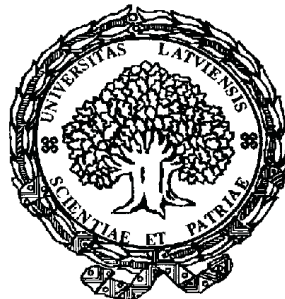


Andis Rudevičs

Datorzinātņu maģistrs

**Silīcija kristālu audzēšanas procesa ar peldošās
zonas metodi kausējuma formas nestacionaritāte un
3D raksturs**

Promocijas darba kopsavilkums



Latvijas Universitāte
Rīga - 2007

Anotācija

Mūsdienu elektronisko ierīču (piemēram, datoru, telefonu, televizoru u.c.) ražošanā tiek izmantotas sarežģītas elektroniskās mikroshēmas, kas nodrošina iekārtu funkcionalitāti. Savukārt pašu mikroshēmu ražošanā tiek izmantotas pusvadītāju plāksnes, kas galvenokārt tiek iegūtas no silīcija (Si) monokristāliem. Lai rūpnieciski iegūtu (audzētu) Si monokristālus ar pielietojumos nepieciešamajām īpašībām, pamatā tiek izmantotas divas audzēšanas metodes: *Czochralski (CZ)* un peldošās zonas metode - *Floating Zone (FZ)*. Šajā darbā tiek attīstīti izkusušās zonas fāzu robežu aprēķinu matemātiskie modeļi FZ kristālu audzēšanas procesam, kā arī tiek realizēti skaitliskie algoritmi un atbilstošās datorprogrammas.

Šajā darbā, pirmkārt, pirmo reizi tika izveidots nestacionārs aksiāli simetrisks FZ procesa modelis, balstoties uz līdz šim pilnīgāko aksiāli simetrisko kvazi stacionāro fāzu robežu aprēķinu modeli. Tas pavēra iespējas modelēt fāzu robežas un kristāla formu kā funkciju laikā, kas nodrošināja procesa pētīšanu ne tikai kvazi stacionārā stāvoklī, bet arī audzēšanas procesa sākuma un beigu fāzēs, kad notiek straujas fāzu robežu izmaiņas laikā. Papildus tam modelis tika verificēts ar vairākiem FZ procesa eksperimentiem.

Otrkārt, šajā darbā izstrādātais nestacionārais FZ procesa modelis tika papildināts ar procesa regulēšanas modelēšanas iespēju. Tas ļāva pētīt ar regulēšanu saistītos aspektus FZ kristālu audzēšanas procesā. Pamatmotivācija šiem pētījumiem ir regulēšanas lielā nozīme rūpniecībā, jo tā nodrošina autonomu kristāla audzēšanas procesu, kurā, atkarībā no sistēmas stāvokļa, automātiski tiek mainīti vadības parametri.

Treškārt, promocijas darbā pirmo reizi tika izstrādāts kvazi stacionārs 3D FZ procesa modelis kausējuma un kristāla formas aprēķiniem. Šis modelis ļāva ņemt vērā FZ sistēmas 3D īpatnību ietekmi uz fāzu robežām. Modelis tika verificēts un izmantots četrkantīgu FZ silīcija kristālu audzēšanas procesa analīzē.

Ceturtkārt, darbā izstrādātie modeļi, izmantojot skaitliskās metodes - pamatā galīgo elementu un robeželementu metodes, tika realizēti specializētās datorprogrammās. Izmantojot modernās datorprogrammu izstrādes tehnoloģijas, nestacionārais FZ modelis tika realizēts datorprogrammā *FZoneT*, bet 3D kvazi stacionārais modelis datorprogrammā *Shape3D*. Papildus matemātisko modeļu realizācijai abām programmām tika izstrādāts arī ērta lietotāja grafiskā vide, kas nodrošināja interaktīvu aprēķinu moduļu vadību, 2D/3D datu vizualizāciju kā arī citas funkcijas, kas kopumā atviegloja pētījumu veikšanu.

Saturis

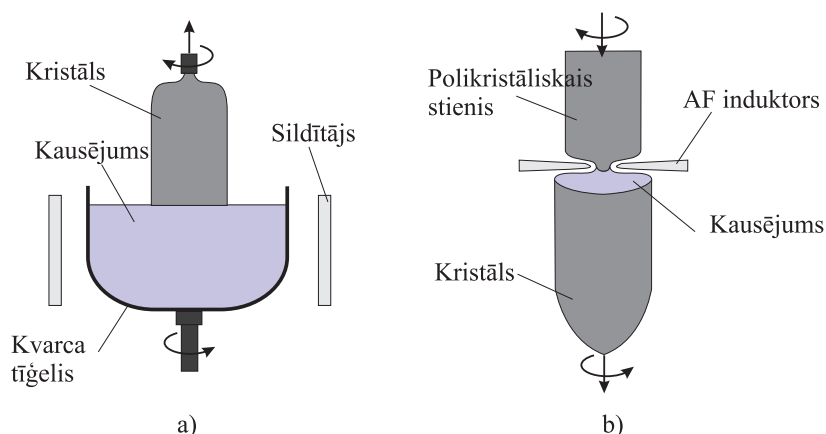
1	Ievads	3
1.1	Silīcija monokristālu audzēšana ar peldošās zonas metodi	3
1.2	FZ procesa matemātiskā modelēšana - literatūras apskats	5
1.3	Promocijas darba uzdevumi	6
1.4	Promocijas darbā iekļautās publikācijas un dalība konferencēs	6
1.5	Dalība pētnieciskajos projektos un stažēšanās ārzemju institūcijās	8
2	FZ kristālu audzēšanas procesa kvazi stacionārā modeļa kopsavilkums	9
2.1	Lietotie pamatpieņēmumi un tuvinājumi	9
2.2	Fāzu robežu modeļi	10
2.3	EM lauka modelēšana induktoram ar spraugām	12
2.4	Siltuma pārnese modelēšana	13
2.5	Vispārīgs aprēķinu algoritms	14
3	Nestacionārs aksiāli simetrisks matemātiskais modelis kristālu audzēšanas procesu pētīšanai	15
3.1	Matemātiskais modelis un skaitliskā realizācija	15
3.1.1	Kausējuma tilpuma uzskaites modelis	16
3.1.2	Brīvās virsmas modelis	16
3.1.3	Kristāla virsmas modelēšana	17
3.1.4	Temperatūras lauka modelēšana	17
3.1.5	Režģu apstrādes algoritmi nestacionārajā FZ procesā	18
3.2	Nestacionāru peldošās zonas procesu aprēķini	19
3.2.1	Nestacionārā modeļa verifikācija ar eksperimentu	19
3.2.2	Galvenie rezultāti	20
3.3	Procesa regulēšanas modelēšana	21
3.3.1	Regulēšana un tās nepieciešamība	21
3.3.2	Aprēķina piemērs un galvenie rezultāti	22
4	Kvazi stacionārs 3D modelis izkusušās zonas formas modelēšanai	23
4.1	3D FZ procesa matemātiskā modeļa svarīgākās komponentes	23
4.1.1	AF EM lauka 3D aprēķins ar robeželementu metodi	23
4.1.2	Brīvās kausējuma virsmas 3D modelis	25
4.1.3	Radiācijas 3D modelēšana ar redzamības faktoriem	26
4.1.4	Temperatūras modelis	30
4.1.5	Kristalizācijas frontes modelis	31

4.1.6	Ārējā trīskāršā punkta līnijas 3D modelis	31
4.2	Kopējais aprēķinu algoritms 3D FZ modeļu komponentu ķēdei	34
4.3	Aprēķinu piemēri kausējuma un kristāla formas modelēšanai 3D FZ procesā ar nerotējošu kristālu	35
4.3.1	3D FZ procesa modelēšana ar vienkāršotu 3D induktora ģeometriju	35
4.3.2	3D FZ procesa modelēšana ar reālistisku 3D induktora ģeometriju, salīdzinājums ar eksperimentu	38
5	Modeļu realizācija datorprogrammās FZoneT un Shape3D	41
5.1	Modernās datoprogrammu izstrādes tehnoloģiju pamatelementi	41
5.2	Nestacionārā FZ procesa fāzu robežu aprēķina modeļa realizācija datoprogrammā <i>FZoneT</i>	41
5.3	Kvazi stacionārā 3D FZ procesa modeļa realizācija datoprogrammā <i>Shape3D</i>	43
6	Galvenie rezultāti	45
	Literatūra	46

1 Ievads

1.1 Silīcija monokristālu audzēšana ar peldošās zonas metodi

Mūsdienu elektronisko ierīču (piemēram, datoru, telefonu, televizoru u.c.) ražošanā tiek izmantotas sarežģītas elektroniskās mikroshēmas, kas nodrošina iekārtu funkcionalitāti. Savukārt pašu mikroshēmu ražošanā tiek izmantotas pusvadītāju plāksnes [1], kas galvenokārt tiek ražotas izmantojot silīcija (Si) monokristālus [2]. Lai rūpnieciski iegūtu (audzētu) silīcija monokristālus ar pielietojumos nepieciešamajām īpašībām, pamatā tiek izmantotas divas audzēšanas metodes, [3]: *Czochralski* (CZ) un peldošās zonas metode - *Floating Zone* (FZ) (sk. att.1.1).



Att. 1.1: Silīcija monokristālu audzēšanas metodes: a) *Czochralski* (CZ), b) *Floating Zone* (FZ)

Apmēram 95% no mūsdienu saražotajiem Si monokristāliem tiek iegūti ar CZ metodes palīdzību. Tas izskaidrojams ar faktu, ka CZ kristāli tiek lietoti mikroelektronikā, piemēram, datoru komponentu ražošanā, kamēr ar FZ metodi audzētie kristāli tiek izmantoti mazākā tirgus daļā, galvenokārt jaudas elektronikā, kurai ir nepieciešama augstāka materiāla tīrības pakāpe.

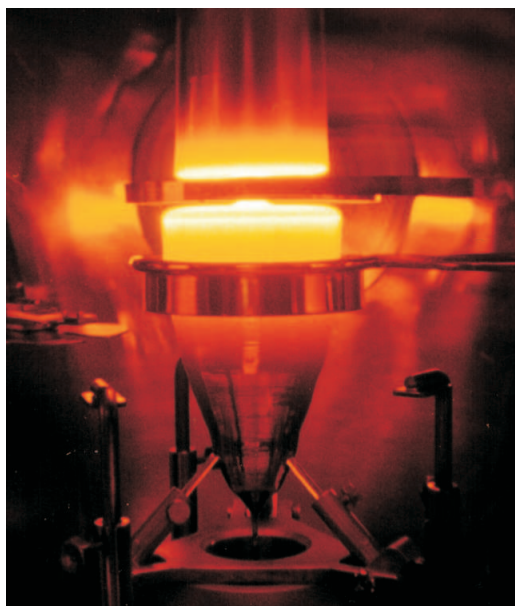
CZ sistēma (att. 1.1) sastāv no kvarca tīģeļa, sildītājiem, kausējuma un kristāla. Procesa sākumā augstas tīrības Si šķembas tiek ievietotas kvarca tīģelī, kuru no ārpuses silda speciāli grafīta sildītāji. Tādējādi Si šķembas izkūst un tīģelī izveidojas kausējums. Lai sāktu kristalizācijas procesu, kausējuma virsmas centrā pieskaras ar nelielu Si monokristāla aizmetni, kurš tiek griezts ap savu asi un virzīts pa vertikāli ārā no kausējuma, nodrošinot pakāpenisku kristāla rādiusa palielināšanos. Procesa laikā kristāls un tīģelis tiek griezti ap

savu asi.

Tipiska modernā FZ sistēma ir parādīta attēlos 1.1 un 1.2, kur redzams, ka to veido: polikristāliskais stienis, *needle-eye* (adatas acs) tipa viena vijuma augstfrekvences (AF) induktors, kausējums un kristāls. Induktora augstfrekvences (≈ 3 MHz) magnētiskais lauks kausē polikristālisko stieni no apakšas, tad izkusušais silīcijs notek caur centrālo induktora caurumu kausējumā. Uz fāzu robežas starp kausējumu un silīcija kristālu notiek šķidrā silīcija kristalizācija, tādējādi nodrošinot silīcija kristāla augšanu [4, 5].

FZ process tiek uzsākts ar piliena izveidošanu pie polikristāliskā stieņa apakšējās virsmas iepretim AF induktora centrālajam caurumam. Pilienam pieskaras ar neliela izmēra silīcija monokristāla aizmetni, kā rezultātā izveidojās fāzu robeža starp kausējumu un kristālu un ir iespējama silīcija monokristāla turpmākā augšana. Lai izaudzētu ievērojama diametra (≈ 200 mm) kristālu, procesa sākumā kristāla diametrs ir pakāpeniski jāpalielina. Procesa laikā polikristāliskais stienis un kristāls tiek pārvietoti vertikāli uz leju ar dažu milimetru minūtē lielu ātrumu, turklāt gan polikristāliskais stienis, gan kristāls tiek griezti ap savu asi. Visvarīgākā daļa FZ sistēmā ir AF induktors, jo pat dažu milimetru nianse induktora ģeometrijā var būtiski ietekmēt kristāla augšanas procesu, tā stabilitāti un dotējošo vielu piemaisījumu sadalījumu kristālā, kam ir ļoti liela nozīme pielietojumos. Lai izvairītos no dzirksteļošanas starp AF induktora elektrodiem visa FZ sistēma parasti tiek ievietota argona atmosfērā (ar H_2 vai N_2 piemaisījumu). Pievadot kausējumam boru, panāk, ka Si kristāls iegūst p-tipa pusvadītāju īpašības, un, piemaisot fosforu, panāk n-tipa īpašības. Ar FZ metodi audzētos silīcija kristālus pārsvarā lieto tādu ierīču izgatavošanā, kur nepieciešama augsta pretestība un zema skābekļa koncentrācija kristālā, piemēram, jaudas elektronikā, RF/bezvadu sakaru ierīču izgatavošanā u.c. Tomēr ir sagaidāms, ka drīzumā FZ kristāli var tikt plaši pielietoti arī saules bateriju ražošanā, jo ar FZ metodi audzētajiem kristāliem piemīt efektīvu saules bateriju ražošanai nepieciešamās īpašības.

Patlaban uzskata, ka ar FZ metodi audzēto kristālu maksimālais diametrs nevar pārsniegt 200 mm robežu, jo turpmākai diametra palielināšanai ir nepieciešamas augstākas jaudas AF induktorā, līdz ar to lielāks spriegums, kas neizbēgami noved pie dzirksteļošanas starp elektrodiem, kā rezultātā tiek radītas dislokācijas silīcija monokristālā.



Att. 1.2: Modernā FZ kristālu audzēšanas sistēma realitātē (*Institute for Crystal Growth, Berlin*)

1.2 FZ procesa matemātiskā modelēšana - literatūras apskats

Vienu no pašiem pirmajiem aksiāli simetriskajiem matemātiskajiem modeļiem modernajai FZ sistēmai ar *needle-eye* tipa AF induktoru izstrādāja A. Mühlbauer darbā [6], kurā viņš pētīja AF EM lauku un tā ietekmi uz šķidrums kustību kausējumā pie fiksētām fāzu robežām.

Savukārt K.H. Lie [7] kā viens no pirmajiem pētīja brīvās kausējuma virsmas aksiāli simetrisko formu, ņemot vērā AF induktora radīto EM spiedienu.

AF induktora spraugu ietekmi uz EM lauka trīsdimensionālu (3D) sadalījumu pirmais pētīja A. Mühlbauer [8, 9]. Kompleksu aksiāli simetrisku modeļu ķēdi, kas ļauj aprēķināt fāzu robežas, brīvo virsmu, temperatūru un šķidrums kustību, ņemot vērā AF induktora EM radīto lauku, izstrādāja A. Mühlbauer vadītā grupa laika intervālā 1993-1997 [10, 11]. Ar šī modeļa palīdzību tika pētīti 100 mm diametra lielu kristālu audzēšanas procesi [12]. Citu autoru darbos izstrādātie FZ modeļi ir ievērojami vienkāršoti, izmantojot empīriskus datus. Piemēram, darbos [13–15] netiek modelēta atklātā kušanas fronte un iekšējais trīskāršais fāzu punkts - ITP (punkts netālu no sistēmas centrālās ass, kur saskaras brīvā virsma, fāzu robeža starp polikristālisko stieni un kausējumu, kā arī atklātā kušanas fronte). Šajos darbos frontes forma un ITP punkta pozīcija tiek uzskatīta par zināmu no konkrētā eksperimenta.

Papildus pētījumiem modernajai FZ sistēmai ar *needle-eye* tipa induktoru ir veikti pētījumi arī klasiskajām FZ sistēmām bez AF induktora. Šāda tipa sistēmās termisko situāciju kausējumā nodrošina radiācijas jauda no speciālas lampas. C.W. Lan savos darbos [16–21] ir pētījis šķidrums kustību, fāzu robežas, kā arī citus kristālu audzēšanas aspektus. Rūpniecībā šāda tipa sistēmas netiek izmantotas, jo maksimālais kristāla diametrs, kuru var izaudzēt ar šo klasisko FZ sistēmu, ir apmēram centimetrs diametrā.

Balstoties uz aksiāli simetrisko modeļi [11], 2003. gadā tika izveidots pilnīgāks modernās FZ sistēmas modelis [22], kurā tika realizēti virkne uzlabojumu salīdzinot ar [11], no kuriem būtiskākie ir: 1) precizēts ITP pozīcijas aprēķins; 2) AF induktora modelēšanā precīzāk tika ņemta vērā tā spraugu ietekme; 3) Precīzāks radiācijas modulis (redzības faktoru izmantošana); 4) Uzlaboti skaitliskie algoritmi, kas ļauj pētīt FZ procesu plašākā audzējamā kristāla diametra diapazonā. Modelis [22] ļauj modelēt fāzu robežas FZ sistēmā bez empīrisku datu izmantošanas kvazi stacionārā tuvinājumā, kas atbilst līdzsvara stāvoklim, kad kristāls tiek audzēts ar nemainīgu rādiusu.

Visos iepriekš apskatītajos modeļos tika pieņemts, ka sistēma ir aksiāli simetriska un tādēļ uzdevums reducējās uz divām dimensijām (2D) vertikālā šķērsgrīzumā. Tomēr, lai pētītu praksei interesējošus FZ procesa aspektus, ir nepieciešami arī 3D modeļi. Piemēram, kristāla īpatnējās pretestības radiālā sadalījuma, kam ir ļoti liela nozīme pielietojumos, atkarība no šķidrums kustības kausējumā 3D rakstura, kuru savukārt būtiski ietekmē AF induktora 3D ģeometrijas īpatnības, tika pētīta darbos [27–32]. Parasti 3D FZ sistēma tiek modelēta pie fiksētām fāzu robežām, kuras savukārt tiek tuvināti aprēķinātas izmantojot 2D aksiāli-simetriskos modeļus [33–35].

C.W. Lan balstoties uz savu 2D modeli pirmo reizi izveidoja 3D modeļu ķēdi klasiskajam FZ procesam ar optisko sildīšanu [36–41]. Šajos darbos viņš modelēja visas fāzu robežas tai skaitā arī kristāla formu. Tika ņemta vērā arī šķidrums kustības ietekme uz fāzu robežām. Tomēr salīdzinot ar moderno FZ metodi ar AF induktoru, *C.W. Lan* apskatītā sistēma ir ievērojami vienkāršāka, kā arī rūpnieciski mazāk nozīmīga.

