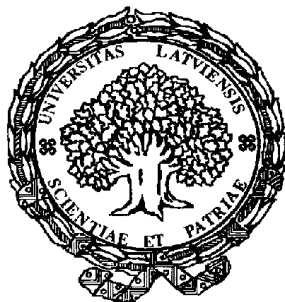


Kaspars Lācis

Dabaszinātņu maģistrs fizikā

**Magnētisko lauku ietekmes uz kausējuma kustību 3D
skaitliskā modelēšana peldošās zonas kristālu
audzēšanas procesam**

Promocijas darba kopsavilkums



Latvijas Universitāte
Rīga - 2010

Promocijas darba veids: zinātnisku publikāciju kopa.

Zinātniskais vadītājs: asoc. prof. Dr. Phys. **Andris Muižnieks** (LU)

Darba recenzenti:

1. _____

2. _____

3. _____

Darba aizstāvēšana notiks Latvijas Universitātes Fizikas un astronomijas zinātnes nozares promocijas padomes atklātā sēdē

2010. gada _____

pulksten _____

_____ auditorijā.

Ar darbu un tā kopsavilkumu var iepazīties Latvijas Universitātes bibliotēkā (Rīgā, Kalpaka bulv. 4) un Latvijas Akadēmiskajā bibliotēkā (Rīgā, Rūpniecības ielā 10).

LU Fizikas un astronomijas zinātnes nozares
speciālās promocijas padomes priekšsēdētājs: _____

Anotācija

Darbs ir veltīts šķidruma kustības, temperatūras lauka un piemaisījumu pārnesei trīsdimensionālai (3D) nestacionārai matemātiskajai modelēšanai izkusušajā zonā industriālajam peldošās zonas (PZ) silīcija monokristālu audzēšanas procesam ar papildus pieliktiem maiņstrāvas un līdzstrāvas magnētiskajiem laukiem.

Ir izveidota noslēgta matemātisko modeļu un programmatūras sistēma skaitliskam fāzu robežu un temperatūras un elektromagnētisko lauku uz silīcija virsmām sadalījumu aprēķinam, lai veiktu 3D nestacionāru šķidruma kustības, temperatūras lauka un piemaisījumu pārnesei kausējumā simulāciju PZ silīcija monokristālu audzēšanas procesam. Attīstītā modeļu sistēma ir daļēji balstīta uz iepriekš attīstītām komponentēm. Aprēķinātie piemaisījumu sadalījumi uz kristalizācijas virsmas tiek lietoti, lai noteiktu radiālos īpatnējās pretestības sadalījumus izaudzētajā kristālā. Speciāls modelis ir izveidots arī izejmateriāla stieņa kausēšanai ar augstas frekvences (AF) induktoru.

Ir veikta kausējuma kustības ietekmes uz īpatnējās pretestības sadalījumu izaudzētā kristālā maiņstrāvas un līdzstrāvas magnētisko lauku klātbūtnē 3D nestacionāra modelēšana. Izveidotie modeļi un programmatūra tika lietoti arī lai aprēķinātu šķidruma kustību un temperatūras lauku nesimetriskos kausējuma apgabalos, piemēram, gadījumos ar nobīdītām izejmateriāla stieņa un kristāla asīm vai gadījumos ar PZ procesa kvadrātiskas formas kausējuma apgabalu un ar nerotējošu kristālu.

Tika pētīts nestacionārs kausējuma ātruma un kristāla augšanas ātruma fluktuāciju process kristalizācijas frontes tuvumā. Tika analizēta šo fluktuāciju ietekme uz piemaisījumu segregāciju un tādejādi uz īpatnējās pretestības izkliedi izaudzētajā kristālā.

Tika izveidota bezmaksas programmatūras pakete, lai nestacionāri modelētu kausējuma kustību, temperatūras un piemaisījumu sadalījumu laukus PZ monokristālu audzēšanas procesā gadījumos ar un bez kristāla rotācijas.

Saturš

1	Ievads	4
1.1	Peldošās zonas silīcija monokristālu audzēšanas procesa galvenās īpašības .	4
1.2	Literatūras apskats	5
1.3	Promocijas darba mērķi	7
1.4	Publikācijas un dalība konferencēs	7
1.5	Dalība starptautiskos zinātniskos un sadarbības projektos	9
2	Matemātisko modeļu kopums PZ sistēmai ar papildus pievienotiem līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētiskajiem laukiem	11
2.1	2D aksiāli simetriski fāzu robežu aprēķini	12
2.2	3D AF EM lauks; Siltuma un EM spēku avotu noteikšana	12
2.3	3D nestacionāra kausējuma kustība, temperatūras lauks un piemaisījumu pārnese	14
2.4	Pretestības aprēķins audzētajā kristālā	17
2.5	Līdzstrāvas magnētiskā lauka ietekme	18
2.6	Maiņstrāvas magnētiskā lauka ietekme	19
3	Matemātisko modeļu realizācija OpenFOAM un citās HD modelēšanas programmās	21
3.1	Komerčiālās programmu paketes CFD-ACE©un Fluent©	21
3.2	Aprēķinu programmas, kas balstītas uz OpenFOAM	22
4	Līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētisko lauku ietekmes uz kausējuma kustību pētījumi	24
4.1	Modelētā 4 collu sistēma un izmantotie parametri	24
4.2	Skaitlisko rezultātu kopsavilkums 4 collu sistēmai ar pievienotiem maiņstrāvas un līdzstrāvas magnētiskajiem laukiem	25
4.3	Rezultātu analīze 4 collu sistēmas gadījumā	33
4.3.1	Vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks	33
4.3.2	Rotējošs maiņstrāvas magnētiskais lauks	35
4.4	Aprēķinu rezultāti un to analīze 6 collu sistēmai ar pievienotu maiņstrāvas magnētisko lauku	35
4.5	Secinājumi	37
5	Specifisku PZ kristālu audzēšanas procesa kausējuma kustības aspektu modelēšana	39

5.1	4" sistēmas aprēķini ar mainītu kristāla rotācijas ātrumu	39
5.2	Raksturīgā pārkārtošanās laika analītisks novērtējums	41
5.3	3D nestacionāri ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauku aprēķini 4" PZ procesā	42
5.4	Lokālā kristalizācijas ātruma analīze	46
5.5	Analītisks lokālo kristalizācijas ātruma izmaiņu dēļ radušos koncentrācijas svārstību novērtējums	47
5.6	Secinājumi	49
6	3D nestacionāra kausējuma kustības modelēšana kvadrātveida PZ silīcija kristāla audzēšanas procesā	50
6.1	Aprēķinātie 3D kausējuma ātruma un temperatūras lauki	50
6.2	Secinājumi	51
7	Izejmateriāla stieņa kausēšanas AF EM laukā modelēšana	52
7.1	Industriālā PZ procesa īpatnības	52
7.2	Vienkāršs nestacionārs peļķveida kušanas modelis	53
7.3	Aprēķinu rezultāti neņemot vērā peļķē inducēto siltumu	54
7.4	Aprēķinu rezultāti ņemot vērā peļķu ekranēšanas efektu	56
7.5	Secinājumi	57
8	Galvenie rezultāti	58

1 Ievads

1.1 Peldošās zonas silīcija monokristālu audzēšanas procesa galvenās īpašības

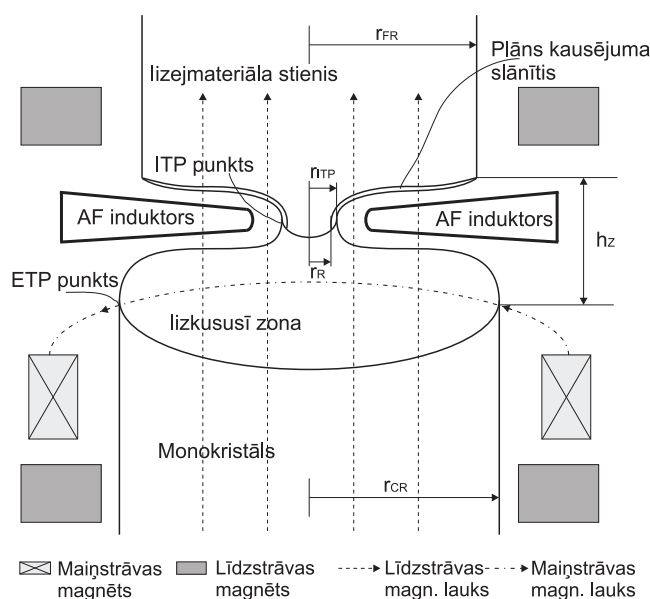
Ja pusvadītāju materiālu dotē ar piemaisījumiem, tā elektriskās īpašības var tikt kontrolēti mainītas. Šo īpašību dēļ pusvadītāji tiek lietoti dažādu ierīču, piemēram, saules bateriju, tranzistoru, mikroprocesoru u.c. ražošanā. Nozīmīgais pielietojums prasa intensīvu pusvadītāju materiālu un to ražošanas procesu pētniecību. Visplašāk lietotie elementārie pusvadītāji ir silīcijs (Si) un germānijs (Ge), kamēr gallija arsenīds (GaAs) ir visvairāk izplatītais saliktais pusvadītājs [1].

Pateicoties relatīvi zemei izejas materiāla izmaksai un relatīvi vienkāršai apstrādei, silīcijs ir visvairāk lietotais materiāls. Atkarībā no pielietojuma, tiek lietotas dažādas silīcija monokristālu ražošanas (audzēšanas) metodes. Lai iegūtu pēc iespējas tīrākus kristālus, tiek lietota peldošās zonas (PZ) metode, jo šajā procesā salīdzinājumā ar Čohraļska procesu kausējums nav kontaktā ar tīģeli vai kādu citu materiālu, ja neskaita izaudzēto kristālu un izejmateriāla stieni [2], skat. procesa shematisku attēlu Att. 1.1.

Izaudzētā kristāla īpatnējā vadītspēja var tikt kontrolēta dotējot kausējumu ar III vai V grupas materiālu, piemēram, ar fosforu vai boru. Piemaisījumu konvekcija un tādejādi sadalījums izaudzētā kristālā ir tieši atkarīgi no kausējuma kustības. Tā kā homogēnāks piemaisījumu sadalījums noved pie homogēnākas īpatnējās pretestības kristālā, kausējuma kustības kontrole ir viens no izaicinājumiem monokristālu ražotājiem, kuri lieto PZ procesu. Kausējuma kustību nosaka kristāla un izejmateriāla stieņa rotācija, elektromagnētiskie spēki un termiskie nosacījumi, kurus rada viena vijuma augstas frekvences (AF), apmēram 3 MHz, induktors. Kā papildus iespēja efektīvi ietekmēt kausējuma kustību ir līdzstrāvas vai maiņstrāvas magnētisko lauku pielietojums.

Galvenais kristālu audzēšanas industrijas mērķis ir lielāku diametru kristālu ražošana īsākā laikā ar pēc iespējas homogēnāku īpatnējās pretestības sadalījumu. Lai sasniegtu šo mērķi, ir nepieciešama nepārtraukta procesa attīstīšana. Laboratorijas eksperimenti ir ļoti dārgi, tāpēc ir nepieciešama dažādu kristāla audzēšanas procesa stadiju matemātiskā modelēšana. Plašais parametru klāsts, kas ietekmē PZ procesu, padara to ļoti sarežģītu, tāpēc globāla PZ procesa modelēšana nav plaši izplatīta. Tā vietā viss process tiek parasti sadalīts mazākās problēmās, kas tad tiek aplūkotas atsevišķi.

Šis darbs ir veltīts galvenokārt kausējuma kustības un piemaisījumu pārnesei izkusušajā zonā modelēšanai. Konkrētā AF induktora forma tiek ievērota lai noteiktu termiskos un



Att. 1.1: Peldošās zonas procesa shematiskais attēlojums vertikālā šķērs griezumā.

ātruma robežnosacījumus uz kausējuma brīvās virsmas. Tiek pētīts zemas frekvences rotējoša maiņstrāvas magnētiskā lauka un līdzstrāvas magnētiskā lauka ietekmes uz kausējuma kustību pielietojums. Tiek veikti nestacionāru procesu pie kristalizācijas frontes un to ietekmes uz piemaisījumu segregācijas procesu pētījumi. Tiek modelēta kausējuma kustība arī izkusušajā zonā kvadrātveida kristālu PZ audzēšanas procesam, kas izmanto speciālas formas AF induktorus. Neliels pētījums ir veltīts izejmateriāla stieņa kausēšanas ar AF induktoru procesam.

1.2 Literatūras apskats

Dažādu PZ silīcija monokristālu audzēšanas procesa posmu skaitliskā modelēšana tiek veikta jau vairāk nekā 30 gadus. Viens no pirmajiem darbiem ir veltīts šķidrums kustības modelēšanai apgabalā ar fiksētām robežām [3]. Tikai vairākus gadus vēlāk tika izdarīti pirmie mēģinājumi noteikt kausējuma formu darbā [4]. Vairāki autori ir rēķinājuši kausējuma brīvās virsmas formu, nemainot atklāto kušanas fronti un iekšējā trīskāršā punkta (ITP) pozīciju [5, 6, 8]. Mazu kristālu gadījums (≤ 10 mm) tiek apskatīts darbā [7]. Daudz pilnīgāku pieeju izveidoja un attīstīja A. Muehlbauera grupa, kas tuvināti ņēma vērā induktora trīsdimensionālās īpašības aprēķinot 2D aksiāli simetriskas fāzu robežas un EM lauku [9–13] rezultātā izveidojot daļēji nestacionāru modeli aksiāli simetriskiem fāzu robežu aprēķiniem, kas aprakstīts [14].

2D laikā vidējots piemaisījumu koncentrācijas lauka aprēķins un makroskopisks pretestības sadalījums ir dots [8] un [15]. Rakstā [16] makroskopiskie pretestības sadalījumi, kas iegūti izmantojot [15] doto modeli, ir salīdzināti ar 4-punktu pretestības mērījumiem eksperi-

mentāli audzētos kristālos. Daži nestacionāri hidrodinamikas un temperatūras aprēķini, kuros apskatīti 100 mm kristāli, doti [17], un 10 mm kristāli - [18]. Nestacionāri koncentrācijas aprēķini veikti darbā [17], kurā pētītas makroskopiskas nehomogenitātes.

Tā kā "pankūkas" tipa induktoram ir tikai viens vijums, AF EM laukam, EM spēku un inducētās jaudas laukiem uz kausējuma brīvās virsmas ir izteiktas nesimetriskas īpašības. Matemātiskais modelis 3D AF EM lauka aprēķinam ir dots [20]. Gan minētie trīsdimensionālie aspekti, gan iespējamā kristāla un polikristāla asu nobīde, gan kristāla rotācija rada asimetrisku hidrodinamisko, termisko un koncentrācijas lauku struktūru kausējumā, kas rada pretestības svārstības un izmaiņas audzētajā kristālā. Tā kā šīs izmaiņas rodas dēļ izteiktiem trīsdimensionāliem aspektiem, to aprēķins ar divdimensionālām metodēm ir ar būtiskām nepilnībām.

Daži 3D neindustriālo PZ procesu (mazi kristālu diametri) aspekti ir apskatīti [19]. Darbā [21] doti 3D industriālā PZ procesa aprēķini, kuros ņemta vērā trīsdimensionālā EM un Marangoni spēku ietekme. Kausējuma kustība kristālu ar diametriem, kas lielāki par 100 mm, audzēšanas procesā 3D tuvinājumā ir modelēta ar komerciālu aprēķinu paketi darbā [22]. Rotācijas radīto pretestības svārstību salīdzinājums ar eksperimentu veikts [23]. Tomēr nevienā no apskatītajiem darbiem nav ņemta vērā kristāla un izejmateriāla stieņu asu nobīde.

Maza izmēra silīcija kristālu PZ audzēšanas process ar papildus pievienotu līdzstrāvas magnētisko lauku apskatīts darbos [24] un [25]. Gan līdzstrāvas, gan maiņstrāvas magnētisko lauku izmantošana ir ļoti izplatīta Čokraļska silīcija kristālu audzēšanas procesā un šī iemesla dēļ skaitliskie aprēķini ir plaši dokumentēti literatūrā, piemēram, [26], [27]. Rakstā [28] 2D tuvinājumā modelēta rotējošā magnētiskā lauka ietekme uz termokapilāro plūsmu mazu kristālu PZ audzēšanas procesā. Termiskā konvekcija un Marangoni plūsma rotējošā magnētiskā lauka ietekmē PZ 6mm GaAs kristālu audzēšanas procesā pētīta darbā [29]. Gan līdzstrāvas, gan maiņstrāvas magnētisko lauku izmantošana PZ sistēmā mikrogravitācijas apstākļos ir skaitliski simulēta darbā [30]. Darbos [31], [32] veikti eksperimentāli, [33] - 2D un [24] - 3D skaitliski aprēķini aksiāla magnētiska lauka ietekmei uz kristālu audzēšanas PZ procesu spoguļkrāsni. Lielu kristālu audzēšanas sistēmās veikti tikai aksiāli simetriski aprēķini aksiālu līdzstrāvas un rotējošu maiņstrāvas magnētisko lauku ietekmei [34]. Rotējošs magnētisks lauks pētīts gan skaitliski, gan eksperimentāli spoguļkrāsns procesos darbā [35]. Tomēr neviens no minētajiem darbiem nav apskatījis līdzstrāvas magnētisko lauku ietekmi uz lielu kristālu audzēšanas PZ procesu 3D nestacionāros aprēķinos.

Piemaisījumu segregācijas nestacionārie aspekti kristālu audzēšanas procesos nav apskatīti ļoti plaši. Tiek uzskatīts, ka kristāla augšanas ātruma izmaiņas temperatūras gradienta svārstību dēļ nespēlē nozīmīgu lomu segregācijas procesa ietekmēšanā salīdzinājumā ar konvektīvo masas pārnesei. Šī iemesla dēļ tikai daži raksti apskata šo problēmu. J. P. Garand darbā [37] veicis analītiskus novērtējumusbet T. Jungs et. al. rakstā [38] veicis 2D skaitlisku analīzi un salīdzinājis ar analītiskiem novērtējumiem Bridžmana iekārtai. Tomēr

abos gadījumos temperatūras svārstības tiek uzspiestas no ārpuses un tad pētīta to ietekme uz kristalizācijas procesu.

1.3 Promocijas darba mērķi

Šajā darbā pabeigta matemātisko modeļu sistēma, kas ļauj veikt dažādu silīcija monokristālu PZ audzēšanas procesa posmu skaitlisko modelēšanu. Ir attīstītas nepieciešamās programmatūras komponentes un veikta kausējuma kustības modelēšana. Pirms darba veikšanas tika uzstādīti sekojoši mērķi:

1. Izmantojot iepriekš izveidotās komponentes 2D fāzu robežu, kā arī 3D inducētās jaudas un elektromagnētisko spēku uz kausējuma brīvās virsmas aprēķinam, attīstīt pilnīgu matemātisko modeļu sistēmu un atbilstošās programmas ar mērķi veikt 3D nestacionāru šķidrums kustības, temperatūras un piemaisījumu koncentrācijas lauku matemātisko modelēšanu izkusušajā zonā PZ silīcija monokristālu audzēšanas procesā. Aprēķinātais piemaisījumu sadalījums uz kristalizācijas frontes nosaka pretestības sadalījumu audzētajā kristālā. Papildus uzmanība jāvelta arī izejmateriāla stieņa kausēšanas procesam un iespējām uzlabot tā matemātisko modelēšanu;
2. Papildināt attiecīgās matemātiskā modeļa komponentes un programmu komponentes, lai varētu pētīt šķidrums kustības ietekmi uz pretestības sadalījumu audzētajā kristālā maiņstrāvas un līdzstrāvas magnētisko lauku klātbūtnē. Aprobēt izveidotos modeļus un programmatūru, izmantošanai šķidrums kustības un temperatūras sadalījuma modelēšanai nesimetriskos kausējuma apgabalos, piemēram, ar nobīdītām izejmateriāla stieņa un kristāla asīm vai kvadrātveida kausējumā PZ procesā bez kristāla rotācijas;
3. Izpētīt nestacionārās kausējuma kustības un kristāla vilkšanas ātruma svārstību procesu kristalizācijas frontes tuvumā. Izpētīt šī procesa ietekmi uz piemaisījumu segregācijas procesu, kas nosaka pretestības izkliedi audzētajā kristālā;
4. Attīstīt programmu paketi, kurai nebūtu jāiegādājas licences, lai varētu veikt nestacionāru kausējuma kustības, temperatūras un piemaisījumu koncentrācijas lauku matemātisko modelēšanu PZ silīcija monokristālu audzēšanas procesos ar un bez kristāla rotācijas.

1.4 Publikācijas un dalība konferencēs

Lai sasniegtu izvirzītos mērķus, tika veikta plaša modeļu testēšana un dažādu PZ sistēmu matemātiskā modelēšana, paralēli turpinot attīstīt lietoto programmatūru. Rezultāti ir publicēti sekojošajās publikācijās, kas iekļautas šajā promocijas darbā:

[dis1] A. Muiznieks, **K. Lacis**, "Polycrystalline silicon melting in high frequency EM field for industrial FZ growth of single crystals", Latvian Journal of physics and technical sciences, No. 4, (2003), pp. 43-57.

[dis2] **K. Lacis**, A. Muiznieks, G. Ratnieks, "3D mathematical model of melt hydrodynamics in the silicon single crystal FZ-growth process with rotating magnetic field", Magnetohydrodynamics, Vol. 41 (2005), No. 2, 147-158.

[dis3] A. Muiznieks, **K. Lacis** and B. Nacke, "3D unsteady modelling of the melt flow in the FZ silicon crystal growth process", Magnetohydrodynamics Vol. 43 (2007), No. 3, pp. 377-386.

[dis4] **K. Lacis**, A. Muiznieks, N. Jekabsons, A. Rudevics, B. Nacke, "Unsteady 3D and analytical analysis of segregation process in the Floating zone silicon single crystal growth", Magnetohydrodynamics, Vol. 45 (2009), No. 4, pp. 549-556.

[dis5] **K. Lacis**, A. Muiznieks, A. Rudevics, A. Sabanskis, "Influence of DC and AC magnetic field on melt motion in FZ Si large single crystal growth", Magnetohydrodynamics.

Bez jau minētajām publikācijām autors strādājis arī pie sekojošajām publikācijām:

[dis6] A. Muiznieks, I. Madzulis, K. Dadzis, **K. Lacis** and Th. Wetzel, "Simplified Monte Carlo simulations of point defects during industrial silicon crystal growth", Journal of Crystal Growth, Volume 266, Issues 1-3, 15 May 2004, Pages 117-125.

[dis7] A. Muiznieks, A. Rudevics, **K. Lacis**, H. Riemann, A. Luedge, F.W. Schulze and B. Nacke, "Square-shaped silicon crystal rod growth by the FZ method with special 3D shaped HF inductors", Magnetohydrodynamics, Vol. 43, (2007), No. 2, 269-282.

Iegūtie rezultāti ir prezentēti sekojošajās konferencēs un semināros:

[conf1] **K. Lacis**, A. Muiznieks, "Modeling of the open melting front in HF EM field for FZ silicon single crystal growth process", Workshop "Use of Magnetic Fields in Crystal Growth", December 5 and 6, 2003, Institute of Physics and Department of Physics of Latvia University, Zellu Str. 8, LV-1002, Riga, Latvia.

[conf2] **K. Lacis**, A. Muiznieks, "3D modeling of influence of HF inductor geometry on FZ silicon crystal growth process and HD processes in molten silicon", 12th International Summer School on Crystal Growth, 2004., Berlin, Germany.

[conf3] **K. Lacis**, A. Muiznieks, G. Ratnieks, "3D modeling of HF EM, HD and dopant concentration fields for the FZ crystal growth process", Joint Riga-Pamir conference, 2005, Jurmala, Latvia

[conf4] A. Muiznieks, A. Rudevics, **K. Lacis**, H. Riemann, A. Luedge, F.W. Schulze, B. Nacke, "Square-like Silicon Crystal Rod Growth by FZ Method with Especially 3D

Shaped HF Inductors", 4th International Scientific Colloquium Modelling for material processing, Riga, June 8-9, 2006

[conf5] **K. Lacis**, A. Muiznieks, "Segregation phenomena in FZ process due to fluctuations of melt motion", Angewandte Simulation in der Kristallzuechtung - 5. WORKSHOP, Iphofen, April 24-26, 2007

[conf6] A. Muiznieks, A. Rudevics, **K. Lacis**, H. Riemann, A. Ludge, J. Fischer, F.W. Schulze, "3D modeling for the square-shaped silicon crystal growth process by FZ method", 7th PAMIR International Conference on Fundamental and Applied MHD Presqu'île de Giens - France, September 8 - 12, 2008.

[conf7] **K. Lacis**, A. Muiznieks, N. Jekabsons, B. Nacke, G. Ratnieks, "3D unsteady modelling of the influence of applied magnetic field on the melt flow in FZ Si single crystal growth", 7th PAMIR International Conference on Fundamental and Applied MHD Presqu'île de Giens - France, September 8 - 12, 2008.

[conf8] **K. Lacis**, A. Muiznieks, H. Riemann, A. Luedge, J. Timosenko, A. Sabanskis, A. Rudevics, "Numerical study of 3D melt flow in the square-shaped silicon crystal growth process by FZ method", 6th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials, Dresden, October 19-23, 2009, Germany.

[conf9] **K. Lacis**, A. Muiznieks, B. Nacke, "Numerical study of 3D melt flow and dopant mass transport under influence of AC and DC magnetic fields in industrial FZ Si single crystal growth process", 6th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials, Dresden, October 19-23, 2009, Germany.

Sekojošās prezentācijas sniedza citi līdzautori:

[conf10] A. Muiznieks, A. Krauze, A. Rudevics, **K. Lacis**, Th. Wetzel, B. Nacke, "State of the art of numerical modelling of industrial silicon single crystal CZ and FZ growth", HES-04, International Symposium on Heating by Electromagnetic Sources. Induction, Dielectric, Conduction and EMP. Topic: Numerical modelling for electromagnetic processing. Padua, June 23-25, 2004.

