Введение

Микроструктура материала определяет его свойства и поведение, например особенности деформации под нагрузкой, его прочность и твердость, однородность структуры, что крайне важно, например, для производства микрочипов из кремния. Моделирование структуры в свою очередь необходимо для анализа и прогнозирования свойств материала и его поведения. От строения структуры материала, также зависит его стоимость, которая сильно варьируется от её качества: наличия дефектов, ориентации зерен, типа границ и так далее. Программные средства, существующие на рынке, предназначены для разного рода моделирования. Есть программы, которые моделируют поведение, например деформацию структуры, а есть те, которые, моделируют рост материала, в нашем случае поликристаллического кремния, что будет рассмотрено в данной работе.

1 Описание предметной области

1.1 Актуальность работы

Проблема построения структуры поликристаллических материалов, в частности кремния, является одной из сложнейших и не тривиальных задач на сегодняшний день. Данной задачей заинтересованы как физики, так и математики. В последнее время математические и физические подходы зашли в тупик, так как не удалось добиться хорошего результата в области моделирования поликристаллической структуры не используя при этом огромные вычислительные мощности. Поэтому требуется разработать новой подход. Этот новый метод должен быть более эффективным и менее ресурсоемким, а также обеспечивать более точное моделирование структуры поликристаллического кремния.

1.2 Предмет и объект исследования

В лабораториях и промышленности, для выращивания поликристаллов, таких как кремний, используют определенный подход. Во первых, весь процесс выращивания происходит в закрытой печи, соответственно нельзя наблюдать за ростом кристалла, а можно лишь оценивать параметры такие, температура, давление и так далее. Суть подхода заключается в следующем: сначала в тугоплавкий тигель засыпают мелкий порошок материала, например кремния. После чего под воздействием высоких температур осуществляется плавление материала. После того как вещество оказалось в жидком состоянии, начинают отводить тепло со дна тигля. Таким образом материал начинает затвердевать снизу вверх, то есть расти. В процессе роста, возникают дефекты, которые точно не возможно предсказать, так как они сильно зависят от изменения молекулярной структуры. Из-за дефектов, кристалл в процессе роста разбивается на зерна, поэтому такой кристалл называется поликристаллическим. Только в природе можно встретить монокристаллы, то есть кристаллы с одним зерном. Но на производстве такого строения структуры добиться невозможно.

Чтобы как-то воздействовать на рост кристалла, помимо регулирования температуры, давления и других параметров, придумали использовать, так называемый затравочный слой. Затравочный слой – это выращенный кристалл, который имеет определенное кол-во зерен. Под разные задачи используется разное количество зерен, от которых зависят качественные свойства материала. В процессе выращивания кристалла этот слой кладут на дно тигля перед засыпанием мелкого порошка сырья. После чего также осуществляется плавление. И когда материал затвердевает, он продолжает следовать структуре затравки, что приблизительно позволяет вырастить кристалл с подходящими свойствами.

Из-за того, что точно не удается подобрать затравочный слой, чтобы получить кристалл с определенными свойствами, необходимо научиться моделировать структуру. Таким образом, если модель научится определять, то как поведет себя материал после затравочного слоя, можно будет улучшить производительность и качество выращиваемых кристаллов.

**1.3 Проблемы математических подходов в моделировании структуры поликристаллических материалов**

Для выполнения микроструктурного анализа, в том числе определения ориентации зерен, рост которых трудно предсказать, используется технология EBSD: Electron Backscatter Diffraction (дифракция обратного рассеяния электронов). Это технология работает только для кристаллических материалов. Она используется в сканировании на электронном микроскопе в масштабе от миллиметра до нанометра и позволяет визуально и количественно оценить строение кристалла: определить ориентацию зерен, их размер и границы, фазы и их распределение, а также оценить дефекты и деформацию структуры.

Модель анализа дифракции обратного рассеяния электронов (EBSD) описывает, как электронный пучок взаимодействует с наклоненным кристаллическим образцом. При столкновении электроны рассеиваются не когерентно и квазиупруго (электроны меняют свое направление и фазу при этом не теряя много энергии), что создает дифракционную картину, которую можно визуализировать на детекторе EBSD с помощью флуоресцентного экрана. Если эти пучки дифрагированных электронов сканировать в каждой точке образца по сетке с фиксированным шагом, можно получить картину, точно описывающие характеристики кристалла.