1.3 Promocijas darba uzdevumi

Šajā promocijas darbā tiek attīstīti matemātiskie modeļi, kas ļauj aprēķināt fāzu robežas modernajā FZ silīcija monokristālu audzēšanas procesā, kurā tiek izmantots AF induktors. Modeļu realizācijai tiek izstrādātas atbilstošas datorprogrammas. Darbā tiek izvirzīti sekojoši **uzdevumi**:

1. Izstrādāt nestacionāru aksiāli simetrisku FZ procesa matemātisko modeli, balstoties uz līdz šim izveidoto kvazi stacionāro aksiāli simetrisko modeli. Modelēt fāzu robežu dinamiku un kristāla formas veidošanos laikā.
2. Izstrādāt FZ procesa regulēšanas matemātisko modeli, izmantojot aksiāli simetrisko nestacionāro FZ procesa modeli. Modelēt procesa vadības parametru kontroli atbilstoši plānotajai procesa norisei, nodrošinot procesa stabilitāti un novēršot procesa avārijas pārtraukšanu (kausējuma izlīšana, polikristāliskā stieņa ietriekšanās AF induktorā u.c.).
3. Izstrādāt kvazi stacionāru trīsdimensionālu FZ sistēmas fāzu robežu matemātisko modeli, kas ļauj pētīt AF induktora ģeometrijas trīsdimensionālo īpatnību ietekmi uz izkusušās zonas formu, kā arī modelēt nesimetrisku kristālu augšanu.
4. Realizēt izstrādātos modeļus specializētās datorprogrammās, izmantojot galīgo elementu un robeželementu metodes, kā arī izmantojot modernās programmu izstrādes tehnoloģijas.

1.4 Promocijas darbā iekļautās publikācijas un dalība konferencēs

Šo uzdevumu izpildei tika veidoti procesu modeļi un to atbilstoša realizācija datorprogrammās, kā arī tika veikti aprēķini. Rezultāti ir atspoguļoti promocijas darbā iekļautajās publikācijās [dis1-dis6]:

[dis1] - **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, G. Ratnieks, A. Mühlbauer, Th. Wetzel, "Numerical study of transient behaviour of molten zone during industrial FZ process for large silicon crystal growth", *J. Crystal Growth* 266 (2004) 54-59.

[dis2] - **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, H. Riemann, A. Lüdge, G. Ratnieks, W. von Ammon, "Numerical study and comparisons with experimental data for transient behavior of

phase boundaries during industrial FZ process for silicon crystal growth", J. Crystal Growth 275 (2005) 561-565.

[dis3] - **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, G. Ratnieks, "Transient modelling of FZ crystal growth process and automatic adjusting of the HF inductor current and feed rod velocity", Proceedings of the Joint 15th Riga and 6th Pamir International Conference, 2 (2005) 229-233.

[dis4] - **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, G. Ratnieks, H. Riemann, "3D Modelling of the molten zone shape created by an asymmetric HF EM field during the FZ crystal growth process", Magnetohydrodynamics 41 (2005) 123-146.

[dis5] - A. Muižnieks, **A. Rudevičs**, K. Lācis, H. Riemann, A. Lüdge, F.W. Schulze, B. Nacke, "Square-shaped silicon crystal rod growth by FZ method with especially 3D shaped HF inductors", Magnetohydrodynamics 43 (2007) 269-282.

[dis6] - **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, B. Nacke, "Development of specialized modelling tools for crystal growth processes with magnetic fields", Magnetohydrodynamics 43 (2007) 253-260.

Iegūtos rezultātus autors prezentēja un aprobēja vairākās konferencēs un semināros:

- **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, "Transient modelling of the FZ process for large silicon single crystal growth", Workshop "Use of magnetic fields in crystal growth" in Riga, 5, 6 December 2003.
- **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, H. Riemann, A. Lüdge, G. Ratnieks and W. von Ammon U. "Numerical study and comparisons with experimental data for transient behavior of phase boundaries during industrial FZ process for silicon crystal growth", 14th International Conference on Crystal Growth, 12th "International Conference on Vapor Growth and Epitaxy" ICCG-14, ICVGE-12, 9-13 August 2004, Alpes Congres, Grenoble France.
- **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, G. Ratnieks, "Transient modelling of FZ crystal growth process and automatic adjusting of the HF inductor current and feed rod velocity", Joint 15th Riga and 6th PAMIR International Conference on Fundamental and Applied MHD, June 27 - July 1, 2005.
- **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, "Development of specialized software for industrial crystal growth processes", DGKK Angewandte Simulation in der Kristallzüchtung, 4. Workshop, 3.- 4 November 2005 in Heigenbrücken, Vācija.
- **A. Rudevičs**, A. Muižnieks, "Development of Specialized Modelling Tools for Crystal Growth Processes", 4th International Scientific Colloquium Modelling for Material Processing Riga, June 8-9, 2006.

1.5 Dalība pētnieciskajos projektos un stažēšanās ārzemju institūcijās

Promocijas darba izstrādi nodrošināja piedalīšanās sekojošos pētnieciskajos projektos.

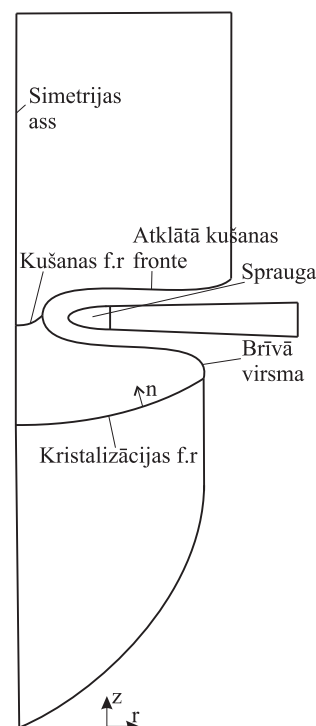
- "*Development of Institute of Physics of University of Latvia for European centre of MagnetoHydroDynamics research, European Commission - 5th Framework Programme*", LU Fizikas institūtā, (2003-2005).
- Līgumdarbs ar Hanoveres Universitātes institūtu: *Institute for Electrothermal Processes*, Vācija, par tēmu - silīcija kristālu audzēšanas procesu matemātiskā modelēšana, (2003-2007).
- "Doktorantu un jauno zinātnieku pētniecības darba atbalsts LU", ESF projekts LU, (2004-2007).
- "Nano-, elektronikas un kompozītmateriālu un tehnoloģiju matemātiskā modelēšana", ERAF projekts LU, (2006-2007).

Šo projektu ietvaros ir bijusi stažēšanās sekojošās ārzemju institūcijās: *Institute for Crystal Growth* (ICG), Berlīne, Vācija (2003. decembris, 2004. decembris, 2005. decembris); *Institut für Elektrothermische Prozesstechnik*, Hanovere, Vācija (2005. februāris); kristālu audzēšanas rūpnīca *Siltronic AG*, Burghauzena, Vācija (2005. februāris un jūlijs, 2006. februāris).

2 FZ kristālu audzēšanas procesa kvazi stacionārā modeļa kopsavilkums

Atbilstoši uzdevumam promocijas darbā tika izstrādāts FZ procesa nestacionārs matemātiskais modelis, kas tika realizēts programmā *FZoneT*. Nestacionārā FZ modeļa izveidei tika izmantota virkne modeļu un programmu komponentu no programmas *FZone*, kas bija attīstīti jau iepriekš (Ratnieks, [22]) kvazi stacionāram FZ procesa aprēķinam. Tā kā kvazi stacionārais modelis nav aprakstīts šī promocijas darba publikācijās, tad materiāla vienotībai un labākai izpratnei šajā nodaļā ir dots īss kvazi stacionārā modeļa kopsavilkums, balstoties uz darbu [22].

Jāuzsver, ka kvazi stacionārais modelis ļauj aprēķināt tikai FZ procesa tādu stāvokli, kad kristāls aug ar nemainīgu rādiusu, kausējuma tilpums laikā nemainās un, kad gan polikristāliskais stienis, gan kristāls ir cilindri ar relatīvi lieliem garumiem, šādu stāvokli tad mēs saucam par FZ procesa kvazi stacionāro stāvokli. Šajā modelī fāzu robežu kvazi stacionāro stāvokļu atrašanai tiek izmantoti algoritmi, kas daļēji balstās uz fāzu robežu pārvietošanos laikā.



2.1 Lietotie pamatpieņēmumi un tuvinājumi

Kvazi stacionārajā modelī aplūkotā FZ sistēma ir dota att. 2.1, kur redzams induktora aksiāli simetriskais tuvinājums ar uzdotu efektīvo spraugu, kušanas fāzu robežu, atklātā kušanas fronti, brīvo virsmu, kristalizācijas fāzu robežu un centrālo asi. Kvazi stacionārajā modelī tiek pieņemts, ka kristāla un polikristāliskā stieņa arējās virsmas ir dotas.

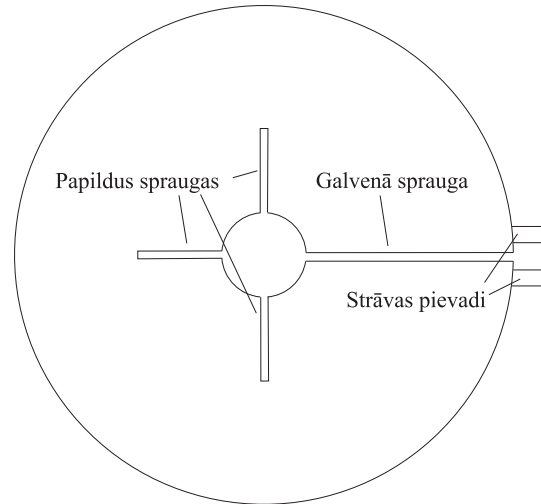
Izstrādājot kvazi stacionāro FZ modeli [22], tiek pieņemts, ka FZ sistēma ir aksiāli simetriska, izņemot AF induktoru (sk. att. 2.2), kuram var būt radiālas spraugas. Spraugu ietekme tiek ņemta vērā tuvināti, izmantojot azimutāli vidējotu aksiāli simetrisku EM lauku. Tādējādi FZ procesa matemātiskais modelis tiek realizēts 2D telpā, izmantojot cilindrisko koordinātu sistēmu (r, z).

Kausējuma brīvā virsma tiek modelēta izmantojot vienkāršotu stacionāru modeli bez

Att. 2.1: FZ sistēma aksiāli simetriskā tuvinājumā

kausējuma tilpuma kontroles. Pārējo fāzu robežu formas un pozīcijas aprēķina modeļos tiek izmantots siltuma plūsmas balansa nosacījums.

Tā kā FZ procesos tiek izmantots AF EM lauks (≈ 3 MHz), tad atbilstošais lauka iespiešanās dziļums ≈ 0.3 mm (*skin*-slānis) ir daudzkārt mazāks nekā raksturīgie sistēmas izmēri ≈ 100 mm un tādēļ var izmantot integrālos virsmas lielumus, tādus kā: virsmas strāvas lineārais blīvums, Džoula siltuma avotu virsmas blīvums, EM lauka spiediens. Tādēļ elektromagnētiskā lauka skaitliskajos aprēķinos tiek izmantota robeželementu metode (BEM, [49–52]).



2.2 Fāzu robežu modeļi

Šajā nodaļā tiek apskatīti fāzu robežu aprēķinu modeļi [22]. Vispirms tiek dots modelis kušanas fāzu robežas, kristalizācijas fāzu robežas un atklātās kušanas frontes aprēķiniem, kura pamatā ir siltuma plūsmas saglabāšanās likums. Tālāk tiek apskatīts stacionārais modelis brīvās kausējuma virsmas modelēšanai FZ sistēmā.

Att. 2.2: AF induktors ar radiālām spraugām, skats no augšas

Kušanas un kristalizācijas fāzu robežu modelis Kušanas un kristalizācijas fāzu robežas tiek modelētas nestacionāri, proti, sākumā virsmu forma tiek modificēta izmantojot to pārvietošanās ātrumu laboratorijas atskaites sistēmā ar doto laika soli. Fāzu robežu ātrums tiek aprēķināts no lokālā siltuma plūsmas saglabāšanās likuma saskaņā ar vienādojumu:

$$\lambda_c \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_c = \lambda_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s + \rho_c Q V_n, \quad (2.1)$$

kur indekss c nozīmē ciets silīcijs un indekss s šķidrums silīcijs, ρ_c cieta silīcija blīvums, Q īpatnējais kušanas siltums, V_n fāzu robežas pārvietošanās ātrums normāles virzienā atiecībā pret nekustīgu cieto silīciju, n fāzu robežas normāle virzienā uz šķidro silīciju (sk. att. 2.1), λ_c λ_s un siltumvadītības koeficienti cietajā un šķidrā silīcijā, T temperatūras lauks. Vienādojuma (2.1) kreisajā pusē ir siltuma plūsmas blīvums, kas tiek aizvadīts no fāzu robežas caur cieto silīciju, bet labajā pusē ir siltuma plūsmu summa, kas pienāk fāzu robežai no šķidruma (pirmais loceklis) un kristalizācijas siltuma, kas izdalās šķidrumam pārejot cietajā fāzē (otrais loceklis). Tādējādi (2.1) izsaka siltuma plūsmas nezūdamības likumu uz fāzu robežas starp cieto un šķidro silīciju. Tā kā praksē cietais kristāls pats tiek pārvietots laboratorijas atskaites sistēmā ar ātrumu \vec{v}_c , tad fāzu robežas ātrums laboratorijas

sistēmā \vec{v}_n ir izsakāms sekojoši:

$$\vec{v}_n = \vec{v}_c + V_n \cdot \vec{n}, \quad (2.2)$$

kur $V_n \cdot \vec{n}$ ir fāzu robežas lokālais ātrums attiecībā pret cieto silīciju, izteikts vektoriālā formā. Fāzu robežas ātrums \vec{v}_n un laika solis Δt tiek izmantots fāzu robežas punktu pozīcijas izmaiņu aprēķinā. Šim ātrumam sasniedzot vērtību 0, tiek iegūts stacionārs atrisinājums fāzu robežas formai.

Skaitliskajā realizācijā fāzu robežu forma tiek tuvināti aprakstīta ar lineāriem nogriežņiem (robežu elementiem), kur katrā nogriežņa galapunktā tiek aprēķināts ātrums \vec{v}_n saskaņā ar (2.1) un (2.2). Sekojoši, nogriežņu galapunkti katrā laika solī tiek pārvietoti par attālumu $\vec{v}_n \cdot \Delta t$.

Atklātās kušanas frontes modelis Atklātā kušanas fronte ir fāzu robeža starp cieto silīciju un gāzi, kurā atrodas visa FZ sistēma, tādēļ siltuma plūsmas saglabāšanās likums šai fronteī ir izsakāms sekojoši:

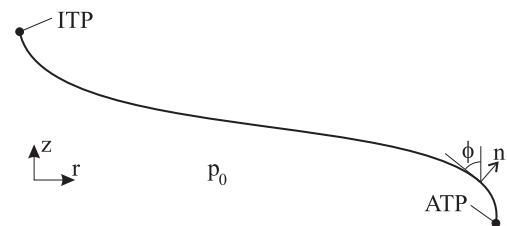
$$\lambda_c \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_c = q^{EM} - q^{rad} + \rho_c Q V_n, \quad (2.3)$$

kur q^{EM} inducētās EM jaudas virsmas blīvums (tas tiek koriģēts izmantojot plānās filmas modeli [22]), q^{rad} izstarotās jaudas virsmas blīvums (par radiācijas modeli sīkāk [22]), $\rho_c Q V_n$ ir kušanas siltuma plūsma. Tādējādi vienādojuma (2.3) labā puse satur efektīvo siltuma plūsmu, kura ieiet cietajā silīcijā. Frontes ātrumu aprēķina pēc (2.2), tikai lokālā ātruma izteiksmes vietā ņemot V_n no vienādojuma (2.3). Atklātās kušanas frontes aprēķinos tiek pieņemts, ka normāles vektora n virziens ir vērsts uz cietā silīcija ārpusi.

Brīvās virsmas stacionārais modelis Stacionārā stāvoklī katrā punktā (r, z) uz brīvās kausējuma virsmas ir spēkā spiedienu līdzsvara likums, kuram izmanto izteiksmi:

$$D = p_0 - \rho g z + \frac{1}{2} \rho \Omega^2 r^2 - p^{EM} - \gamma \left(\frac{\cos \phi}{r} + \frac{1}{R'} \right), \quad (2.4)$$

kur D ir spiedienu disbalanss, kas līdzsvara gadījumā ir vienāds ar nulli visos virsmas punktos, ϕ ir virsmas pieskares leņķis ar vertikāli (att. 2.3), γ virsmas spraiguma koeficients, R' virsmas liekuma rādiuss meridionālā plaknē, Ω kristāla rotācijas cikliskā frekvence (tiek pieņemts, ka šķidrums griežās kopā ar kristālu kā ciets ķermenis), p_0 iekšējais manometriskais spiediens kausējumā, p^{EM} EM lauka radītais spiediens. No (2.4)



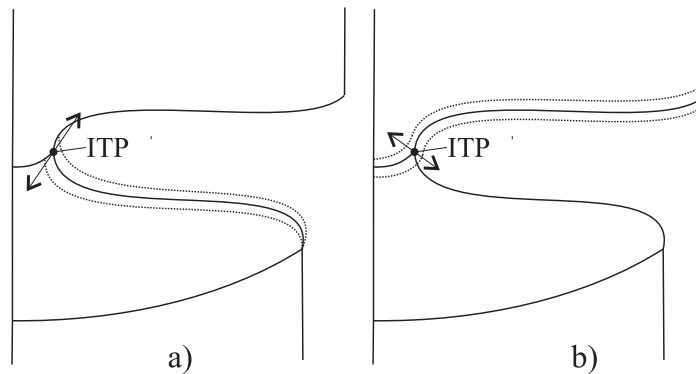
Att. 2.3: Brīvā kausējuma virsma vertikālā šķērs griezumā ar galapunktiem - iekšējo (ITP) un ārējo trīskāršo punktu (ATP)

pie zināma p_0 un galapunktiem - iekšējā un ārējā trīskāršā punkta (ITP un ATP) ir iespējams atrast brīvās virsmas formu. Iekšējā spiediena p_0 noskaidrošanai ir nepieciešams papildus nosacījums. Ir zināms, ka FZ procesa stacionārā stāvoklī, kad augošā kristāla rādiuss ir konstants, brīvā kausējuma virsma uz ATP-līnijas veido noteiktu leņķi ϕ_0 ar vertikāli. Tādēļ pieprasot $D=0$ punktā ATP, iegūstam izteiksmi iekšējā spiediena p_0 vērtības iteratīvai noteikšanai:

$$p_0 = \rho g z_{ATP} - \frac{1}{2} \rho \Omega^2 r_{ATP}^2 + p_{ATP}^{EM} + \gamma \left(\frac{\cos \phi_0}{r_{ATP}} + \frac{1}{R'_{ATP}} \right), \quad (2.5)$$

kur ar indeksa ATP palīdzību tiek norādīts, ka atbilstošās vērtības tiek ņemtas ārējā trīskāršā punktā. Lai atrastu brīvās virsmas formu skaitliski, tā tiek aprakstīta ar galīga garuma elementiem. Iteratīvi pārvietojot, katru no elementiem disbalansa D samazināšanās virzienā tiek panākts, ka līdzsvara gadījumā katrā elementa galapunktā ir spēkā $D=0$ (sk. sīkāk [22]).