[conf11] **K. Lacis**, A. Muiznieks, N. Jekabsons, A. Rudevics, G. Ratnieks, B. Nacke, "Unsteady 3D and analytical analysis of segregation process in FZ Si single crystal growth", 5th International Scientific Colloquium Modelling for electromagnetic processing, Hannover, October 27-29, 2008

1.5 Dalība starptautiskos zinātniskos un sadarbības projektos

Pētījumi tika veikti ar sekojošu projektu atbalstu:

- "Doktorantu un jauno zinātnieku pētniecības darba atbalsts Latvijas Universitātē",

ESF projekts, Latvijas Universitāte, (2005-2008).

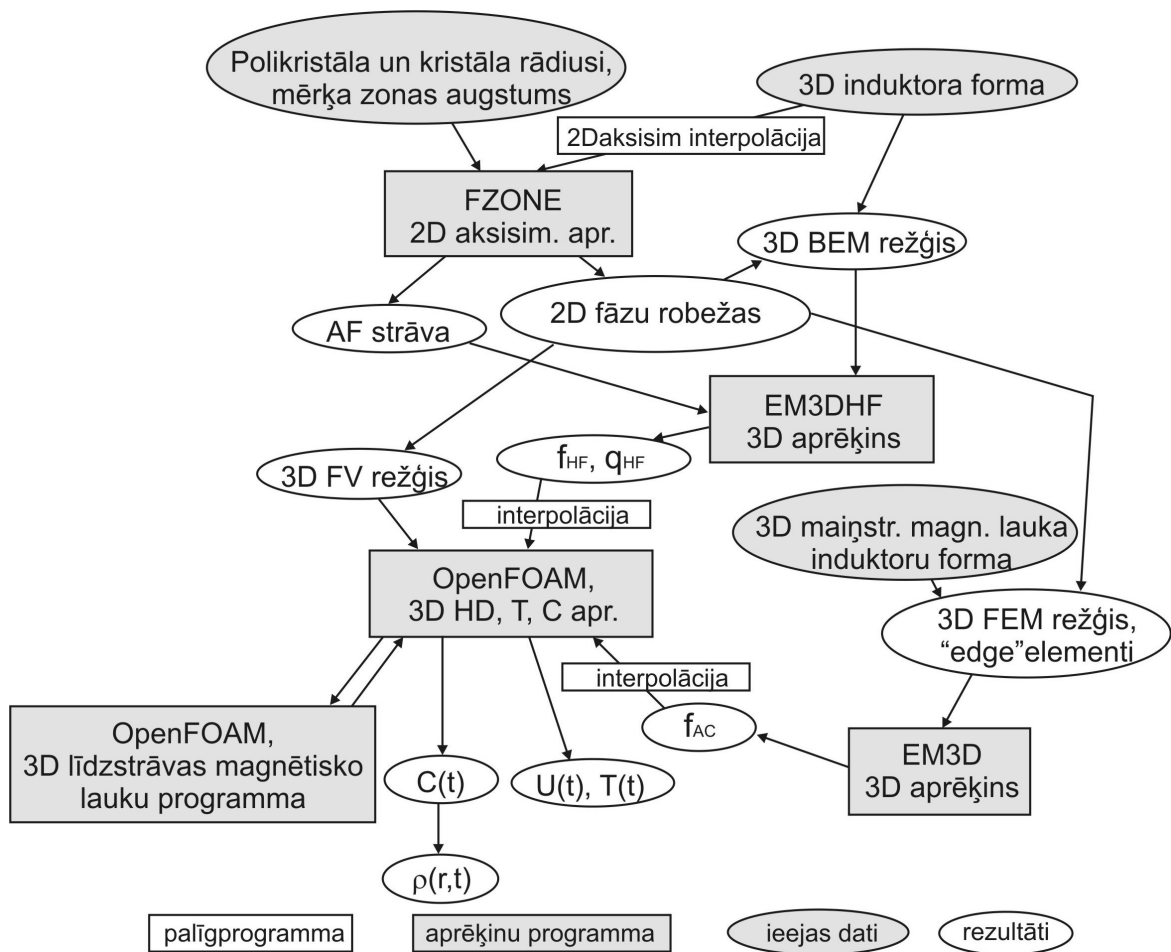
- "Nano-, elektronikas un kompozītmateriālu un tehnoloģiju matemātiskā modelēšana", ERAF projekts, Latvijas Universitāte, (2006-2008).
- "Atbalsts doktora studijām Latvijas Universitātē", ESF projekts, Latvijas Universitāte, (2009-2010).
- Līgumdarbs ar Hannoveres Universitātes institūtu: Institute for Electrothermal Processes, Vācija, par tēmu - silīcija kristālu audzēšanas procesu matemātiskā modelēšana, (2003-2010).

Minēto projektu ietvaros autors ir stažējies sekojošās ārzemju institūcijās: Institute for Electrothermal Processes, Hannoveres Universitāte, Vācija, (Marts - Maijs 2004); kristālu audzēšanas rūpnīca Siltronic AG, Burghauzena, Vācija (februāris 2007, jūlijs 2007 un februāris 2008); 12-tā starptautiskā kristālu audzēšanas vasaras skola, augusts 2004., Berlīne, Vācija.

2 Matemātisko modeļu kopums PZ sistēmai ar papildus pievienotiem līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētiskajiem laukiem

Šī darba ietvaros ir attīstīta modeļu sistēma PZ silīcija monokristālu audzēšanas procesa skaitliskajai modelēšanai. Šī sistēma sastāv no vairākām komponentēm, kas katra apraksta atsevišķu kristāla audzēšanas procesa posmu. Matemātiskos modeļus un atbilstošo programmatūru 2D aksiāli simetriskai kausējuma formas aprēķināšanai attīstīja J. Virbulis, G. Ratnieks un A. Rudevičs A. Muižnieka vadībā. A. Muižnieks izveidoja arī modeli 3D AF EM lauka aprakstam. Atsevišķi tuvinājumi, kas tiek lietoti 3D kausējuma kustības, temperatūras un piemaisījumu koncentrācijas lauku aprēķinam ir aprakstīti G. Ratnieka doktora disertācijā. Šajā darbā visi iepriekš minētie modeļi tika sasaistīti, veidojot tam speciālus palīgrīkus. Tāpat 3D nestacionārais modelis kausējuma kustības aprēķinam tika papildināts ar iespēju ņemt vērā līdzstrāvas magnētiskā lauka ietekmi, kā arī ar vairākiem jauna tipa robežnosacījumiem ātruma un koncentrācijas laukiem. Papildus tika radītas vairākas datu pirms un pēcapstrādes programmas labākai rezultātu interpretēšanai.

Sekojošajās apakšnodaļās tiks dots izmantoto matemātisko modeļu kopsavilkums, kas sīkākās detaļās ir aprakstīts publikācijās [dis2], [dis3], [conf7] un [dis5]. Galvenās mijiedarbības saites starp modeļa komponentēm un atbilstošā programmatūra ir attēlota Att. 2.1. Visas nepieciešamās programmu komponentes ir speciāli programmētas un daļēji balstītas uz atvērtā koda platformām, tāpēc aprēķini ir veicami neizmantojot komerciālās programmas.



Att. 2.1: Modeļa komponentu, programmu un to mijiedarbības vispārējā shēma.

2.1 2D aksiāli simetriski fāzu robežu aprēķini

Kausējuma formas ieguve, izmantojot zināmos procesa parametrus, ir pirmais aprēķinu uzdevums. 2D aksiāli simetriskās fāzu robežas PZ procesam tiek aprēķināts ar specializētu programmu *FZONE* [14]. Parametri, kas nepieciešami, lai definētu procesu, ir induktora ģeometrija, izejmateriāla stieņa un kristāla ģeometrija ārpus kušanas zonas, materiālu fizikālās īpašības, plānotais zonas augstums h_Z , skat. Att. 1.1, kristāla vilkšanas ātrums un strāvas frekvence AF induktorā (tipiski apmēram 3 MHz). Aprēķinu laikā tiek iteratīvi atrasta AF strāva un kausējuma forma. Iegūtās fāzu robežas tālākajos aprēķinu posmos tiek izmantotas, lai veidotu nepieciešamos režģus 3D AF EM un 3D HD aprēķiniem.

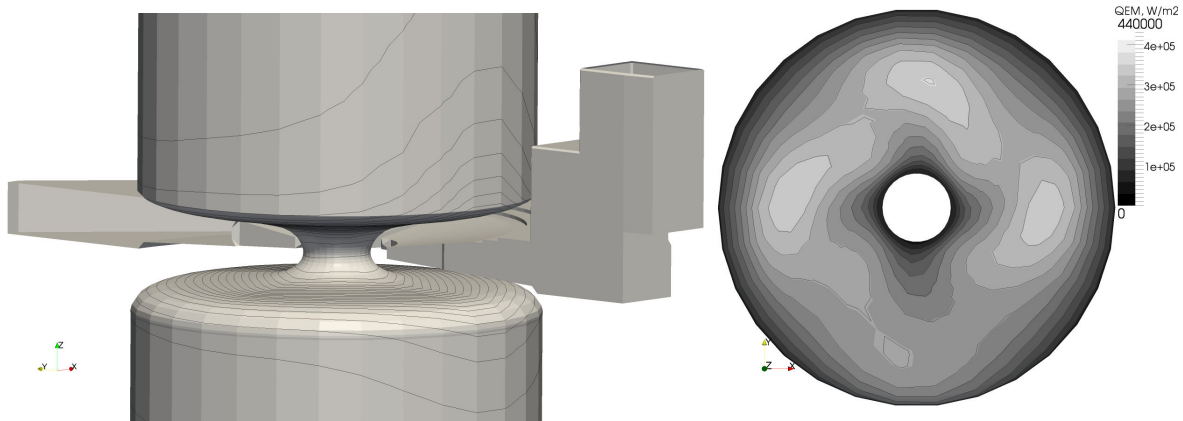
2.2 3D AF EM lauks; Siltuma un EM spēku avotu noteikšana

Matemātiskais modelis, kas tiek izmantots 3D AF aprēķinos ar specializētu programmu *EM3DHF* sīkāk ir aprakstīts [20]. Tā kā procesā ir izteikts skinefekts, aprēķiniem var

izmantojot robeželementu metodi. Lai veiktu aprēķinus, 3D režģis tiek izveidots, rotējot ap centrālo asi izejmateriāla stieņa, kausējuma brīvās virsmas un kristāla virsmas, kas iegūtas 2D aprēķinos. Šiem mērķiem ir izveidota speciāla programma, ar kuras palīdzību ir iespējams arī veikt izejmateriāla stieņa un kristāla asu savstarpējo nobīdi. Lai veiktu šo nobīdi, trijstūra elementi uz brīvās virsmas tās horizontālajā daļā tiek plastiski deformēti. Induktora forma tiek iegūta no tehniskajiem rasējumiem. Veikto 3D AF lauka aprēķinu rezultāts ir lineārā strāvas blīvuma sadalījums j_{HF} (A/m) uz silīcija virsmas, skat. Att. 2.2, no kā sekojošā veidā var iegūt inducētās jaudas virsmas blīvumu q uz kausējuma brīvās virsmas:

$$q = \frac{j_{HF}^2}{\delta \sigma_M}, \quad \delta = \frac{1}{\sqrt{\pi f_{HF} \sigma_M \mu_0}}, \quad (2.1)$$

kur σ_M ir šķidrā silīcija elektriskā vadītspēja un δ ir elektromagnētiskā skinslāņa biezums kausējumā, μ_0 - magnētiskā konstante. Ja $f = 3$ MHz un $\sigma_M = 1.2 \cdot 10^6$ S/m, $\delta = 0.26$ mm.



Att. 2.2: (pa kreisi) Sistēmas silīcija daļas ar strāvas līnijām uz to virsmas, kas iegūtas no 3D AF jaudas blīvuma sadalījuma, kā arī puse no AF induktora; (pa labi) inducētais jaudas virsmas blīvums uz kausējuma brīvās virsmas.

Strāvas blīvuma sadalījums ietekmē ne tikai inducētās jaudas virsmas blīvuma sadalījumu, bet arī EM spēku sadalījumu skinslānī, kas jāņem vērā HD aprēķinos. Dēļ izteiktā skin efekta inducētais magnētiskais lauks B_{HF} un strāvas blīvums j_{HF} (A/m²) var tikt uzskatīti par paralēliem virsmai. Tādejādi lielākā AF EM spēka tilpuma blīvuma daļa ir perpendikulāra virsmai, jo $f_V = j_{HF} \times B_{HF}$. Ņemot vērā cirkulācijas teorēmu magnētiskajam laukam var rakstīt

$$f_V = -\frac{1}{2\mu_0} \nabla [B_{HF}^2] + \frac{1}{\mu_0} (B_{HF} \nabla) B_{HF}. \quad (2.2)$$

Izteiktā skin efekta dēļ magnētiskais lauks un strāvas blīvums var tikt uzskatīti par paralēliem virsmai, tāpēc pirmais loceklis vienādojuma (2.2) labajā pusē ir potenciāls spēks, ko kom-

pensē spiediena gradients kausējumā. Otrais loceklis vienādojuma (2.2) labajā pusē var tikt integrēts pa visu skinslāņa biezumu un aizvietots ar tangenciālo spēka virsmas blīvuma sadalījumu f_τ [23]. Hidrodinamiskajiem aprēķiniem ir būtisks tikai laikā vidējotais spēka blīvums tāpēc

$$f_\tau = \int_0^\infty \overline{f_V} d\xi_3 = \frac{1}{2\mu_0} \nabla_{1,2} \left[\int_0^\infty \overline{B_{HF}^2} d\xi_3 \right], \quad (2.3)$$

kur $\xi_{1,2,3}$ ir lokālo koordināšu virzieni, kur pirmās divas komponentes ir vērstas tangenciāli, bet trešā - virsmas iekšējās normāles virzienā. Simbols $\nabla_{1,2}$ apzīmē virsmas gradientu. Līnija virs mainīgā nozīmē vidējošanu laikā.

Izteiktā skinefekta dēļ, locekli $\overline{B_{HF}^2}$ var meklēt kā

$$\overline{B_{HF}^2} = \mu_0^2 j_{\tau HF}^2 e^{-\frac{2\xi_3}{\delta}}. \quad (2.4)$$

Ievietojot (2.4) vienādojumā (2.3), iegūst

$$f_\tau = \frac{1}{4} \mu_0 \delta \nabla_{1,2} [j_{\tau HF}^2]. \quad (2.5)$$

Stākāks EM spēku aprēķinu apraksts ir dots [23].

Iegūtie inducētās jaudas virsmas blīvuma q un EM spēku blīvuma f_τ sadalījumi tiek nodoti 3D HD aprēķiniem kā robežnosacījumi temperatūras un ātruma laukiem uz brīvās virsmas. Datu interpolācijai no robeželementu režģa uz šūnu robežvirsmu centriem ir izveidota speciāla palīgprogramma.

2.3 3D nestacionāra kausējuma kustība, temperatūras lauks un piemaisījumu pārnese

Pētījumu ietvaros 3D nestacionāra hidrodinamikas modelēšana ir veikta ar dažāda tipa programmām. [dis3] apskata rezultātus, kas iegūti ar komerciālo paketi CFD-ACE©. Pēdējie publicētie rezultāti jau ir iegūti ar pašrakstītām programmām, kas balstītas uz OpenFOAM atvērtā koda bibliotēkām [39], [conf7] un [dis5]. Starpposmā dažādiem pētījumiem tika izmantota arī komerciālā pakete Fluent©. Lai nodrošinātu pilnu procesa modelēšanu, specifiskās palīgprogrammas laika gaitā ir adaptētas dažādu hidrodinamikas programmu izmantotajiem standartiem. Neskatoties uz to, galvenās matemātisko modeļu komponentes ir palikušas nemainīgas vai arī attīstītas saskaņā ar zināšanām par PZ kristālu audzēšanas procesi un ir aprakstītas zemāk.

Šķidrums kustība tiek uzskatīta par nesaspiežamu un lamināru, tāpēc tiek risināti sekojošie vienādojumi

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_0 (v \nabla) v = -\nabla p + \eta \Delta v - \rho_0 g \beta (T - T_0) + f_M, \quad (2.6)$$

$$\nabla v = 0, \quad (2.7)$$

kur ρ_0 ir šķidrā silīcija blīvums kušanas temperatūrā, v - ātrums, p - spiediens, η - viskozitāte, g - brīvās krišanas paātrinājums, β - termiskās izplešanās koeficients, T - aktuālā kausējuma temperatūra T_0 - silīcija kušanas temperatūra. Trešais loceklis vienādojuma (2.6) labajā pusē apraksta Busineska tuvinājumu termiskajai konvekcijai mazu kausējuma blīvuma atšķirību gadījumā. f_M ir summārais spēku blīvums, kas rodas dēļ papildus pieliktajiem magnētiskajiem laukiem. Vispārīgi šo summu atrod kā

$$f_M = f_{DC} + f_{AC}, \quad (2.8)$$

kur f_{DC} un f_{AC} ir spēku blīvums attiecīgi dēļ līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētiskajiem laukiem.

Uz brīvās virsmas tiek lietoti Marangoni un elektromagnētiskie spēki sekojošā formā:

$$f_{FS} = f_\tau + \frac{\partial \gamma}{\partial T} \nabla_{1,2} T, \quad (2.9)$$

kur f_{FS} ir summārais spēku virsmas blīvums, kas tiek pielikts šķidrumam uz brīvās virsmas, bet $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$ ir virsmas spraiguma temperatūras atvasinājums jeb t.s. Marangoni koeficients.

Kušanas un kristalizācijas frontes tiek uzskatītas par ieplūdes un izplūdes virsmām, kur pieliktais vertikālais ātrums raksturo izejmateriāla stieņa kausēšanas un kristalizācijas procesu. Sekojoši uz kristalizācijas frontes tiek uzdotas sekojošas vērtības ātruma komponentēm:

$$v_x = -y \cdot 2\pi\omega_{CR}, \quad v_y = x \cdot 2\pi\omega_{CR}, \quad v_z = -v_{CR}, \quad (2.10)$$

kur $v_{x,y,z}$ ir attiecīgās ātruma komponenter punktā ar koordinātēm $\{x, y, z\}$, bet ω_{CR} ir kristāla rotācijas ātrums.

Kušanas fronte tiek modelēta līdzīgi. Vienīgās atšķirības ir saistītas ar vertikālo ātruma komponenti v_z . Ja uz visas kušanas frontes tiek uzdota konstanta vertikālā ātruma komponente, tad to atrod sekojošā formā

$$v_z = -v_{CR} \cdot \frac{r_{CR}^2}{r_{ITP}^2} \quad (2.11)$$

Tādejādi ievērojot kausējuma masas saglabāšanās likumu. Šī pieeja principā nozīmē, ka izejmateriāla stieņa rādiuss ir vienāds ar ITP punkta attālumu no rotācijas ass. Daļai no šajā darbā apskatītajiem aprēķiniem vertikālais ātrums uz kušanas frontes tiek uzdots izmantojot radiālu profilu ar mērķi simulēt šķidrums ieplūdi kausējumā no atklātās kušanas frontes. Šim mērķim kušanas fronte tiek sadalīta divos koncentriskos apgabalos - centrālajā aplī un ārējā gredzenā. Centrālajā aplī vertikālais ātrums tiek uzdots vienāds ar izejmateriāla stieņa stumšanas ātrumu v_{FR} , kas ir zināms no eksperimenta. Vertikālais ātrums gredzenā v_{zR} tiek meklēts formā

$$v_{zR} = \frac{v_{CR}r_{CR}^2 - v_{FR}r_R^2}{r_{ITP}^2 - r_R^2}, \quad (2.12)$$

kur r_R ir gredzena iekšējais rādiuss, un r_{ITP} ir gredzena ārējais rādiuss, t.i. iekšējās trīskāršās līnijas rādiuss, skat. Att. 1.1.

Temperatūras aprēķinam tiek risināts nestacionārs siltuma pārnese vienādojums

$$\rho_0 c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_0 c_p (\mathbf{v} \nabla) T = \lambda \Delta T, \quad (2.13)$$

kur c_p ir izkusušā silīcija īpatnējā siltumietilpība, λ ir siltumvadītības koeficients. Kušanas temperatūra T_0 tiek izmantota kā robežnosacījums gan uz kušanas, gan kristalizācijas frontes. Savukārt uz brīvās virsmas tie uzlikts siltuma plūsmas blīvums q no (2.1) vienādojuma.

Piemaisījumu pārnese tiek modelēta izmantojot sekojošo vienādojumu:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (v(t) \nabla) C = D \Delta C, \quad (2.14)$$

kur D ir piemaisījumu difūzijas koeficients kausējumā. Tā kā kausējuma ātrums ir laikā mainīgs, tad arī piemaisījumu sadalījums ir laika funkcija.

Piemaisījumu sadalījumu kristalizācijas frontes tuvumā būtiski ietekmē segregācijas process, kas tiek modelēts izmantojot sekojošo vienādojumu

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = v_{CR} (1 - k_0) C \cos \theta, \quad (2.15)$$

kur C ir koncentrācija, n - kristalizācijas frontes iekšējā normāle, k_0 - segregācijas koeficients un θ ir leņķis starp kristalizācijas fronti un xy plakni apskatītajā punktā.

Arī piemaisījumu koncentrācijas robežnosacījums uz kušanas frontes ir saistīts ar koncentrācijas vērtību C kausējumā tiešā kušanas frontes tuvumā

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = -v_{zBC} (C - C_{FR}) \cos \theta, \quad (2.16)$$

kur v_{zBC} ir vertikālais ātrums apskatītajā punktā atbilstoši ātruma robežnosacījumam, C_{FR} ir koncentrācija izejmateriāla stienī, bet θ ir leņķis starp kušanas fronti un xy plakni apskatītajā punktā. Dažādi testa aprēķini ir parādījuši, ka C_{FR} un C ir praktiski vienādi, tāpēc aprēķinos var tikt lietots vienkāršāks robežnosacījums $C = C_{FR}$. Šāda pieeja lietota arī šajā darbā apskatītajos aprēķinos. Koncentrācija izejmateriāla stienī tiek normēta uz vērtību 1, t.i. $C_{FR} = C_R = 1$, kur C_R ir koncentrācija gredzenā pie ITP punkta, skat., ātruma robežnosacījuma aprakstu uz kušanas frontes.

Piemaisījumu ievads kausējumā dažādos eksperimentos var atšķirties. Apskatītā modeļu sistēma pieļauj divus dažādus piemaisījumu ievadišanas tuvinājumus - piemaisījumi ir ietverti jau izejmateriāla stienī vai iekļūst kausējumā no apkārtējās atmosfēras. Gadījumā, ja dotēšana notiek no izejmateriāla stieņa, tad $C_{FR} = 1$ un arī ārējā gredzenā koncentrācija $C_R = 1$, kā tas ir šajā darbā apskatītajos aprēķinos. Ja piemaisījumi nonāk kausējumā pa taisno no atmosfēras, $C_{FR} = 0$, un $C = 1$ uz visām kausējuma robežvirsmām, kas ir kontaktā ar piemaisījumu saturošo atmosfēru - atklātā izejmateriāla stieņa kušanas fronte un/vai daļēji vai pilnībā kausējuma brīvā virsma. Ja piemaisījumi silīcijā nonāk caur atklāto kušanas fronti, tad skaitliskajos aprēķinos tiek uzskatīts, ka ieplūšana kausējumā notiek caur kušanas frontes ārējo gredzenu.

Robežnosacījums uz brīvās virsmas visos darbā apskatītajos rakstos ir

$$\frac{\partial C}{\partial n} = 0. \quad (2.17)$$

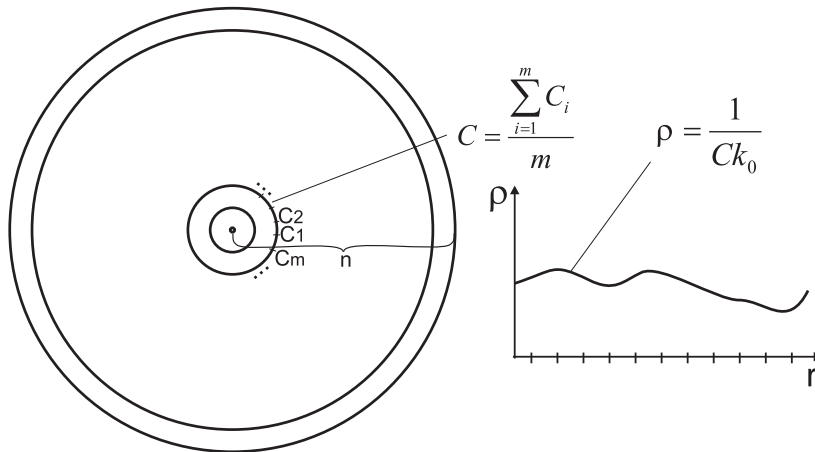
Modelis pieļauj kombinēt (5.9) nosacījumu ar pirmā tipa robežnosacījumu $C = 1$, ja piemaisījumi iekļūst kausējumā caur noteiktiem brīvās virsmas apgabaliem.

2.4 Pretestības aprēķins audzētajā kristālā

Aprēķinu laikā katrā laika solī tiek saglabāta koncentrācijas vērtība katrā kristalizācijas frontes šūnā. Lai aprēķinātu radiālo pretestības sadalījumu, koncentrācijas vērtības tiek azimutāli vidējotas n radiālos gredzenos, skat. Att. 2.3. Katrā gredzenā koncentrācijas vērtība tiek iegūta vidējot m diskretas vērtības. No iegūtās vidējās vērtības tiek aprēķināta pretestība pēc izteiksmes

$$\rho = \frac{1}{k_0 C}, \quad (2.18)$$

kur C ir piemaisījumu koncentrācija aplūkotajā gredzenā.



Att. 2.3: Shematisks radiālā pretestības sadalījuma iegūšanas apraksts vienam laika solim.

