Effektives Potential für ultrakurzpulslaser angeregtes Silizium

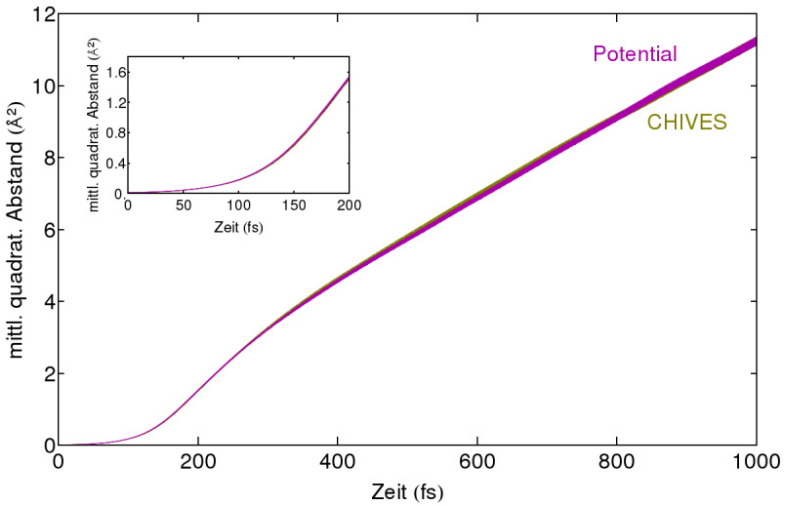

Abb. 1: Vergleich des zeitlich aufgelösten mittleren quadratischen Abstandes der Kristallstruktur zur Diamantstruktur für die Molekulardynamik-Simulationen mit unserem Potential zu den Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen, an die das Potential angefittet wurde.

Introduction

Silizium ist eines der wichtigsten Elemente in der modernen Halbleitertechnik und daher unverzichtbar in der Computer- und Elektronikindustrie. Die Verwendung von ultrakurzen Laserpulsen eröffnet völlig neue Möglichkeiten in der Materialverarbeitung: Der Beschuss einer Silizium-Oberfläche mit ultrakurzen Laserpulsen erzeugt Strukturen mit einer ungeahnten Regelmäßigkeit und Präzision. Um die Vorgänge bei einer solchen Bearbeitung von Silizium zu verstehen, hat Bernd Bauerhenne im Rahmen seiner Doktorarbeit u.a. ein effektives Potential für Silizium entwickelt, das die atomaren Bewegungen mit einer noch nicht dagewesenen Präzision reproduziert.

Methods

In der Arbeitsgruppe wurden die Bewegungen der einzelnen Silizium-Atome nach einer Anregungen mit einem ultrakurzen Puls mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie berechnet und analysiert [1,2]. Bei Silizium führt ein intensiver ultrakurzer Puls dazu, dass die im Grundzustand vorliegende Diamantstruktur innerhalb von wenigen 100 Femtosekunden zerstört wird. Diesen Vorgang nennt man nichtthermisches Schmelzen. An die Atombewegungen einer solchen oben genannten Molekulardynamik-Simulation wurde das Potential für eine ausgewählte Laserfluenz angefittet. Denn ein effektives Potential

Researchers
Dr. Bernd Bauerhenne and E. S. Zijlstra

Principal Investigator
Prof. Dr. Martin E. Garcia

Project Term
2013 - 2015

Project Areas
Optics, Quantum Optics and Physics of Atoms, Molecules and Plasmas, Physical and Theoretical Chemistry

Clusters
Lichtenberg Cluster Darmstadt, Linux Cluster Kassel

Institute
Institut für Theoretische Physik II

University
University Kassel

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

ist eine Funktion, die die Energie des Festkörpers in Abhängigkeit von den Atompositionen angibt. Die funktionale Form des Potentials wurde ausgehend von bereits in der Literatur bekannten Formen optimiert. Der numerisch recht aufwändige Prozess des Anfittens wurde parallel programmiert und die Berechnungen wurden auf dem Linux-Cluster in Kassel, auf dem Lichtenberg-Cluster in Darmstadt und auf dem Computer Cluster Fuchs in Frankfurt durchgeführt. In Spitzenzeiten wurden für einen Fit 2901 Prozessoren in Darmstadt für mehrere Tage verwendet.

Results

Zum Testen wurden unter Verwendung des neuen Potentials die Molekulardynamik-Simulationen wiederholt und mit den zum Fitten verwendeten Dichtefunktionaltheorie Molekulardynamik-Simulationen verglichen. Dies ergab eine sehr gute Übereinstimmung, wie man an Abb. 1 sehen kann, wo der zeit aufgelöste mittlere quadratische Abstand der Kristallstruktur zur Diamantstruktur der Molekulardynamik-Simulationen mit unserem Potential und den Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen (CHIVES) aufgetragen ist. In Zukunft ist eine Erweiterung des Potentials auf einen ganzen Bereich von Laserfluenzen geplant.

Reference

[1] E.S. Zijlstra, A. Kalitsov, T. Zier, and M.E. Garcia (2013), Fractional diffusion in silicon, Advanced Materials, 25, 5605–5608. https://doi.org/10.1002/adma201302559

[2] T. Zier, E.S. Zijlstra, and M.E. Garcia (2014), Silicon before the bonds break, Applied Physics A, 117: 1-5. https://doi.org/10.1007/s00339-014-8316-4

Last Update: 2022-06-30 18:20