Iekšējā trīskāršā punkta modelis Iekšējais trīskāršais punkts (ITP) tiek definēts kā vieta, kur satiekās sekojošas fāzu robežas: kušanas fāzu robeža, atklātā kušanas fronte un brīvā kausējuma virsma (sk. att. 2.4).



Att. 2.4: Iekšējā trīskāršā punkta (ITP) modelis, pozīcijas maiņas scenāriji

FZ procesa modelēšanā ITP pozīcijas izmaiņas nosaka, pirmkārt, brīvā kausējuma virsma, kur iteratīvi tiek meklēta ITP punkta pozīcija uz kušanas fāzu robežas un atklātās kušanas frontes atkarībā no disbalansa (2.4) vērtības ITP punktā [22] (sk. a) att. 2.4), otrkārt, kušanas fāzu robežas un atklātās kušanas frontes ātrumi (sk. b) att. 2.4). Papildus tam ITP punkta aprēķinu modelī tiek pieņemts, ka pāreja no kušanas fāzu robežas uz atklāto kušanas fronti ir gluda. Sīkāku modeļa izklāstu skatīt [22].

2.3 EM lauka modelēšana induktoram ar spraugām

Tipiskā FZ procesā ir izteikts *skin*-efekts, tādēļ, risinot EM problēmu skaitliski, var izmantot robeželementu metodi. Tādējādi tiek aprēķināts azimutāli vidējots lineārās strāvas

blīvums uz virsmām FZ sistēmā, kas nepieciešams gan temperatūras lauka, gan kausējuma brīvās virsmas formas aprēķinos. Lai tuvināti ņemtu vērā induktora spraugu (att. 2.2) ietekmi aksiāli simetriskajā tuvinājumā tiek izmantotas speciālas modeļa modifikācijas (aprakstu skatīt sekojošos darbos [22, 24, 25]). Šāds tuvinājums ir attaisnojams, jo nesimetriskā 3D EM lauka ietekme uz FZ procesu tiek vidējota paša procesa laikā kristālam un polikristāliskajam stienim rotējot.

2.4 Siltuma pārnese modelēšana

Radiācijas modelēšana Radiācijas modeļa pamatā tiek pieņemts, ka apskatāmajām virsmām piemīt sekojošas īpašības: tās ir necaurspīdīgas (emisija, absorbcija un atstarošanās notiek uz ķermeņu virsmām); optiski pelēkas (materiālu īpašību neatkarība no temperatūras un viļņa garuma), kā arī tiek uzskatīts, ka radiācija ir difūza. Atbilstošā radiācijas vienādojuma sastādīšanā tiek izmantoti redzamības faktori [22, 26] aksiāli simetriskā tuvinājumā.

Atrisinot radiācijas vienādojumus, tiek iegūts radiācijas jaudas blīvuma sadalījums q^{rad} uz visām ārējām virsmām FZ sistēmā. Lielums q^{rad} tiek izmantots robežnosacījumos formulējot temperatūras problēmu FZ sistēmā. Tā kā q^{rad} ir atkarīgs no temperatūras lauka, tad risinot globālo siltuma pārnese problēmu radiācijas un temperatūras lauka aprēķinu modeļi ir iteratīvi saistīti:

$$\dots \rightarrow T_{(n)} \rightarrow q_{(n)}^{rad} \rightarrow T_{(n+1)} \rightarrow q_{(n+1)}^{rad} \rightarrow \dots, \quad (2.6)$$

kur $T_{(n)}$ ir temperatūras lauks sistēmā n -tajā solī un $q_{(n)}^{rad}$ temperatūrai $T_{(n)}$ atbilstošais jaudu sadalījums, savukārt nakamajā iterācijas solī $n+1$ tiek iegūts jauns temperatūras lauks $T_{(n+1)}$, kurš tiek izmantots tālāk radiācijas jaudas aprēķinā. Šādas iterācijas tiek turpinātas, kamēr temperatūras lauka izmaiņas kļūst mazākas par uzdoto skaitlisko precizitāti.

Temperatūras modelēšana Temperatūras lauks tiek risināts atsevišķi polikristāliskajā stienī, kausējumā un kristālā [22] saskaņā ar vienādojumu:

$$\rho c_p \left(u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right], \quad (2.7)$$

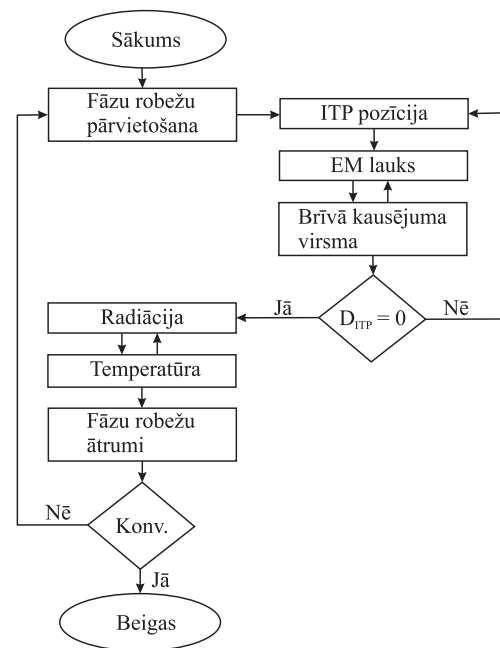
kur ρ silīcija blīvums, c_p silīcija siltumietilpība, $\lambda(T)$ silīcija siltumvadītības koeficients, (u_r, u_z) konvekcijas ātrums, kurš atkarībā no apskatāmā apgabala ir polikristāliskā stieņa, kristāla pārvietošanās ātrums (kvazi stacionārajā modelī tiek pieņemts, ka polikristāliskais stienis un kristāls laboratorijas sistēmā ir nekustīgi, tādēļ, lai modelētu to pārvietošanu, tiek izmantots konvektīvais ātrums temperatūras vienādojumā) vai šķidrā silīcija kustības ātrums kausējumā. Risinot temperatūras problēmu tiek izmantoti sekojoši robežnosacījumi: $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ uz simetrijas ass, $T = T_0$ (T_0 -kristalizācijas temperatūra) uz kristalizācijas un kušanas fāzu robežām; $\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial n} = q^{EM} - q^{rad}$ (vienādojuma labā puse satur inducētās EM jaudas

un radiācijas jaudas starpību) uz visām polikristāliskā stieņa, kausējuma un kristāla ārējām virsmām.

Lai atrisinātu temperatūras problēmu skaitliski tiek izmantota galīgo elementu metode (FEM, [53–59]).

2.5 Vispārīgs aprēķinu algoritms

Stacionārā FZ procesa modeļa aprēķinu algoritma vienkāršota blokshēma ir attēlota att. 2.5 [22]. Aprēķina sākumā tiek pārvietotas visas fāzu robežas saskaņā ar to lokālajiem ātrumiem tekošajā laika solī. Tad tiek iteratīvi aprēķināta brīvā kausējuma virsma un EM lauks pie fiksētas ITP pozīcijas, ja disbalanss punktā ITP ($D_{ITP} \neq 0$) tad ITP punkts tiek pārvietots saskaņā ar speciālu algoritmu un brīvās virsmas aprēķins tiek atkārtots līdz $D_{ITP}=0$. Tālāk iteratīvi tiek rēķināta radiācija un temperatūra, kamēr tiek iegūts stacionārs temperatūras lauka atrisinājums, t.i. temperatūras lauka izmaiņas ir 0. Zinot temperatūras lauku visos FZ sistēmas apgabalos, tiek aprēķināti temperatūras gradienti un atbilstošie fāzu robežu ātrumi. Kvazi stacionārs risinājums tiek iegūts tad, kad atbilstošie fāzu robežu ātrumi ir 0.



Att. 2.5: Vienkāršots aprēķinu algoritms kvazi stacionārājā FZ modelī

3 Nestacionārs aksiāli simetrisks matemātiskais modelis kristālu audzēšanas procesu pētīšanai

Balsoties uz iepriekšējā nodaļā aprakstītā kvazi stacionārā FZ kristālu audzēšanas procesa modeļa komponentēm, tika izstrādāts un aprobēts jauns nestacionārs aksiāli-simetrisks (2D) FZ procesa modelis [dis1-dis3]. Izmantojot šo modeli, ir iespējams aprēķināt izkusušās zonas formas atkarību no laika FZ procesā. Šāds modelis paver iespējas pētīt FZ procesus ne tikai kvazi stacionārā stāvoklī (nemainīga kausējuma forma, cilindrisks kristāls), bet arī procesa sākuma un beigu fāzēs, kad notiek straujas fāzu robežu izmaiņas laikā. Papildus tam, izmantojot šo modeli, var pētīt arī automātisko procesa regulēšanu (vadību), kas ieņem būtisku vietu FZ kristālu rūpnieciskajā audzēšanā.

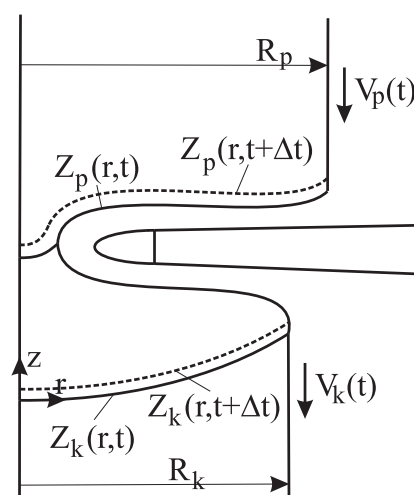
Šajā nodaļā tiek dots nestacionārā modeļa apraksts [dis1], izceļot būtiskākās tā sastāvdaļas, kā arī dots ieskats modeļa pielietojumā FZ procesa regulēšanas pētīšanā. Modelis tika realizēts kā datorprogramma *FZoneT*.

3.1 Matemātiskais modelis un skaitliskā realizācija

Nestacionārajā modelī tiek izmantotas vairākas kvazi stacionārā modeļa komponentes, tādas kā: atklātās kušanas frontes modelis, augstfrekvences EM lauka modelis, trīskāršā ITP punkta modelis, temperatūras un radiācijas modeļi. No kvazi stacionārā modeļa tika izmantots arī brīvās virsmas modelis ar nelielām modifikācijām.

Viena no būtiskākajām komponentēm nestacionārajā FZ modelī ir kausējuma tilpuma uzskaitē, kur tiek ņemts vērā cik silīcija dotajā laika intervālā izkūst un cik silīcija kristalizējas. Zinot šos lielumus, ir iespējams aprēķināt nepieciešamo kausējuma tilpuma izmaiņu, kas savukārt tiek izmantota brīvās virsmas aprēķinā. Tālāk atkarībā no brīvās virsmas formas pie ATP tiek modelēta arī paša kristāla formas veidošanās, kristālam augot, kā funkcija laikā.

Zemāk tiek dots īss apraksts, būtiskākajām nestacionārā modeļa komponentēm.



Att. 3.1: Kausējuma tilpuma uzskaites modelis

3.1.1 Kausējuma tilpuma uzskaites modelis

Lai noteiktu kausējuma tilpuma izmaiņu laika intervālā $[t..t + \Delta t]$ ir nepieciešams aprēķināt tilpumu šķidrājam silīcijam ΔV_{izk} , kurš rodas kūstot polikristāliskajam stienim uz kušanas fāzu robežas un atklātās kušanas frontes, kā arī šķidrā silīcija zudumus uz kristalizācijas fāzu robežas ΔV_{kris} , materiālam kristalizējoties. Zinot šos abus lielumus, pēc šķidrums tilpuma nezūdamības likuma var aprēķināt kausējuma tilpuma izmaiņu ΔV_{kaus} , saskaņā ar vienādojumu:

$$\Delta V_{kaus} = \Delta V_{izk} - \Delta V_{kris}. \quad (3.1)$$

Polikristāliskā stieņa kausēšanas aprakstam ir lietderīgi apskatīt virsmu $Z_p(r, t)$, kas sastāv no kušanas fāzu robežas un atklātās kušanas frontes un ir definēta laboratorijas atskaites sistēmā laika momentā t (sk. att. 3.1). Kušanas rezultātā virsma pēc laika intervāla Δt ir pārvietojusies stāvoklī $Z_p(r, t + \Delta t)$, tādēļ atbilstošā cietā silīcija tilpuma izmaiņa laboratorijas atskaites sistēmā ir aprēķināma pēc $\int_0^{R_p} [Z_p(r, t + \Delta t) - Z_p(r, t)] 2\pi r dr$, kur R_p ir polikristāliskā stieņa rādiuss. Ņemot vērā to, ka pats polikristāliskais stienis tiek pārvietots ar noteiktu ātrumu $V_p(t)$ leju, izkusušais silīcijs laika intervālā Δt ir aprēķināms pēc sekojoša vienādojuma:

$$\Delta V_{izk} = \frac{\rho_c}{\rho_s} \left(V_p \pi R_p^2 \Delta t + \int_0^{R_p} [Z_p(r, t + \Delta t) - Z_p(r, t)] 2\pi r dr \right), \quad (3.2)$$

kur ρ_c - cietā silīcija blīvums, ρ_s - šķidrā silīcija blīvums. Analoģiski tiek aprēķināts tilpums šķidrājam silīcijam, kas kristalizējas uz kristalizācijas fāzu robežas $Z_k(r, t)$:

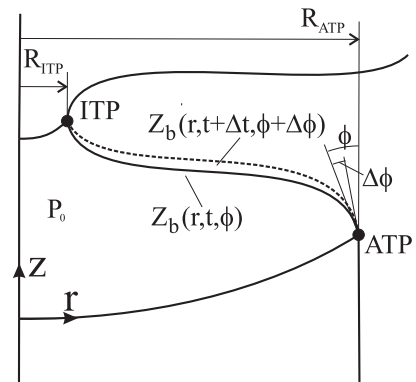
$$\Delta V_{kris} = \left(V_k \pi R_k^2 \Delta t + \int_0^{R_k} [Z_k(r, t + \Delta t) - Z_k(r, t)] 2\pi r dr \right), \quad (3.3)$$

3.1.2 Brīvās virsmas modelis

Īsā laika intervālā Δt kausējuma tilpuma izmaiņa ΔV_{kaus} izraisa atbilstošu brīvās virsmas izmaiņu. Apzīmēsim brīvās virsmas formu laika momentā t ar $Z_b(r, t, \phi)$, kur ϕ ir leņķis starp vertikālo z asi un pieskari brīvajai virsmai ārējā trīskāršajā punktā (ATP), sk. att. 3.2. Savukārt virsmas forma pēc laika intervāla Δt ir $Z_b(r, t + \Delta t, \phi + \Delta \phi)$, tādējādi aktuālā kausējuma tilpuma izmaiņa ir aprēķināma pēc formulas:

$$\Delta V_{akt} = \left(\int_{R_{ITP}}^{R_{ATP}} [Z_b(r, t + \Delta t, \phi + \Delta \phi) - Z_b(r, t, \phi)] 2\pi r dr \right), \quad (3.4)$$

kur R_{ATP} ir punkta radiālā koordināte, R_{ITP} iekšējā trīskāršā punkta (ITP) radiālā koordināte. Lai izpildītos



Att. 3.2: Brīvās virsmas aprēķins

kausējuma tilpuma saglabāšanās, ir nepieciešams nestacionārajā modelī nodrošināt to, ka

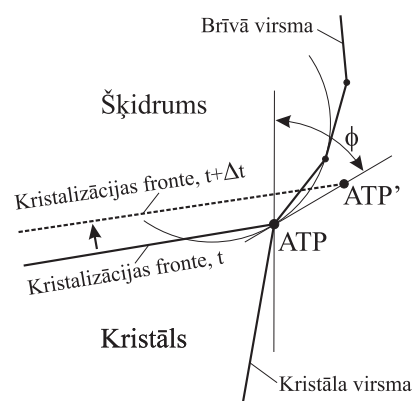
$$\Delta V_{akt} = \Delta V_{kaus}. \quad (3.5)$$

Tas tiek panākts ar iteratīvu algoritmu, kurā tiek meklēta tāda leņķa izmaiņa $\Delta\phi$, pie kuras kausējuma tilpuma izmaiņa ΔV_{akt} sakrīt ar ΔV_{kaus} . Lielums ΔV_{kaus} ir iepriekš zināms no kušanas un kristalizācijas fronšu analīzes.

Brīvās virsmas forma tiek rēķināta pie fiksētiem galapunktiem (ITP un ATP) pieprasot katrā tās punktā spiedienu līdzsvaru, t.i, tiek pieprasīts, ka hidrostatiskais spiediens, elektromagnētiskais spiediens, virsmas spraiguma spiediens, centrālās spiediens, kā arī iekšējais efektīvais spiediens p_0 ir līdzsvarā. Spiediens p_0 raksturo kopējo kausējuma tilpumu un tiek aprēķināts, izmantojot leņķa nosacījumu punktā ATP ([22]).

3.1.3 Kristāla virsmas modelēšana

Kristāla forma nestacionārā FZ procesa laikā ir atkarīga no leņķa ϕ starp brīvās virsmas pieskari un vertikāli punktā ATP. Skaitliskajos aprēķinos brīvā virsma tiek aprakstīta ar galīga garuma elementiem (sk. att. 3.3), un punktā ATP tā tiek tuvināti aprakstīta ar riņķa līniju, kas iet caur ATP punktam tuvākā elementa galapunktiem. Tādējādi pieskari brīvajai virsmai punktā ATP iegūst velkot atbilstošo pieskari riņķa līnijai. Tālāk tā tiek izmantota katrā laika momentā t , lai aprēķinātu jauno ATP punktu - ATP', nākamajam laika momentam $t + \Delta t$. Punktu ATP' iegūst aprēķinot krustpunktu starp kristalizācijas fronti (laika momentā $t + \Delta t$) un brīvās virsmas pieskari punktā ATP (sk. att. 3.3).



Att. 3.3: Kristāla virsmas modelēšana

Kristalizācijas fāzu robežu laika momentā $t + \Delta t$, iegūst pārvietojot to laika momentā t ar atbilstošo ātrumu kristāla atskaites sistēmā (kristāls nekustīgs). Tādējādi tiek iegūts jauns ārējais trīskāršais punkts ATP' kristāla atskaites sistēmā, lai pārietu uz laboratorijas atskaites sistēmu šis punkts tiek pārvietots uz leju par attālumu $V_k \cdot \Delta t$, kur V_k kristāla vilkšanas ātrums.