2.5 Līdzstrāvas magnētiskā lauka ietekme

Matemātiski līdzstrāvas magnētisko lauku apraksta vektoru lauks B , kurš mijiedarbojoties ar elektriski vadošu vidi rada elektrisko strāvu. Šīs strāvas blīvums j tiek izteikts kā:

$$j = \sigma_M (-\nabla\varphi + v \times B), \quad (2.19)$$

kur φ ir elektrostatisks potenciāls. Magnētiskais lauks, ko rada strāva j netiek ņemts vērā.

Kā redzams vienādojumā (2.19), strāvas blīvuma j aprēķinam nepieciešams noskaidrot nezināmo potenciālu φ . Matemātisko problēmu φ aprēķinam iegūst izmantojot faktu, ka strāvai nav avotu ($\nabla \cdot j = 0$) un, ka elektriskā strāva nevar pamest kausējumu ($j \cdot n = 0$). Tādejādi rezultējošā problēma φ aprēķinam ir sekojoša:

$$\Delta\varphi = -B \cdot \nabla \times v, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial n} = (v \times B) \cdot n, \quad \varphi(P_0) = 0, \quad (2.20)$$

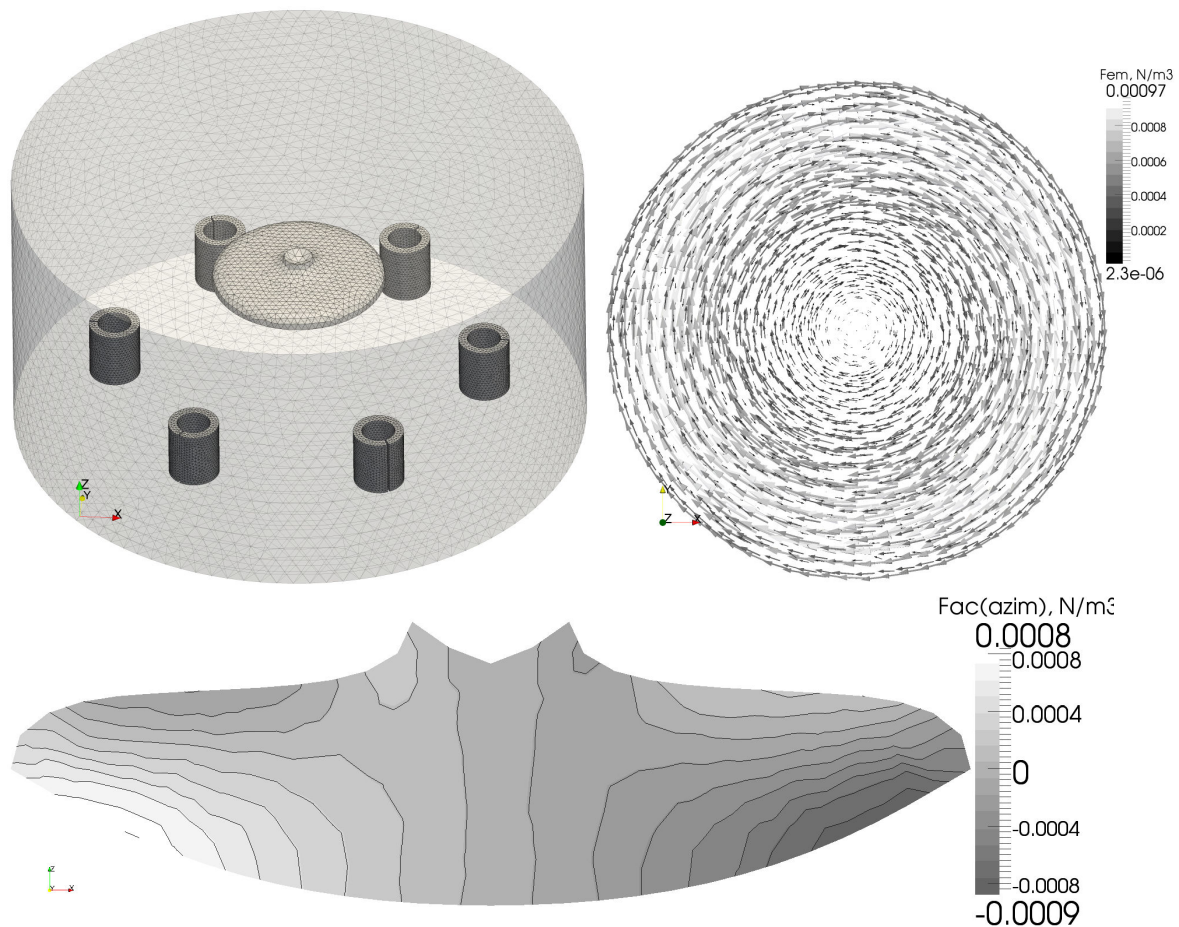
kur n ir virsmas normāles vektors, P_0 ir brīvi izvēlēts punkts kausējumā, kurā tiek fiksēta elektrostatisks potenciāla vērtība. Otrais vienādojums ir robežnosacījums, kas ir spēkā uz visām kausējuma robežām.

Tādejādi katrā laika solī potenciāls φ tiek iegūts risinot (2.20) vienādojumus un vēlāk tiek izmantots līdzstrāvas magnētiskā lauka izraisītā spēka blīvuma f_{DC} (N/m^3) aprēķinam:

$$f_{DC} = j \times B = \sigma_M (-\nabla\varphi + v \times B) \times B. \quad (2.21)$$

Iegūtā f_{DC} vērtība tiek ievietota vienādojumā (2.6), lai risinātu ātruma lauku v .

2.6 Maiņstrāvas magnētiskā lauka ietekme



Att. 2.4: (augšā pa kreisi) 3D FEM režģis zemas frekvences rotējoša magnētiskā lauka aprēķinam. Režģis attēlots tikai uz apskatītā gaisa domēna, kausējuma un induktoru virsmām; (augšā pa labi) maiņstrāvas magnētiskā lauka radītā spēka blīvuma vektori f_{AC} kausējumā, skats no augšas; (apakšā) maiņstrāvas magnētiskā lauka radītā spēka f_{AC} blīvuma azimutālais sadalījums vertikālā šķērs griezumā.

Maiņstrāvas rotējošā magnētiskā lauka un sekojoši radītā spēka blīvuma f_{AC} aprēķiniem kausējumā tiek izmantota specializēta programma *EM3D* [36]. Lai iegūtu rotējošu magnētisko lauku, tiek izmantoti trīs induktoru pāri, skat. Att. 2.4. Spolēs tiek uzdots strāvas blīvums. Zemfrekvences magnētiskais lauks tiek aprakstīts ar vektorpotenciālu A :

$$-\Delta A + \nabla \nabla A = \mu_0 j, \quad (2.22)$$

kur spolēs: $j = j_0$, argona atmosfērā $j = 0$, kausējumā $j = \sigma(-i\omega A - \nabla \phi)$. Visi ieviestie lauki tiek aprakstīti ar efektīvajām vērtībām. Skalārajam potenciālam ϕ tiek lietots papildus nosacījums kausējumā $\nabla j = 0$. Kad ir iegūts A un ϕ sadalījums, tiek aprēķināts magnētiskais

lauka indukcija $B = \nabla \times A$ un strāvas blīvums j kausējumā. Laikā vidējotais spēka blīvuma sadalījums kausējumā tiek iegūts kā

$$f_{AC} = [j_{Re} \times B_{Re} + j_{Im} \times B_{Im}]. \quad (2.23)$$

Ja spoles tiek pieslēgtas trīs fāzu strāvai, tā, ka katrai fāzei atbils savs diagonāli novietotu spoļu pāris, magnētiskā lauka indukcija maina savu virzienu horizontālajā plaknē. Sekojoši var tikt iegūts azimutālā virzienā orientēts spēka blīvuma sadalījums, skat. Att. 2.4.


```

    end_f_loop(f, thread)
}

```

Rakstot šīs palīgprogrammas ir nepieciešams sintezēt klasisko programmēšanas sintaksi ar dažādām specifiskām predefinētām funkcijām, piemēram, *F_CENTROID* dotajā fragmentā, kas atgriež apskatītās šūnas robežvirsmas centra koordinātes [42].

3.2 Aprēķinu programmas, kas balstītas uz OpenFOAM

Kopš 2007. gada beigām aprēķinu vajadzībām tiek attīstītas un lietotas programmas, kas balstītas uz atvērta koda bibliotēkām OpenFOAM [39]. Svarīgākās programmas ir sekojošās:

- *FzsiFOAM* - Pirmā uz OpenFOAM piedāvātās programmas *icoFoam* balstītā pašrakstītā specializētā programma. Tajā gan kušanas, gan kristalizācijas frontes tiek uzskatītas par cietām sienām. Kušanas un kristalizācijas process tiek ņemts vērā, risinot uzdevumu speciālam potenciālam laukam, kura gradients vienāds ar kristalizācijas ātrumu [dis2].
- *FzsiACFoam* - Programma, kura attīstīta uz *FzsiFOAM* bāzes. Papildinājumi saistīti ar iespēju ņemt vērā maiņstrāvas magnētiskā lauka radīto spēku.
- *FzsiDirect* - Šī programma ir modificēta *FzsiFOAM* versija, kurā kušanas un kristalizācijas frontes tiek modelētas attiecīgi kā šķidrums ieplūde un izplūde. Šī iemesla dēļ vairs nav nepieciešams risināt papildus potenciālo lauku.
- *fzsiDCACFoam* - Pēdējā no aprēķinu programmām, kas ir *FzsiDirect* ar iebūvētu iespēju ņemt vērā gan līdzstrāvas, gan maiņstrāvas magnētiskos laukus.

Visu radīto programmu pamatā ir standarta programma *icoFoam*, kas ļauj risināt (2.6) vienādojumu bez Businesska locekļa un bez papildus pievienotiem magnētiskajiem laukiem un to radītajiem spēkiem. Sekojošajā koda fragmentā ir parādīts, kā tiek ņemti vērā minētie papildinājumi programmas *fzsiDCACFoam* kodā:

```

    volForce.setVal( (ACScale*Fv/rho) + (FBv/rho) - _g*alpha*T );

// Solve the Momentum equation

fvVectorMatrix UEqn (
    fvm::ddt(U)
    + fvm::div(phi,U)
    - fvm::laplacian(nu,U)
    == volForce.forceA()
);

solve( UEqn == - fvc::grad(p)+volForce.forceB() );

```

OpenFOAM attīstītāji ir ieviesuši noteiktu pieraksta formu, kas ļauj konstruēt risināmos vienādojumus vienkāršā un saprotamā veidā. Dotajā piemērā visi papildus avoti - līdzstrāvas un

maiņstrāvas magnētisko lauku radītie spēki, kā arī Busineska tuvinājums - tiek grupēti zem mainīgā *volForce*, kas kopā ar spiediena gradientu tiek pielīdzināti visiem ātrumu saturošajiem locekļiem. Mainīgā *volForce* divkāršā lietošana ar komentāriem *forceA* un *forceB* ir ieprogrammēta PISO algoritma ātruma un spiediena risināšanas īstenošanai [41].

Līdzstrāvas magnētiskā lauka radītā spēka atrašanai (parādītajā fragmentā mainīgais FBv) nepieciešams atrast elektrisko potenciālu ϕ un sekojošo strāvas blīvuma sadalījumu j . Šos lielumus iegūst, izmantojot ātrumu sadalījumu no iepriekšējā laika soļa. Šādas iterācijas tiek atkārtotas katrā laika solī. Spēku blīvums (Fv), ko rada maiņstrāvas magnētiskais lauks, tiek interpolēts no aprēķinu rezultātiem ar programmu *EM3D*. Kā redzams parādītajā piemērā, izmantojot koeficientu *ACScale* ir iespējams mainīt iegūtā spēka intensitāti. Visi programmēšanas darbi tiek veikti izmantojot C++ programmēšanas valodu [43].

4 Līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētisko lauku ietekmes uz kausējuma kustību pētījumi

Šajā nodaļā ilustrēti rezultāti, kas iegūti modelējot 4 un 6 collu PZ kristālu audzēšanas sistēmas ar papildus pievienotiem līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētiskajiem laukiem. Šie rezultāti ir publicēti rakstos [conf7] un [dis5].

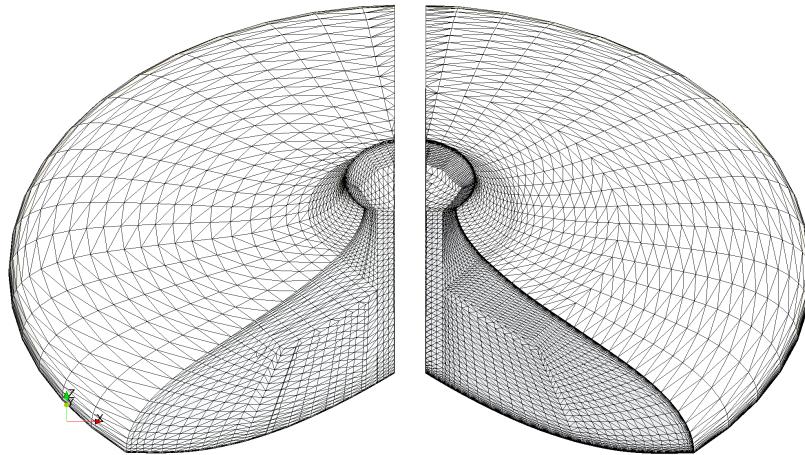
4.1 Modelētā 4 collu sistēma un izmantotie parametri

Aprēķinos tika modelēta eksperimentālā sistēma, kas iegūta no Institute for Crystal Growth (ICG), Berlīne (Dr. H. Riemann, Dr. A. Luedge). Puse no induktora un silīcija daļas ir ilustrētas Att. 2.2. Apskatītajā gadījumā izejmateriāla stieņa rādiuss ir vienāds ar audzētā kristāla rādiusu, t.i. $r_{FR} = 100$ mm. Kristāla vilkšanas ātrums ir $v_{CR} = 3.2$ mm/min, kristāla rotācijas ātrums ir $\omega = 5$ rpm un mārķa zonas augstums ir $h_Z = 31$ mm. AF strāvas frekvence induktorā ir $f_{HF} = 3$ MHz.

Aprēķinos tiek izmantotas sekojošās materiāla īpašības un fizikālās konstantes: $\rho_0 = 2580$ kg/m³, $\sigma_M = 1.2 \cdot 10^6$ S/m, $\eta = 8.6 \cdot 10^{-4}$ kg/m·s, $\beta = 1 \cdot 10^{-4}$ 1/K, $T_0 = 1687$ K, $\frac{\partial \gamma}{\partial T} = -2.5 \cdot 10^{-4}$ N/m·K, $c_p = 1000$ J/kg·K, $\lambda = 67$ W/m·K, $D = 3.29 \cdot 10^{-8}$ m²/s and $k_0 = 0.35$.

Visi aprēķini tika veikti izmantojot strukturētu režģi ar heksaedriem elementiem. Elementu skaits režģī bija 32000 vai 86000, skat. Att. 4.1, un tie atšķīrās ar dažādu elementu blīvumu pie kristalizācijas frontes un brīvās virsmas. Lai pārbaudītu, vai izmantotie režģi nav pārāk rupji, tika veikti testa aprēķini ar režģiem, kur elementu skaits sasniedza 160000, kas parādīja, ka galvenās plūsmas un piemaisījumu pārneses tendences tiek modelētas pareizi. Samazinot šūnu skaitu režģī, ir iespējams palielināt aprēķinu ātrumu, kas ļauj veikt plašākas parametru studijas īsākā laikā. Tāpat, lai samazinātu aprēķinu laiku, dati tika sadalīti uz četriem procesoriem. Tādejādi, lietojot 2.5 ms laika soli, diennaktī var sarēķināt 20 līdz 100 plūsmas sekundes atkarībā no režģa.

Visu aprēķinu veikšanā tika izmantota Crank-Nicholson galīgo diferencu shēma. Gradientu saturošie locekļi tika risināti ar Gausa lineāro shēmu, savukārt diverģenci saturošie locekļi tika risināti ar Gausa limitēto lineāro shēmu. Izņēmums ir ātruma lauks, kura risināšanai tika izmantota limitētā shēma. Laplasiānu saturošie locekļi tiek risināti ar Gausa lineāro koriģēto shēmu.



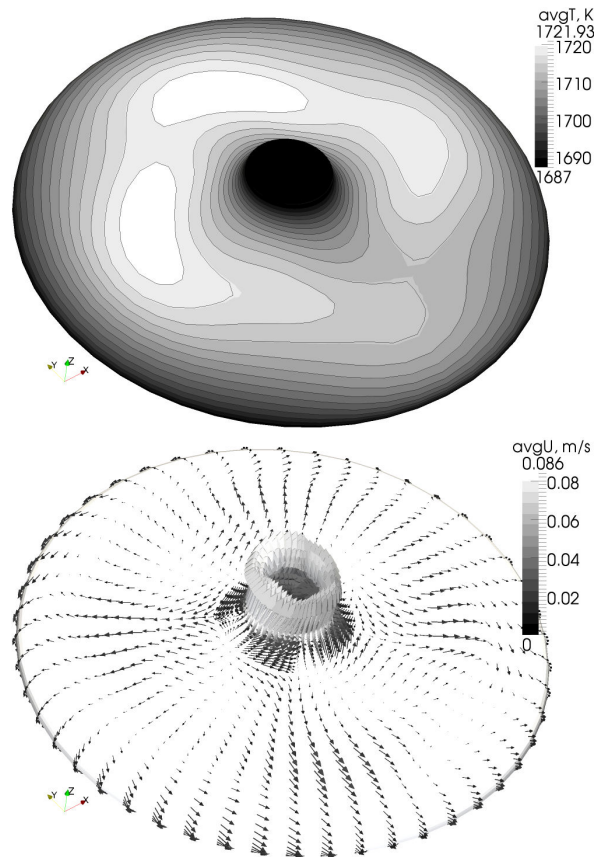
Att. 4.1: Heksaedrālie režģi 3D HD aprēķinu veikšanai. (pa kreisi) 32000 elementi, (pa labi) 86000 elementi.

4.2 Skaitlisko rezultātu kopsavilkums 4 collu sistēmai ar pievienotiem maiņstrāvas un līdzstrāvas magnētiskajiem laukiem

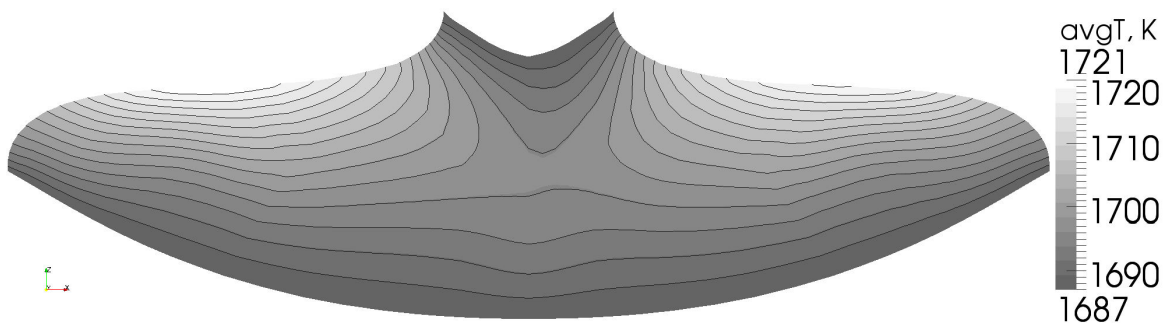
Sekojošajās apakšnodaļās apskatīti rezultāti 4 collu sistēmai. Atskaites aprēķins ir bez papildus pievienotiem magnētiskiem laukiem. Viens no variantiem ir aprēķināts ar līdzstrāvas magnētisko lauku $B_{DC} = 60$ mT. Trešais aprēķins ir veikts ar rotējošu maiņstrāvas magnētisko lauku ar frekvenci ($f_{AC} = 50$ Hz) un intensitāti $B_{AC} = 2.2$ mT. Magnētiskā lauka rotācijas virziens apskatītajā piemērā ir pretējs kristāla rotācijas virzienam.

Lai ilustrētu izteikto temperatūras un ātruma sadalījuma trīsdimensionalitāti, šie lauki atskaites aprēķinam ir parādīti uz brīvās virsmas Att. 4.2. Tā kā induktora ģeometrija ir vienāda visiem variantiem, tad šie lauki visos gadījumos ir kvalitatīvi līdzīgi. Arī temperatūras sadalījums vertikālā šķērs griezumā tiek attēlots tikai atskaites variantam, skat. Att. 4.3.

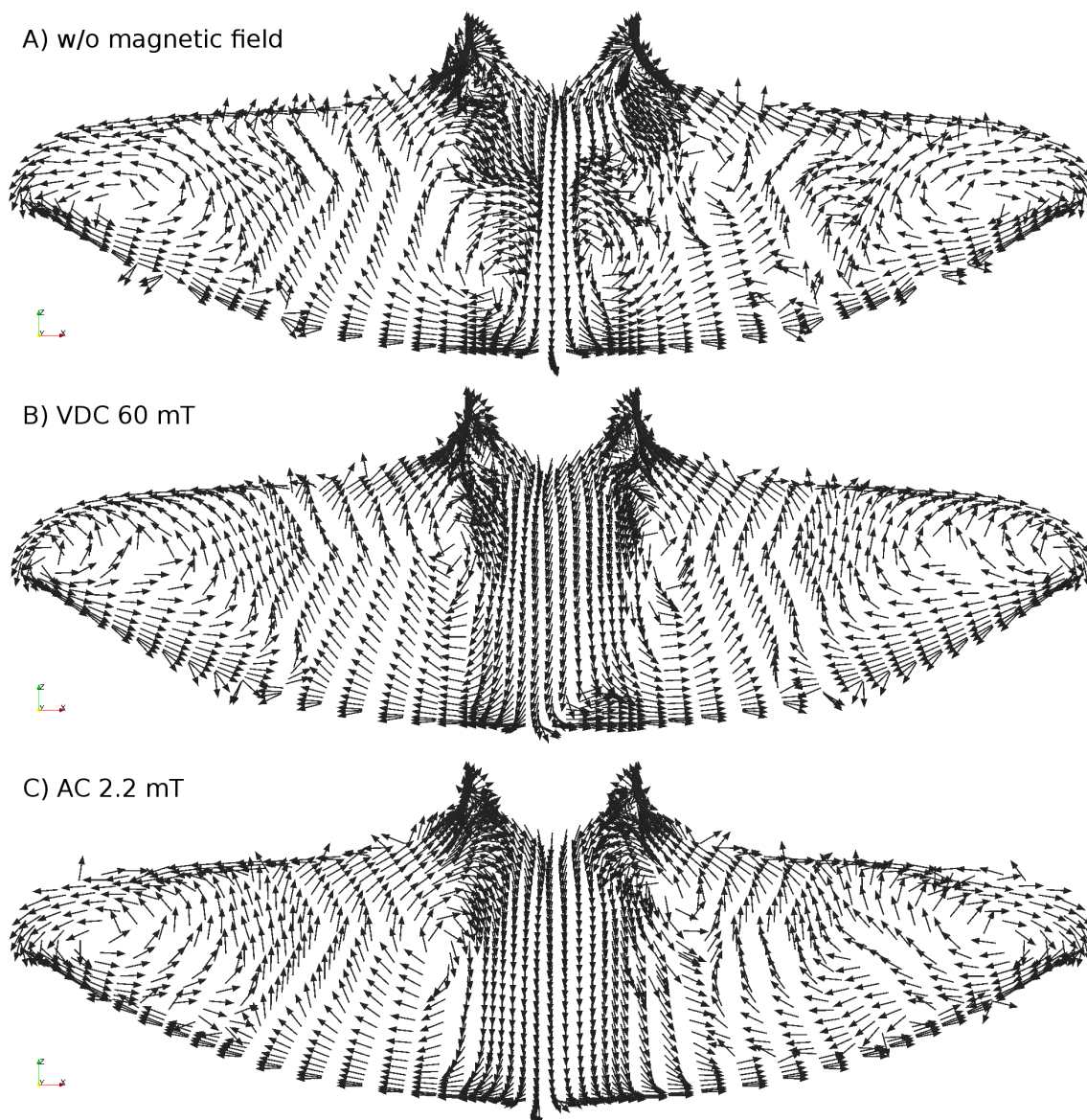
Ātruma sadalījums kausējumā ir raksturots gan ar vektoriem (Att. 4.4), gan ātruma moduļa vērtību Att. 4.5 vertikālā šķērs griezumā. Azimutālais ātrums visiem aprēķinātajiem variantiem ir parādīts Att. 4.6, bet palielinājumā Att. 4.7 redzams azimutālā ātruma sadalījums pie kristalizācijas frontes aprēķinam ar līdzstrāvas magnētisko lauku. Ātruma sadalījums tiešā veidā ietekmē gan piemaisījumu koncentrācijas (Att. 4.8), gan pretestības sadalījumu kristālā (Fig. 4.11). Lai varētu veikt aprēķina ar pievienoto līdzstrāvas magnētisko lauku analīzi elektriskā potenciāla sadalījums un atbilstošie strāvas blīvuma vektori horizontālā šķērs griezumā parādīti Att. 4.9 un 4.10. Kausējuma kustības ātruma svārstību samazināšanās ir parādīta Att. 5.6, kur salīdzināta ātruma vērtība zondē atskaites aprēķinā un variantā ar līdzstrāvas magnētisko lauku.



