

AGENTSCHAP INNOVEREN & ONDERNEMEN

Koning Albert II-laan 35 bus 12
1030 Brussel
T 0800 20 555
Info@vlaio.be
www.vlaio.be

AANGETEKEND
de heer Michael Sluydts
Leeuwstraat 22
B-9000 GENT

Projectadviseur: Francis Deprez
FD; tel: 4301
Ons kenmerk: 2016/4482 - FD/AV
Projectnummer: HBC.2016.0245: te vermelden bij alle verdere contacten
Ab initio bepaling van input parameters voor kristalproductieprocesmodellen voor
germanium
gemotiveerde beslissing
Bijlagen: 1
Datum: 19 JULI 2016

Geachte heer,

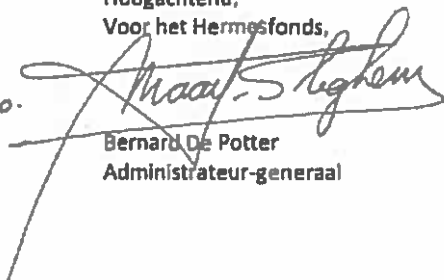
Opbeslissingscomité bij het Hermesfonds 14 juli 2016 werd beslist om uw project HBC.2016.0245 met als titel:
"Ab initio bepaling van input parameters voor kristalproductieprocesmodellen voor germanium" te
subsidieren.

In bijlage sturen we u een kopie van de gemotiveerde beslissing die aan het bedrijf werd overgemaakt.

Voor verder informatie kunt u contact opnemen met de projectadviseur.

Hoogachtend,
Voor het Hermesfonds,

i.o.



Bernard De Potter
Administrateur-generaal



Vlaanderen
Is ondernemen

////////////////////////////////////
Nota ter beslissing

Evaluatie van project nr HBC.2016.0245

Ab initio bepaling van input parameters voor kristalproductieprocesmodellen voor germanium

////////////////////////////////////
Projecttype: Innovatiemandaten Fase 2
Aanvrager: UMICORE NV, OLEN
UMICORE Research
Wet. promotor: UGent, Faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur, ZWIJNAARDE (GENT)
Vakgroep Toegepaste Fysica
Stefaan Cottenier
Copromotor: UGent, Faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur, GENT
Vakgroep Elektronica en Informatiesystemen (ELIS)
Kandidaat Mandataris: Michael Sluydts

PROJECTGEGEVENS: Ingediend op 07/03/2016 Beslist op 14/07/2016
Projectperiode: 36 maanden Startdatum: 01/10/2016

	Begroting	Menskracht	Totale steun
Bij aanvraag:	€ 185.250	18 mm	€ 92.625
Bij beslissing:	€ 185.250	18 mm	€ 92.625

LINK MET ANDERE PROJECTEN

Geen.

PROJECTBESCHRIJVING - INNOVATIEDOEL

Algemene doelstelling:

Het project is gericht op de verbetering van de betrouwbaarheid van het procesmodel dat binnen Umicore gebruikt wordt om de vorming van microdefecten in germanium kristallen tijdens de Czochralski (CZ) groei te simuleren. D.m.v. state-of-the-art 'density functional theory' berekeningen (DFT) wordt een complete coherente set van accurate numerieke waarden nagestreefd op alle relevante parameters die de incorporatie en evolutie van intrinsieke puntdefecten bepalen evenals de agglomeratie tot grote defectclusters.

Concrete doelen en criteria:

Op puur germanium worden volgende grootheden berekend:

- " temperatuurafhankelijke evenwichtsconcentratie van intrinsieke puntdefecten, inclusief de vormingsentropie
- " het diffusiepotentieel van natuurlijke defecten als functie van temperatuur inclusief de pre-exponentiële factor

* de effectieve grondwaarden van oppervlakte-energie van scheuren

* de temperatuurafhankelijkheid van effectieve oppervlakte-energie van scheuren

De resultaten worden vergeleken met de experimentele resultaten van Hüger waarbij de afwijking de experimentele onnauwkeurigheid niet mag overschrijden. Verder kunnen de resultaten gevalideerd worden via verschillende trekparameters in het Cz-proces (vergelijking nucleatietemperatuur, defectprofilering in radiale richting, defectgrootte en dichtheid binnen 15% van de oppervlaktescanresultaten). De Cz validatietesten zouden op fenomeenbasis de defectprofielen en de 'ring'-wafers moeten aantonen. De DFT-berekeningen van de effectieve oppervlakte-energie van scheuren bij verschillende temperaturen moeten informatie verstrekken over het nucleatie-temperatuurbereik.

Het ultieme concrete doel ligt:

* het bepalen van de vormingsenergieën voor Ga-V en Ga-I complexen

* het bepalen van de galliumconcentratie om dergelijke interstitieel-rijke germaniumkristallen (theoretisch) te trekken

* als de DFT berekeningen een merkbaar effect op de galliumconcentratie aantonen, zullen de berekeningen van de thermodynamische eigenschappen vanuit de pure germaniumsimulatie herhaald worden

* het kwantificeren van de invloed van waterstof- en zuurstofcontaminatie op de effectieve oppervlakte-energie van grote scheuren

Finaal dient het resulterende Cz-procesmodel de pitgrootte en -densiteit te voorspellen met dezelfde accuraatheid zowel voor puur als voor industriële "gallium-doped" kristallen.