3.1.4 Temperatūras lauka modelēšana

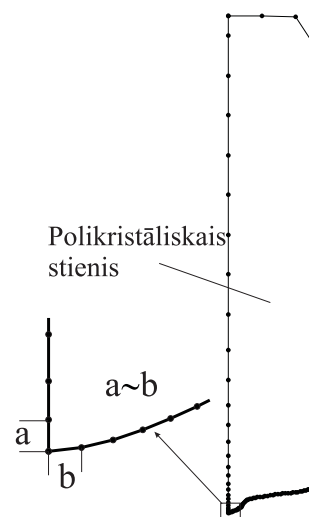
Nestacionārajā FZ procesa matemātiskajā modelī temperatūras lauks tiek modelēts līdzīgi kā iepriekš aprakstītajā stacionārajā modelī (sk. nodaļu 2.4). Katrā FZ sistēmas apgabalā tiek risināts vienādojums (2.7) ar atbilstošajiem robežnosacījumiem. Tomēr, atšķirībā no stacionārā modeļa, nestacionārajā modelī risinot temperatūras problēmu polikristāliskajā stienī un kristālā tiek uzskatīts, ka tie ir nekustīgi, t.i, konvektīvais ātrums ir $(u_r, u_z) = (0, 0)$. Tas

ir pieļaujams, jo nestacionārajā modelī polikristāliskais stienis un kristāls, kā arī pats temperatūras lauks, tiek pārvietoti laboratorijas atskaites sistēmā ar doto ātrumu.

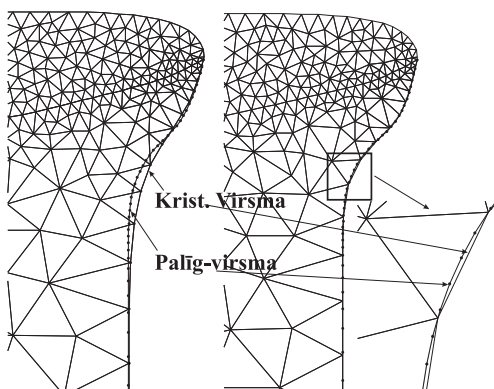
3.1.5 Režģu apstrādes algoritmi nestacionārajā FZ procesā

Tā kā pilnīgai nestacionārai FZ procesa modelēšanai ir jāapskata sistēmas ar būtiski atšķirīgiem izmēriem, t.i. sākot no procesa sākuma fāzes, kad monokristāla izmēri ir daži milimetri, līdz pat procesa beigu fāzei, kad kristāla izmēri sasniedz vairākus desmitus milimetru, ir nepieciešami speciāli režģu apstrādes algoritmi problēmas skaitliskajā risināšanā [dis2].

Tādēļ tika izstrādāti, pirmkārt, robeželementu režģu ģenerācijas algoritmi, kas nodrošināja režģa adaptāciju sistēmas izmēriem, t.i. elementu skaita atkarība no sistēmas izmēriem. Turklāt, lai optimizētu skaitlisko realizāciju un samazinātu kopējo elementu skaitu, vienlaicīgi saglabājot pietiekamu skaitlisko precizitāti fāzu robežu aprēķinos, tika izstrādāts algoritms arī elementu izmēru noteikšanai, kuram pamatā bija pieņēmums, ka kausējums tiek aprakstīts ar vismazākajiem elementiem (paaugstināta skaitliskā precizitāte), kamēr kristāls un polikristāliskais stienis tiek aprakstīti ar elementiem, kuru izmēri vienmērīgi palielinās virzienā prom no kausējuma. Piemēram, att. 3.4 parādīts robeželementu režģis uz polikristāliskā stieņa virsmas, šeit ir redzams, ka elementu izmēri pakāpeniski palielinās sākot no minimālā izmēra a .



Att. 3.4: Robeželementu režģa piemērs

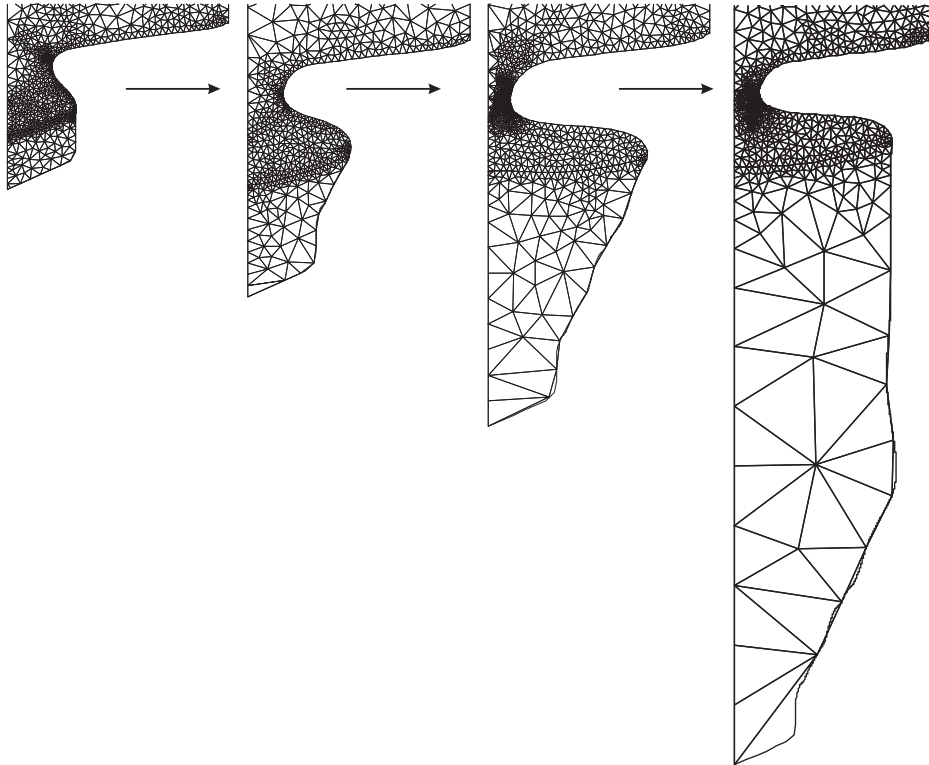


Att. 3.5: Prezicētā kristāla virsmas modelēšana, izmantojot palīgvirsmu

Otrkārt, robeželementu ģenerācijai uz kristāla virsmas tika izmantota speciāla palīgvirsma, kura apraksta precīzo kristāla formu līdz tekošajam laika momentam. Attēlā 3.5 kreisajā pusē redzamas kristāla ģeometrijas skaitliskās novirzes modelēšanas laikā, gadījumam, kad netiek izmantota palīgvirsma, un attēla labajā pusē redzama kristāla forma, kas tika iegūta izmantojot palīgvirsmu robeželementu režģa ģenerācijas algoritmā.

Treškārt, katrā laika solī, izmantojot uzģenerēto robeželementu režģi, tiek ģenerēts elementu režģis apgabalā tilpumos, kas ir nepieciešams temperatūras problēmu risināšanai, piemēram att. 3.5

ir parādīti tilpuma režģi gan kausējumā, gan kristālā. Katrā laika solī visas fizikālo lauku vērtības jaunajos režģu mezglu punktos tiek aprēķinātas interpolējot, izmantojot veco režģi no iepriekšējā laika soļa.



Att. 3.6: Galīgo elementu režģis sākuma konusa modelēšanā ar nestacionāro FZ procesa modeli

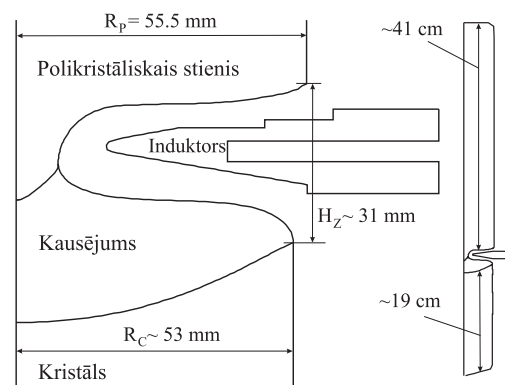
Režģu ģenerācijas algoritmu ilustrācijai, nestacionārajā FZ procesa skaitliskajā modelēšanā att. 3.6 ir parādīts sākuma konusa modelēšanas process ar trīs secīgiem sistēmas stāvokļiem. Redzams, ka modelēšanas sākumā neliela kristāla aprakstīšanai tiek izmantots relatīvi smalks režģis salīdzinot ar to kas tiek izmantots nestacionārā aprēķina vēlākajās fāzēs, kad kristāla izmēri ir jau būtiski palielinājušies. Lai optimizētu aprēķinu atdarbību galīgo elementu izmēri vienmērīgi pieaug virzienā no izkusušās zonas.

3.2 Nestacionāru peldošās zonas procesu aprēķini

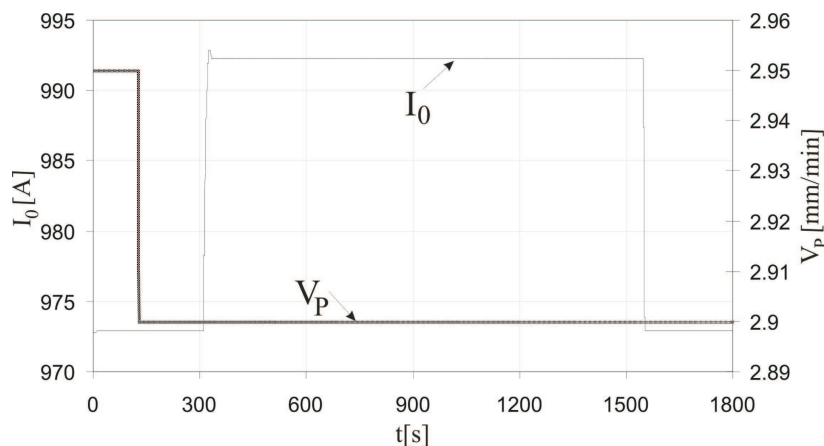
3.2.1 Nestacionārā modeļa verifikācija ar eksperimentu

Berlīnes institūtā *Institute for Crystal Growth (ICG)*, tika veikts eksperiments ar mērķi pētīt FZ sistēmas reakciju uz impulsa veida induktora strāvas un polikristāliskā stieņa padeves ātruma izmaiņām. Impulsa veida parametru izmaiņas tika veiktas tad, kad sistēma jau bija sasniegusi līdzsvara stāvokli, t.i kristāls aug ar nemainīgu rādiusu. Šī eksperimenta dati tika izmantoti, lai veiktu atbilstošo nestacionāro simulāciju ar FZ matemātisko modeli [dis2].

Sākuma ģeometrijas tuvinājums nestacionārajam FZ modelim ir parādīts att. 3.7, tas atbilst eksperimentālajai FZ sistēmai līdzsvara stāvoklī. Procesa laikā tika mainīta induktora strāva I_0 un polikristāliskā stieņa padeves ātrums V_P saskaņā ar grafiku att. 3.8, kas savukārt izraisīja kristāla rādiusa R_C un zonas augstuma H_Z izmaiņas. Nestacionārā FZ modeļa rezultātu salīdzinājums ar eksperimentu ir dots att.3.9. Redzams, ka kristāla rādiusa un zonas augstuma izmaiņu raksturs laikā labi sakrīt ar eksperimentu. Redzamās atšķirības ir izskaidrojamas ar skaitliskās aproksimācijas precizitāti, kā arī mērījumu kļūdu, nosakot zonas augstumu un kristāla rādiusu eksperimenta laikā.



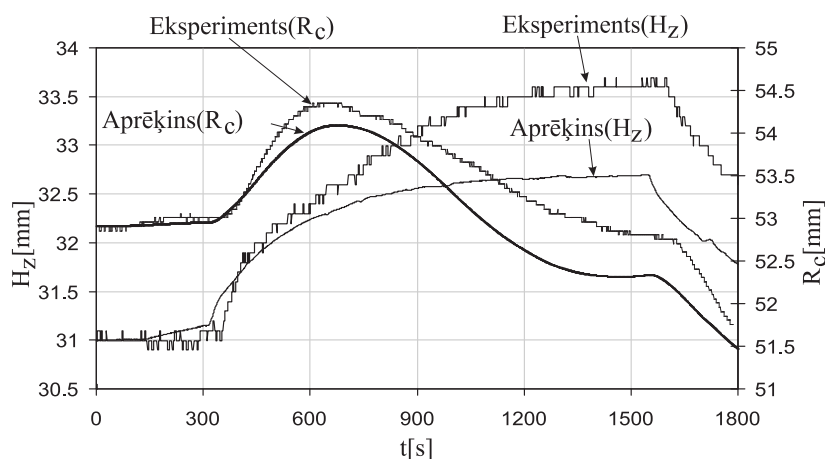
Att. 3.7: Fāzu robežu formas un raksturīgie parametri FZ sistēmai nestacionārā aprēķina sākumā



Att. 3.8: Impulsa veida strāvas un polikristāliskā stieņa ātruma izmaiņas eksperimentā un aprēķinā

3.2.2 Galvenie rezultāti

Ar nestacionāro FZ procesa modeli tika pētīta 4" (kristāla diametrs 4 collas) kvazi stacionāru sistēmu reakcija uz lēcienvēidīgām V_P un I_0 izmaiņām [dis1,dis2 un dis3]. Skaitliskie aprēķini parādīja, ka raksturīgie reakcijas pārejas laiki, piemēram, kristāla diametra izmaiņai atbilst apmēram 10 minūtes, un sistēmas reakcijai piemītošais rimstošu oscilāciju raksturs [dis1] ir labā saskaņā ar praksē novēroto. Turklāt aprēķini un eksperiments parādīja, ka lēcienvēida I_0 strāvas izmaiņas izraisa īslaicīgas impulsa veida kristāla rādiusa izmaiņas



Att. 3.9: Kristāla rādiusa un zonas augstuma reakcija uz impulsa veida parametru izmaiņām

[dis3].

Papildus tam tika konstatēts, ka uzdodot impulsa veida V_P un I_0 izmaiņas sistēmai kvazi stacionārā stavoklī, matemātiskais modelis un eksperiments dod līdzīgas kristāla rādiusa un zonas augstuma izmaiņas laikā [dis2].

Modelējot konusu augšanu, skaitliskie aprēķini parādīja, ka samazinoties kristāla diametram leņķis starp kristāla virsmu un kristalizācijas interfeisu punktā ATP palielinās [dis1], savukārt, palielinoties diametram, leņķis samazinās. Var parādīt, ka šī leņķa lielumam ir būtiska nozīme kristāla augšanas procesa stabilitātei.

3.3 Procesa regulēšanas modelēšana

3.3.1 Regulēšana un tās nepieciešamība

Viens no svarīgākajiem uzdevumiem kristālu audzēšanas praksē ir noteiktas formas kristālu audzēšana. Lai to realizētu ir nepieciešams zināt atbilstošos vadības parametrus kā funkcijas laikā. Tomēr, izrādās, ka šādu funkciju atrašana pirms plānotā kristālu audzēšanas procesa nav iespējama un arī praktiski nav nepieciešama, jo eksperimentiem raksturīgās gadījuma veida kļūdu (trokšņu) dēļ iepriekš zināmie vadības parametri tiktu modificēti, kas savukārt nekontrolējami ietekmētu procesa gaitu. Tādēļ praksē tiek izmantoti regulēšanas algoritmi, kuru rezultātā iepriekš nezināmās procesa vadības parametru funkcijas tiek atrastas paša procesa laikā.

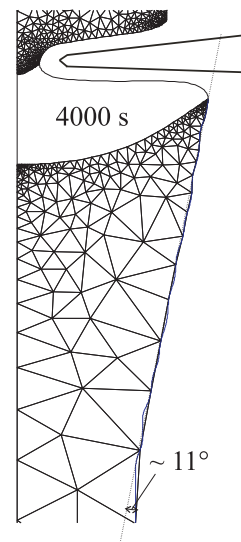
Lai pētītu praksē lietotos regulēšanas algoritmus šajā darbā tika izstrādāts FZ procesa regulēšanas matemātiskais modelis, izmantojot aksiāli simetrisko nestacionāro FZ procesa modeli. Tas ļāva modelēt procesa vadības parametru kontroli atbilstoši plānotajai procesa norisei, nodrošinot procesa stabilitāti un novēršot procesa avārijas pārtraukšanu (kausējuma izlīšana, polikristāliskā stieņa ietriekšanās AF induktorā u.c.).

Regulēšanas matemātiskā modeļa realizācijā tika izmantoti proporcionāl-integrāl-diferenciālie (PID) kontrolieri ([23],[dis3]) kā atsevišķa nestacionārā modeļa komponente. Tādējādi regulēšanas modelī pēc noteikta algoritma, kura struktūra šeit netiek atklāta dēļ sadarbības noteikumiem ar *Siltronic AG*, tika saistīti sekojoši FZ procesa parametri H_Z - zonas augstums, I_0 - induktora strāva, V_p - polikristāliskā stieņa ātrums un φ - leņķis starp kristāla virsmu un vertikāli (kristāla slīpums) punktā ATP (ārējais triskāršais punkts).

3.3.2 Aprēķina piemērs un galvenie rezultāti

Procesa regulēšanas modelēšanas ilustrācijai att. 3.10 ir dots aprēķina piemērs, kur redzama FZ sistēma laika momentā 4000 s (kopš simulācijas sākuma) ar kristāla slīpuma leņķi 11 grādi. Redzams, ka regulēšanas algoritms nodrošina vēlamu kristāla formu, kas šai piemērā ir noteikta ar kristāla virsas slīpuma leņķi.

Tādējādi, izmantojot rūpnieciskajiem procesiem raksturīgās PID kontrolieru parametru vērtības, ir iespējams atkārtoti reproducēt rūpnieciskās kristālu formas un pētīt nestacionāra procesa aspektus.



Att. 3.10:
Nestacionārā
FZ procesa
modelēšana ar
automātisko
vadības
parametru
regulēšanu

4 Kvazi stacionārs 3D modelis izkusušās zonas formas modelēšanai

Kristālu audzēšanas procesā ar FZ metodi ļoti būtisku lomu ieņem augstfrekvences (AF) 3D elektromagnētiskais (EM) lauks, kas rodas maiņstrāvai plūstot induktorā. AF EM inducē virpuļstrāvas *skin* slānī uz silīcija virsmām, tā rezultātā tiek nodrošināta polikristāliskā stieņa kausēšana, kā arī termiskā situācija kausējuma zonā. Atkarībā no AF EM lauka struktūras uz brīvās kausējuma virsmas tiek radīts noteikts EM spiediena sadalījums, kas ietekmē arī pašas virsmas formu. Pārējo fāzu robežu forma (piemēram, kušanas un kristalizācijas frontes) ir atkarīga no AF EM radīto siltumu avotu sadalījuma uz ārējām silīcija virsmām.

Līdz šim FZ procesa modelēšanā plaši tika izmantota sistēmas aksiālā simetrija (sk. nodaļas 2,3), kā rezultātā 3D problēmas vietā tika risināta vienkāršota 2D problēma. Šāda tuvinājuma lietošana ir attaisnojama tādu FZ sistēmu modelēšanā, kurās izpildās virkne nosacījumu, piemēram: 1) AF induktors, kam nesimetrija ir vāji izteikta; 2) induktora un kristāla centrālo āšu nobīdes neesamība; 3) pietiekami liels kristāla un polikristāliskā stieņa rotācijas ātrums, t.i labāk tiek vidējots nesimetriskais AF EM lauks. Audzējot FZ kristālus, praksē šie nosacījumi bieži neizpildās, kā rezultātā rodas izteikti nesimetrisks AF EM lauka sadalījums uz silīcija virsmām, un izteikti nesimetriska izkusušās zonas forma. Tādēļ pilnīgākai FZ procesu pētīšanai ir nepieciešams izveidot 3D matemātiskos modeļus.