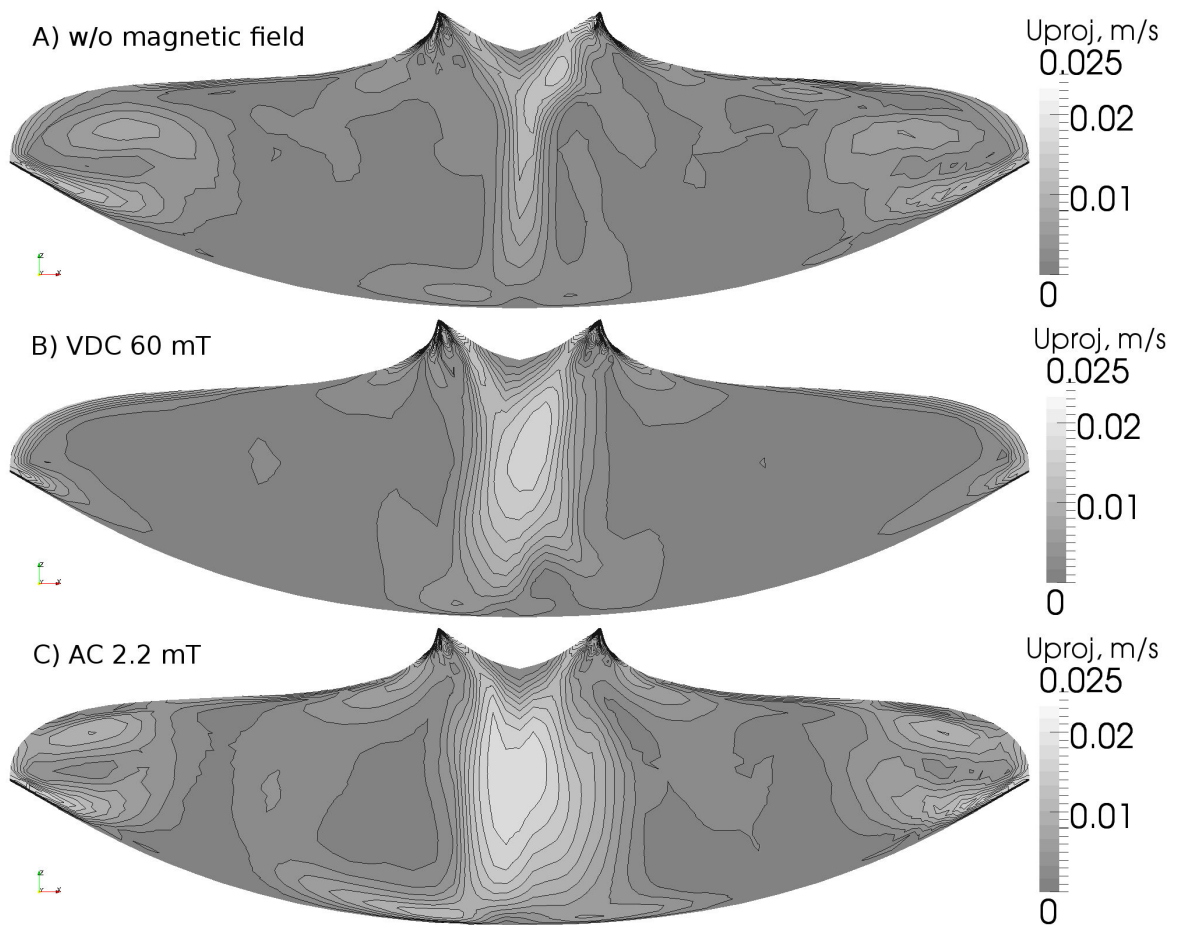
Att. 4.2: Temperatūras (pa kreisi) un ātruma (pa labi) sadalījumi uz brīvās virsmas atskaites aprēķinā bez papildus pievienotiem magnētiskajiem laukiem.



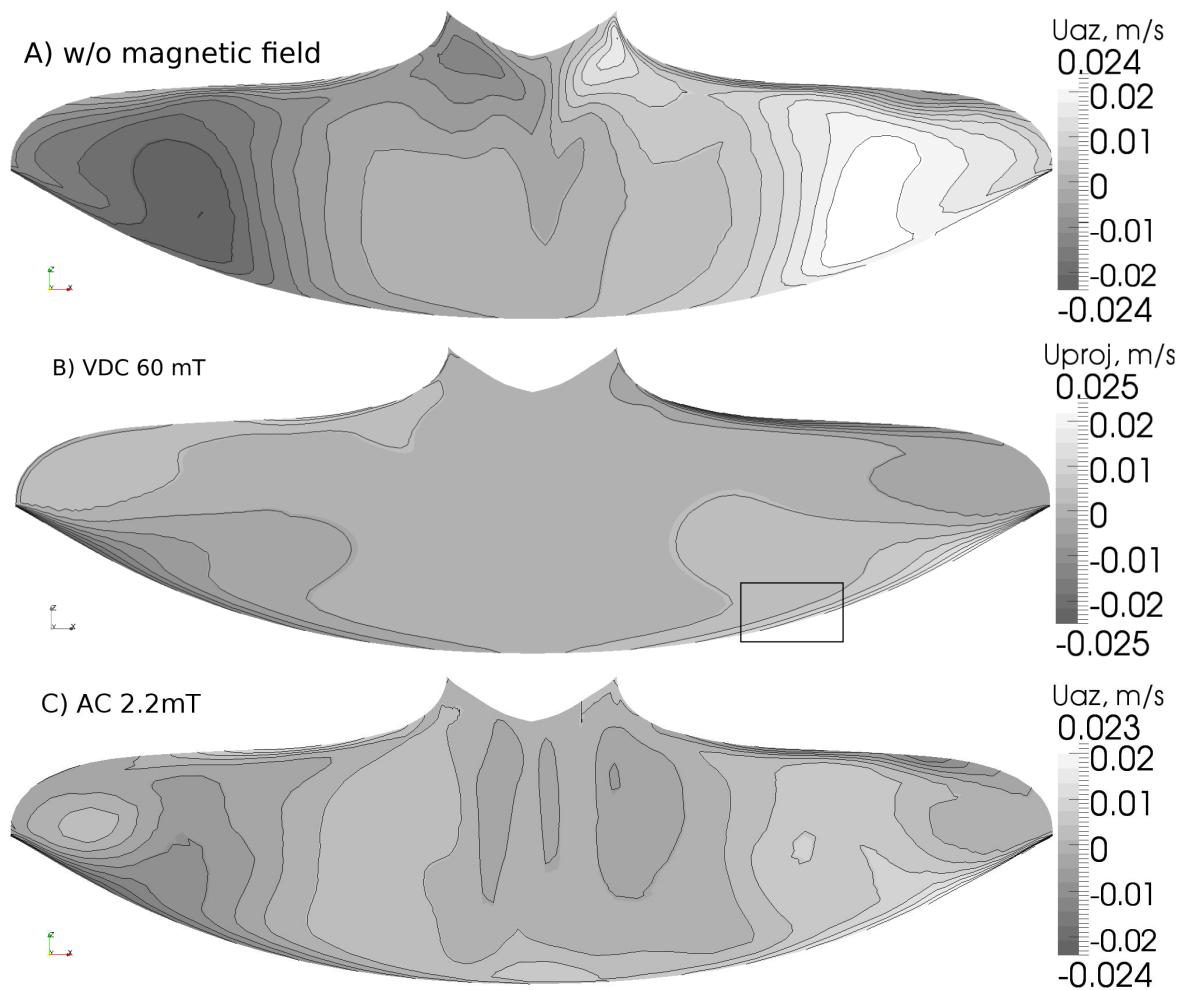
Att. 4.3: Temperatūras sadalījums vertikālā šķērs griezumā xz plaknē atskaites aprēķinā bez papildus pievienotiem magnētiskajiem laukiem.



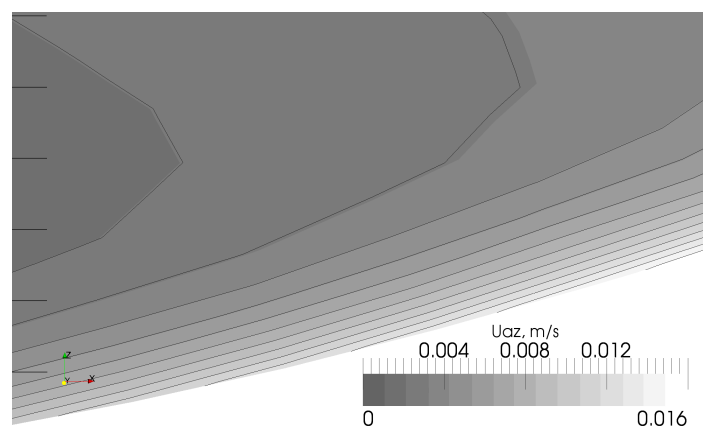
Att. 4.4: Ātruma vektori ar vienādu garumu xz plaknē. A) atskaites variants bez magnētiskā lauka, B) vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$, C) kristāla rotācijai pretējā virzienā rotējošs līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 2.2mT$.



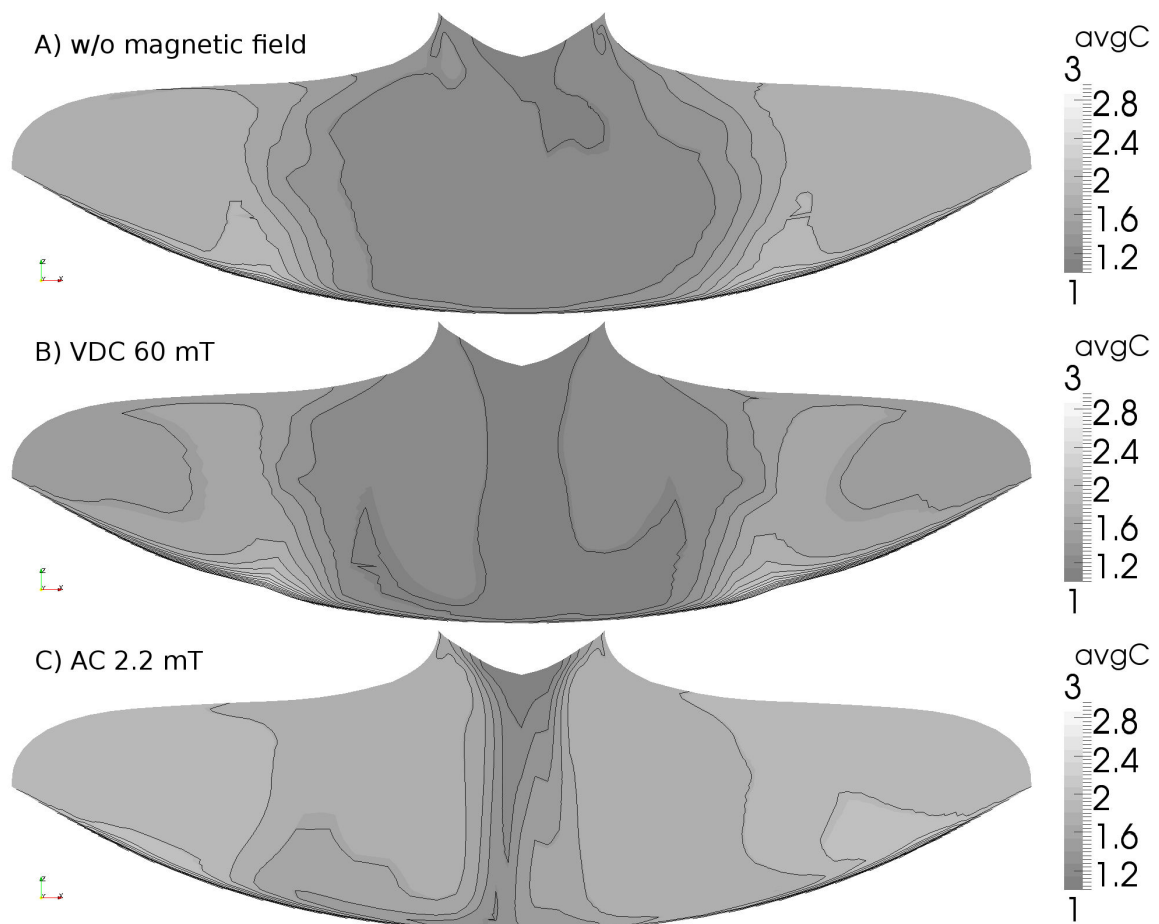
Att. 4.5: Ātruma moduļa sadalījums xz plaknē. A) atskaites variants bez magnētiskā lauka, B) vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$, C) kristāla rotācijai pretējā virzienā rotējošs līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 2.2mT$.



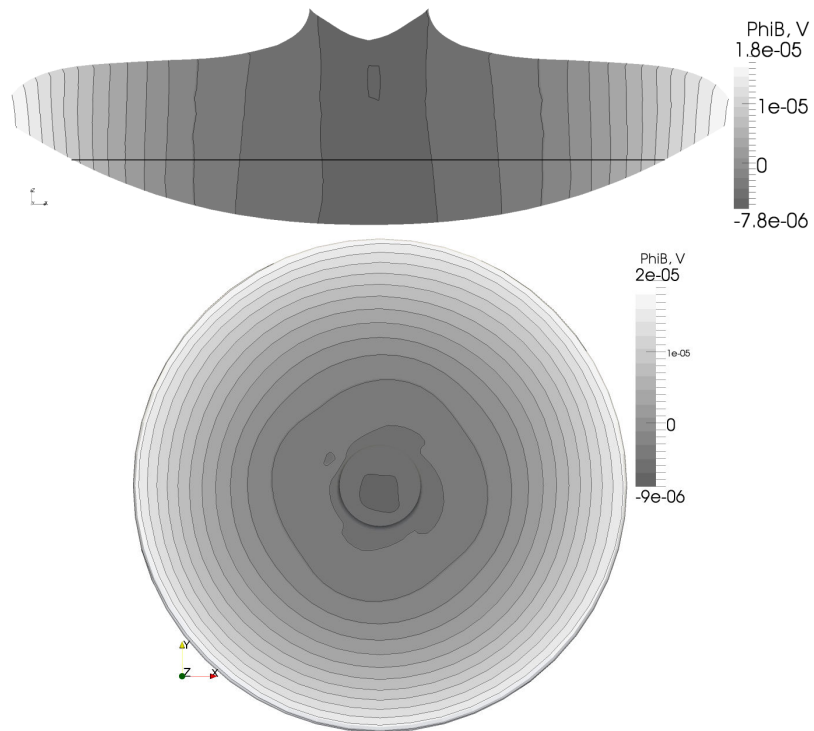
Att. 4.6: Azimutālā ātruma sadalījums xz plaknē. A) atskaites variants bez magnētiskā lauka, B) vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$, C) kristāla rotācijai pretējā virzienā rotējošs līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 2.2mT$.



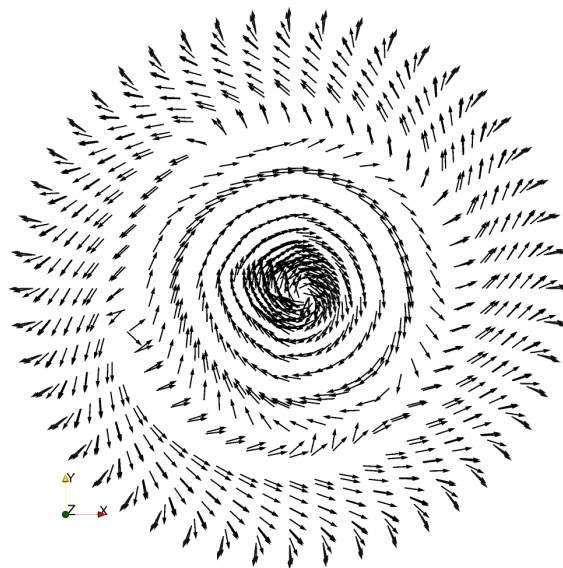
Att. 4.7: Azimutālā ātruma sadalījums xz plaknē. Vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$. Palielinājums zonā pie kristalizācijas frontes starp rādiusa vērtībām $r_{CR} = 0.02$ to $r_{CR} = 0.03$ m. Melnās iedaļas attēla kreisajā pusē atbilst milimetriem.



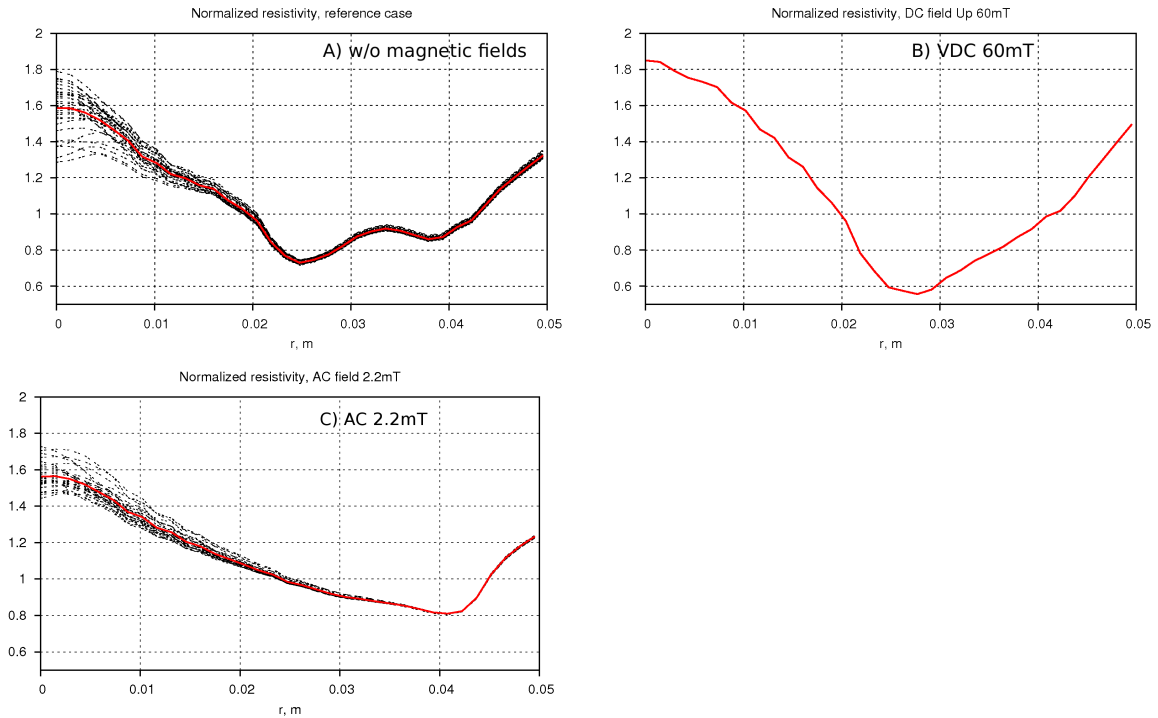
Att. 4.8: Piemaisījumu koncentrācijas sadalījums xz plaknē. A) atskaites variants bez magnētiskā lauka, B) vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$, C) kristāla rotācijai pretējā virzienā rotējošs līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 2.2mT$.



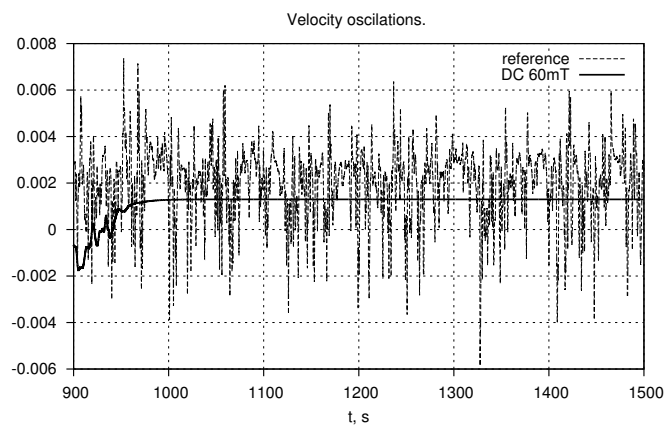
Att. 4.9: Elektriskā potenciāla sadalījums. Vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$ xz plaknē un uz kausējuma brīvās virsmas. Horizontālā līnija parāda līmeni, kādā ņemts šķērs griezumā Att. 4.10.



Att. 4.10: Strāvas blīvuma vektori horizontālā šķērs griezumā, kura līmenis parādīts Att. 4.9. Vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$.



Att. 4.11: Normētās pretestības radiālais sadalījums kristālā. A) atskaites variants bez magnētiskā lauka, B) vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 60mT$, C) kristāla rotācijai pretējā virzienā rotējošs līdzstrāvas magnētiskais lauks $B = 2.2mT$.



Att. 4.12: Ātruma svārstības zondē ar attālumu līdz rotācijas asij ($R_{pr} = 2.5$ cm. Atskaites aprēķina un varianta ar vertikālo līdzstrāvas magnētisko lauku $B = 60mT$ salīdzinājums.

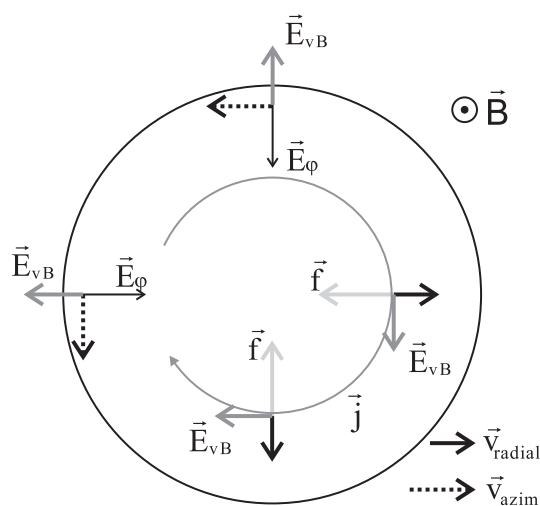
4.3 Rezultātu analīze 4 collu sistēmas gadījumā

Sekojošā apakšnodaļa ilustrē rezultātu analīzi aprēķiniem ar līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētiskajiem laukiem. Kvalitatīvi novērtējumi tiek salīdzināti ar skaitliskajiem rezultātiem.

4.3.1 Vertikāls līdzstrāvas magnētiskais lauks

Šķidrums kustību līdzstrāvas magnētiskā lauka klātbūtnē ietekmē spēku blīvums f_{DC} (2.21), kas ir tieši atkarīgs no strāvas blīvuma sadalījuma j . Ja strāvas sadalījumu neietekmētu elektriskais potenciāls ϕ , spēka blīvuma vektori f_{DC} būtu vērsti tieši pretējā virzienā nekā v , jo $f_{DC} = j \times B = (v \times B) \times B$. Tomēr j virzienu nosaka gan elektriskais lauks dēļ elektriskā potenciāla - $E_\phi = -\nabla\phi$, gan vektoriālais reizinājums $E_{vB} = v \times B$, skat. (2.19). Tā kā $\nabla j = 0$, E_ϕ veidojas tikai, lai kompensētu to E_{vB} daļu, kas neveido noslēgtu kontūru j , kā arī lai kompensētu to strāvas daļu, kas vērsta apgabala normāles virzienā tiešā robežas tuvumā. Katra no ātruma komponentēm mijiedarbojas ar savādāk ar pielikto magnētisko lauku, tāpēc sagaidāmās sekas vienādojumu (2.19) un (2.21) realizācijai ir jāanalizē atsevišķi.

Vertikālais ātrums tiešā veidā nemijiedarbojas ar pielikto līdzstrāvas magnētisko lauku, jo abi vektori ir paralēli. Radiālā ātruma gadījumā jāpievērš uzmanība meridionālajam kausējuma šķērsgriezumam. Tajā ir novērojami vairāki izteikti virpuļi, kam trijās dimensijās ir toroidāla forma, piemēram, virpulis pie ETP punkta, kurā šķidrums ātrums vērsts rotācijas ass virzienā gar kristalizācijas fronti un prom no ass gar brīvo virsmu, skat. Att. 4.4 (a)). Radiālā ātruma vektoriālais reizinājums ar magnētisko lauku rada azimutālā virzienā vērstu E_{vB} , kas ļauj veidoties noslēgtiem strāvas j kontūriem, ko labi var saskatīt Att. 4.10. Strāvai mijiedarbojoties ar magnētisko lauku rodas spēku sadalījums $f_{DC} = j \times B$. Šī spēka virziens ir pretējs ātrumam, skat. Att. 4.13. Att. 4.5 (a), (b) redzama virpuļa pie ETP punkta palēnināšanās.



Att. 4.13: Shematisks radiālā un azimutālā ātruma mijiedarbības ar vertikālu līdzstrāvas magnētisko lauku skaidrojums.

Kristāla rotācija izraisa ļoti izteiktu azimutālo kustību arī kausējumā, skat. Att. 4.6 (a), kam mijiedar-

bojoties ar vertikālu magnētisko lauku rada E_{vB} , kas vērsts radiāli prom no rotācijas ass. Lai kompensētu šo elektrisko lauku veidojas elektriskā potenciāla φ . sadalījums, Att. 4.9, kam novērojama izteikta aksiāla simetrija.

Novērtējot kausējuma kustības ātrumu ETP punkta tuvumā iegūst $v \approx 2.7$ cm/s (skat. Att. 4.6). Tā kā magnētiskā lauka indukcijas intensitāte ir 0.06T, elektrisko lauku var novērtēt

$$E_{\varphi} = -\nabla\varphi = v \cdot B = 0.027 \cdot 0.06 \approx 1.62 \cdot 10^{-3} V/m. \quad (4.1)$$

No aprēķinu rezultātiem Att. 4.9 seko, ka pirmajā centimetrā pie ETP līnijas elektriskā potenciāla vērtība radiālajā virzienā krītas par apmēram $1 \cdot 10^{-5} V$. Atbilstošais gradients ir $\nabla\varphi = 1 \cdot 10^{-3} V/m$, kas pietiekami labi sakrīt ar analītisko novērtējumu (4.1).

Tā kā rotācijas kustība ir daudz intensīvāka kristalizācijas frontes tuvumā, E_{vB} dilst tuvojoties brīvajai virsmai. Lielums $\nabla\varphi$ ir praktiski konstants pa vertikāli, tāpēc rezultējošā strāva ir vērsta prom no rotācijas ass kristalizācijas frontes tuvumā un ass virzienā pie brīvās virsmas, tādejādi veidojot toroidālu noslēgtu virpuļi. Tādejādi rotācijas kustība tiek efektīvi bremsēta kristalizācijas frontes tuvumā.

