насыщением зародышей углеродом уменьшается разброс линейных размеров зародышей одного политипа, т. е. покрытие становится более равномерным.

С помощью стохастического моделирования выявлено, что за время 10^{-4} с (длительность флуктуационной стадии) происходит целая цепочка событий.

1. Гексагональные политипы появляются при температуре поверхности, равной $\approx 0,45$ от температуры плавления поверхности.

2. Доля зародышей без выделенной внутренней структуры весьма существенна в интервале температур от 0,4 до 0,6 от значения температуры плавления поверхности. При этих температурах образуются конгломераты застывших капелек зародышей на поверхности.

3. До температуры поверхности 0,75 от температуры плавления поверхности преобладают зародыши типа 3С—SiC.

4. При более высоких температурах (выше 0,75 от значения температуры плавления субстрата) преобладают зародыши гексагональных политипов, с образованием которых связаны упрочняющие свойства покрытий.

Получение покрытий, состоящих из частиц заданного размера и одного конкретного политипа кристаллической решетки (в случае карбида кремния), является целью многих экспериментальных и теоретических исследований. Стохастическое моделирование образования зародышей карбида

кремния дополнено моделью скачкообразных марковских процессов, с помощью которых можно учесть степень насыщения поверхности расплавленных зародышей атомами углерода. Однако эта задача находится в процессе численной реализации, поэтому в использованной модели кристаллизации зародышей карбида кремния состав капель расплава (отношение концентрации атомов Si и C) известен и постоянен в течение расчета.

Таким образом, получены результаты, характеризующие зависимость размеров зародышей карбида кремния, кристаллизующихся из капель расплава SiC при температурах субстрата Si(100) от 0,4 до 0,9 от значения температуры плавления, от процентного содержания углерода, а также получено возможное соотношение политипов кристаллической решетки в островах тонкой пленки упрочнения карбидом кремния в зависимости от условий упрочнения.

Заключение

Представленные материалы подтверждают, что современный высокопроизводительный программный комплекс LRnLA/Nano позволяет численно исследовать широкий комплекс задач из предметной области вычислительной нанофизики.

В данной работе показано, что этот программный комплекс обеспечивает возможность:

исследовать отношение числа зародышей данного политипа карбида кремния к общему числу зародышей карбида кремния в образующемся покрытии в зависимости от температуры поверхности, причем зависимость от температуры поверхности образования в численном эксперименте политипов карбида кремния качественно согласуется с экспериментальными результатами [20, 21];

оценить роль состава на процесс кристаллизации: выявлено, что при насыщении зародышей углеродом происходит уменьшение линейных размеров оснований зародышей, т. е. покрытие становится более мелкокристаллическими, более равномерным;

моделировать распространение оптической волны практически без потерь по волноводу на основе фотонного кристалла с изгибом волновода на 90°, причем такое поведение не характерно для классических волноводов, для которых существуют принципиальные ограничения на изгиб.

Приведенный пример численного исследования неравновесной стадии фазового перехода 1-го рода дополняет численные кинетические модели флуктуационно-обусловленных процессов кластеризации и броуновского движения в зародышеобразовании моделью кристаллизации расплава с учетом степени карбидизации исходных капель зародышей.

Реализованная модель фазовых переходов на основе решения СДУ Ито в форме Стратоновича использует устойчивые численные алгоритмы решения, а также в отличие от других аналогичных численных моделей опирается на строгие результаты, доказывающие существование и единственность решения стохастической задачи, эквивалентной решению уравнений кинетической теории в частных производных.

Следует отметить, что перспективными областями численного моделирования на основе использованного программного комплекса являются спинтроника, решение задач электродинамики в 3D3V-геометрии, в приложении к плазменным двигателям Холла и новым методам ускорения плазмы [5, 15], к задачам акустики и физики магнетиков [22], а также в проблеме деградации технологических зеркал для будущих схем EUV-литографии и в анализе механизмов газофазной и твердофазной эпитаксий карбида кремния на поверхностях различного назначения.

Работа частично поддержана грантом РФФИ
11-01-00282-а и 09-01-00798-а,
а также программой ОМН РАН 3.5.