Šajā nodaļā tiek dots kopsavilkums 3D modeļu sistēmai, kas ļauj ņemt vērā FZ sistēmas 3D īpatnības kausējuma formas modelēšanā [dis4, dis5]. Nodaļas beigās tiek dots viens aprēķinu piemērs izteikti nesimetriskai FZ sistēmai ar nerotējošu kristālu.

4.1 3D FZ procesa matemātiskā modeļa svarīgākās komponentes

4.1.1 AF EM lauka 3D aprēķins ar robeželementu metodi

Lai aprēķinātu 3D inducētās EM jaudas sadalījumu silīcijā, kā arī EM spiediena sadalījumu uz brīvās kausējuma virsmas, ir nepieciešams atrisināt AF EM lauka problēmu visā FZ kristālu audzēšanas sistēmā [dis4], [33–35]. Turklāt, tā kā FZ procesā EM lauka frekvence ir daži MHz tad var uzskatīt, ka visa EM lauka iedarbība ir koncentrēta uz silīcija virsmas plānā *skin* slānī un tādēļ, risinot AF EM problēmu skaitliski, ar labu precizitāti var izmantot robeželementu metodi (BEM, [49–52]). Metodes pamatā ir pieņēmums, ka virpuļstrāvu sadalījumu var aprakstīt ar lineārā strāvas blīvuma sadalījumu uz objektu virsmām. FZ sistēmā atbilstošo *skin* slāņa biezumu var novērtēt, izmantojot sakarību *skin* slānim bez-

galīgā pustelpā:

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\pi f \sigma \mu_0 \mu_r}}, \quad (4.1)$$

kur δ - skin-slāņa biezums; f - EM lauka frekvence; σ - elektriskā vadītspēja; μ_0 - magnētiskā caurlaidība vakumā; μ_r - relatīvā magnētiskā caurlaidība materiālam. Silīcijam cietajā fāzē pie kušanas temperatūras elektriskā vadītspēja ir $\sigma = 5 \cdot 10^4 S/m$, tipiska EM lauka frekvence ir $f = 3 MHz$, ievietojot izteiksmē (4.1) iegūstam $\delta = 1.3$ mm, šis biezums ir daudzkārt mazāks par raksturīgajiem FZ sistēmas izmēriem, tādēļ robeželementu metodes lietošana ir attaisnojama.

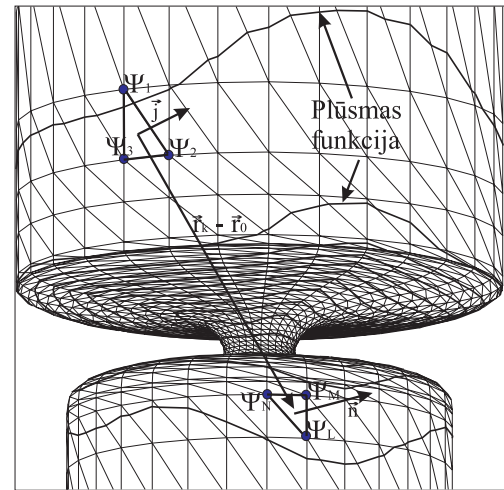
Vēl viens pieņēmums, modelējot AF EM lauku, ir sekojošs: pie vairāku MHz frekvencēm FZ sistēmās kapacitīvos efektus var neņemt vērā, jeb lietot tā saucamo kvazi stacionāro strāvu tuvinājumu. Var parādīt, ka frekvences, pie kurām parādīsies kapacitīvie efekti, ir daudzkārt lielākas par dažiem MHz. Šis pieņēmums nozīmē, ka no lādiņa nezūdamības likuma lineārajam strāvas blīvumam seko:

$$\text{div} \vec{j} = 0, \quad (4.2)$$

tas atļauj uz vadītāju virsmām ieviest speciālu vektoru $\vec{\Psi}$, kam ir spēkā:

$$\text{rot} \vec{\Psi} = \vec{j}, \quad (4.3)$$

pie kam operators rot tiek definēts uz vadītāja virsmas. $\vec{\Psi}$ ir vienmēr vērsts virsmas normāles virzienā un tā normālā komponente Ψ ir strāvas plūsmas funkcija.



Att. 4.1: Inducētās strāvas plūsmas funkcija uz silīcija virsmām aprēķināta ar robeželementu metodi

Lietojot Bio-Savāra likumu, vektorpotenciāla \vec{A} atkarībai no \vec{j} un faktu, ka augstu frekvenču gadījumā magnētiskā lauka normālā komponente uz vadītāja virsmas ir nulle, var uzrakstīt:

$$\text{rot}_n \int_S \frac{\text{rot} \vec{\Psi}}{|\vec{r} - \vec{r}_o|} dS = 0. \quad (4.4)$$

aizvietojot integrāli pa virsmu ar integrāli pa noslēgtu kontūru uz virsmas iegūst:

$$\oint_L \left[\int_S \frac{\text{rot}_s \vec{\Psi}}{|\vec{r} - \vec{r}_o|} dS \right] \vec{dl} = 0. \quad (4.5)$$

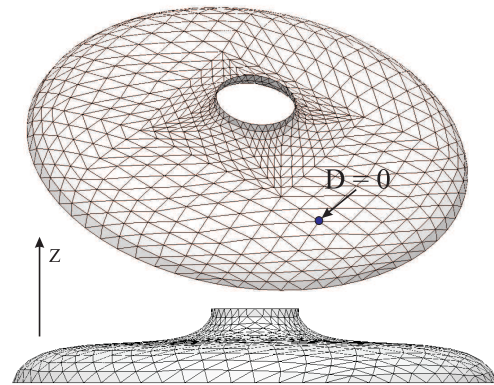
Lai iegūtu risinājumu skaitliski, visas virsmas tiek sadalītas galīga izmēra elementos (trijstūros), kuru virsotnēm tiek piekārtotas plūsmas funkcijas vērtības. Vienādojums (4.5) tiek diskretizēts un reducēts uz lineāru vienādojumu sistēmu ar nezināmajiem Ψ_i - plūsmas funkcijas vērtība elementa virsotnē, kur $i=1\dots n$ ir globāls virsotnes indekss (n kopējais virsotņu skaits). Būvējot sistēmas matricu tiek analizēta elementu savstarpējā ietekme, piemēram, sk. att. 4.1, kur ir attēlots trijstūru robeželementu režģis un aprēķinātā plūsmas funkcija. Lineāras vienādojumu sistēmas atrisināšanai tiek izmantotas CG metodes [42–45].

4.1.2 Brīvās kausējuma virsmas 3D modelis

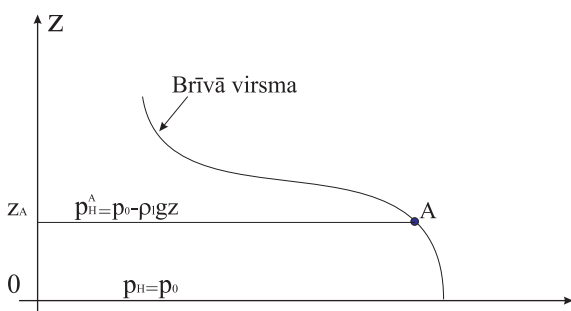
Kausējuma brīvās virsmas forma tiek meklēta pie fiksētām tās robežām. Virsma tiek atrasta balstoties uz nosacījumu, ka katrā tās punktā darbojošies spiedienu ir līdzsvarā, jeb visu spiedienu disbalanss (D) ir nulle (sk. att.4.2) [dis1,dis4] un [22]. Disbalansu (D) veido summa no iekšējā spiediena, hidrostatiskā spiediena, virsmas spraiguma spiediena un EM spiediena, tādējādi:

$$D = p_0 - \rho_l g z - \frac{j^2 \mu_0}{2} - \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (4.6)$$

kur p_0 ir iekšējais spiediens, $p_0 - \rho_l g z$ ir hidrostatiskais spiediens, z ir vertikālā koordināte punktam uz virsmas, ρ_l ir šķidrā silīcija blīvums, γ ir virsmas spraiguma koeficients un R_1, R_2 liekuma rādiusi perpendikulāros virzienos dotajā punktā, un loceklis $\frac{j^2 \mu_0}{2}$ ir EM spiediens, kur j ir inducētā virsmas strāvas lineārais blīvums, kas ir zināmas no AF EM aprēķina.



Att. 4.2: Brīvās kausējuma virsmas diskretizācijas ar galīgiem elementiem



Att. 4.3: Brīvās kausējuma virsmas modelis, hidrostatiskais p_H^A un iekšējais p_0 spiediens uz brīvās kausējuma virsmas

gadījumā $D=0$ [dis4].

Lai definētu iekšējo spiedienu p_0 tiek izvēlēts tāds līmenis kausējumā, kur vertikālā z koordināte ir nulle (sk. att. 4.3). Līmenī $z=0$ iekšējais spiediens p_0 ir vienāds ar manometrisko spiedienu p_H . Savukārt punktā A uz brīvās kausējuma virsmas atbilstošais hidrostatiskais spiediens ir $p_H^A = p_0 - \rho_l g z$.

Lai atrastu virsmas formu skaitliski, tā tiek aprakstīta ar robeželementu režģi, kur katrā mezglu punktā tiek aprēķināts aktuālais disbalanss D un ar speciāla iteratīva algoritma palīdzību tiek nodrošināts, ka līdzsvara

4.1.3 Radiācijas 3D modelēšana ar redzamības faktoriem

Radiācijas modelēšanai FZ sistēmās tiek izmantoti sekojoši pieņēmumi: 1) radiācija ir difūza, šim pieņēmumam ir tuvinājuma raksturs, jo praksē ir novērojama arī atspoguļošanās; 2) emisija, absorbcija un atstarošānās notiek uz ķermeņu virsmām un nevis ķermeņa tilpumā, jeb virsma ir necaurspīdīga; 3) visas materiālu īpašības nav atkarīgas no temperatūras un viļņa garuma, jeb virsma ir optiski pelēka.

Saskaņā ar Planka likumu, aboslūti melns ķermenis (ideāls absorbētājs) emitē sekojošu jaudas blīvumu uz ķermeņa virsmas laukuma vienību un uz viļņa garuma vienību $e_{b\lambda}(T)$ pie dotās temperatūras T un viļņa garuma λ :

$$e_{b\lambda}(T) = \frac{2\pi C_1}{\lambda^5 (e^{C_2/\lambda T} - 1)}, \quad (4.7)$$

kur $C_1 = 0.595448 \cdot 10^8 \text{ W}\mu\text{m}^4 \text{ m}^{-2}$ un $C_2 = 14388 \mu\text{m K}$.

Integrējot pa visu spektru iegūstam izstaroto jaudas blīvumu uz ķermeņa virsmas vienību $q_b(T)$:

$$q_b(T) = \int_0^\infty e_{b\lambda}(T) d\lambda = \sigma T^4, \quad (4.8)$$

kur $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ ir Stefana-Boltzmana konstante.

Savukārt izstaroto jaudas virsmas blīvumu q_e ķermenim, kas nav aboslūti melns, var izteikt sekojoši:

$$q_e(x) = \varepsilon(x)q_b(T(x)) = \varepsilon(x)\sigma T^4(x), \quad (4.9)$$

kur $\varepsilon(x) \leq 1$ ir ķermeņa virsmas emisijas koeficients dotajā virsmas punktā x .

Katrs virsmas elements gan emitē, gan saņem no citiem elementiem nākošo jaudas virsmas blīvumu $q_i(x)$. Daļu no saņemtās enerģijas elements atstaro, bet atlikušo daļu absorbē. Absorbēto enerģijas blīvumu $q_a(x)$ punktā x var izteikt sekojoši:

$$q_a(x) = \alpha(x)q_i(x), \quad (4.10)$$

kur $\alpha(x)$ ir virsmas absorbcijas koeficients dotajā punktā.

Pēc Kirhoha termodinamiskā līdzsvara likuma izotermālām sistēmām, absorbcijas un emisijas koeficienti ir vienādi. Tādēļ absorbēto q_a un atstaroto q_r jaudu blīvumi ir:

$$q_a(x) = \varepsilon(x)q_i(x) \quad (4.11)$$

un

$$q_r(x) = (1 - \varepsilon(x))q_i(x) \quad (4.12)$$

Pilnā jauda q_o , kas iet prom no elementa, ir summa no emitētās jaudas $q_e(x)$ un atstarotās jaudas $q_r(x)$:

$$q_o(x) = q_e(x) + q_r(x), \quad (4.13)$$

Risinot temperatūras problēmu apgabalu iekšienē, svarīgi ir zināt aktuālo elementa jaudas zudumu $q_{rad}(x)$, kas tiek aprēķināts kā starpība starp aizejošo $q_o(x)$ un saņemto $q_i(x)$ jaudas blīvumu:

$$q_{rad}(x) = q_o(x) - q_i(x), \quad (4.14)$$

Apkārtējā vide tiek modelēta kā absolūti melns ķermenis ar raksturīgo temperatūru T_A , kas saņem visu to enerģiju, kura nenonāk uz apskatāmās sistēmas virsmām. Vienlaicīgi tā emitē enerģiju, atbilstoši tās temperatūrai:

$$q_o(vide) = \sigma T_A^4 \quad (4.15)$$

Pilnā jauda, kuru saņem virsma punktā x ir $q_i(x)$ un tā sastāv no jaudu summas, kas nāk no visiem elementiem punktos x^* $q_o(x^*)$. Papildus tam vēl ir jāņem vērā arī jauda, kas nāk no apkārtējās vides.

Apzīmēsim ar dA bezgalīgi mazu laukumiņu punktā x , tad, saskaņā ar Lamberta kosinusu likumu, difūzai izstarošanai, enerģijas daudzums laika vienībā, kas aiziet prom no dA telpiskajā leņķī ω virzienā, kas definēts ar leņķi ϕ starp virsmas normāli, ir (sk. att.4.4):

$$d\Theta = I \cdot \cos \phi \cdot d\omega \cdot dA, \quad (4.16)$$

kur I ir radiācijas intensitāte. Tādējādi no elementa dA aizejošais jaudas blīvums q_o izsakās sekojoši:

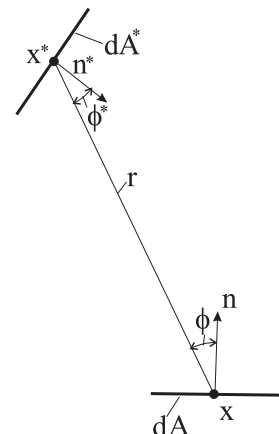
$$q_o = \frac{1}{dA} \cdot \int_0^{2\pi} d\Theta = I \cdot \pi, \quad (4.17)$$

kur integrālis ir pa pustelpu (telpas daļa, kas atrodas elementa vienā pusē).

Izmantojot (4.16) var aprēķināt enerģijas plūsmu no elementa dA uz elementu dA^* , kas atrodas punktā x^* . Pieņemsim, ka elements dA^* ir pilnībā redzams no elementa dA (dA^* neaizsedz citi virsmas elementi), tad var uzrakstīt atbilstošo telpisko leņķi $d\omega = dA^* \cos \phi^* / r^2$, kur r ir attālums starp x un x^* un ϕ^* ir leņķis starp taisni, kas savieno abus elementus un ārējo normāli elementā dA^* (sk. att. 4.4). Tādēļ:

$$d\Theta_{xx^*} = I \cdot \frac{dA \cdot \cos \phi \cdot dA^* \cdot \cos \phi^*}{r^2} = q_o(x) \cdot \frac{dA \cdot \cos \phi \cdot dA^* \cdot \cos \phi^*}{\pi r^2} \quad (4.18)$$

Gadījumā, ja dA^* ir aizsegts un nav redzams, enerģijas apmaiņa starp elementiem nenotiek un $d\Theta_{xx^*} = 0$, tādēļ ir lietderīgi ieviest speciālu funkciju H_{xx^*} kura ir 1 ja dA^* ir redzams un 0



Att. 4.4: Enerģijas apmaiņa starp diviem bezgalīgi maziem virsmas elementiem

ja nav redzams, skatoties elementu savienojošās taisnes virzienā no elementa dA . Apskatot galīga izmēra virsmas ΔA un ΔA^* kopējā enerģija, kas aiziet no virsmas ΔA uz virsmu ΔA^* , ir $\Delta\Theta_{xx^*}$:

$$\Delta\Theta_{xx^*} = \int_{\Delta A} \int_{\Delta A^*} H_{xx^*} \cdot q_o(x) \cdot \frac{dA \cdot \cos \phi \cdot dA^* \cdot \cos \phi^*}{\pi r^2} \quad (4.19)$$

Tagad var definēt redzamības faktora F_{xx^*} jēdzienu [46], kas būtībā nozīmē attiecību starp to enerģiju, kas nonāk no virsmas ΔA uz virsmu ΔA^* , un kopējo enerģijas daudzumu, kas aiziet prom no virsmas ΔA :

$$F_{xx^*} = \frac{\Delta\Theta_{xx^*}}{q_o(x) \cdot \Delta A} = \frac{1}{\Delta A} \cdot \int_{\Delta A} \int_{\Delta A^*} H_{xx^*} \cdot \frac{dA \cdot \cos \phi \cdot dA^* \cdot \cos \phi^*}{\pi r^2} \quad (4.20)$$

No (4.20) var viegli redzēt, ka:

$$F_{xx^*} \cdot \Delta A = F_{x^*x} \cdot \Delta A^* \quad (4.21)$$

Turklāt no enerģijas nezūdamības likuma izriet:

$$\sum_{x^*} F_{xx^*} = 1, \quad (4.22)$$

kas nozīmē, ka pilnā enerģija, kas aiziet no virsmas ΔA , ir vienāda ar enerģiju summu, kuru saņem visas virsmas ΔA^* .

