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**

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.

1.4 Постановка целей и задач

Цель проекта: разработать систему для моделирования структуры поликристаллического кремния, в основе алгоритмов которой, используются нейросетевые подходы.

Для достижения целей проекта необходимо решить ряд задач, которые помогут в разработке эффективного метода 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.

1.5 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.