Литература

1. Сигов Ю. С. Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды// Сост. Г. И. Змиевская, В. Д. Левченко — М.: Наука, 2001.
2. Левченко В. Д. // Информац. технологии и вычисл. системы. 2005. № 1. С. 68.
3. Левченко В. Д. Синхронные параллельные алгоритмы как способ достижения эффективности вычислений: В кн. "Будущее прикладной математики. Лекции для молодых исследователей"// Под. ред. Г. Г. Малинецкого. — М.: Едиторал УРСС. 2005. С. 213.
4. Ёлкина Н. В., Левченко В. Д.// Прикладная физика. 2003. № 5. С. 16.
5. Калининкова Е. И., Левченко В. Д.// Физика плазмы. 2008. Т. 34. № 4. С. 324.
6. Закиров А. В., Левченко В. Д. // Мат. моделирование. 2011. Т. 23. № 8. С. 55.
7. Змиевская Г. И., Иньков Л. В., Левченко В. Д., Левченко Т. В.// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 5. С. 106.
8. Змиевская Г. И. // Физика плазмы. 1997. Т. 23. № 4. С. 368.
9. Змиевская Г. И. Флуктуационная стадия фазового перехода. Энциклопедия низкотемпературной плазмы (Сер. Б). Т. VII. Матем. моделирование в низкотемпературной плазме. Кн. 3. — М.: Янус К, 2009.
10. Bondareva A. L., Levchenko T. V., Zmievskaia G. I. Computer Simulation Model for First-Order Phase Transition Fluctuation Stage// Defect and Diffusion Forum. 2010. V. 297—301: Diffusion in Solids and Liquids V: Trans Tech Publications. Switzerland. P. 502.
11. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L. Computer Simulation Model of Charged Nanoparticles Clustering and Powder Deposition // BULLETIN of the American Physical Society, October

2010. 63-rd Gaseous Electronics Conference & 7th International Conference on Reactive Plasmas (GEC/ICRP Meeting 2010). Ed. by Lab. de Phys. des Plasmas, Ecole Polytechnique-CNRS. October 4—8, 2010, Paris, France. V. 55. No. 7. P. 24.
12. *Zmievskaya G. I., Bondareva A. L., Levchenko V. D., Levchenko T. V.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2007. V. 40. P. 4842.
13. *Змиевская Г. И., Бондарева А. Л.* Численное моделирование вакансионно-газовых дефектов поверхности твердого тела, возникающих после воздействия на нее горячей плазмы. Энциклопедия низкотемпературной плазмы (Сер. Б). Т. IX-2. Радиационная плазмодинамика: физика, экспериментальные технологии, применения, 2007. С. 480.
14. *Бондарева А. Л., Змиевская Г. И.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 6. С. 26.
15. *Perepelkina A. Y., Goryachev I. A., Levchenko V. D.* Fully Kinetic Model of Hall Thruster PlasmaDynamics with LRnLA Algorithm // ISPlasma 2011, 3-rd Interantional Symposium on Advanced Plasma Scienceand its Applicationsfor Nitrides and Nanomaterials, March 6—9, 2011, Nagoya Institute of Technology, Nagoya, Japan. P2-027A. P. 110.
16. *Yee K.* // Antennas and Propagation, IEEE Transactions on 14. 1996. P. 302.
17. *Закиров А. В., Левченко В. Д.* Эффективный алгоритм для трехмерного моделирования распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах. Препринт № 21 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. — М., 2008.
18. *Artem'ev S. S., Averina T. A.* Numerical analysis of systems of ordinary and stochastic differential equations. — Utrecht, The Netherlands. 1997. P. 176.
19. *Змиевская Г. И., Бондарева А. Л.* // Физика плазмы. 2011. Т. 37. № 1. С. 93.
20. *Куликов В. Ю., Ворличек В., Богач П. и др.* // Наноструктурное материаловедение. 2008. Т. 1. С. 42.
21. *Семенов А. В., Скорик С. Н., Лопин А. В. и др.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 7. С. 58.
22. *Dmitriev A. V., Ivanov A. V., Khokhlov A. R.* // Journal of Mathematical Sciences. 2011. V. 172. No. 6. P. 782.

Simulation of problems of nanophotonics and nanofilms: LRnLA/Nano kinetic code

V. D. Levchenko, G. I. Zmievskaya, A. L. Bondareva
Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS
4 Miusskaya sq., Moscow, 125047, Russia
E-mail: zmig@mail.ru

A. V. Zakirov
Moscow Physicotechnical Institute
9 Institutsky al., Dolgoprudny, Moscow region, 141700, Russia

LRnLA/Nano as the kinetic complex is developed for simulation of problems of nanophysics such as nanophotonics, spintronics, surface nanomodification, plasma physics, and others.

PACS: 61.46.Hk

Keywords: high-performance software-based complex, nanooptics, photon crystal, non-equilibrium phase change, silicon carbide, plasma.

Bibliography — 22 references.

Received September 25, 2011