Tiklīdz redzamības faktori ir zināmi vienādojums (4.13) var tikt pārrakstīts attiecībā pret nezināmo q_o sekojošā veidā:

$$q_o(x)dA = q_e(x)dA + (1 - \varepsilon(x)) \int_{x^*} q_o(x^*)F_{x^*x}dA^* \quad (4.23)$$

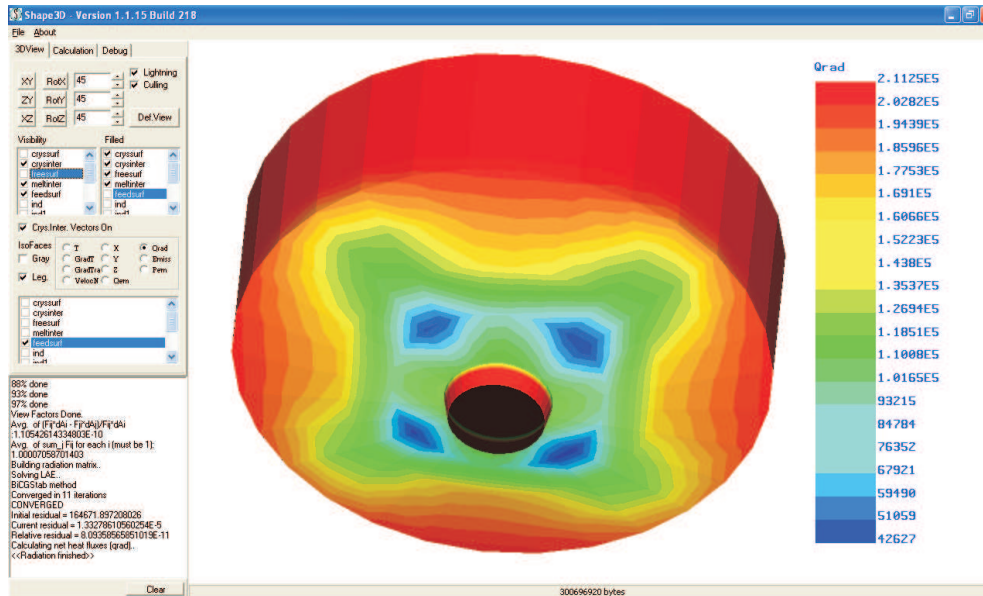
Tātad problēma ir atrast q_o no radiācijas vienādojuma (4.23) un tad atbilstošo jaudas zudumu q_{rad} katrā elementā saskaņā ar (4.14). Zinot q_{rad} var formulēt robežnosacījumus temperatūras problēmai visā sistēmā.

Lai atrisinātu radiācijas problēmu skaitliski, visas apskatāmās virsmas tiek aprakstītas ar galīga izmēra elementu režģi, kur katra elementa viduspunktam tiek piekārtotas fizikālo lauku vērtības. Pielietojot radiācijas vienādojumu (4.23) elementu režģim, iegūst lineāru vienādojumu sistēmu, kuru atrisinot tiek noskaidrotas q_{rad} vērtības katrā elementa viduspunktā.

Izrādās, ka risinot radiācijas problēmu trijās dimensijās, vislaikietilpīgākais apakšuzdevums ir redzamības faktoru atrašana. Šī uzdevuma efektīvai risināšanai tiek izmantota tā saucamā *hemi-cube* metode [47, 48], kuras realizācija ir balstīta uz datora videokartes funkcijām (*z-buffer*) [dis4].

Radiācijas modeļa realizācijas ilustrācija atbilstošajā datoprogrammā *Shape3D* ir dota att. 4.5, kur redzams radiācijas jaudas sadalījums uz polikristāliskā stieņa virsmas (šajā

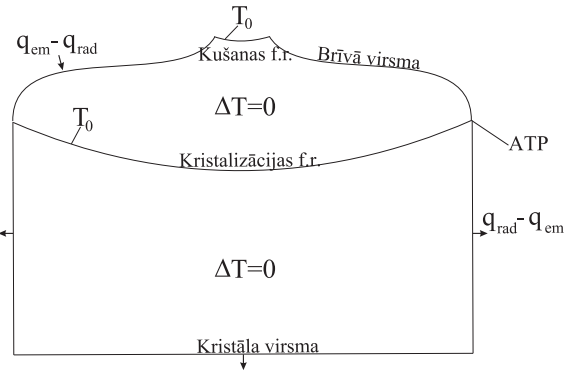
piemērā, tika pieņemti sekojoši parametri: kristāla, polikristāliskā stieņa, kausējuma temperatūra ir 1687 K; induktora temperatūra ir 400 K; apkārtējās vides temperatūra ir 0 K; kristāla un polikristāliskā stieņa emisivitāte ir 0.46; induktora emisivitāte ir 0.3; brīvās kausējuma virsmas emisivitāte ir 0.27). Tākā tika izmantots induktors ar četrām spraugām tad atbilstošais radiācijas jaudas blīvuma sadalījums ir ar četrstūrveida raksturu.



Att. 4.5: Radiācijas jaudas sadalījums uz polikristāliskā stieņa, aprēķināts ar datorprogrammu *Shape3D*

4.1.4 Temperatūras modelis

Kausējuma formas modelēšanai FZ kristālu audzēšanas procesā ir nepieciešams risināt temperatūras problēmu sistēmā, kuras shematiska skice ir dota att. 4.6. Tā sastāv no diviem apgabaliem - kausējuma un kristāla, kuru ierobežo sekojošas fāzu robežu virsmas: kušanas fāzu robeža, brīvā kausējuma virsma, kristalizācijas fāzu robeža un kristāla ārējā virsma. Temperatūras lauks tiek aprēķināts atsevišķi kausējumam, kura robežas ir kušanas fāzu robeža, brīvā kausējuma virsma un kristalizācijas fāzu robeža (sk. att. 4.7).



Att. 4.6: Temperatūras problēma, kausējumā un kristālā

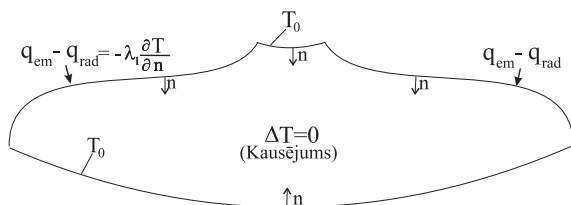
Lai vienkāršotu 3D modeli tiek pieņemts, ka kausējumā nav konvekcijas, tādēļ temperatūru apraksta laplasa vienādojums:

$$\Delta T = 0. \quad (4.24)$$

Temperatūras problēmas matemātiskais formulējums kausējumā ir attēlots att. 4.7, kur redzams, ka uz kušanas un kristalizācijas fāzu robežām tiek uzlikts nosacījums $T = T_0$, (T_0 - silīcija kušanas temperatūra) un uz brīvās kausējuma virsmas jaudas plūsma atkarībā no inducētās EM jaudas (q_{em}) un radiācijas jaudas zudumiem (q_{rad}). Virsmas normāles virziens ir vērsts uz kausējumu, tādēļ robežnosacījums uz brīvās kausējuma virsmas ir:

$$-\lambda_l \frac{\partial T}{\partial n} = q_{em} - q_{rad}, \quad (4.25)$$

kur λ_l šķidra silīcija siltumvadītspēja.



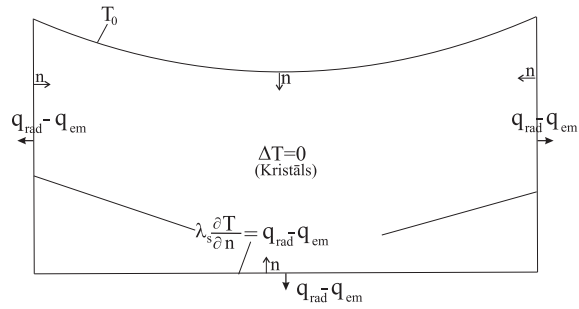
Att. 4.7: Temperatūras problēma kausējumā un atbilstošie robežnosacījumi, EM un radiācijas jaudas nosacījums uz brīvās kausējuma virsmas, silīcija kušanas temperatūra uz kušanas un kristalizācijas fāzu robežām

Līdzīgi tiek formulēta temperatūras problēma arī kristālā (sk. att. 4.8), kur uz kristāla virsmas tiek uzlikts sekojošs nosacījums:

$$\lambda_s \frac{\partial T}{\partial n} = q_{rad} - q_{em}, \quad (4.26)$$

kur λ_s cieta silīcija siltumvadītspēja, q_{rad} - radiācijas jaudas zudumi, q_{em} - inducētā EM jauda. Uz kristalizācijas fāzu robežas temperatūras vērtība ir T_0 .

Risinot temperatūras problēmu skaitliski, visas apskatāmās robežvirsmas tiek aproksimētas ar galīga izmēra elementu režģi. Tādējādi vienādojums (4.24) reducējās uz lineāru vienādojumu sistēmu, kur nezināmie ir temperatūras vērtības elementu viduspunktos.



4.1.5 Kristalizācijas frontes modelis

Siltuma plūsmas saglabāšanās likuma rezultātā uz kristalizācijas fāzu robežas (KI) (sk. att. 4.9) siltuma plūsmai no kausējuma jābūt vienādaī ar siltuma plūsmu, kas ieiet kristālā:

$$\left(\lambda_l \frac{\partial T}{\partial n} \right)_l + v_n \rho_s Q = - \left(\lambda_s \frac{\partial T}{\partial n_s} \right)_s, \tag{4.27}$$

kur indeksi s, l apzīmē silīciju cietā un šķidrā agregātstāvoklī, n normāles vektors uz KI, n_s pretēji n vērsts vektors, ρ_s cieta silīcija blīvums, Q silīcija īpatnējais kušanas siltums, v_n KI ātrums virsmas normāles n virzienā (sk. att. 4.9) attiecībā pret nekustīgu kristālu. Tādēļ KI ātrums \vec{V} laboratorijas atskaites sistēmā izsakās ar vienādojumu:

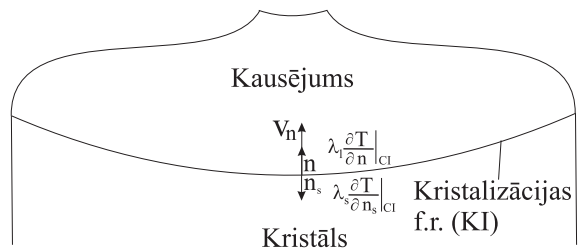
$$\vec{V} = \vec{V}_{cr} - \frac{1}{\rho_s Q} \cdot \left(\left(\lambda_l \frac{\partial T}{\partial n} \right)_l + \left(\lambda_s \frac{\partial T}{\partial n_s} \right)_s \right) \cdot \vec{n}, \tag{4.28}$$

kur $\vec{V}_{cr} = (0,0,-V_{cr})$ ir kristāla vilkšanas ātrums. Atrisinot temperatūras problēmu, atrastais temperatūras lauks kausējumā un kristālā tiek izmantots vienādojumā (4.28), lai aprēķinātu KI pārvietošanās ātrumu. Zinot virsmas ātrumu un izvēloties noteiktu laika soli Δt , KI virsma tiek pārbīdīta katrā aprēķinu solī, līdz tiek iegūta stacionāra tās forma ($\vec{V}=0$).

4.1.6 Ārējā trīskāršā punkta līnijas 3D modelis

Kausējuma 3D formas modelēšanai FZ procesā pie nulles kristāla rotācijas ātruma, tika izstrādāts speciāls modelis ārējā trīskāršā punkta (ATP) līnijas aprēķinam (sk. att. 4.10,

Att. 4.8: Temperatūras problēma kristālā un atbilstošie robežnosacījumi, EM un radiācijas jaudas blīvumu nosacījums uz kristāla virsmas un silīcija kušanas temperatūra uz kristalizācijas fāzu robežas



Att. 4.9: Izmantojot temperatūras gradientus uz kristalizācijas fāzu robežas gan kausējumā, gan kristālā ir iespējams aprēķināt virsmas ātrumu V_n

[dis5]). Ar šī modeļa palīdzību var aprēķināt kausējuma un kristāla formu stacionārā augšanas režīmā. Modeļa pamatā ir sekojoši galvenie pieņēmumi (sk. att. 4.11):

- Stacionārā stāvoklī radiācijas jaudas blīvums sakrīt ar inducēto EM jaudas blīvumu katrā punktā uz ATP-līnijas. Šis ir enerģijas saglabāšanās likums gadījumam, kad kristalizācijas fāzu robeža ir perpendikulāra kristāla virsmai jeb neeksistē radiāla siltuma plūsmas komponente uz ATP-līnijas. Gadījumā, kad kristalizācijas fāzu robeža nav perpendikulāra kristāla virsmai, tiek ņemta vērā arī radiālā siltuma plūsmas komponente kristālā.
- Stacionārā stāvoklī kristāls aug tikai vertikālā virzienā (horizontālā šķēluma forma saglabājas) un tādēļ brīvā kausējuma virsma uz ATP-līnijas ir vertikāla.

Izstarotās jaudas blīvums q_{RAD} uz ATP-līnijas var tikt aptuveni novērtēts izmantojot Stefana-Boltzmaņa likumu:

$$q_{RAD} = \sigma \varepsilon (T_0^4 - T_A^4), \quad (4.29)$$

kur $\sigma = 5.6703 \cdot 10^{-8} W/m^2 \cdot K^4$ - Stefana-Boltzmaņa konstante, $\varepsilon = 0.46$ - cieta silīcija emisivitāte, $T_0 = 1687 K$ silīcija kušanas temperatūra, T_A apkārtējās vides temperatūra. Piemēram, ja $T_A=0 K$, $q_{RAD} \approx 2.11 \cdot 10^5 W/m^2$.

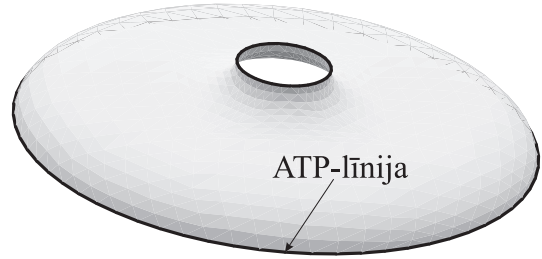
Tādēļ pirmais pieņēmums nozīmē, ka stacionārā stāvoklī katra ATP-līnijas punkta pozīcija telpā ir tāda, ka inducētais EM jaudas blīvums q_{EM} sakrīt ar izstaroto jaudas blīvumu q_{RAD} , t.i, izpildās $q_{RAD} = q_{EM}$. Lai uzlabotu precizitāti, var izmantot pilno radiācijas modeli [dis4], tad q_{RAD} nav konstante, bet gan funkcija atkarībā no pozīcijas uz ATP-līnijas. Skaitliski nosacījums $q_{RAD} = q_{EM}$ katrā punktā uz ATP-līnijas tiek nodrošināts pēc sekojoša algoritma:

$$z_{new}^i = z^i + k_v * (q_{RAD} - q_{EM}^i); \quad (4.30)$$

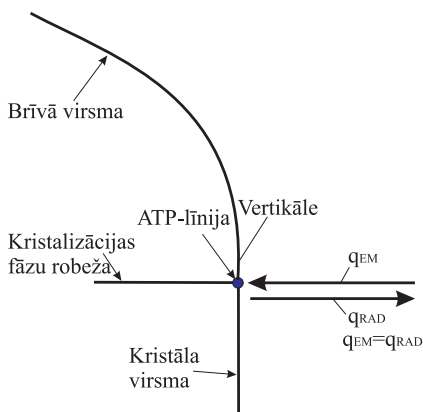
$$x_{new}^i = x^i - k_h * n_z^i * n_x^i; \quad (4.31)$$

$$y_{new}^i = y^i - k_h * n_z^i * n_y^i; \quad (4.32)$$

kur $(x_{new}^i, y_{new}^i, z_{new}^i)$ - jauna telpiskā koordināte i-tajam punktam uz ATP-līnijas, (x^i, y^i, z^i) - tā paša punkta iepriekšējā pozīcija, q_{EM}^i - aktuālais EM jaudas blīvums i-tajā punktā, pozitīvās vērtības k_v un k_h nosaka ATP-līnijas punktu izmaiņu amplitūdu un (n_x^i, n_y^i, n_z^i) ir normāles vektors brīvajai kausējuma virsmai i-tajā punktā uz ATP-līnijas.



Att. 4.10: Brīvā kausējuma virsma un ārējā trīskāršā punkta līnija silīcija kristālu audzēšanas sistēmā ar FZ metodi

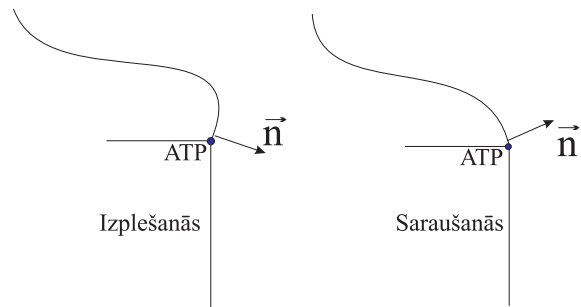


Att. 4.11: Pamatpieņēmumi ATP-līnijas modelī

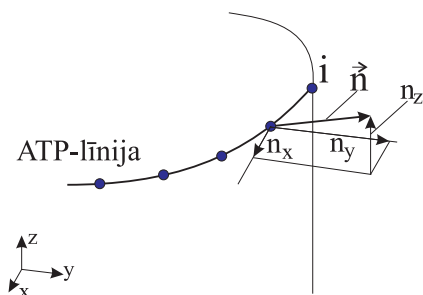
kausējuma virsma izliecās uz āru un kristalizācijas procesa rezultātā kristāls izplešās (sk. att. 4.12). Kamēr augstāk novietotajos punktos uz ATP-līnijas hidrostatiskais spiediens ir zemāks un brīvā virsma ir ieliekusies virzienā uz centrālo asi, kas izraisa kristāla augšanu virzienā uz asi jeb kristāla sašaurināšanos (sk. att. 4.12).

Skaitliskajos aprēķinos ATP-līnijas kustību horizontālajā plaknē nosaka brīvās kausējuma virsmas normāles vektors uz ATP-līnijas (n_x, n_y, n_z) (sk. att. 4.13).

Atkarībā no komponentes n_z zīmes ATP-līnija vai nu izplešās, vai saraujās saskaņā ar vienādojumiem (4.31) un (4.32). Stacionārā stavoklī normāles vektori ir perpendikulāri kristāla virsmai ($n_z=0$, otrais pamatpieņēmums ATP-līnijas modelī), kā arī inducētā EM jauda un izstarotā jauda sakrīt ($q_{EM} = q_{RAD}$, pirmais pamatpieņēmums) un tādēļ ATP-līnija paliek nemainīga.



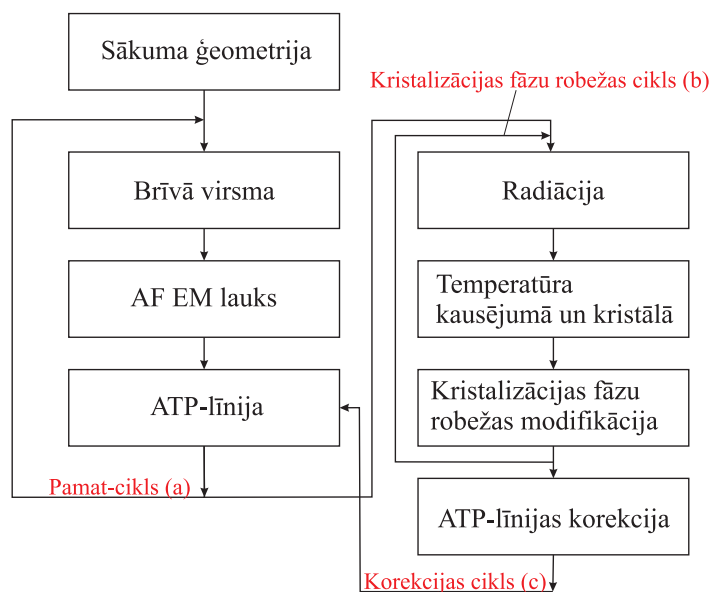
Att. 4.12: Kausējuma un kristāla saraušanās vai izplešanās atkarībā no brīvās kausējuma virsmas formas uz ATP-līnijas



Att. 4.13: Brīvās kausējuma virsmas normāle uz ATP-līnijas

4.2 Kopējais aprēķinu algoritms 3D FZ modeļu komponentu kūdei

Iepriekš aprakstītie 3D FZ modeļu komponenti tika realizēti specializētā datorprogrammu paketē, kuras pamatā ir vairāki iterāciju cikli (sk. att. 4.14). Katrs no cikliem tiek atkārtots vairākkārtīgi līdz tiek sasniegts stacionārs risinājums (ATP-līnija un kristalizācijas fāzu robeža ir nemainīgas).