Azimutālā ātruma dilšanu kristalizācijas frontes tuvumā raksturo Hartmaņa skaitlis [40], kuru aprēķina sekojošā formā:

$$Ha = B \cdot L \sqrt{\frac{\sigma_M}{\eta}}, \quad (4.2)$$

kur L ir raksturīgais attālums ≈ 1 cm, jo tālāk no kristalizācijas frontes spēki, kas darbojas pie brīvās virsmas arī sāk ietekmēt šķidruma kustību. Ja magnētiskā lauka indukcijas vērtība ir $B = 0.06$ T Ha skaitlis ir apmēram 22. Sekojoši Hartmaņa slāņa biezuma novērtējums ir

$$\delta_{Ha} = \frac{L}{Ha} \approx 0.01/22 \approx 0.0005m = 0.5mm. \quad (4.3)$$

No tā seko, ka ātrumam ir jāsamazinās ≈ 2.71 reizes ≈ 0.5 mm biezā slānī. Skaitliskie rezultāti palielinājumā (Att. 4.7) parāda, ka minētajā attālumā no kristalizācijas frontes $r = 0.025$ m attālumā no rotācijas ass ātrums ir apmēram 0.006 m/s, kas ir 2.25 reizes mazāk nekā kristalizācijas frontes azimutālais ātrums šajā punktā. Ņemot vērā kausējuma komplicēto ģeometriju un to, ka kristalizācijas fronte nav horizontāla, iegūtais rezultāts labi atbilst novērtējumam.

Kopumā kausējuma kustības ātrumam būtu jāsamazinās līdzstrāvas magnētiskā lauka ietekmē. Tāpēc var sagaidīt, ka plūsma stabilizētos un hidrodinamiskās nestabilitātes samazinātos, iedarbojoties uz sistēmu ar vertikālu magnētisko lauku. Abas šīs tendences ir labi redzamas Att. 5.6, kurā attēlotas ātruma svārstības atskaites aprēķinā un aprēķinā ar līdzstrāvas magnētisko lauku. Konkrētais zondes punkts atrodas $R_{pr} = 2.5$ cm attālumā no rotācijas ass kristalizācijas frontes tuvumā. Kausējuma kustības svārstību apspiešana labi redzama salīdzinot normētās pretestības sadalījumus Att. 4.11 (a), (b), kur redzams, ka aprēķinā ar līdzstrāvas magnētisko lauku pretestības svārstības ir pazudušas. Izteiktais pretestības minimums ir saglabājies, jo līdzstrāvas magnētiskais lauks nav izjaucis vispārējo meridionālo virpuļu struktūru, skat. Att. 4.8 (b).

4.3.2 Rotējošs maiņstrāvas magnētiskais lauks

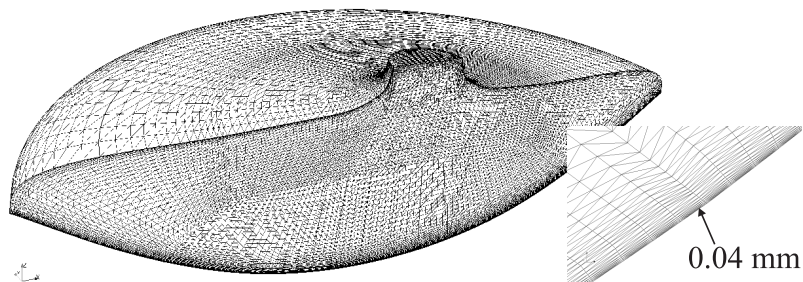
Maiņstrāvas magnētiskā lauka gadījumā kausējuma kustību ietekmē konstants spēku blīvuma sadalījums f_{AC} , kas tiek iegūts ar programmu *EM3D* ar konkrētu induktoru formu un sadalījumu. Apskatītajā piemērā spēka blīvuma sadalījums (Att. 2.4) ir vērsts pretējā virzienā nekā kristāla rotācija. Lielākais spēks ir novērojams kristalizācijas frontes tuvumā, skat. Att. 2.4, tāpēc ir sagaidāma plūsmas azimutālā ātruma bremsēšanās. Apskatot skaitliskos rezultātus, Att. 4.6 (c) redzams, ka tālāk no kristalizācijas frontes šķidrums rotē pat pretēji nekā kristāls. Izņēmums ir zona, kur termiskās konvekcijas dēļ šķidrums kustas vertikāli uz augšu, tādejādi ienesot kristāla azimutālo rotāciju tālāk kausējumā. Azimutālais ātrums tiek apslāpēts apmēram 3 mm biezā slānī pie kristalizācijas frontes. Šajā robežslānī ir novērojama šķidruma kustība virzienā no rotācijas ass uz kristāla malu (Att. 4.4 (c)) izteikto centrālās spēku dēļ. Šī robežslāņa dēļ tiek izlīdzināts piemaisījumu koncentrācijas maksimums, kas bija novērojams gan atskaites aprēķinā, gan aprēķinā ar līdzstrāvas magnētisko lauku, skat. Att. 4.8 (c). Salīdzinot ar atskaites aprēķinu šķidruma kustība meridionālā plaknē ir stabilāka un sakārtotāka, Att. 4.4 (a), (c), tomēr normētās pretestības sadalījumi parāda, ka pilnībā kausējuma fluktuācijas nav novērstas, skat. Att. 4.11(c).

4.4 Aprēķinu rezultāti un to analīze 6 collu sistēmai ar pievienotu maiņstrāvas magnētisko lauku

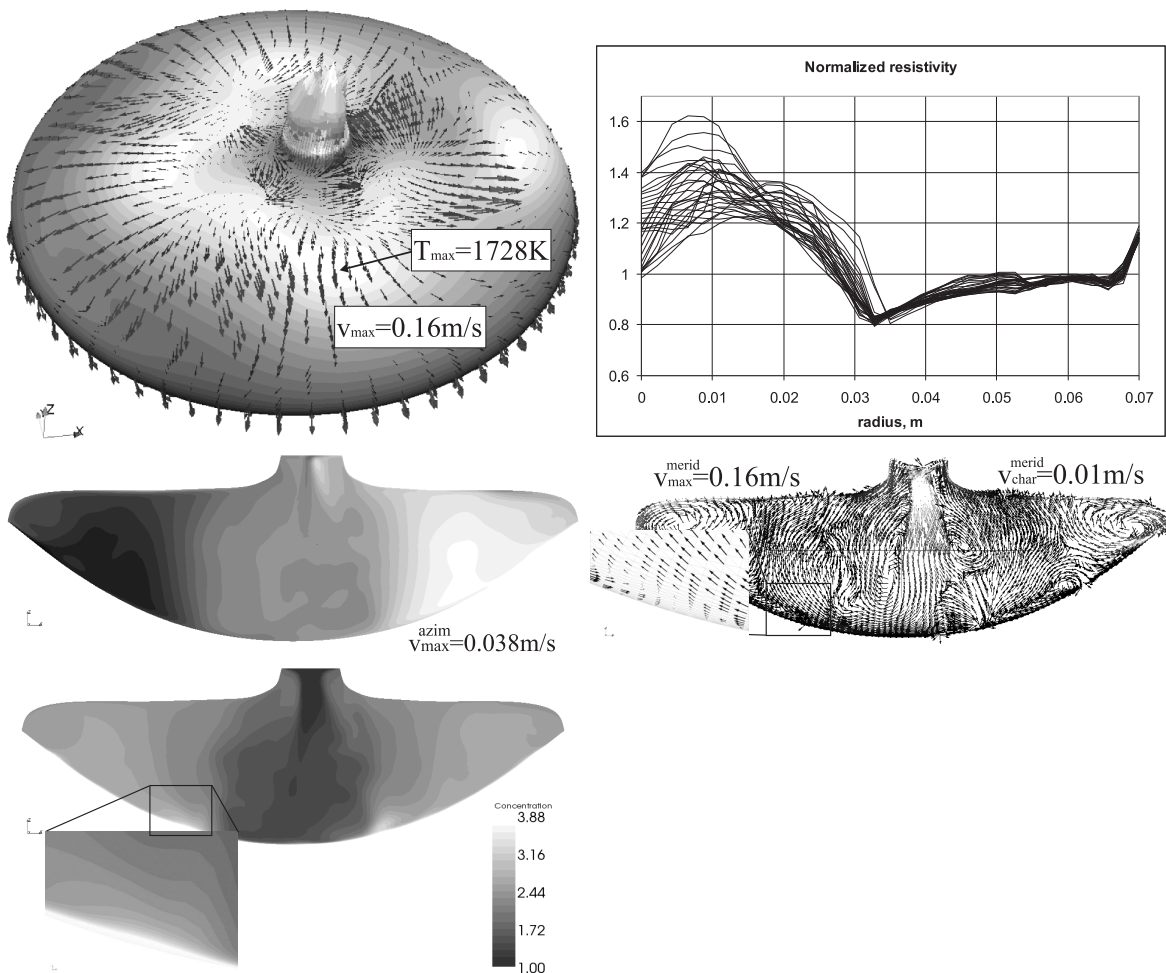
Šajā apakšnodaļā salīdzināti 3D nestacionāru aprēķinu rezultāti 6 collu PZ procesam bez papildus magnētiskā lauka un ar rotējošu maiņstrāvas magnētisko lauku. Rezultāti publicēti [conf7]. Kristāla rotācijas ātrums abos apskatītajos gadījumos ir 5 rpm. Zemfrekvences rotējoša magnētiskā lauka aprēķinu metode ar komerciālo paketi ANSYS © ir dota [conf7].

Šķidruma kustības, temperatūras un masas pārnese aprēķini ir veikti ar specializētu aprēķinu programmu *FzsiACFoam*, kas ir balstīts uz atvērtā koda bibliotēkām no OpenFOAM un ir verificēts, salīdzinot rezultātus ar Fluent©. Aprēķiniem izmantots 3D heksaedrāls strukturēts režģis ar 18000 elementiem, skat. Att. 4.14, ar pirmās šūnas biezumu pie kristalizācijas frontes 0.04mm. Konvektīvie locekļi *FzsiACFoam* ir aproksimēti ar Limited linear shēmu, bet Fluent © ar otrās kārtas pretvēja shēmu. Atbilstošie aprēķinu laika soļi ir 0.0025s un 0.01s. Aprēķiniem ar *FzsiACFoam* tiek īstenota paralelizācija uz 8 procesoriem. Rezultātu sakritība bija 5% robežās.

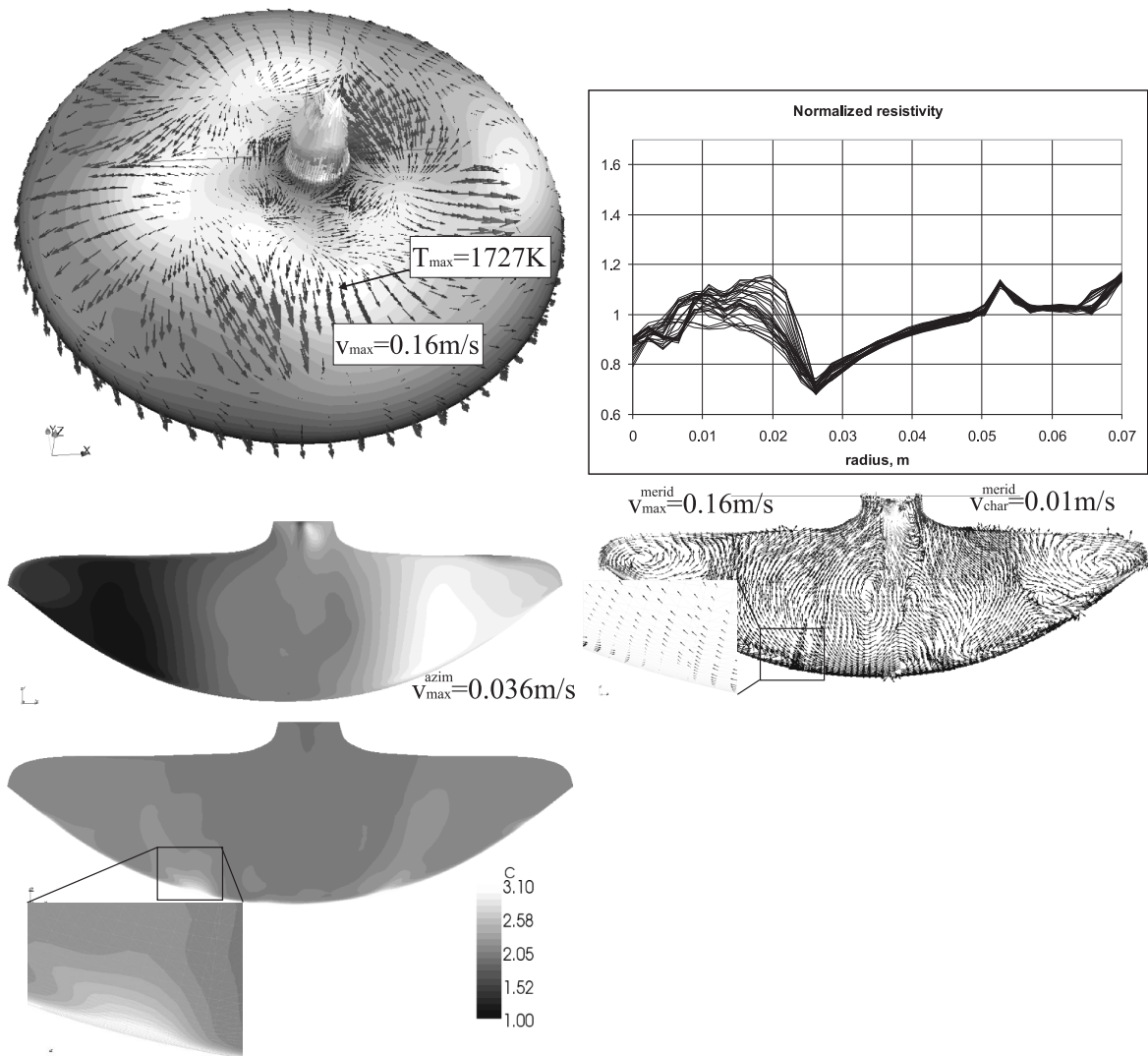
Att. 4.15 redzami rezultāti ar rotējošo magnētisko lauku ar indukcijas vērtību 4mT un frekvenci 50 Hz. Magnētiskā lauka rotācijas virziens ir pretējs kristāla rotācijas virzienam. Salīdzinot rezultātus ar atskaites variantu bez magnētiskā lauka (Att. 4.16), redzams, ka līdzīgi kā 4 collu gadījumā pretestības sadalījums ir kļuvis nedaudz homogēnāks. Pretestības minimums ir pavirzījies tālāk no kristāla rotācijas ass, taču profili vēl nav tik efektīvi nogludināti kā 4 collu gadījumā. Acīmredzot radītais magnētiskais spēks nav pietiekami stiprs, lai pilnībā nobremzētu šķidruma azimutālo kustību, kas redzams Att. 4.15 un 4.16. Šī iemesla dēļ vēl nav izveidojies centrālās radītais ātruma robežslānis gar kristalizācijas fronti.



Att. 4.14: 3D heksaedrālais režģis pusei no apskatītā apgabala ar palielinājumu kristalizācijas frontes tuvumā.



Att. 4.15: Rezultāti ar rotējošu magnētisku lauku, kristāla rotācija 5 rpm: a) ātruma vektori un temperatūras sadalījums uz brīvās virsmas, b) azimutālais ātrums vertikālā šķērs griezumā, c) ātruma vektori vertikālā šķērs griezumā, d) koncentrācijas sadalījums un palielināts segregācijas robešlānis, e) normētās pretestības sadalījums kristālā.



Att. 4.16: Rezultāti aprēķinam bez papildus magnētiskā lauka, kristāla rotācija 5 rpm: a) ātruma vektori un temperatūras sadalījums uz brīvās virsmas, b) azimutālais ātrums vertikālā šķēsgriezumā, c) ātruma vektori vertikālā šķēsgriezumā, d) koncentrācijas sadalījums un palielināts segregācijas robešlānis, e) normētās pretestības sadalījums kristālā.

4.5 Secinājumi

Ir parādīts, ka vertikālais magnētiskais lauks efektīvi samazina šķidruma kustības ātrumu un aplāpē ātruma fluktuācijas. Plūsmas stabilizācijas dēļ, nostiprinās virpuļu struktūra, kā rezultātā pretestības sadalījuma amplitūda pieaug salīdzinājumā ar atskaites variantu bez magnētiskā lauka.

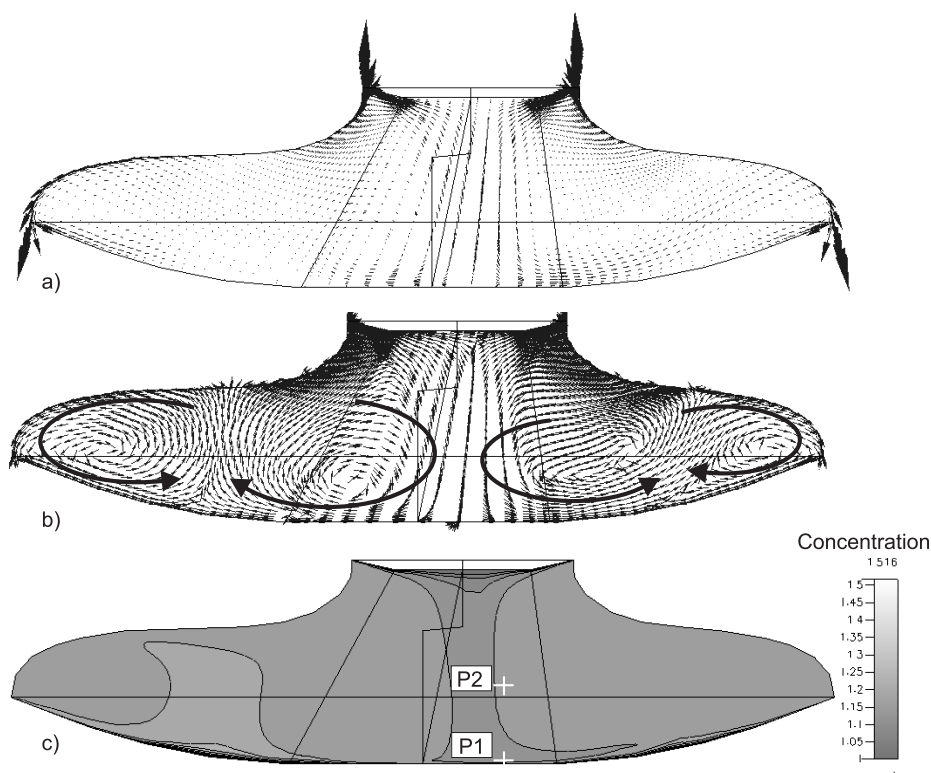
Ir parādīts, ka rotējošo magnētisko lauku var izmantot, lai efektīvi ietekmētu šķidruma azimutālo kustību. Ja maiņstrāvas magnētiskā lauka radītais spēks ir orientēts pretēji kristāla rotācijas virzienam, pietiekami stipra spēka gadījumā, tas var nobremzēt šķidruma rotāciju, kā rezultātā izveidojas centrālās ātruma robežslānis, kas homogenizē pretestības sadalījumu. Ir parādīts, ka rotējošais magnētiskais lauks nedaudz samazina šķidruma fluktuācijas, ko izraisa hidrodinamiskās

nestabilitātes.

5 Specifisku PZ kristālu audzēšanas procesa kausējuma kustības aspektu modelēšana

Šī nodaļa ilustrē skaitlisko aprēķinu rezultātus, kas iegūti ar nestacionāru kristāla rotāciju 4 collu procesā [dis3] un nestacionāru 3D segregācijas procesa analīzi [dis4].

5.1 4" sistēmas aprēķini ar mainītu kristāla rotācijas ātrumu

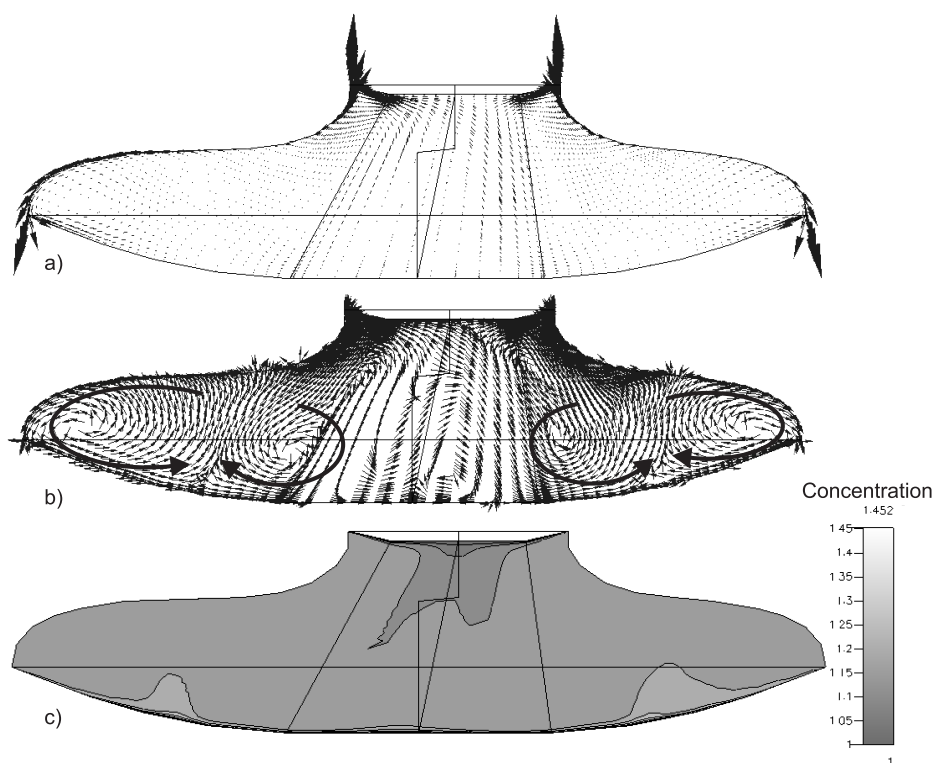


Att. 5.1: Meridionālais ātrums (a) vektori reālā mērogā, b) vienāda garuma vektori un koncentrācijas lauks vertikālā šķērs griezumā, kas paralēls induktora galvenajai spraugai. 10. nestacionāro aprēķinu sekunde (kristāls nerotē).

4 collu sistēmas aprēķini, kas aprakstīti šajā nodaļā, veikti ar komerciālo aprēķinu paketi CFD-ACE ©. Sekojošas materiāla īpašības ir izmantotas: polikristāla rotācijas ātrums $\Omega_F = 0rpm$; kristāla rotācijas ātrums $\Omega_{cr} = 7rpm$; kristāla vilkšanas ātrums $v_{cr} = 4 \cdot 10^{-5}m/s$; viskozitāte $\eta = 8.6 \cdot 10^{-4}kg/m \cdot s$; blīvums $\rho = 2580kg/m^3$; īpatnējā siltumietilpība $c_p = 1000J/kg \cdot K$; siltuma vadītspēja $\lambda = 67W/m \cdot K$, Lineārais termiskās izplešanās koeficients $\beta = 1 \cdot 10^{-4}1/K$ difūzijas

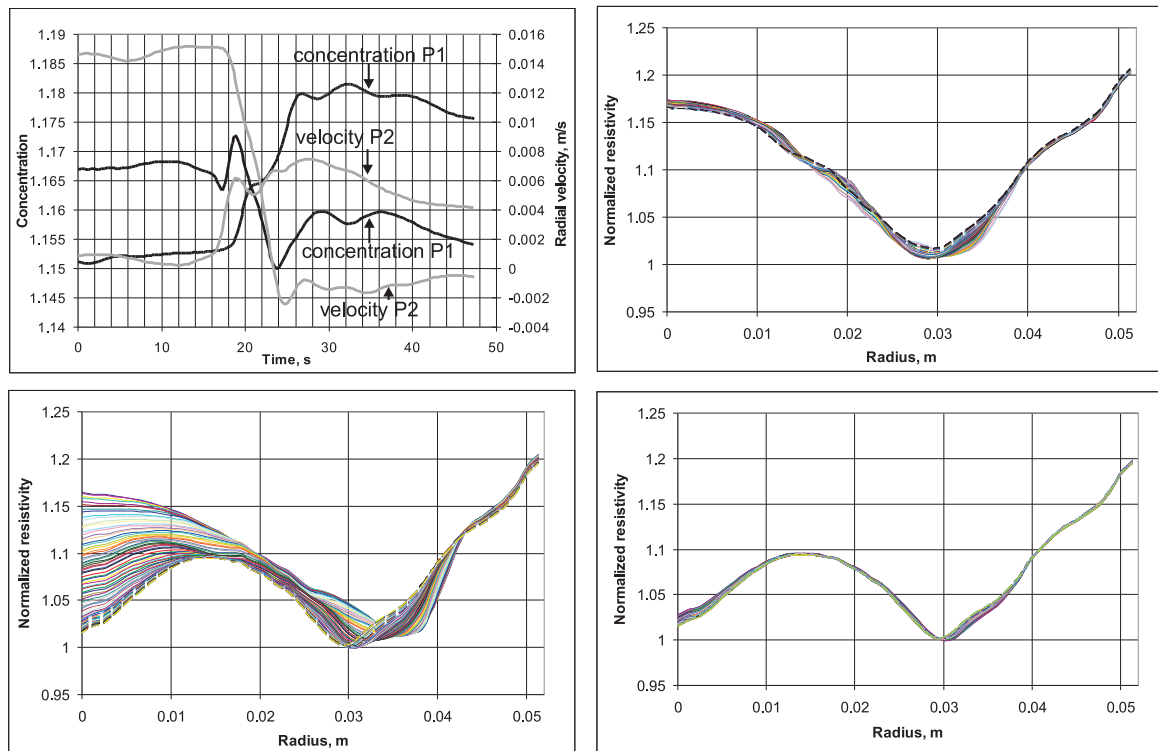
koeficients $D = 3.4 \cdot 10^{-8} m^2/s$; segregācijas koeficients $k_0 = 0.7$; virsmas spraiguma koeficienta temperatūras atvasinājums $\partial\gamma/\partial T = -2.5 \cdot 10^{-4} N/m \cdot K$, sīkākām detaļām skatīt [dis2].