Aanwending van de resultaten:

Bij een nauwkeurige kennis van de fundamentele defectparameters van het Cz-proces kunnen experimentele proeven (gedeeltelijk) vervangen worden door numerieke simulatie. Dit leidt tot een substantiële vermindering van de ontwikkelingskosten bij UMICORE, en verhoogt rechtstreeks de competitiviteit.

Een ander direct effect ligt in het onderzoek naar 'ring'-wafers (ringvormige zone op een germaniumsubstraat met een sterk verhoogde defectdensiteit). Experimenteel werd deze ringvormige verstoring vastgesteld, maar het mechanisme is tot op heden niet begrepen.

Een verbeterd Cz-model zal eveneens gebruikt worden in de verbetering van het hot-zone ontwerp van Cz-pullers.

Het gezamenlijke effect moet Umicore blijvend positioneren in het topsegment op het gebied van kwaliteit gecombineerd met een economisch aanvaardbare hogere productie kostprijs. De doelmarkten liggen op zonnecellen voor ruimtevaart (met voornamelijk groei op niet geostationaire satellieten), zonne-energiecollectoren.

HET EXTERN ADVIES

De kandidaat is goed onderlegd in het vakgebied en heeft een sterke academische koppeling. De complexiteit van de opdracht wordt kritisch benaderd. Tevens schat de kandidaat de technologische relatie en de samenwerking met Umicore correct in en geeft de sterke en zwakke elementen van deze samenwerking weer. De wetenschappelijke uitdaging is substantieel, met een hoog risico. De kandidaat benadert deze onzekerheden correct. Het werkplan is uitgewerkt voor een 50% bezetting gedurende 3 jaar, terwijl de kandidaat additionele stappen plant in het zelfstandig aanbieden van gerelateerde berekeningsmethodes (super computing).

Het project situeert zich in een kosten-competitieve sector waarin Umicore zich probeert te handhaven. Het project wordt vanuit Umicore eerder gezien als een opportuniteit, dan als een zekere weg naar structurele verbetering. De valorisatie wordt door de kandidaat ook op dit vlak correct weergegeven, inclusief de mogelijkheden tot verdere samenwerking. De toegang tot de industriële kennisdatabase van Umicore over het germanium trekproces is niet verzekerd, wat enigszins reserves geeft bij de diepere valorisatiebeheersing bij de kandidaat. Niettemin kunnen de resultaten voor Umicore een strategisch voordeel opleveren in het produceren van hoogwaardig germanium voor de betreffende nichemarkten. Het vermijden van 'ring'-wafers is hierbij beduidend. Het valorisatiepotentieel is voor Umicore beperkt tot het verwerven van een groter marktaandeel door een kwalitatief beter aanbod evenals door een scherpere productiekost via het vermijden van additionele experimentele bepalingen. Met de deeltijdse bezetting in het mandaat is er een goede balans tussen omvang en potentiële meerwaarde.

EVALUATIEROOSTER

	Kritisch	Zwak	Redelijk goed	Goed	Zeer goed
I. Wetenschappelijke kennis					
A. Kandidaat					
A1 Wetenschappelijke kennis en begeleiding				X	
A2 Redeneervermogen en kritische geest				X	
B. Project					
B1 Wetenschappelijk niveau en uitdagingen				X	
B2 Kwaliteit werkplan en haalbaarheid				X	
A. Kandidaat					
A1 Inzicht in strategisch belang en valorisatie			X		
A2 Engagement tot valorisatie				X	
B. Project					
B1 Strategisch belang voor bedrijf				X	
B2 Omvang en waarschijnlijkheid valorisatie				X	

BESLUITVORMING

Er wordt beslist dit projectvoorstel te steunen.

De financiële positie en de cofinancieringscapaciteit van het bedrijf werden bepaald. Er zijn geen indicaties dat het bedrijf niet in staat zou zijn om de eigen bijdrage in de kosten van het project te financieren.

BESLISSING:

Op basis van het besluit van de Vlaamse Regering van 12 december 2008 tot regeling van de steun aan projecten van onderzoek en ontwikkeling van het bedrijfsleven in Vlaanderen wordt aan de aanvrager(s) van dit project een subsidie toegekend.

De subsidie is als volgt samengesteld:

	Personeelskost (€)	MM	Overige kosten (€)	Subsidie-percentage	Totale maximale subsidie (€)
UMICORE RESEARCH OLEN	0,00	0,0	10.000,00	50%	5.000,00
RUG-TW-FYS-CMM	125.250,00	18,0	50.000,00	50%	87.625,00
TOTAAL PROJECT	125.250,00	18,0	60.000,00		92.625,00

Legende:

Begunstigde (in vetgedrukte tekst)

Onderzoekspartner (in normale tekst)

Met volgende specifieke voorwaarde(n):

- De toekenning van de Subsidie is afhankelijk van de ontvangst van het doctoraatsdiploma van de Mandaathouder vermeld in Referentiedocument 2 ten laatste op de dag van de startdatum van het Project.