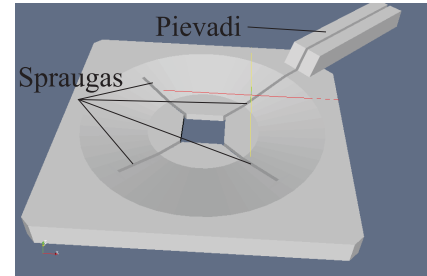


Att. 4.14: Kopējais aprēķinu algoritms 3D FZ procesa matemātiskajai modelēšanai

- Pamatcikls (a) ļauj modelēt kristāla un kausējuma formas veidošanos horizontālajā plaknē, balstoties uz pieņēmumu, ka kristalizācijas fāzu robeža ir horizontāla pie ATP-līnijas. Cikls (a) sastāv no 3D kausējuma brīvās virsmas aprēķina, kam seko 3D AF EM lauka aprēķins un ATP-līnijas formas aprēķins. Modeļa vienkāršošanai, polikristāliskā stieņa forma tika aproksimēta ar fiksētu iepriekš uzdotu ģeometriju, turklāt tā temperatūra tika pieņemta konstanta. Savukārt kristāla forma tika aprakstīta ar noteikta garuma vertikālu virsmu, kuras šķēlums horizontālajā plaknē sakrīt ar ATP-līniju.
- Kristalizācijas interfeisa ciklā (b) pie fiksētas brīvās kausējuma virsmas iteratīvi tiek rēķināts temperatūras lauks gan kausējumā, gan kristālā no kura tad aprēķina kristalizācijas frontes ātrumu un attiecīgi arī ģeometrijas izmaiņu katrā aprēķina solī. Šajā ciklā temperatūras lauka aprēķins tiek kombinēts ar 3D radiācijas aprēķiniem.
- Korekcijas ciklā (c) var ņemt vērā kristalizācijas fāzu robežas formas ietekmi uz ATP-līnijas formu.

4.3 Aprēķinu piemēri kausējuma un kristāla formas modelēšanai 3D FZ procesā ar nerotējošu kristālu

Patlaban praksē ir vērojama liela interese četrkantīgu silīcija kristālu audzēšanā, tas izskaidrojams ar šādu kristālu pielietojamību saules bateriju ražošanā. Izrādās, ka šāda tipa kristālu audzēšanu var realizēt ar standarta FZ metodi. Lai audzētu četrkantīgus kristālus ar FZ metodi ir nepieciešams 3D induktors ar speciālām īpašībām, t.i induktoram jābūt ar četrām spraugām (sk. att. 4.15). Var parādīt, ka inducētās EM jaudas maksimumi rodas tieši zem spraugu galapunktiem [dis5]. Tādējādi, ja FZ procesa laikā kristāls netiek griezts ap savu asi, kristālam pakāpeniski izveidojās četri stūri tieši spraugu virzienā.

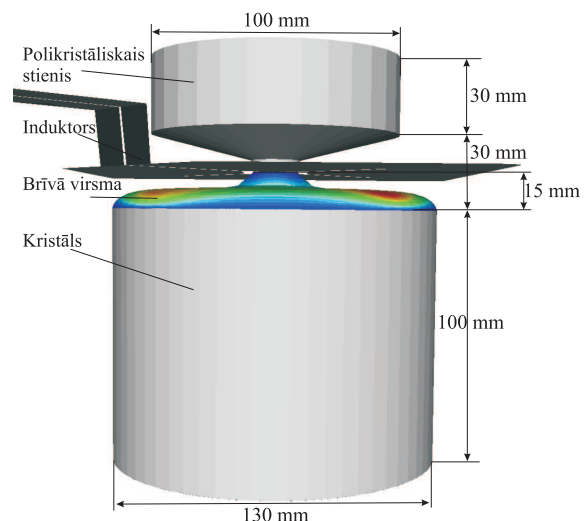


Att. 4.15: 3D AF induktors ar spraugām, kas nepieciešamas četrkantīgu kristālu audzēšanai ar FZ metodi

Šajā nodaļā tiek doti aprēķinu piemēri, kas ilustrē četrkantīgu kristālu audzēšanas procesu modelēšanu. Tiek iegūti stacionāri atrisinājumi, kuros ir izteikta kausējuma un kristāla četrkantīgā forma. Tiek apskatīti divi dažādi 3D induktori, pirmais, vienkāršots - plakans 3D induktors, otrs, reālistisks 3D induktors ar galīgu biezumu.

4.3.1 3D FZ procesa modelēšana ar vienkāršotu 3D induktora ģeometriju

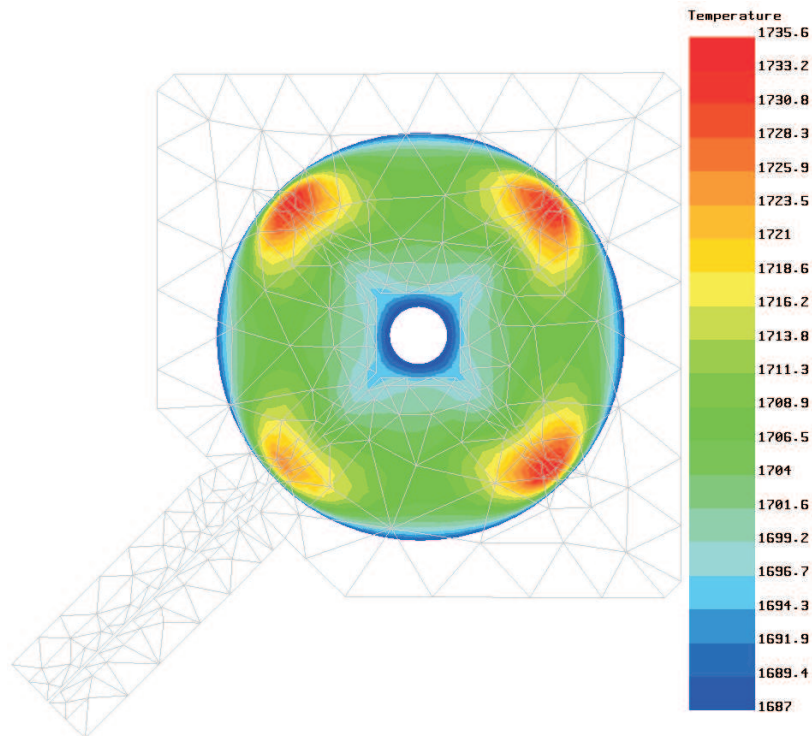
Lai ilustrētu 3D FZ matemātisko modeli, tika apskatīta sekojoša sākuma ģeometrijas forma (sk. att. 4.16). Kā parādīts attēlā 3D induktora forma tika maksimāli vienkāršota, t.i tika izmantots plakans 3D induktors ar četrām spraugām. Tādējādi netiek ņemts vērā tā galīgais biezums, kurš praksē ir nepieciešams, lai realizētu induktora dzesēšanu.



Att. 4.16: Aksiāli simetriska 3D FZ sistēma kā sākuma tuvinājums 3D aprēķiniem ar vienkāršotu induktoru

Aprēķinos izmantoto parametru vērtības ir sekojošas silīcija īpašības: $T_0 = 1687 \text{ K}$; $\rho_l = 2580 \text{ kg/m}^3$; $\rho_s = 2329 \text{ kg/m}^3$; $Q = 1.8 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$; $\sigma_l = 1.2 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$; $\sigma_s = 5.0 \cdot 10^4 \text{ J/kg}$; $\lambda_l = 67 \text{ W/(mK)}$; $\lambda_s(T_0) = 22 \text{ W/(mK)}$; $\epsilon_l=0.27$; $\epsilon_s=0.46$; $\gamma=0.88 \text{ N/m}$; FZ procesa parametri: $I = 700\text{A}$ (strāva induktorā); $p_0 = 200 \text{ N/m}^2$, $p_0 = 210 \text{ N/m}^2$ un

$p_0 = 290 \text{ N/m}^2$ (iekšējais spiediens brīvās kausējuma virsmas aprēķinā); $f=3 \text{ MHz}$ (AF EM lauka frekvence); citi parametri: $\epsilon_{ind}=0.3$ (induktora emisivitāte); $T_{ind}=400 \text{ K}$ (induktora temperatūra); $T_{poli}=1687 \text{ K}$ (polikristāliskā stieņa temperatūra);



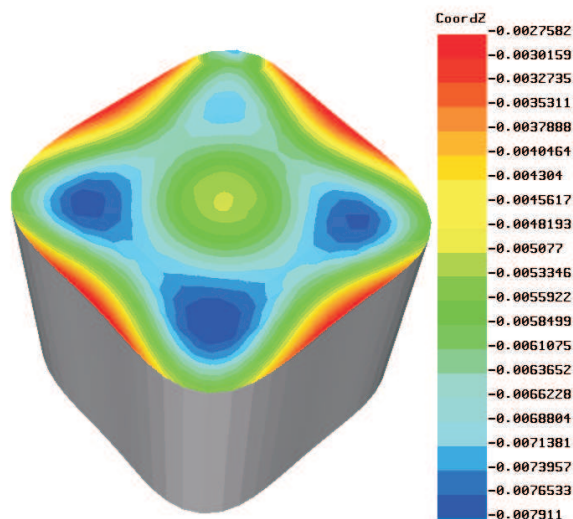
Att. 4.17: Asimetrisks temperatūras lauka sadalījums uz brīvās kausējuma virsmas

Attēlā 4.17 ir redzams temperatūras lauks ar raksturīgajiem maksimumiem. Šādi maksimumi rodas dēļ 3D induktora spraugām. Stacionārā kristāla un brīvās kausējuma virsmas forma tiek aprēķināta saskaņā ar pamatciklu (a) (sk. att. 4.14). EM lauka aprēķinā uzdotā strāva induktorā bija $I=700 \text{ A}$ un brīvās virsmas formas aprēķinā iekšējais spiediens bija $P_0=200 \text{ N/m}^2$, atbilstošais stacionārais atrisinājums ir redzams (att. 4.18), kur skaidri redzama kristāla četrkantīgā forma.

Izmantojot šo stacionāro risinājumu, tika modelēta arī 3D kristalizācijas virsmas forma. Aprēķini tika realizēti saskaņā ar ciklu (b) (att. 4.14), kuru iterāciju laikā brīvā virsma un ATP-līnija tika uzskatīta par fiksētu. Rezultātā tika iegūta kristalizācijas virsmas forma pie kristāla vilkšanas ātruma $V_{CR}=1 \text{ mm/min}$ (sk. att. 4.19). Redzams, ka dēļ EM jaudas maksimumiem arī kristalizācijas virsmas horizontālie šķēlumi veido četrkantīgas formas.



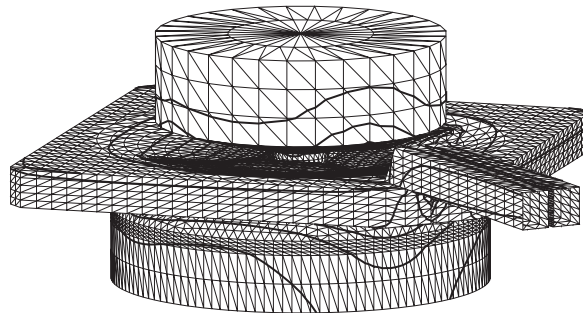
Att. 4.18: Stacionārs atrisinājums ar vienkāršotu 3D induktoru (nav redzams), $I=700$ A, iekšējais spiediens $p_0=200$ N/m²



Att. 4.19: Kristalizācija fāzu robežas vertikālā (z) koordināte stacionārā stavoklī, kristāla vilkšanas ātrums $V_{cr} = 1$ mm/min

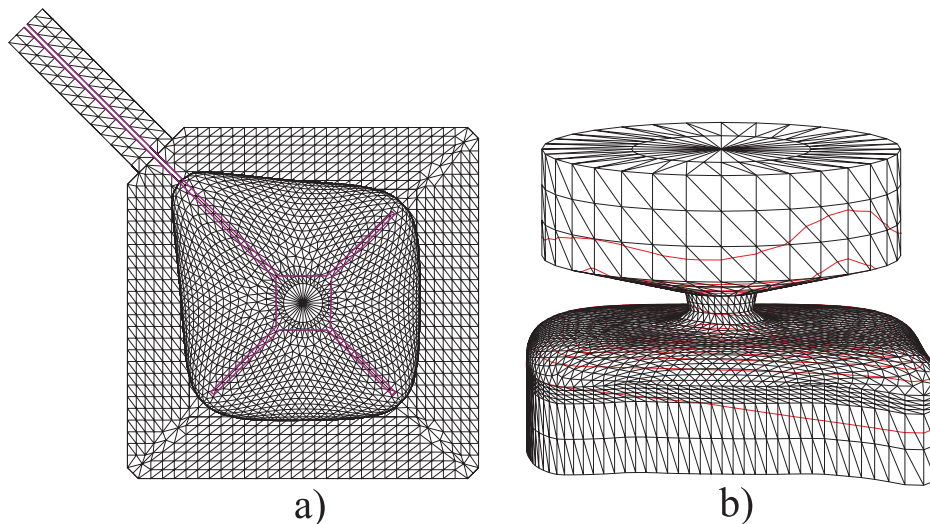
4.3.2 3D FZ procesa modelēšana ar reālistisku 3D induktora ģeometriju, salīdzinājums ar eksperimentu

Praksē 3D induktoram ir galīgs biezums, kas nepieciešams dzesēšanas sistēmas realizācijai. Tādēļ šajā nodaļā tiek apskatīta arī sistēma ar reālistisku 3D induktora ģeometriju (att. 4.20), kur redzama arī kristāla, polikristāliskā stieņa un brīvās kausējuma virsmas sākuma reprezentācija. Lietotie parametri ir līdzīgi kā iepriekšējā piemērā, izņemot induktora strāvu $I=800$ A un iekšējo spiedienu brīvās kausējuma virsmas aprēķinā $p_0=250$ N/m².



Att. 4.20: Sākuma tuvinājums 3D FZ sistēmai ar reālistisku induktora ģeometriju

Attēlā 4.21 tiek parādīts atbilstošais stacionārais risinājums ar četrkantīgu kristāla formu, kura stūri ir spraugu virzienā.



Att. 4.21: Stacionārs atrisinājums ar reālistisku 3D induktora ģeometriju, $I=800$ A, $p_0=250$ N/m² a) skats no apakšas; b) skats no sāniem

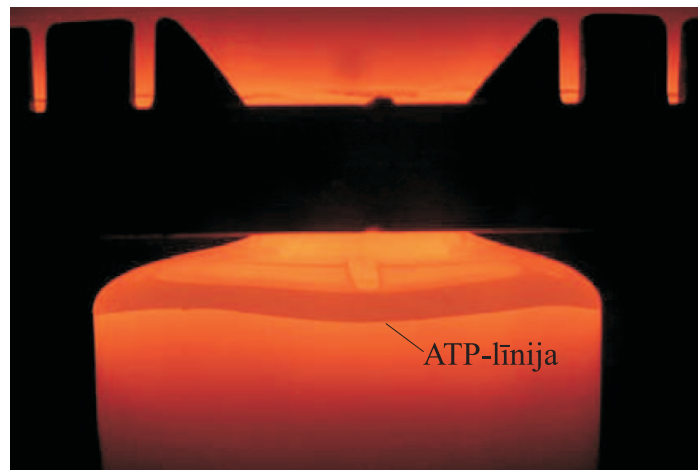
Iepriekš apskatītais 3D kvazi stacionārais FZ procesa matemātiskais modelis sekmīgi tika izmantots reālā FZ procesa attīstībā un optimizācijā sadarbībā ar H.Riemann vadīto grupu institūtā *Institute for Crystal Growth*, Vācija. H.Riemann grupas mērķis bija, izmantojot FZ metodi, izaudzēt četrkantīgus silīcija kristālus, lai to panāktu tika izstrādāts speciālas

konstrukcijas 3D induktors kā arī, lai nodrošinātu kristāla stūru veidošanos procesa laikā kristāls netika rotēts. Četrstūra formas kristāli tiek izmantoti kā izejmateriāli saules bateriju ražošanā, jo ļauj būtiski optimizēt to ražošanas izmaksas.

Att. 4.22 redzama FZ procesa fotogrāfija, kurā kristāls netiek griezts ap savu asi. Savukārt procesa galaprodukts-četrkantīgs silīcija monokristāls ir redzams att. 4.23.

Skaitliskajos aprēķinos un eksperimentā iegūtā kristāla četrkantīgā forma labi sakrīt. Papildus tam skaitliskie pētījumi parādīja, ka eksistē nestabili kristāla augšanas režīmi, kas ir būtiski atkarīgi no 3D induktora ģeometrijas. Šāda nestabilitāte tika novērota arī praksē.

Nerotējošu kristālu gadījumā FZ procesā, nav iespējama ATP-līnijas kopīga regulēšana, jo dēļ sistēmas izteiktās nesimetrijas, katrs tās punkts atrodās nevienādos apstākļos. Tādējādi ir iespējami ATP-līnijas punkti, kuros kristāla augšanas process ir nestabils. Skaitliskie pētījumi parādīja, ka stabila nerotējoša kristāla augšana ir iespējama tikai kristāliem ar pietiekami lielu diametru, kuru nosaka konkrētā 3D induktora ģeometrijas īpatnības. Mazākiem kristāliem stabils augšanas process nav iespējams. Iegūtie rezultāti tika apstiprināti arī eksperimentos.



Att. 4.22: FZ kristālu audzēšanas process bez kristāla rotācijas ar speciāli projektētu 3D induktoru [60]



Att. 4.23: Viens no pirmajiem četrkantīgajiem silīcija monokristāliem, kas izaudzēts ar FZ metodi [60]

5 Modeļu realizācija datorprogrammās FZoneT un Shape3D

5.1 Modernās datoprogrammu izstrādes tehnoloģiju pamatelementi

Tā kā promocijas darbā izstrādātie matemātiskie modeļi FZ procesa modelēšanai ir kompleksi, jo sastāv no daudzām sarežģītām komponentēm, tad to realizācijai datorprogrammās ir nepieciešams izmantot modernas datorprogrammu izstrādes tehnoloģijas [dis6]. Mūsdienās datorprogrammu izstrādes industrijā tiek lietota objektorientētā metodoloģija, kuras pamatā ir objekta (*object*) un klases (*class*) jēdzieni. Klase definē noteiktu objektu kopu ar kopīgām īpašībām, kas nepieciešamas konkrētu uzdevumu realizācijai. Organizējot šos objektus speciālā struktūrā tiek nodrošināta datorprogrammas funkcionālā bāze.