Sākumā tiek veikts nestacionārs aprēķins, lai iegūtu pareizu koncentrācijas līmeni kausējumā. Iegūtais rezultāts tiek izmantots kā sākuma nosacījums nestacionārajam aprēķinam bez kristāla rotācijas, kurš tiek veikts 16 plūsmas sekundes. Niecīgas fizikālo lielumu svārstības var tikt novērotas. Sešpadsmitajā sekundē tiek ieslēgta kristāla rotācija no 0 uz 7 apgriezieniem minūtē. Tiek apskatīti normētie pretestības sadalījumi, kā arī radiālā ātruma un piemaisījumu koncentrācijas svārstības divās zondēs (P1 un P2 Att. 5.1. c), kas atrodas vertikālā šķērs griezumā induktora galvenās spraugas plaknē.



Att. 5.2: Meridionālais ātrums (a) vektori reālā mērogā, b) vienāda garuma vektori un koncentrācijas lauks vertikālā šķērs griezumā, kas paralēls induktora galvenajai spragai. 43. nestacionāro aprēķinu sekunde (kristāla rotācija 7 rpm).

Att. 5.1 un 5.2 parāda meridionālā ātruma vektorus: (a) vektori reālā mērogā, b) vienāda garuma vektori un koncentrācijas lauku vertikālā šķērs griezumā 10-tajai sekunde bez kristāla rotācijas Att. 5.1 un 43. sekunde - kristāla rotācija 7 rpm Att. 5.2. Gadījumā bez kristāla rotācijas ir novērojami divi toroidāli virpuļi, kas atdalās no kristalizācijas frontes apmēram 3 cm attālumā no rotācijas ass, skat. Att. 5.1. b). Šo virpuļu ietekme uz koncentrācijas sadalījumu redzama Att. 5.1. c), jo koncentrācijas maksimums novērojams tādā pašā attālumā no rotācijas ass, kā abu virpuļu atdalīšanās vieta. Brīdī, kad tiek ieslēgta kristāla rotācija, kausējuma centrā novērotā kustība kristalizācijas frontes virzienā tiek izjaukta un parādās vēl viens toroidāls virpuļis, kas rada jaunu koncentrācijas maksimumu uz rotācijas ass.



Att. 5.3: Augšā pa kreisi - radiālā ātruma un piemaisījumu koncentrācijas svārstības laikā divās zondēs - P1 un P2. Augšā pa labi - normētais pretestības sadalījums bez kristāla rotācijas, 1. - 16. sek. Apakšā pa kreisi - normētais pretestības sadalījums, kristāla rotācija 7 rpm, 16 - 48. sek. Apakšā pa labi - normētais pretestības sadalījums, kristāla rotācija 7 rpm, 40 - 48. sek.

Att. 5.3 redzamas radiālā ātruma un piemaisījumu koncentrācijas svārstības laikā divās zondēs (skat. Att. 5.1.). Pēc rotācijas ieslēgšanas sešpadsmitajā sekundē var redzēt, ka nepieciešamas apmēram 10 sekundes lai plūsma pārkārtotos. Pēc tam novērojamas tikai relatīvi mazas svārstības.

Viens no galvenajiem audzētā kristāla kvalitātes rādītājiem ir pretestības sadalījuma homogenitāte. Gadījumā bez kristāla rotācijas novērojams izteikts maksimums pie rādiusa 0.03 m, skat. Att. 5.3, kas izskaidrojams ar diviem toroidāliem virpuļiem. Kad tiek ieslēgta rotācija, pretestības vērtība uz rotācijas ass krītas, skat. Att. 5.3. Att. 5.3 parādīti pretestības sadalījumi pēdējām aprēķinātajām deviņām sekundēm, kas atbilst vienam pilnam kristāla apgriezienam. Ja salīdzina šos profilus ar Att. 5.3, tad galvenā atšķirība novērojama tieši uz rotācijas ass.

5.2 Raksturīgā pārkārtošanās laika analītisks novērtējums

Šajā apakšnodaļā tiek veikts analītisks novērtējums raksturīgajam plūsmas pārkārtošanās laikam. Šis laiks ir nepieciešams, lai plūsma varētu pielāgoties robežnosacījumu izmaiņām (rotācijas ieslēgšanai), proti, tai nepieciešams iegūt azimutālo ātrumu un atbilstoši mainīt arī meridionālo virpuļu struktūru.

5.3. 3D nestacionāri ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauku aprēķini 4" PZ procesā

Lai raksturotu spēka blīvumu, kas darbojas uz kausējumu dēļ rotējošā kristāla var rakstīt

$$\tau = \eta \frac{v}{\delta}, \quad (5.1)$$

kur τ ir spēka blīvums, kas darbojas uz kausējumu notiktā apgabalā, v ir raksturīgā starpība starp azimutālo kristāla un kausējuma ātrumu un δ ir raksturīgais hidrodinamiskā robežslāņa biezums. Šī slāņa biezuma novērtēšanai izmantota izteiksme Ekmaņa robežslānim no [27]

$$\delta_E = \sqrt{\frac{\eta}{\rho \cdot \Omega}}, \quad (5.2)$$

kur Ω ir kristalizācijas frontes leņķiskais ātrums. Apskatot šķidruma slāni ar biezumu h , raksturīgais pārkārtošanās laiks, kurā šis slānis iegūst azimutālo ātrumu no kristāla, var tikt aprēķināts kā

$$t = h \sqrt{\frac{\rho}{\Omega \eta}}. \quad (5.3)$$

Dotajā sistēmā šķidruma slāņa biezums var tikt novērtēts kā $h = 0.015m$. No tā seko, ka raksturīgais plūsmas pārkārtošanās laiks no 5.3 ir apmēram $30sec$. Ņemot vērā šī novērtējuma tuvinājumu, var uzskatīt, kas sakrītība ar aprēķiniem ir laba. Considering the roughness of the estimation, the correspondence with the calculation results is satisfactory.

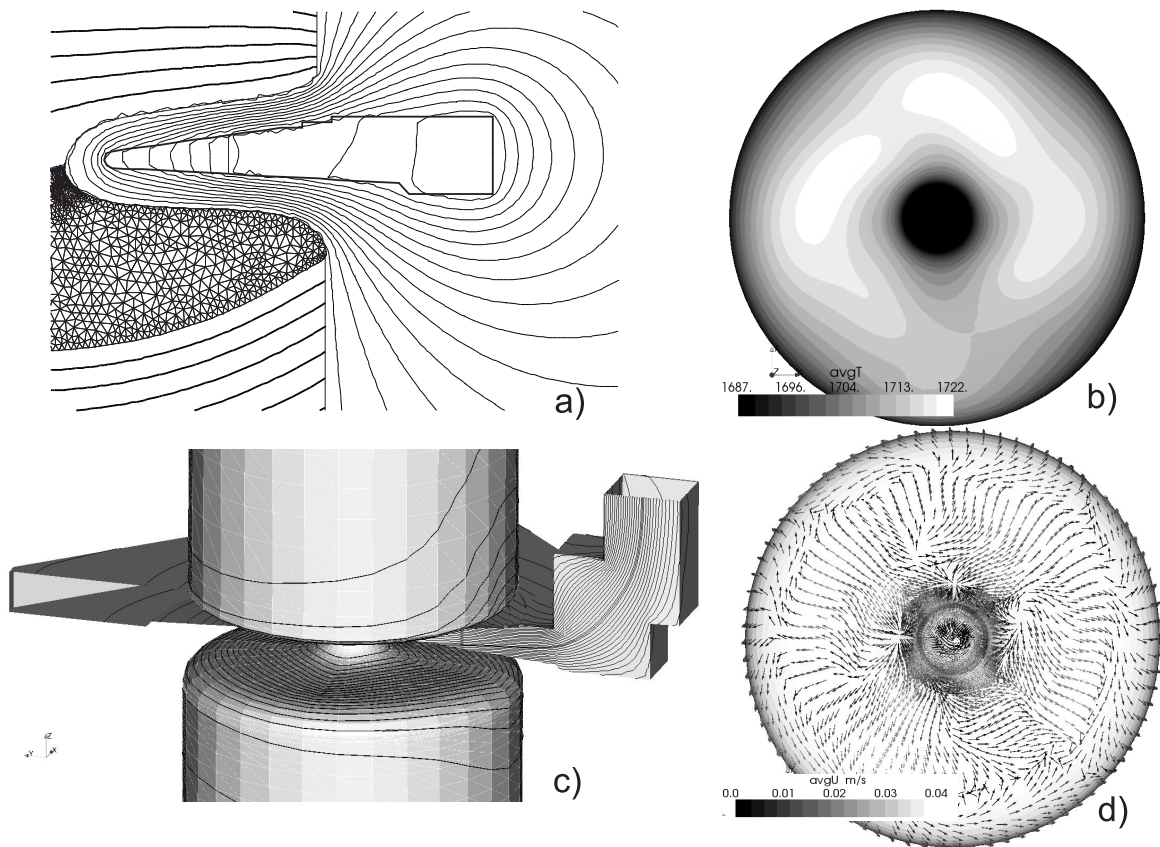
5.3 3D nestacionāri ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauku aprēķini 4" PZ procesā

Rakstā [dis4] aprakstīti nestacionāri lamināras šķidruma kustības, temperatūras un piemaisījumu koncentrācijas lauku aprēķini reālai eksperimentālai PZ sistēmai 100mm kristālu audzēšanai. Pētījumiem tiek izmantots iepriekš attīstīts matemātiskais modelis [dis3] kā arī specializēta programmu pakete *FzsiFOAM*, kas attīstīta izmantojot atvērtā koda bibliotēkas OpenFOAM [39].

Procedūra kausējuma fāzu robežu aprēķinam (Att. 5.4 a) ar specializētu 2D programmu FZone [14], 3D režģa izveidošana un robežnosacījumu aprēķins (Att. 5.4 c) kausējuma brīvajai virsmai ir aprakstīti [20]. 3D HD aprēķiniem izmantots režģis ar 160000 heksaedrāliem elementiem un lietots 0.5 ms laika solis. Apskatītajai sistēmai veikti aprēķini arī ar rupjāku režģi. Tā kā rezultāti pieņemamās robežās sakrīta ar 160000 elementu režģi, tad smalkāki režģi netika pārbaudīti. Laika diskretizācijai tika izmantota CrankNicholson shēma, bet diverģences locekļiem - LimitedLinearV shēma. Fizikālo lielumu laika atkarību pētīšanai kausējumā tika izvietotas 4 zondes, Att. 5.5 a. Visām zondēm attālums no kristalizācijas frontes bija 1.5 mm, bet attālums no rotācijas ass - 0, 0.01, 0.02 un 0.035 m. Tā kā plūsma tiek uzskatīta par lamināru, tiek ņemta vērā tikai fizikālā viskozitāte un konvekcija pulsāciju dēļ tiek modelēta tieši.

Temperatūras un ātruma lauki uz kausējuma brīvās virsmas vidējoti laikā pa 50 s ilgu periodu aprēķinu variantam ar kristāla rotāciju 5 rpm un polikristāla rotāciju 0 rpm ir attēloti Att. 5.4 b, d. Neskatoties uz konstanto rotācijas ātrumu, nestacionārie aprēķini dod ātruma, temperatūras un

5.3. 3D nestacionāri ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauku aprēķini 4" PZ procesā

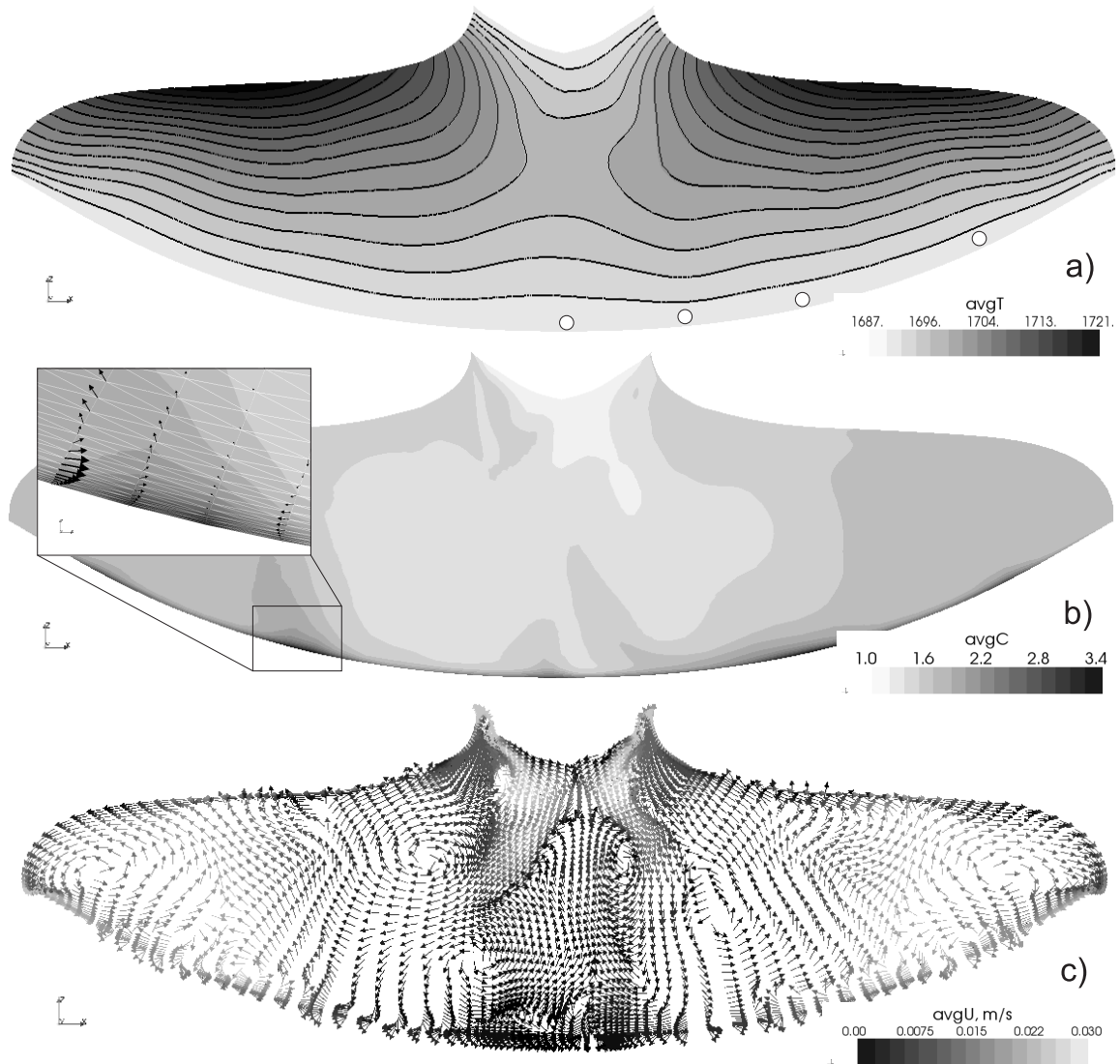


Att. 5.4: a) 2D fāzu robežas, kas aprēķinātas ar specializātu programmu FZone, [?], temperatūras izolīnijas poli, un monokristālos, FEM režģis (tiek izmantots tikai 2D aprēķiniem) kausējumā un magnētiskā lauka līnijas iekārtā. b) Laikā vidējots temperatūras lauks uz kausējuma brīvās virsmas (3D aprēķini), strāvas pievadi pievienoti attēla apakšējā daļā. c) 3D AF aprēķinu rezultāti, strāvas līnijas uz silīcija daļām, kā arī puses no induktora. d) Laikā vidējots ātruma sadalījums uz kausējuma brīvās virsmas (3D aprēķini), strāvas pievadi pievienoti attēla apakšējā daļā.

koncentrācijas svārstības hidrodinamisko nestabilitāšu dēļ apskatītajā kausējumā. Aprēķiniem atbilstošie laikā vidējie (50 s) ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauki vertikālā šķērs griezumā doti Att. 5.5.

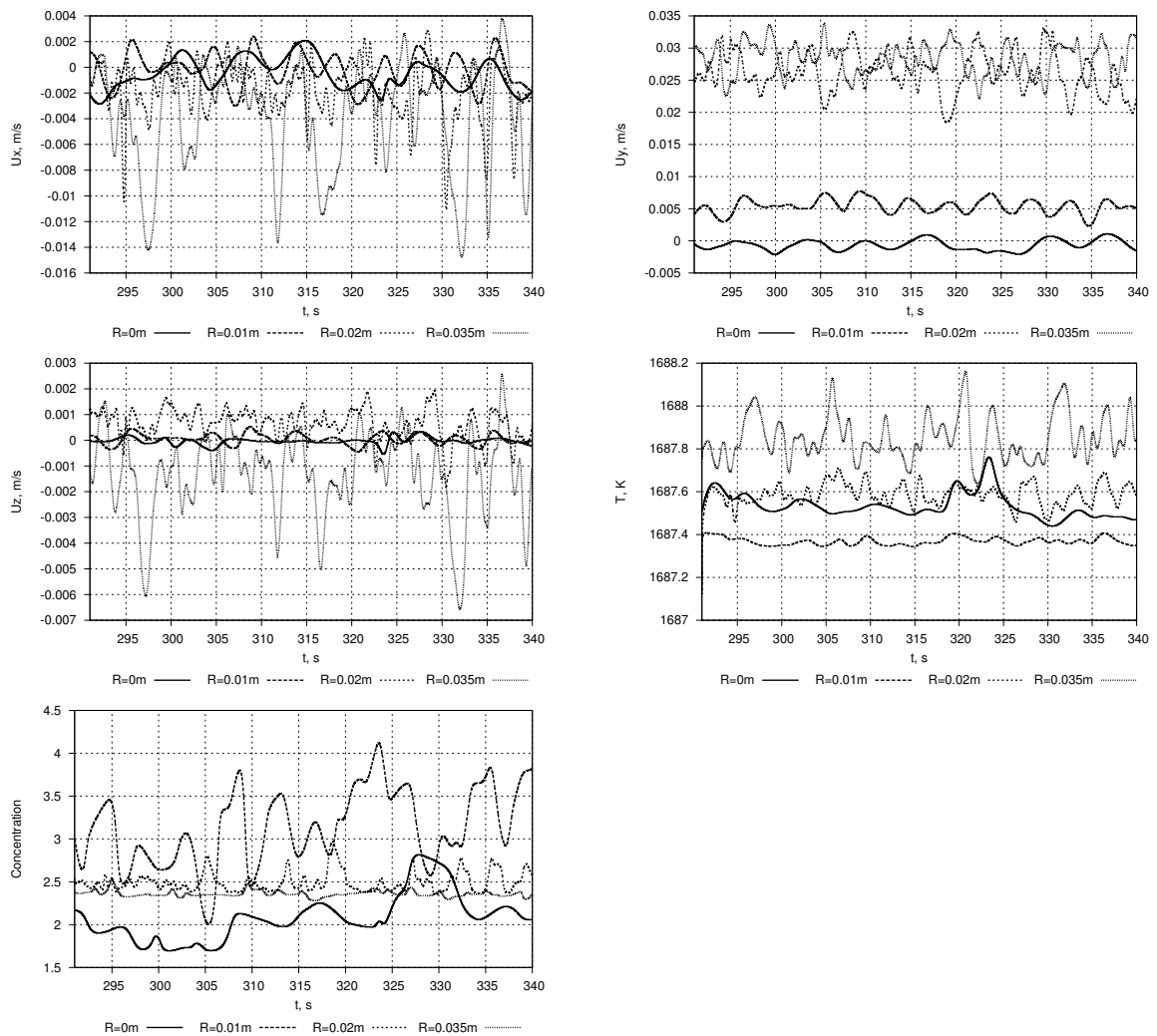
Lai noskaidrotu iespējamo temperatūras svārstību ietekmi uz lokālā kristāla augšanas ātrumu un segregācijas procesu, tiek analizētas fizikālo lielumu svārstības zondēs Att. 5.6. Temperatūras novirze zondē no kristalizācijas temperatūras konkrētā laika momentā tiek apzīmēta ar ΔT . No grafikiem ir iespējams novērtēt laikā vidējoto starpību $\overline{\Delta T}$ katrā zondē. Lai raksturotu momentāno temperatūras novirzi no vidējotās temperatūras novirzes tiek izmantots lielums $\delta(\Delta T) = \Delta T - \overline{\Delta T}$. Tāpēc tiek ieviests bezdimensionāls koeficients $\xi = \delta(\Delta T) / \overline{\Delta T}$, kas raksturo temperatūras svārstību relatīvo amplitūdu. Salīdzinot zondēs iegūtās temperatūras svārstības, augstākā laikā vidējotā starpība $\overline{\Delta T} \approx 0.9K$ novērojama zondē $R = 0.035m$. Tā kā svārstības šajā zondē ir $\pm 0.2K$ robežās, maksimālā $|\xi|$ vērtība ir $\xi_0 \approx 0.22$. Citās zondēs šī vērtība ir mazāka par 0.22, tomēr tā nenokrīt zemāk par $|\xi|_{max} \approx 0.13$ kā zondē $R = 0.01m$. Temperatūras svārstībām ir izteiktas vairākas svārstību frekvences

5.3. 3D nestacionāri ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauku aprēķini 4" PZ procesā



Att. 5.5: Laikā vidējoti a) temperatūras sadalījums ar norādītā zonu atrāšanās vietām, b) piemaisījumu koncentrācija ar palielinātu daļu pie kristalizācijas frontes un c) projicēti ātruma vektori vertikālā šķērsgriezumā galvenās induktora spraugas plaknē.

5.3. 3D nestacionāri ātruma, temperatūras un koncentrācijas lauku aprēķini 4" PZ procesā



Att. 5.6: Ātruma komponentu, piemaisījumu koncentrācijas un temperatūras svārstības zondēs.

robežās no 1 - 5 sek. tomēr visizteiktākais periods ir $\tau \approx 3s$.

Stiprākās normētās koncentrācijas svārstības dēļ konvektīvās kustības var novērot zondē $R = 0.01m$, kur $C(t) \approx 3.25 \pm 0.5$ un relatīvās svārstības ir apmēram 15%. Vismazākās svārstības var novērot zondē ar rādiusu $R = 0.035m$, kurā $C(t) \approx 2.4 \pm 0.1$ un svārstības ir tikai apmēram 4%. Arī koncentrācijas raksturīgais svārstību periods ir $\tau = 3s$.

Tā kā zondes atrodas xz plaknē tad U_x un U_z ir atbilstošās meridionālā ātruma komponentes, bet U_y atbilst azimutālajam ātrumam. Ir redzams, ka U_z (vertikālā komponente) svārstības pieaug pieaugot rādiusam. To var skaidrot ar pieaugošo leņķi starp kristalizācijas fronti un horizontālo plakni. Radiālais ātrums U_x svārstās ar divas līdz trīs reizes lielāku amplitūdu un tās raksturīgā vērtība ir $U_x \approx -0.001 \pm 0.002m/s$, kur mīnus zīme nozīmē šķidruma kustību rotācijas ass virzienā. Azimutālais ātrums U_y pieaug attālinoties no rotācijas ass. Neskatoties uz to, relatīvā amplitūda ir lielāka ass tuvumā $\approx 40\%$ pie $R = 0.01m$ un $\approx 20\%$ pie $R = 0.035m$. Ātruma komponentu svārstību periods krītas palielinoties zondes attālumam no ass. Ja centrā tas ir $\tau \approx 7s$, tad $0.035m$ attālumā no ass raksturīgais $\tau = 2.5s$.

5.4 Lokālā kristalizācijas ātruma analīze

Lokālais kristalizācijas ātruma amplitūda var tikt novērtēta no skaitliski aprēķinātā temperatūras gradienta svārstībām kristalizācijas frontes tuvumā. Laikā vidējotais siltuma plūsmas blīvums, kas rodas silīcijam kristalizējoties ir $\bar{q}_{cr} = v_p \rho q_0$, kur v_p ir kristāla vilkšanas ātrums, ρ ir cietā silīcija blīvums un q_0 īpatnējais kušanas siltums. Momentānā $q_{cr}(t) = v_{cr}(t) \rho q_0$ vērtība var laikā mainīties, jo aktuālais v_{cr} ir atkarīgs no temperatūras gradienta svārstībām pie kristalizācijas frontes. Kvazistacionārā tuvinājumā PZ procesā kristalizācijas fronte laboratorijas atskaites sistēmā nekustas, tāpēc laikā vidējotajam kristāla augšanas ātrumam ir spēkā $\bar{v}_{cr} = v_p$. Laikā vidējotais siltuma plūsmas blīvums \bar{q}_m no kausējuma temperatūras gradienta dēļ ir $\bar{q}_m = \lambda \Delta \bar{T} / \Delta n$, kur $\Delta \bar{T} / \Delta n$ ir raksturīgais temperatūras atvasinājums kristalizācijas frontes normāles virzienā, Δn ir attālums no izvēlētas zondes līdz kristalizācijas frontei un λ ir kausējuma siltumvadītspēja. Momentāna siltuma plūsma no kausējuma var tikt rakstīta kā $q_m = \lambda \Delta T / \Delta n$. Acīmredzot, laikā vidējotais siltuma plūsmas blīvums no kristalizācijas frontes kristālā var tikt izteikts kā summa $\bar{q}_s = \bar{q}_{cr} + \bar{q}_m$. Tā kā laboratorijas atskaites sistēmā kristalizācijas fronte var tikt uzskatīta par nekustīgu (relatīvi niecīgu svārstību gadījumā), momentānā vērtība ir $q_s \approx \bar{q}_s = const$. No šī pieņēmuma izriet, ka temperatūras svārstības kausējumā tiek kompensētas ar lokālā kristalizācijas ātruma izmaiņām:

$$q_{cr} + q_m = q_s = \bar{q}_{cr} + \bar{q}_m. \quad (5.4)$$

Momentānajam lokālajam kristalizācijas ātrumam seko

$$v_{cr}(t) = \frac{1}{\rho q_0} [\bar{q}_{cr} + \bar{q}_m - q_m] = v_p + \frac{1}{\rho q_0} [\bar{q}_m - q_m]. \quad (5.5)$$

Izmantojot temperatūras vērtību zondē, seko, ka

$$v_{cr}(t) = v_p - \frac{1}{\rho q_0} \cdot \lambda \frac{\Delta \bar{T}}{\Delta n} \cdot \frac{\delta(\Delta T)}{\Delta \bar{T}} = v_p - \frac{1}{\rho q_0} \cdot \bar{q}_m \cdot \xi(t) = v_p(1 - \beta(t)), \quad (5.6)$$

kur relatīvās kristalizācijas ātruma izmaiņas tiek aprakstītas ar $\beta(t)$. Tādejādi, izmantojot aprēķinu rezultātus un datus par temperatūras svārstībām zondē, var novērtēt β_0 raksturoto apmēru, kādā lokālais kristalizācijas ātrums svārstās dēļ temperatūras izmaiņām kristalizācijas frontes tuvumā, t.i.

$$\beta(t) = -\frac{v_{cr}(t) - v_p}{v_p} = \frac{1}{\rho q_0} \bar{q}_m \xi(t), \quad \beta_0 = |\beta(t)|_{max} = \frac{\bar{q}_m \xi(t)_0}{v_p \rho q_0}. \quad (5.7)$$

Visizteiktākās temperatūras svārstības tiek novērotas zondē $R = 0.035m$. Ja $\xi_0 = 0.22$ un izmantojot sekojošās materiāla īpašības: $v_p = 3.2mm/min$, $\rho = 2329kg/m^3$, $q_0 = 1.8 \cdot 10^6 W/m^2$, $\Delta \bar{T}/\Delta n = 600K/m$, $\lambda = 67W/mK$ meš iegūstam, ka $\beta_0 \leq 0.04$.