Кристаллы состоят из точно упорядоченных в трехмерном пространстве групп атомов, что называется кристаллической решеткой. При чем группы атомов в кристаллах регулярно повторяются с определенной закономерностью. Такая закономерность называется элементарной ячейкой. И ее устройство принадлежит к одной из 7 кристаллических систем: триклинная, моноклинная, орторомбическая, треугольная, четырехугольная, шестиугольная и кубическая. Каждая такая система обладает определенной симметрией. Поликристаллический кремний имеет кубическую систему. Этот параметр очень важен в построении карт EBSD, так как от него зависит визуальное наполнение этих карт, например, цвет ориентации зерен.

**1.4 Проблемы математических подходов в моделировании структуры поликристаллических материалов**

Точно описать структуру поликристаллического материала с использованием математического языка пока остается невозможным. Существуют системы, моделирующие эти структуры хорошего качества объёмом измеряемых в количестве атомов с использованием с суперкомпьютера, но этот подход не применим в реальных условиях. Обычно объем получаемого на предприятии кремния начинается от 10 см3, а алюминия и других поликристаллических материалов ещё больше. Существуют множество программ, которые используют в основе своих алгоритмов методы Вороного, методы клеточных автоматов, но все они не способны адекватно построить структуру поликристаллического кремния. С помощью таких подходов можно лишь примерно оценить ориентации зерен кристалла, но не структуру. Также такие подходы не умеет адекватно моделировать дефекты, которые всегда возникает в процессе выращивания кристалла. Помимо этих проблем, как уже было упомянуто выше, для моделирования требуются огромные вычислительные мощности, что на данный момент не применимо в реальных условиях.

Для решения этих проблем, в научном сообществе предлагают использовать современные подходы, основанные на нейросетях. Так как на сегодняшний день они хорошо справляются с генерацией изображений. И так как структуру кристалла можно представить в виде изображений, следует предположить, что нейросетевой подход окажется эффективным в моделировании сложных структур.

1.5 Генеративно-состязательные сети

Генеративно-состязательная сеть (GAN) представляет собой алгоритм машинного обучения, который использует две нейронные сети — генератор G и дискриминатор D.

Задача генератора заключается в создании образцов данных, которые максимально приближаются к реальным. Он принимает на вход случайный шум из латентного пространства и преобразует его в данные (например, изображения). Генератор обучается на основе обратной связи от дискриминатора, стремясь улучшить качество своих выходных данных.

Дискриминатор выполняет функцию классификатора, определяя, являются ли данные реальными (из обучающего набора) или сгенерированными генератором. Он обучается различать подлинные и поддельные образцы, предоставляя генератору информацию о том, насколько успешно тот справляется с задачей.

Обучение GAN в общем случае происходит через итеративный процесс, состоящий из следующих шагов: Создание случайных данных генератором; Оценка на предмет схожести сгенерированных данных и настоящих; Выдача дискриминатором параметров, показывающие то, насколько подлинными являются сгенерированные данные; Обновление параметров генератора и дискриминатора. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будет достигнуто состояние равновесия, при котором дискриминатор не может надежно отличить реальные данные от сгенерированных. При идеальном обучении модель способна генерировать высококачественные данные, не отличимые от реальных.

1.6 Постановка целей и задач

Цель проекта: повысить эффективность моделирования структуры поликристаллического кремния, при использовании минимальных входных данных.

Для достижения цели проекта необходимо решить ряд задач, которые помогут в разработке эффективного алгоритма, основанного на генеративно-состязательных сетях для моделирования поликристаллических структур, в частности кремния.

Основные задачи включают:

- изучение существующих программных средств по моделирование структур кристаллов;

- изучение существующих нейросетевых подходов по моделированию структур кристаллов;

- сбор и подготовка данных для обучения нейросети.

1.7 Выдвигаемые гипотезы

Ожидается, что разработанных подход, основанный на нейросетях, будет способен качественно моделировать структуру кремния, что может быть использовано в прогнозировании структуры выращиваемого кристалла.

Также следует предположить, что такой подход окажется не сильно требовательным к вычислительным ресурсам, что позволит его использовать на настольном компьютере.