5.5 Analītisks lokālo kristalizācijas ātruma izmaiņu dēļ radušos koncentrācijas svārstību novērtējums

Vispārējais koncentrācijas pārnese vienādojums kausējumā ir

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (v \nabla) C = D \Delta C, \quad (5.8)$$

kur D ir piemaisījumu difūzijas koeficients kausējumā. Segregācijas robežnosacījums pie kristalizācijas frontes ir

$$D \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{n=0} = v_{cr} (k_0 - 1) C \cos \theta, \quad (5.9)$$

kur n ir kristalizācijas frontes iekšējā normāle, k_0 - segregācijas koeficients un θ ir leņķis starp kristalizācijas fronti un horizontālo plakni. Sekojošajā analītiskajā novērtējumā tiek pieņemts, ka $\theta = 0$ un tiek apskatīts tiešs kristalizācijas frontes tuvums. Šī iemesla dēļ tikai normālā ātruma komponente var tikt ņemta vērā un tā atbilst kristāla vilkšanas ātrumam. Tādejādi lokāli (5.8) pārveidojas par

$$\frac{\partial C}{\partial t} - v_p \frac{\partial C}{\partial n} = D \frac{\partial^2 C}{\partial n^2}. \quad (5.10)$$

Vienādojuma (5.10) stacionārais atrisinājums jāmeklē eksponenciālā formā. Izmantojot robežnosacījumu (5.9) un aizvietojo v_{cr} ar v_p , kā arī ar nosacījumu, ka $C(n)|_{n \rightarrow \infty} = 1$ atrisinājums ir

$$C_0(n) = \frac{1 - k_0}{k_0} e^{-\frac{v_p}{D} n} + 1. \quad (5.11)$$

Lai analizētu koncentrācijas svārstības, oscilējošais ātrums robežnosacījumā (5.9) tiek aprakstīts kā $v_{cr}(t) = v_p (1 + \beta_0 e^{i\omega t})$, kur $\omega = 2\pi/\tau$ un τ ir raksturīgais svārstību periods, savukārt β_0 ir maza

ātruma svārstību relatīvā amplitūda. No laika atkarīgais (5.10) un (5.9) atrisinājums $C(n, t)$ var tikt meklēts kā stacionārā atrisinājuma un relatīvi mazas no laika atkarīgas komponentes $C_1(n, t)$ summa

$$C(n, t) = C_0(n) + C_1(n, t), \quad (5.12)$$

kur

$$C_1(n, t) = C_1^* e^{i\omega t} \cdot e^{\lambda n}, \quad (5.13)$$

kur $\lambda = \lambda_{Re} + i\lambda_{Im}$. Ievietojot (5.13) vienādojumā (5.10) iegūstam sekojošas vērtības λ_{Re} un λ_{Im} gadījumā, kad $C_1(n, t)|_{n \rightarrow \infty} = 0$

$$\lambda_{Re} = -\frac{v_p}{2D} \left[1 + \sqrt{\sqrt{\frac{1}{4} + 4\frac{\omega^2 D^2}{v_p^4}} + \frac{1}{2}} \right] \quad \lambda_{Im} = \frac{v_p}{2D} \left[1 + \sqrt{\sqrt{\frac{1}{4} + 4\frac{\omega^2 D^2}{v_p^4}} - \frac{1}{2}} \right]. \quad (5.14)$$

Lai iegūtu koeficientu C_1^* , izteiksme (5.12) ir jāievieto robežnosacījumā (5.9)

$$D \frac{\partial C_0}{\partial n} + D \frac{\partial C_1}{\partial n} = \gamma C_0^* + \gamma C_1^* e^{i\omega t} + \beta_0 e^{i\omega t} C_0^* + \beta_0 e^{i\omega t} C_1^* e^{i\omega t}, \quad (5.15)$$

Kur izmanto $C_0^* = C_0(0)$ un $\gamma = (k_0 - 1)v_p/D$.

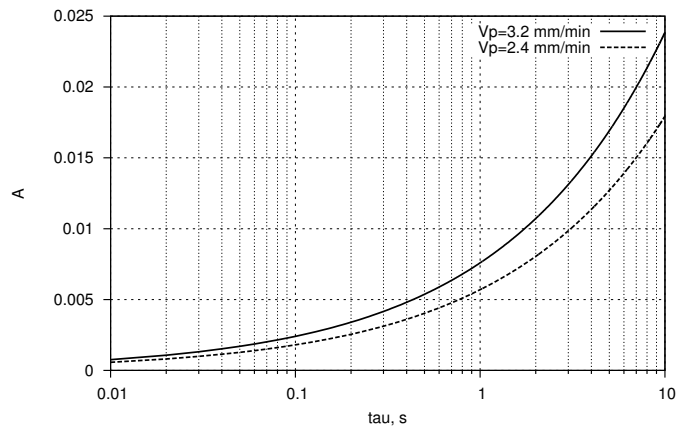
Pēdējais loceklis var tikt atmests kā divu mazu locekļu reizinājums. Zinot, ka kreisās un labās puses atrisinājums ir stacionārā koncentrācijas pārnese vienādojuma robežnosacījums, tiek iegūta sekojošā sakarība

$$C_1^* e^{i\omega t} \cdot \lambda = \gamma C_1^* e^{i\omega t} + \beta_0 e^{i\omega t} C_0^*. \quad (5.16)$$

Attiecībai C_1^*/C_0^* un attiecībai starp koncentrācijas svārstību amplitūdu un laikā vidējoto koncentrācijas vērtību seko

$$\frac{C_1^*}{C_0^*} = \beta_0 \frac{\gamma}{\lambda - \gamma}, \quad \frac{|C_1^*|}{|C_0^*|} = \beta_0 A, \quad A = \frac{\gamma}{\sqrt{(\lambda_{Re} - \gamma)^2 + \lambda_{Im}^2}}. \quad (5.17)$$

Att. 5.7 redzams $A(\tau)$ pie diviem tipiskiem kristāla vilkšanas ātrumiem 2.4 mm/min un 3.2 mm/min . Skaitliskie aprēķini parādīja, ka tipiskais pulsāciju periods τ nav garāks par 5 s . No Att. 5.7 periodam $\tau = 5 \text{ s}$ seko, ka $A \leq 0.018$. Zinot, ka $\beta_0 \leq 0.04$, attiecība $|C_1^*|/|C_0^*| \leq 0.0001$. Šī vērtība ir būtiski mazāka par mazākajām koncentrācijas svārstībām 4% apmērā dēļ konvektīvās pārnese, Att. 5.6.



Att. 5.7: $A(\tau)$ diviem tipiskajiem kristāla vilkšanas ātrumiem $2.4\text{mm}/\text{min}$ un $3.2\text{mm}/\text{min}$.

5.6 Secinājumi

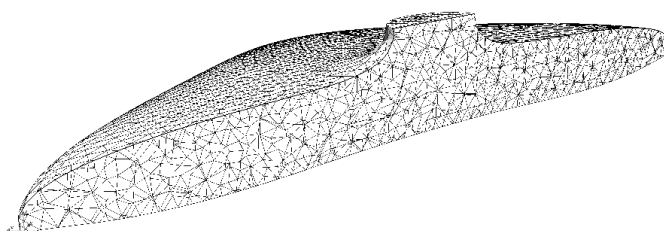
Ir veikts testa aprēķins 4 collu PZ procesam, kurā vienā momentā tiek ieslēgs kristāla rotācijas ātrums. Ir analizētas kausējuma kustības un piemaisījumu koncentrācijas svārstības zondēs. Normētā pretestības sadalījuma izmaiņas ir izskaidrotas ar kausējuma kustības izmaiņām. Ir veikta aptuvena pārejas perioda, kas nepieciešams kausējumam lai pārkārtotos pēc rotācijas ieslēgšanas, novērtēšana. Iegūtais lielums ir salīdzināts ar skaitliskajiem rezultātiem.

Veiktie 3D aprēķini un sekojošie analītiskie novērtējumi ir parādījuši, ka piemaisījumu koncentrācijas svārstības kausējumā pie kristalizācijas frontes ir par divām kārtām mazākas kā iespējamās svārstības lokālu kristalizācijas ātruma izmaiņu dēļ. Šī iemesla dēļ izmantotais konstanta kristalizācijas ātruma tuvinājums skaitliskajos aprēķinos var tikt uzskatīts par pietiekami precīzu.

6 3D nestacionāra kausējuma kustības modelēšana kvadrātveida PZ silīcija kristāla audzēšanas procesā

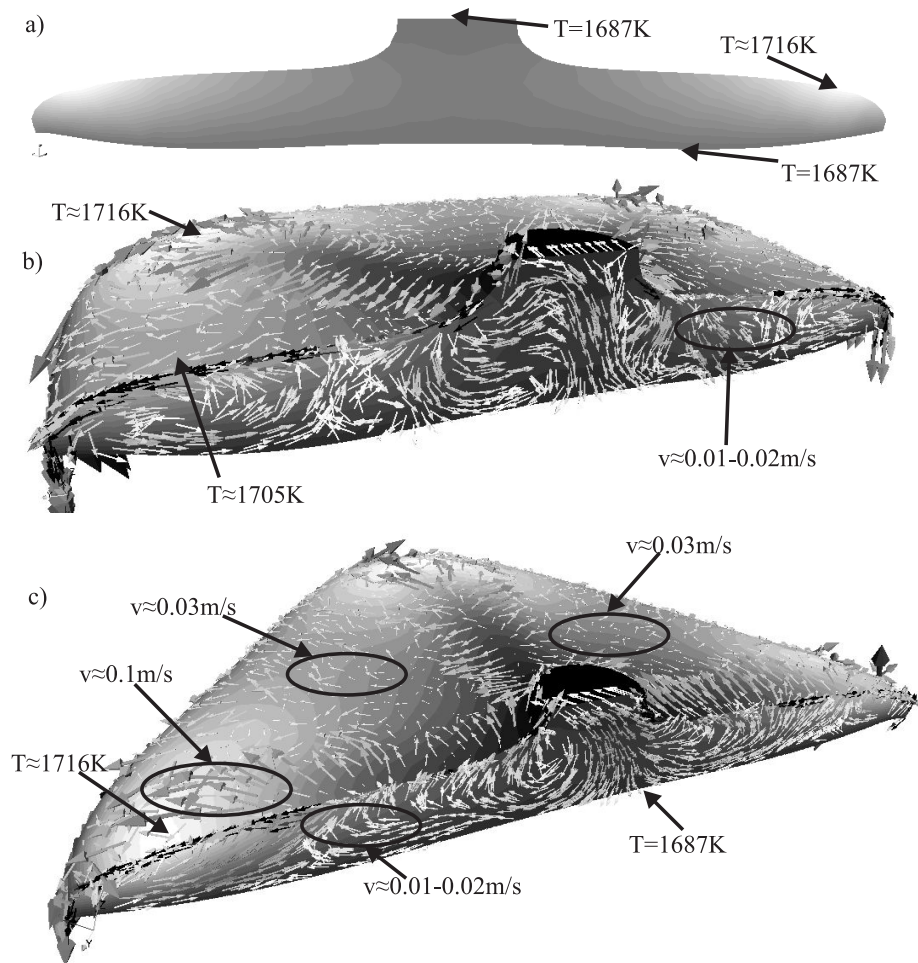
Šī nodaļa ilustrē pirmos 3D nestacionāros kausējuma kustības un temperatūras aprēķinus izkusušajā zonā PZ procesā, kurā tiek audzēti kvadrātveida silīcija monokristāli. Matemātiskais modelis, kas tiek izmatots kausējuma formas aprēķinos ir sīkāk aprakstīts [conf8].

6.1 Aprēķinātie 3D kausējuma ātruma un temperatūras lauki



Att. 6.1: Kausējumu aprakstošais nestrukturētais tetraedru režģis ar apmēram 50000 elementiem.

Lai aprakstītu kausējumu kvadrātveida kristālu audzēšanas procesā tiek izmantots nestrukturēts tetraedru režģis ar apmēram 50000 elementiem, kas parādīts Att. 6.1. Att. 6.2 parādīti sekojošie rezultāti: a) temperatūras sadalījums vertikālā šķērsgriezumā pa audzētā kristāla diagonāli, b) temperatūras un ātruma vektori uz kausējuma brīvās virsmas, kā arī vertikālā šķērsgriezumā, kas paralēls kristāla taisnajai malai, c)) temperatūras un ātruma vektori uz kausējuma brīvās virsmas, kā arī vertikālā šķērsgriezumā paralēli kristāla diagonālei. Maksimālā kausējumā novērotā temperatūra ir 1716 K un tā ir aptuveni vienāda visos četros maksimumos, kas atrodas zem galvenās induktora spraugas un trim papildspraugu galos. Dominējošie kausējuma kustību izraisītie spēki ir Marangoni un EM spēki, bet termālā konvekcija nespēlē tik būtisku lomu. Marangoni spēki izteiktāk dominē trīskāršo līniju tuvumā, savukārt uz kausējuma brīvās virsmas šķidrums kustību pamatā nosaka AF EM spēki. Ļoti izteikti redzams inducētās jaudas minimuma ietekme zem papildspraugām - ātruma vektori ir gandrīz perpendikulāri spraugām. Lielākā ātruma vērtība novērojama ETP līnijas tuvumā - 0.3-0.35 m/s. Uz brīvās virsmas raksturīgais ātrums ir 0.03-0.1 m/s, bet kausējuma tilpumā ātrums nokrīt līdz 0.01-0.02 m/s.



Att. 6.2: a) Temperatūras sadalījums vertikālā šķērsgriezumā pa kausējuma diagonāli; b) Temperatūras lauks un ātruma vektori uz kausējuma brīvās virsmas un vertikālā šķērsgriezumā, kas paralēls kristāla malai; c) Temperatūras lauks un ātruma vektori uz kausējuma brīvās virsmas un vertikālā šķērsgriezumā, kas paralēls kausējuma diagonālei.

6.2 Secinājumi

Pirmo reizi veikti kausējuma kustības un temperatūras lauka aprēķini PZ procesā, kurā tiek audzēti kvadrātveida silīcija kristāli. Rezultāti ir parādījuši, ka kausējuma kustību ļoti būtiski ietekmē AF EM lauka sadalījums, ko rada AF induktors. Īpaši redzama induktora spraugu ietekme. Tā kā kristāls netiek griezts, ātruma struktūrā kausējuma stūros ir neatkarīga.

7 Izejmateriāla stieņa kausēšanas AF EM laukā modelēšana

Šajā nodaļā dots ieskats pētījumā par polikristāliska silīcija kausēšanu AF EM laukā industriālā PZ kristālu audzēšanas procesa vajadzībām. Sīkāk pētījums aprakstīts rakstā [dis1].

Ņemot vērā AF induktora, kas tiek izmantots silīcija izejmateriāla kausēšanai, strāvas pievadus un spraugas, kušanas procesu nevar uzskatīt par stacionāru. Silīcijs tiek intensīvāk kausēts virs galvenās spraugas un papildspraugām, dēļ inducētās jaudas asimetrijas. Lai panāktu vienmērīgu kausēšanu, izejmateriāla stienis tiek rotēts, neskatoties uz to reizēm atsevišķas neizkusušas silīcija daļiņas atdalās no izejmateriāla un nonāk kausējumā. Ja šāda daļiņa nonāk kontaktā ar kristalizācijas fronti, iespējama kristāla dislocēšanās. Cits nevienmērīgas kausēšanas scenārijs paredz neizkusušu izvirzījumu ietriekšanos induktorā, kas nenovēršami novestu pie kristāla audzēšanas procesa pārtraukšanas. Šie procesi sīkāk analizēti rakstā [dis1].

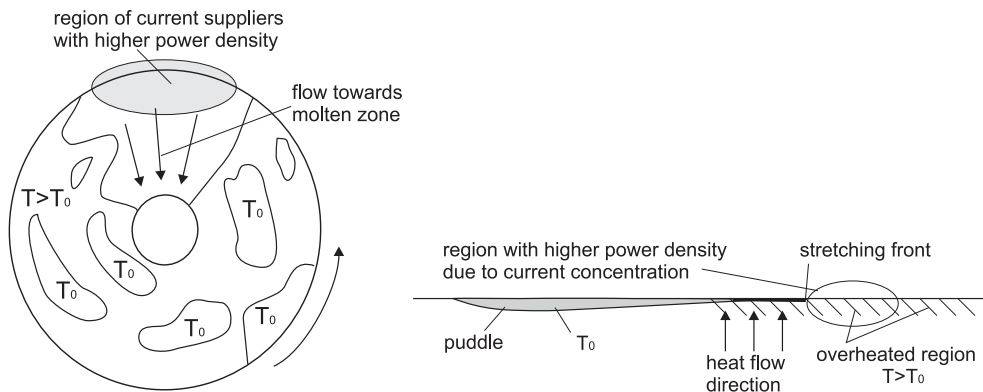
7.1 Industriālā PZ procesa īpatnības

Industriālajā praksē ir novērots, ka kausējums gar atvērto kušanas fronti notek galvenokārt zonā virs induktora galvenās spraugas. Pārējā kušanas frontes daļā kušanas notiek peļķveida struktūrā. Uzreiz pēc novirzīšanās aiz induktora galvenās spraugas, atklātā kušanas fronte ir gandrīz sausa. Inducētās jaudas dēļ izdalās siltums, kā rezultātā peļķes aug un pilna rotācijas perioda laikā apvienojas. Kā parādīts aprēķinos [dis1], Inducētās jaudas blīvums virs galvenās spraugas ir apmēram trīs reizes augstāks par pārējiem atklātās kušanas frontes sektoriem. Šī iemesla dēļ visintensīvākā kušana ir tieši virs galvenās spraugas, skat. Att. 7.1.

Sausajos induktora sektoros inducētais siltums patērējas materiāla pārkarsēšanai, bet peļķēs - to palielināšanai. Peļķu iedīgli izvietojas neregulāri, jo to rašanās process ir stohastisks. Šī iemesla dēļ ir sarežģīti modelēt peļķu apvienošanās. Neskatoties uz to, ir iespējams aptuveni analizēt peļķu palielināšanās procesu, skat. Att. 7.1.

Tiek pieņemts, ka temperatūra uz robežas starp izkusušo un cieto silīciju vienmēr ir vienāda ar materiāla kušanas temperatūru T_0 . Tieši pēc peļķes aiztecēšanas, virsmas temperatūra ir T_0 , bet tā kā materiāls tiek sildīts, tā temperatūra kāpj virs kušanas temperatūras.

Punktos, kur kausējums nonāk kontaktā ar pārkarsušu reģionu, siltums var plūst kušanas frontes virzienā, tādējādi kausējot kristālu, Att. 7.1.



Att. 7.1: Pa kreisi - peļķu formēšanās process un plūsmas intensificēšanās virs galvenās spraugas. Pa labi - peļķu stiepšanās modelis, vertikāls šķērs griezumā, kas paralēls strāvas virzienam.

7.2 Vienkāršs nestacionārs peļķveida kušanas modelis

Rakstā [14] ir veikta atklātās kušanas frontes analīze, izmantojot nepārtraukta šķidrums slānīša modeli. Šis modelis tika izmantots arī aprēķinos, dodot labu kušanas frontes formas sakritību ar industriālo pieredzi. Tomēr ir zināms, ka industriālajā kristālu audzēšanas procesā, izejmateriāla stienis nekūst vienmērīgi un tas nav pārklāts ar vienmērīgu izkusušo slānīti.

Šajā nodaļā ir veikta vienkāršota peļķveida kušanas procesa matemātiskā analīze. Tiek pieņemts, ka jebkuram punktam uz atklātās kušanas frontes sausie un slapjie periodi secīgi nomaina viens otru. Iespējamās trīs tuvinātas pieejas:

- Peļķe ir tik plāna, ka tā neietekmē cietajā materiālā inducētās jaudas daudzumu. Peļķes vienīgā funkcija ir noturēt kušanas temperatūru T_0 uz virsmas starp cieto un šķidro silīciju.
- Peļķe ir biezāka par EM skinslāni, tāpēc cietajā materiālā netiek izdalīts siltums. Temperatūra uz kušanas frontes ir T_0 . Vidējais inducētās jaudas daudzums tiek nodrošināts tādā ašā līmenī, kā iepriekšējā modelī pie identiskiem pārējiem parametriem.
- Peļķei ir vidējs biežums. Temperatūra uz kušanas frontes ir T_0 . Sausajā periodā siltums tiek inducēts tikai cietajā materiālā, bet slapjajā - gan cietajā, gan šķidrā. Attiecīgais daudzums tiek aprēķināts, ņemot vērā šķidrums slānīša biežumu, kas ir atkarīgs no inducētā siltuma daudzuma.

Pirmie divi modeļi ir realizēti kā viendimensionāls uzdevums specializētā datorprogrammā. Šīs programmas galvenās īpašības ir sekojošas:

- Tiek analizēts galīga biezuma x_d cieta materiāla slānis. $x = 0$ atbilst kušanas frontei, kur x ass ir perpendikulāra kušanas frontei;
- dziļumā x_d tiek definēta konstanta temperatūra T_d ;
- aprēķina sākumā temperatūras sadalījums cietajā materiālā ir lineārs;

- tiek ņemts vērā tikai siltums, kas izdalās cietajā materiālā, kas atbilst ļoti augstai šķidrā silīcija vadītspējai. Siltuma avotu blīvums q tiek aprakstīts ar eksponenciālu funkciju:

$$q = A \cdot e^{\frac{2x}{\delta}} \quad (7.1)$$

kur A raksturo kopējo jaudu skinslānī, $\delta = 1/\sqrt{\pi\mu_0\sigma_S f}$ ir skinslāņa biezums ;

- tiek risināts siltuma pārnese vienādojums:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + q \quad (7.2)$$

- aprēķiniem tiek izmantota galīgo diferencu metode.

Lai noteiktu reālistisku A vērtību tiek izmantots tipisks izejmateriāla stieņa stumšanas ātrums 3 mm/min. Šajos aprēķinos A vērtība tiek nodrošināta tāda, lai vidējā siltuma plūsma uz kristalizācijas fronti ir $q_{av} = 250000 \text{ W/m}^2$. Lielumu q_{av} ietekmē arī koeficients ξ , kas raksturo attiecību starp sauso periodu un pilno rotācijas periodu. Vadoties no AF aprēķiniem tiek izvēlēta tipiska koeficienta vērtība $\xi = 0.5$ [dis1].

Bez vidējās siltuma plūsmas q_{av} uz kušanas fronti, tiek novērtēta ar kopējais jaudas blīvums Q_{EM} , kas tiek inducēts uz izejmateriāla stieņa virsmas: $Q_{EM} = \frac{\delta}{2} \cdot A \approx 715000 \text{ W/m}^2$. Abu lielumu starpība atbilst siltuma plūsmai, kas vērsta iekšā izejmateriāla stienī.

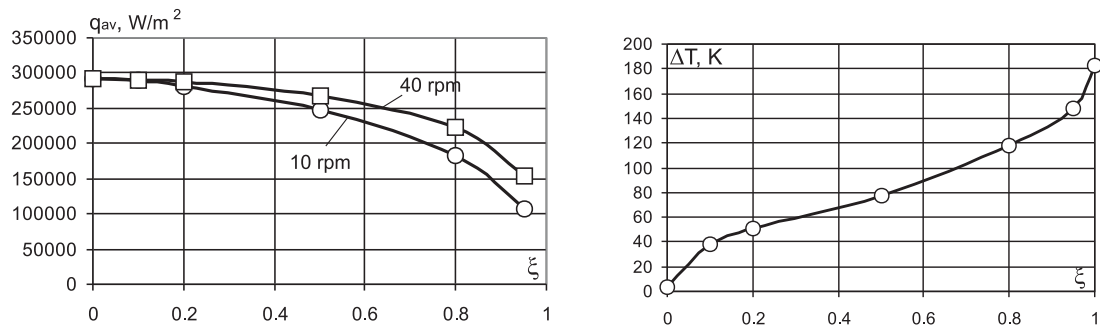
Pārējie tipiskie parametri ir kristāla rotācijas ātrums $\Omega_{rot} = 10 \text{ rpm}$ un skinslāņa biezums $\delta = 0.0013 \text{ m}$ (frekvence 3 MHz).

7.3 Aprēķinu rezultāti neņemot vērā pelkē inducēto siltumu

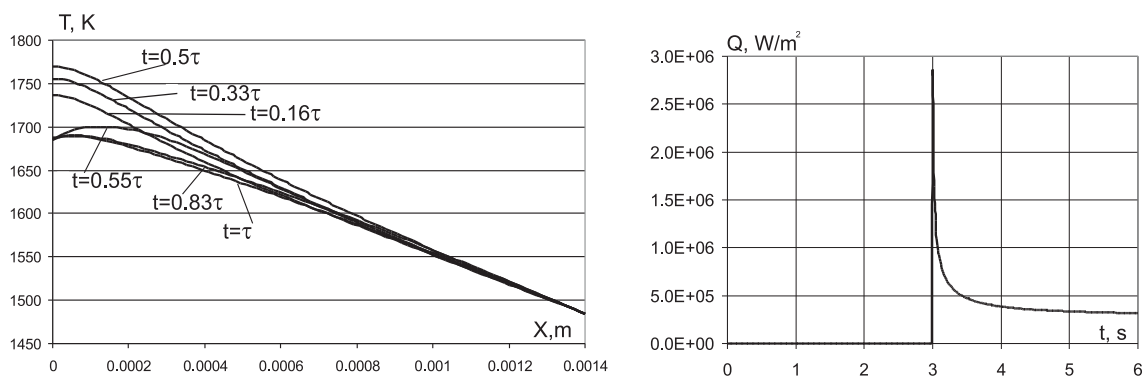
Att. 7.2 ir attēlota laikā vidējota siltuma plūsmas blīvuma q_{av} no cietā silīcija uz kušanas fronti atkarībā no koeficienta ξ . q_{av} vērtība tiecas uz nulli pie augstākām ξ vērtībām, jo cietā materiāla kontakts ar kausējumu tiecas uz nulli un siltums nevar tikt novadīts. Pie mazām ξ vērtībām līkne Att. 7.2 tiecas uz piesātinājumu, jo sistēmā iestājas līdzsvars, kad siltums daļēji plūst izejmateriālā un daļēji uz kušanas fronti. Zemākiem rotācijas ātrumiem sistēma sasniedz šo līdzsvaru ātrāk, jo laiks, kad cietais silīcijs ir kontaktā ar kausējumu ir garāks.

Liela nozīme šajā modelī ir pārkaršanai, tāpēc Att. 7.2 ir attēlota maksimālā pārkaršanas temperatūra atkarībā no attiecības ξ . No rezultātiem izriet, ka pārkaršana var sasniegt pat 100 K, tomēr reālākas vērtības ir novērojamas pie mazākiem ξ , kas atbilst lielākam laikam, kad cietais silīcijs ir kontaktā ar šķidro.

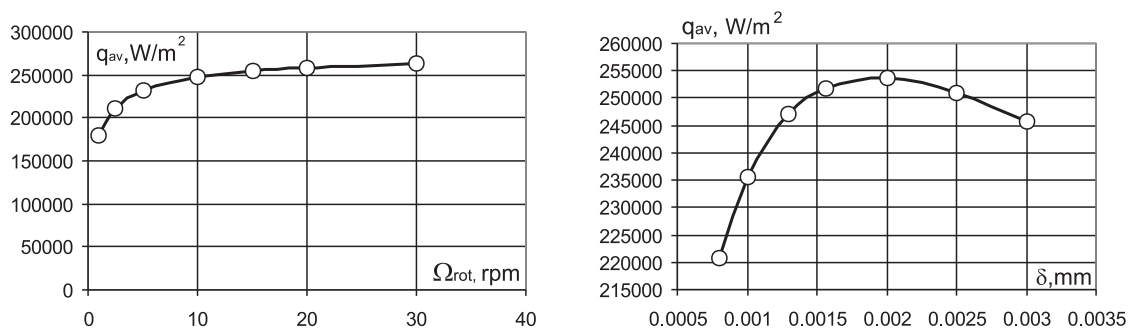
Att. 7.3 parādīta temperatūra kristālā dažādiem secīgiem momentiem t viena rotācijas perioda τ laikā pie rotācijas ātruma 10 rpm un $\xi = 0.5$. Rezultāti parāda, ka akumulētais siltums ieplūst kausējumā ļoti ātri un atlikušajā laikā, kad polikristāls ir klāts ar šķidro silīciju, sistēma ir līdzsvarā. Att. 7.3 parādīta siltuma plūsmas blīvuma atkarība no laika.



Att. 7.2: Pa kreisi - laikā vidējots siltuma plūsmas blīvums q_{av} atkarībā no attiecības ξ , pie rotācijas ātrumiem 10 rpm un 40 rpm. Pa labi - Maksimālā pārkarsuma temperatūra ΔT atkarībā no attiecības ξ rotācijas ātrumam 10 rpm.



Att. 7.3: Pa kreisi - temperatūra kristālā secīgiem momentiem t viena rotācijas perioda τ laikā pie rotācijas ātruma 10 rpm un $\xi = 0.5$. Pa labi - momentānais siltuma plūsmas blīvums no cietā silīcija kausējumā laika periodā $\tau = 6$ s.



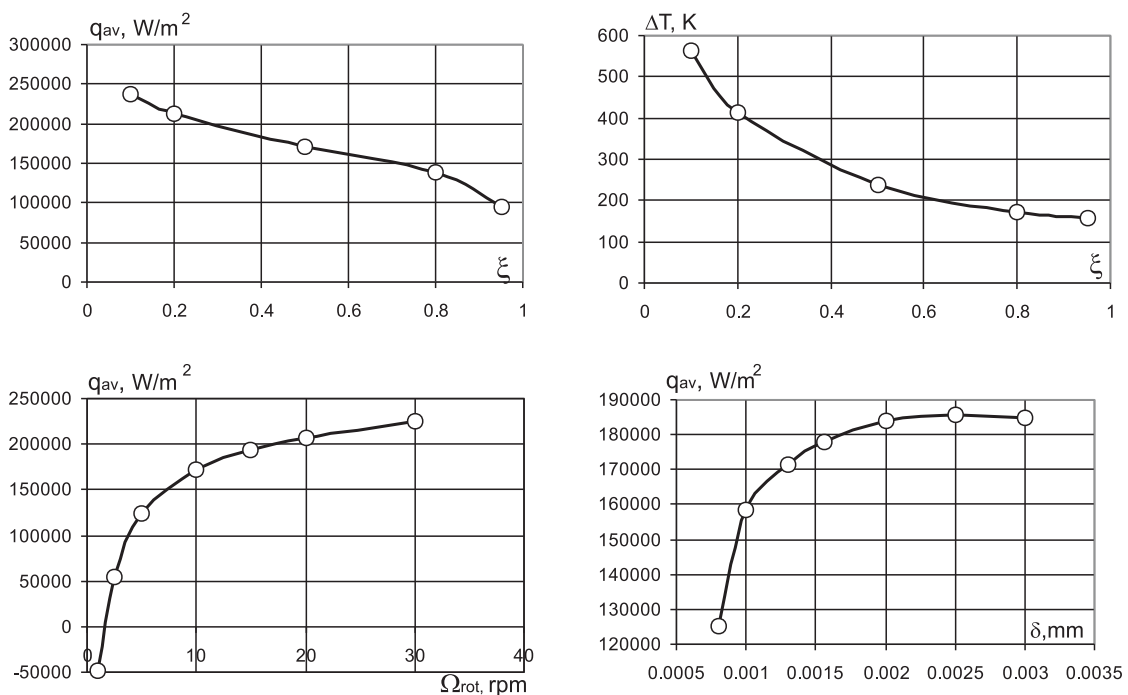
Att. 7.4: Pa kreisi - laikā vidējots siltuma plūsmas blīvums q_{av} atkarībā no rotācijas ātruma, $\xi = 0.5$. Pa labi - laikā vidējots siltuma plūsmas blīvums q_{av} atkarībā no EM skinslāņa biezuma pie rotācijas ātruma 10 rpm un $\xi = 0.5$.

Otra pētījumu daļa tika veikta pie konstanta $\xi = 0.5$, bet tika mainīts rotācijas ātrums robežās 0-30 rpm, skat. Att. 7.4. Novadītā siltuma daudzums no cietā materiāla kausējumā samazinās samazinot rotācijas ātrumu. Iemesls tam ir sistēmas nonākšana līdzsvarā slapjajos posmos pie maziem rotācijas ātrumiem.

Att. 7.4 parādīta q_{av} atkarība no EM skinslāņa biezuma δ . Kopējais inducētās jaudas virsmas blīvums tiek turēts konstants. Pie plānākiem skinslāņiem - augstākām frekvencēm - tiek inducēts mazāks siltuma daudzums, tāpēc slapjajā posmā mazāk siltums tiek novadīts kausējumā.

7.4 Aprēķinu rezultāti ņemot vērā peļķu ekranēšanas efektu

Šajā apakšnodaļā parādīti rezultāti gadījumam, kad peļķes ekranē elektromagnētisko lauku, proti, slapjajā periodā polikristālā netiek izdalīts siltums. Parametra A vērtība ir izmeklēta tāda, lai vidējais inducētais siltums ir tāds pats kā iepriekšējā modelī.



Att. 7.5: Aprēķini ar ekranējošām peļķēm. Augšā pa kreisi - laikā vidējots siltuma plūsmas blīvums q_{av} atkarībā no attiecības ξ , pie rotācijas ātruma 10 rpm. Augšā pa labi - Maksimālā pārkaruma temperatūra ΔT atkarībā no attiecības ξ rotācijas ātrumam 10 rpm. Apakšā pa kreisi - laikā vidējots siltuma plūsmas blīvums q_{av} atkarībā no rotācijas ātruma, $\xi = 0.5$. Apakšā pa labi - laikā vidējots siltuma plūsmas blīvums q_{av} atkarībā no EM skinslāņa biezuma pie rotācijas ātruma 10 rpm un $\xi = 0.5$.

Kā redzams Att. 7.5, ja sausais posms ir īss (maza parametra ξ vērtība) tad visam siltumam ir jāinducējas šajā laikā un momentānajai inducētajai jaudai jābūt ļoti augstai. Tas noved pie ļoti stipras pārkaršanas, skat. Att. 7.5. Ja sausais periods ir garš, kausējumā tiek novadīts praktiski ļoti mazs

siltuma daudzums un sistēma nonāk līdzsvarā, kad viss inducētais siltums ieplūst polikristālā.

Att. 7.5 parādīta laikā vidējtā siltuma plūsmas blīvuma q_{av} atkarība no rotācijas ātruma pie $\xi = 0.5$. Rezultāti parāda, ka polikristāla kausēšana ir ļoti vāja, jo viss siltums aizplūst dziļāk materiālā.

Laikā vidējtā siltuma plūsmas blīvuma q_{av} atkarība no skinslāņa biezuma δ ir parādīta Att. 7.5. Kopējā inducētās jaudas blīvuma vērtība tiek turēta konstanta. Tāpat kā Att. 7.4 mazāks skinslāņa biezums atbilst siltuma avotu novietojumam tuvāk materiāla virsmai, un pārkaršana ir mazāk izteikta.

7.5 Secinājumi

Nodaļā analizēta industriālajā praksē novērotā peļķu struktūra uz izejmateriāla stieņa atklātās kušanas frontes. Lai izskaidrotu peļķu augšanu tiek lietota materiāla pārkaršanas koncepcija. Tā ir pamatota, analizējot kušanas procesa sākšanos.

Izmantojot vienkāršotu viendimensionālu matemātisko modeli ir analizēts polikristāla kušanas process. Darbā pētīta siltuma plūsmas no cietā silīcija uz kausējumu atkarība no dažādiem procesa parametriem.

8 Galvenie rezultāti

Promocijas darbā atbilstoši formulētajiem mērķiem ir iegūti sekojoši rezultāti:

Ir izveidota noslēgta matemātisko modeļu sistēma skaitliskam fāzu robežu un temperatūras un elektromagnētisko lauku uz silīcija virsmām sadalījumu aprēķinam, lai veiktu 3D nestacionāru šķidrums kustības, temperatūras lauka un piemaisījumu pārneses izkusušajā apgabalā simulāciju PZ silīcija monokristālu audzēšanas procesam līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētisko lauku ietekmē. Attīstītā modeļu sistēma ir daļēji balstīta uz iepriekš attīstītām komponentēm. Aprēķinātie piemaisījumu koncentrācijas sadalījumi uz kristalizācijas virsmas tiek lietoti, lai noteiktu īpatnējās pretestības sadalījumus izaudzētajā kristālā. Speciāls modelis ir izveidots arī barošanas stieņa kausēšanai ar augstas frekvences (AF) induktoru.

Tika parādīts, ka izmantojot atvērtā izejas koda bibliotēku OpenFOAM var izveidot efektīvu programmatūras paketi minētai modeļu sistēmai, pie kam šāda sistēma ir bezmaksas. Hidrodinamiskie aprēķini tika veikti vienlaicīgi uz līdz 8 procesoriem uz daudzprocesoru klastera un tika parādīts, ka ātrdarbība aplūkotajiem uzdevumiem pieaug aptuveni (novirze mazāka kā 8%) proporcionāli procesoru skaitam.

Pirmo reizi PZ silīcija monokristālu ar lieliem diametriem (diametrs ≥ 100 mm) audzēšanas sistēmā ir veikta 3D nestacionāra modelēšana, lai pētītu līdzstrāvas un maiņstrāvas magnētisko lauku ietekmi uz kausējuma kustību un tādejādi uz īpatnējās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā. Izveidotie modeļi un programmatūra tika lietoti arī, lai aprēķinātu šķidrums kustību un temperatūras lauku nesimetriskos kausējuma apgabalos, piemēram, gadījumos ar nobīdītām izejmateriāla stieņa un kristāla asīm, kā arī pirmoreiz tika pētīta kausējuma kustība tuvināti kvadrātiskas formas PZ procesa kausējuma apgabalā.

Tika parādīts, ka aplūkotajiem PZ procesiem vertikālais līdzstrāvas magnētiskais lauks efektīvi samazina hidrodinamisko nestabilitāšu izraisītās ātruma fluktuācijas kausējumā un tādejādi arī piemaisījumu koncentrācijas lauka fluktuācijas. Sekojoši, īpatnējās pretestības sadalījumam izaudzētajā kristālā ir būtiski samazināta izkliede vertikālā virzienā. Tika arī parādīts, ka līdzstrāvas magnētiskais lauks neizjauc kausējuma plūsmas meridionālo virpuļu struktūru un tādejādi īpatnējās pretestības sadalījums izaudzētajā kristālā paliek būtiski nehomogēns.

Pirmo reizi ar 3D aprēķiniem tika parādīts, ka pielietojot kristāla rotācijai pretēji rotējošu maiņstrāvas magnētisko lauku, divu sadurošos virpuļu struktūra kausējumā kristalizācijas virsmas tuvumā tiek jaukta un centrālās spēku ietekmē izveidojas gar kristalizācijas fronti virzienā no ass uz kristāla malu plūstošs kausējuma slānis. Šī plūsmas izmaiņa nodrošina būtiski homogēnāku īpatnējās pretestības radiālo sadalījumu izaudzētajā kristālā. Tika arī parādīts, ka šāda rotējoša magnētiskā lauka pielietošana aplūkotajās sistēmās var samazināt ātruma lauka fluktuācijas kausējumā un tādejādi īpatnējās pretestības izkliedi izaudzētajā kristālā vertikālajā virzienā.

Pētot lokālās kristāla augšanas ātruma fluktuācijas, kuras izraisa kausējuma plūsmas nestabilitātes izsuktās temperatūras gradienta fluktuācijas kristalizācijas frontes tuvumā, tika parādīts, ka kristāla augšanas ātruma svārstības noteiktā līmenī ietekmē piemaisījumu segregācijas procesu pie kristalizācijas frontes. Tomēr iegūtie rezultāti arī parādīja, ka nestacionāras plūsmas konvekcijas izraisītās koncentrācijas fluktuācijas ir apmēram divas kārtas lielākas kā analītiski novērtētās oscilācijas, ko izraisa iespējamās izmaiņas kristalizācijas ātrumā. Lokālo kristalizācijas ātruma fluktuāciju amplitūda tika novērtēta, izmantojot skaitliski iegūtās temperatūras svārstības. Tādejādi tika parādīts, ka aplūkotajās PZ sistēmās īpatnējās pretestības izkliedes kristālā aprēķinā lokālās kristāla augšanas fluktuācijas var tikt neņemta vērā.

Literatūra

- [1] S.M. SZE. *Semiconductor devices, physics and technology*. John Wiley & Sons, Inc., (2002).
- [2] EDITED BY G.MÜLLER, J. METOIS, P.RUDOLPH. *Crystal Growth - From Fundamentals to Technology*. ELSEVIER, (2004).
- [3] A. MÜHLBAUER, W. ERDMANN, W. KELLER. *J. Crystal Growth*, Vol. 64 (1983), pp. 529.
- [4] K. H. LIE, J. S. WALKER, AND D. N. RIAHI. *J. Crystal Growth*, 100 (1990), pp. 450-458.
- [5] H. RIEMANN, A. LÜDGE, K. BÖTTCHER, H.- J. ROST, B. HALLMANN, W. SCHRÖDER, W. HENSEL, B. SCHLEUSENER. *J. Electrochem. Soc.*, 142 (3) (1995) 1007.
- [6] Z. GUO, S. MARUYAMA, AND S. TOGAWA. Combined heat transfer in floating zone growth of large silicon crystals with radiation on diffuse and specular surfaces. *J. Crystal Growth*, 194 (1998), pp. 321-330.
- [7] C. W. LAN AND S. KOU. *J. Crystal Growth*, 108 (1991), pp. 351-366.
- [8] S. TOGAWA, Y. NISHI, AND M. KOBAYASHI. *Electrochem. Soc. Proc.*, 98-13 (1998), pp. 67-78.
- [9] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, A. JAKOWITSCH, J. VIRBULIS. *Latvian J. Phys and Techn.*, Vol. 4 (1992), pp. 5.
- [10] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, A. JAKOWITSCH, J. VIRBULIS. *Archiv für Elektrotechnik*, Vol. 76 (1993), pp. 161.
- [11] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, J. VIRBULIS, A. LÜDGE, AND H. RIEMANN. Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystals with the needle-eye technique. *J. Crystal Growth*, 151 (1995), pp. 66-79.
- [12] J. VIRBULIS. *PhD thesis, Faculty of Physics and Mathematics, University of Latvia, Rīga* (1997).
- [13] G. RAMING. *PhD. thesis, Institut für Elektrowärme, Universität Hannover*, (2000).
- [14] G. RATNIEKS, A. MUIZNIEKS AND A. MUEHLBAUER. Modelling of phase boundaries for large industrial FZ silicon crystal growth with the needle-eye technique. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 255, 2003, pp. 227-240.
- [15] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, AND J. VIRBULIS. Analysis of the dopant segregation effects at the floating zone growth of large silicon crystals. *J. Crystal Growth*, 180 (1997), pp. 372-380.

- [16] A. LÜDGE, H. RIEMANN, W. SCHRÖDER, A. MUIŽNIEKS, AND G. RAMING. *Experimental Confirmation of a Numerical Model of Doping Distribution for Floating-Zone Silicon Growth with the Needle Eye Technique, Proc. 8th International Symposium on Silicon Materials Science and Technology, San Diego (May 3-8, 1998), 2 p.*
- [17] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, G. RAMING, H. RIEMANN, AND A. LÜDGE. Numerical modelling of the microscopic inhomogeneities during FZ silicon growth. *J. Crystal Growth*, 198/199 (1999), pp. 107-113.
- [18] T. MUNAKATA AND I. TANASAWA. Study on silicon melt convection during the RF-FZ crystal growth process II. Numerical investigation. *J. Crystal Growth*, 206 (1999), pp. 27-36.
- [19] T. KAISER. *Magnetohydrodynamische Effekte bei der Halbleiterkristallzuchtung, Dissertation, Geowissenschaftliche Fakultät der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i. Br. (1998).*
- [20] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, AND H.-J. LESSMANN. Berechnung von dreidimensionalen elektromagnetischen Feldern bei der induktiven Erwärmung.. *Archiv für Elektrotechnik*, 77 (1994), pp. 157-168.
- [21] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, L. BULIGINS, G. RAMING, AND A. MÜHLBAUER. 3D modelling numerical analysis of the influence of EM and Marangoni forces on melt hydrodynamics and mass transport during FZ silicon crystal growth. *Magnitnaya Gidrodinamika*, 35, No. 3 (1999), pp. 278-293.
- [22] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, A. MUEHLBAUER, G. RAMING. Numerical 3D study of FZ growth: dependence on growth parameters and melt instability. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 230, 2001, pp. 48-56.
- [23] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, L. BULIGINS, G. RAMING, A. MÜHLBAUER, A. LÜDGE, AND H. RIEMANN. Influence of the three dimensionality of the HF electromagnetic field on resistivity variations in Si single crystals during FZ growth. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 216, Issues 1-4, 15 June 2000, pp. 204-219
- [24] TH. KAISER, K.W. BENZ. Floating-zone growth of silicon in magnetic fields III. Numerical simulation. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 183, 1998, pp. 564-572.
- [25] C.W. LAN, B.C. YEH. Three-dimensional simulation of heat flow, segregation, and zone shape in floating-zone silicon growth under axial and transversal magnetic fields. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 264, 2004, pp. 59-71.
- [26] J. VIRBULIS, TH. WETZEL, A. MUIŽNIEKS, B. HANNA, E. DORNBERGER, E. TOMZIG, A. MUEHLBAUER, W. V. AMMON. Numerical investigation of silicon melt flow in large diameter CZ-crystal growth under the influence of steady and dynamic magnetic fields. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 230, 2001, pp. 92-99.
- [27] A. MUIŽNIEKS, A. KRAUZE, B. NACKE. Convective phenomena in large melts including magnetic fields. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 303, 2007, pp. 211-220.

- [28] WALKER J. S., WITKOWSKI L. M., HOUCHEMS B.C.. Effects of a rotating magnetic field on the thermocapillary instability in the floating zone process, *Journal of Crystal Growth*, Vol. 252, 2003, 413-423.
- [29] FISCHER B., FRIEDRICH J., WEINMANN H., MUELLER G.. The use of time-dependent magnetic fields for control of convective flows in melt growth configurations, *Journal of Crystal Growth*, Vol. 198/199, 1999, 170-175.
- [30] LI K., HU W.R.. Magnetic field design for floating zone crystal growth, *Journal of Crystal Growth*, Vol. 230, 2001, 125-134.
- [31] P. DOLD, A. CROELL, K. W. BENZ. Floating-zone growth of silicon in magnetic fields I. Weak static axial fields. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 183, 1998, pp. 545-553.
- [32] A. CROELL, F. R. SZOFRAN, P. DOLD, K. W. BENZ, S. L. LEHOCZKY. Floating-zone growth of silicon in magnetic fields II. Strong static axial fields. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 183, 1998, pp. 554-563.
- [33] C. W. LAN. Effect of axisymmetric magnetic fields on radial dopant segregation of floating-zone silicon growth in a mirror furnace. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 169, 1996, pp. 269-278.
- [34] G. RAMING, A. MUIZNIEKS, A. MUEHLBAUER. Numerical investigation of the influence of EM-fields on fluid motion and resistivity distribution during floating-zone growth of large silicon single crystals. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 230, 2001, pp. 108-117.
- [35] P. DOLD, A. CROELL, M. LICHTENSTEIGER, TH. KAISER, K. W. BENZ. Floating-zone growth of silicon in magnetic fields IV. Rotating magnetic fields. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 231, 2001, pp. 95-106.
- [36] A. RUDEVICS, A. MUIZNIEKS, B. NACKE. Development of specialized modelling tools for crystal growth processes with magnetic fields. *Magnetohydrodynamics*, 2007, 43, 253-260.
- [37] T. JUNG, G. MUELLER. Amplitudes of doping striations: comparison of numerical calculations and analytical approaches. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 171, 1997, pp. 373-379.
- [38] J.P. GARANDET. Microsegregation in crystal growth from melt: an analytical approach. *Journal of Crystal Growth*, Vol. 131, 1993, pp. 431-438.
- [39] <http://www.open CFD.co.uk/openfoam/>
- [40] J. GELFGAT, O. LIELAUSIS, E. SCERBININ. Zidki metal pod deistviem elektromagnitnih sil. *Zinatne*, 1975, Riga.
- [41] H. JASAK. *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*, PhD thesis, Department of mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology and Medicine. (1996).
- [42] *FLUENT 6.1 User Guide*, Fluent Inc©. (2003).
- [43] B. STROUSTRUP. *The C++ Programming Language (third edition)*. Addison-Wesley, (1999).

Pateicības

Vislielāko pateicību esmu parādā savam darba vadītājam asoc. prof. Andrim Muižniekam par ziedoto laiku, uzmanību un pacietību. Paldies arī par doto iespēju strādāt pie nozīmīgiem projektiem un viesoties tādās institūcijās kā: *Institute for Crystal Growth* (ICG, Berlīne, Vācija), *Institut für Elektrothermische Prozesstechnik* (Hanovere, Vācija) un *Siltronic AG* (kristālu audzēšanas rūpnīca Burghauzenā, Vācija).

Darbus ar tikai pasūtītājam raksturīgiem uzmundrinājumiem uz priekšu palīdzēja virzīt arī Dr. G. Ratniekas (*Siltronic AG*).

Par manu uzklauššanu neizpratnes pilnos brīžos un sadarbību projektu realizācijā esmu pateicību parādā arī saviem darba kolēģiem no asoc. prof. A. Muižnieka vadītās projektu grupas *Modelling in Crystal Growth* (Latvijas Universitāte) - Dr. A. Krauzem, Dr. A. Rudevičam, K. Dadzim, J. Timošenko un A. Sabanskim.

Darba izstrādes procesā saņēmu neatsveramu finansiālo atbalstu no Eiropas sociālajiem un reģionālās attīstības fondiem, piedaloties sekojošos projektos: "Doktorantu un jauno zinātnieku pētniecības darba atbalsts LU", "Atbalsts doktora studijām Latvijas Universitātē" un "Nano-, elektronikas un kompozītmateriālu un tehnoloģiju matemātiskā modelēšana".

Par nonākšanu līdz doktorantūras studijām saku paldies saviem vecākiem un māsām, kas mani motivēja virzīties uz priekšu.

Vissirsnīgāko paldies saku savai sievai Agnesei par sapratni un mazajiem Emīlijai un Jēkabam, kas mani vienmēr gaidīja mājās.