Procesu, kad tiek analizēta un projektēta objektu-orientētas datorprogrammas struktūra, sauc par *Object Oriented Analysis and Design* (OOA un OOD [61–65]). OOA un OOD rezultātā tiek specificēta visa datorprogrammas struktūra, kurā par pamatelementiem tiek izmantoti objekti, klases un to savstarpējā mijiedarbība. Objektu-orientētu datorprogrammu izstrādes procesā bieži ir jāsastopas ar projektēšanas problēmām, nereti šo problēmu risināšanā tiek izmantoti - *Design Patterns* ([66, 67]). *Design Patterns* lietošana būtiski atvieglo datorprogrammu izstrādi un uzturēšanu, jo tie ir stingri definēti datorprogrammas struktūras elementi, kurus veido noteiktu klašu un objektu kopums, tādējādi tos var izmantot kā "blokus" kopējās datorprogrammas struktūras konstruēšanā.

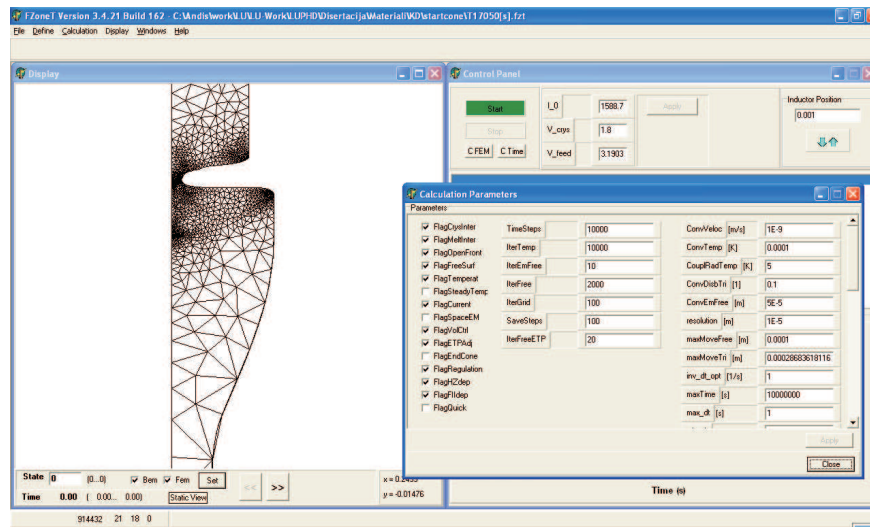
Objektorientētas datorprogrammas realizāciju konkrētajā programmēšanas valodā sauc par *Object Oriented Programming* (OOP, [68–71]). Praksē nav iespējams nodalīt atsevišķi OOA, OOD un OOP izstrādes fāzes, jo datorprogrammas izstrādes process ir iteratīvs, kura gaitā tiek precizēta sistēmas struktūra un realizācija attiecībā pret sākotnēji plānoto.

5.2 Nestacionārā FZ procesa fāzu robežu aprēķina modeļa realizācija datoprogrammā FZoneT

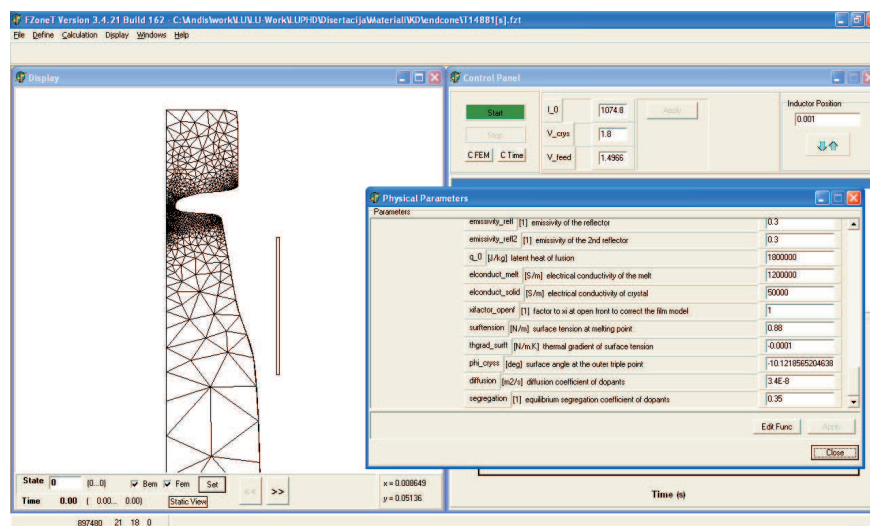
Nestacionārajam FZ procesa fāzu robežu aprēķinu matemātiskajam modelim tika izstrādāta atbilstošā datorprogramma *FZoneT*, kuras realizācijā tika izmantotas modernās OOA, OOD un OOP tehnoloģijas. Datorprogrammā ir netikai realizēti matemātiskie modeļi, bet arī ērta lietotāja grafiskā vide, sistēmas vizualizācija, kā arī iespēja interaktīvi kontrolēt aprēķinu procesu. *FZoneT* tika realizēta datorprogrammu izstrādes vidē *Delphi*. Lai realizētu galīgo

elementu režģa ģenerāciju apgabalā tilpumos datorprogrammā tika adaptēta J. Shewchuk bibliotēka [72].

Nestacionārā FZ procesa modeļa realizācija datorprogrammā *FZoneT* ir redzama att. 5.1, kur ir parādīta sistēma FZ procesa sākuma fāzē, kad kristāla rādiuss laikā palielinās. Savukārt att. 5.2 ir redzama FZ sistēma beigu konusa audzēšanas fāzē, kad pakāpeniski tiek samazināts kristāla rādiuss.



Att. 5.1: Datorprogrammas *FZoneT* lietotāja grafiskā vide, aprēķina piemērs FZ procesa sākuma fāzei (sākuma konuss)

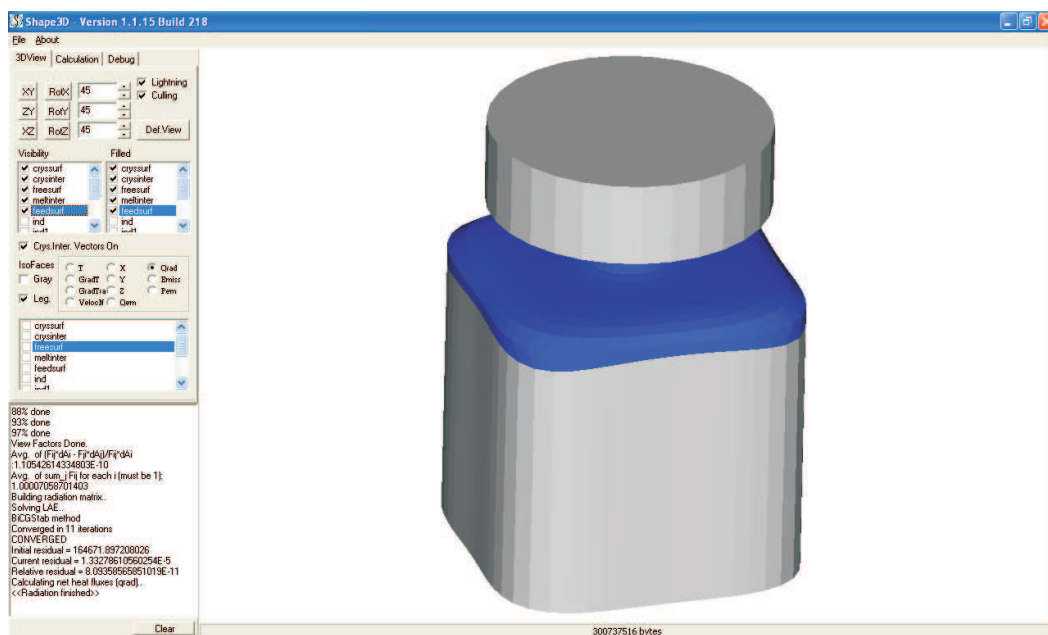


Att. 5.2: Nestacionārā FZ modeļa realizācija datorprogrammā *FZoneT*, lietotāja grafiskā vide, aprēķina piemērs FZ procesa beigu fāzei (beigu konuss)

5.3 Kvazi stacionārā 3D FZ procesa modeļa realizācija datoprogrammā *Shape3D*

Savukārt kausējuma 3D formas aprēķinam kvazi stacionārajā stāvoklī atbilstošie 3D FZ modeļi tika realizēti datoprogrammā *Shape3D*. Arī *Shape3D* izstrādē tika izmantotas OOA, OOD un OOP tehnoloģijas, kas ļāva būtiski atvieglot komplekso matemātisko modeļu komponentu un to savstarpējo mijiedarbību realizāciju. Datorprogramma tika izstrādāta *Delphi* vidē, kas būtiski atviegloja arī ērta grafiskā interfeisa izveidi. Sistēmas ģeometrijas 3D vizualizācijai datoprogrammā *Shape3D* tika izmantotas OpenGL bibliotēkas [73] funkcijas. OpenGL tika izmantots netikai sistēmas 3D vizualizācijas realizācijā, bet arī efektīvā 3D redzamības faktoru aprēķinā, izmantojot datora video kartes iespējas.

Att. 5.3 un 5.4 ilustrē 3D FZ procesa modelēšanu ar datorprogrammu *Shape3D*. Kvazi stacionārs risinājums četrkantīgai silīcija kristāla formai (EM frekvence 3 MHz, induktora strāva 700 A, iekšējais spiediens kausējumā $P_0=175$ Pa) ir redzams att. 5.3, savukārt atbilstošais temperatūras lauka sadalījums uz 3D kristāla virsmas ir redzams att. 5.4.



Att. 5.3: Četrkantīgās kristāla formas modelēšana FZ procesā, izmantojot datorprogrammu *Shape3D*

6 Galvenie rezultāti

Atbilstoši promocijas darba uzdevumiem tika iegūti sekojoši rezultāti:

Pirmkārt, darbā pirmo reizi tika izveidots nestacionārs aksiālisimetriskais FZ procesa modelis [dis1], balstoties uz līdz šim pilnīgāko aksiālisimetrisko kvazi stacionāro fāzu robežu aprēķinu modeli. Tas pavēra iespējas modelēt izkusušās zonas fāzu robežas un kristāla formu kā funkciju laikā, kas nodrošināja procesa pētīšanu ne tikai kvazi stacionārā stāvoklī, bet arī audzēšanas procesa sākuma un beigu fāzēs, kad notiek straujas fāzu robežu izmaiņas laikā. Papildus tam modelis tika verificēts ar vairākiem FZ procesa eksperimentiem [dis2]. Ar modeli iegūtie rezultāti parādīja, ka FZ sistēmas reakcija uz lēcienveidīgām kontroles parametru izmaiņām izraisa līdzīgu reakciju gan skaitliskajā aprēķinā, gan eksperimentā. Turklāt sākuma un beigu konusus modelēšana ļāva pētīt FZ procesa stabilitāti, analizējot leņķi starp kristāla virsmu un kristalizācijas fronti ATP punktā.

Otrkārt, šajā darbā izstrādātais nestacionārais FZ procesa modelis tika papildināts ar procesa regulēšanas modelēšanas iespēju [dis3]. Tas ļāva pētīt ar regulēšanu saistītos aspektus FZ kristālu audzēšanas procesā. Pamatmotivācija šiem pētījumiem ir regulēšanas lielā nozīme rūpniecībā, jo tā nodrošina autonomu kristāla audzēšanas procesu, kurā, atkarībā no sistēmas stāvokļa, automātiski tiek mainīti vadības parametri. Izmantojot izstrādāto skaitlisko modeli un rūpnieciskajiem procesiem raksturīgās PID kontrolieru parametru vērtības tika reproducētas rūpnieciskās kristālu formas, kas ļāva pētīt nestacionārā procesa aspektus.

Treškārt, promocijas darbā pirmo reizi tika izstrādāts kvazi stacionārs 3D FZ procesa modelis kausējuma un kristāla formas aprēķiniem [dis4, dis5]. Šis modelis ļāva modelēt FZ sistēmas 3D īpatnību ietekmi uz izkusušās zonas fāzu robežu 3D formu. Modelis tika verificēts un izmantots četrkantīgu FZ silīcija kristālu audzēšanas procesa analīzē. Skaitliskie aprēķini parādīja, ka iegūtās četrkantīgās kristāla formas labi sakrīt ar eksperimentu. Papildus tam skaitliskie pētījumi parādīja, ka eksistē nestabili kristāla augšanas režīmi, kas ir būtiski atkarīgi no 3D induktora ģeometrijas. Šāda nestabilitāte tika novērota arī praksē. Turklāt skaitliskie pētījumi parādīja, ka stabila nerotējoša kristāla augšana ir iespējama tikai kristāliem ar pietiekami lielu diametru, kuru nosaka konkrētā 3D induktora ģeometrijas īpatnības. Mazākiem kristāliem stabils augšanas process nav iespējams.

Ceturtkārt, darbā izstrādātie modeļi, izmantojot skaitliskās metodes - pamatā galīgo elementu un robeželementu metodes, tika realizēti specializētās datorprogrammās [dis6]. Izmantojot modernās datorprogrammu izstrādes tehnoloģijas, tika realizēts nestacionārais FZ modelis datorprogrammā *FZoneT* un 3D kvazi stacionārais modelis datorprogrammā *Shape3D*. Papildus matemātisko modeļu realizācijai abām programmām tika izstrādāta arī

ērtā lietotāja grafiskā vide, kas nodrošināja interaktīvu aprēķinu moduļu vadību, 2D/3D datu vizualizāciju, kā arī citas funkcijas, kas kopumā atviegloja pētījumu veikšanu.

Literatūra

- [1] S.M. SZE. *Semiconductor devices, physics and technology*. John Wiley & Sons, Inc., (2002).
- [2] W. ZULEHNER. *Material Science and Engineering*, Vol. B73 (2000), pp. 7.
- [3] EDITED BY G.MÜLLER, J. METOIS, P.RUDOLPH. *Crystal Growth - From Fundamentals to Technology*. ELSEVIER, (2004).
- [4] W. KELLER, A. MÜHLBAUER. *Floating-Zone Silicon*. Dekker, (1981)
- [5] J. BOHM, A. LÜDGE, W. SCHRÖDER. *Handbook of Crystal Growth, Bulk crystal growth basic techniques*, edited by D. T. J. Hurle, Vol. 2a (1994), pp. 215.
- [6] A. MÜHLBAUER, W. ERDMANN, W. KELLER. *J. Crystal Growth*, Vol. 64 (1983), pp. 529.
- [7] K.H. LIE, J.S. WALKER, D.N. RIAHI. *J. Crystal Growth*, 100 (1990) 450.
- [8] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, A. JAKOWITSCH, J. VIRBULIS. *Latvian J. Phys and Techn.*, Vol. 4 (1992), pp. 5.
- [9] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, A. JAKOWITSCH, J. VIRBULIS. *Archiv für Elektrotechnik*, Vol. 76 (1993), pp. 161.
- [10] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, J. VIRBULIS, A. LÜDGE, H. RIEMANN. *J. Crystal Growth*, Vol. 151 (1995), pp. 66.
- [11] J. VIRBULIS. *PhD thesis, Faculty of Physics and Mathematics, University of Latvia, Rīga* (1997).
- [12] G. RAMING. *PhD. thesis, Institut für Elektrowärme, Universität Hannover*, (2000).
- [13] H. RIEMANN, A. LÜDGE, K. BÖTTCHER, H.- J. ROST, B. HALLMANN, W. SCHRÖDER, W. HENSEL, B. SCHLEUSENER. *J. Electrochem. Soc.*, 142 (3) (1995) 1007.
- [14] S. TOGAWA, Y. NISHI, M. KOBAYASHI. *J. Electrochem. Soc. Proc.*, 98-13 (1998) 67.
- [15] Z. GUO, S. MARUYAMA, S. TOGAWA. *J. Crystal Growth*, 194 (1998) 321.
- [16] C. W. LAN, Y. J. KIM, S. KOU. *J. Crystal Growth*, Vol. 104 (1990), pp. 801.
- [17] C. W. LAN, S. KOU. *J. Crystal Growth*, Vol. 108 (1991), pp. 351.

- [18] C. W. LAN, S. KOU. *J. Crystal Growth*, Vol. 114 (1991), pp. 517.
- [19] C. W. LAN, S. KOU. *J. Crystal Growth*, Vol. 119 (1992), pp. 281.
- [20] C. W. LAN, S. KOU. *J. Crystal Growth*, Vol. 132 (1993), pp. 578.
- [21] C. W. LAN. *J. Crystal Growth*, Vol. 169 (1996), pp. 269.
- [22] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, A. MÜHLBAUER. *J. Crystal Growth*, 255 (2003) 227.
- [23] SMITH A.C. *Automated Continuous Process Control*. John Wiley & Sons, Inc., NewYork, (2002).
- [24] A. MUIŽNIEKS, E. WESTPHAL, A. MÜHLBAUER. *Elektrowarme Int.*, 50 (B3)(1992) B286.
- [25] E. WESTPHAL, A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS. *Electrical Eng.*, 79 (4)(1996) 251.
- [26] F. DUPRET, P. NICODEME, Y. RYCKMANS, P. WOUTERS, M.J. CROCHET. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 33 (9)(1990) 1849.
- [27] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, G. RAMING, A. MÜHLBAUER, L. BULIGINS. *International Colloquium "Modelling of Material Processing"*, Rīga (1999) 30.
- [28] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, L. BULIGINS, G. RAMING, A. MÜHLBAUER. *Magneto hydrodynamics*, 35 (3) (1999) 223.
- [29] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, L. BULIGINS, G. RAMING, A. MÜHLBAUER, A. LÜDGE, H. RIEMANN. *J. Crystal Growth*, 216 (2000) 204.
- [30] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, G. RAMING, G. RATNIEKS. *International Colloquium "Modelling of Saving Resources"*, Rīga, (2001) 17.
- [31] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, G. RATNIEKS, A. KRAUZE, G. RAMING, TH. WETZEL. *Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engeneering*, 22 (2003) 123.
- [32] A. MÜHLBAUER, A. MUIŽNIEKS, G. RATNIEKS, A. KRAUZE, G. RAMING, TH. WETZEL. *Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engeneering*, 22 (2003) 158.
- [33] A. MUHELBAUER, A. MUIZNIEKS, H.-J. LESSMANN. *IEEE Transactions on Magnetics*, 29 (1993), No.4, pp. 1566-1569.
- [34] A. MUHELBAUER, A. MUIZNIEKS, H.-J. LESSMANN. *Archiv fuer Elektrotechnik*, 77 (1994), S. 157-168.
- [35] G. RATNIEKS, A. MUIŽNIEKS, A. MÜHLBAUER, G. RAMING. *J. Crystal Growth*, 230 (2001) 48.
- [36] C. W. LAN, M. C. LIANG. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol 40 (1997), 621.

- [37] C. W. LAN, C. H. TSAI. *J. Crystal Growth*, Vol 173 (1997), 561.
- [38] C. W. LAN, M. C. LIANG. *J. Crystal Growth*, Vol 208 (2000), 327.
- [39] C. W. LAN, J. H. CHIAN. *J. Crystal Growth*, Vol 230 (2001), 172.
- [40] C.W. LAN. *J. Crystal Growth*, Vol 247 (2003), 597.
- [41] C. W. LAN, B. C. YEH. *J. Crystal Growth*, Vol 262 (2004), 59.
- [42] DAVID S. WATKINS. *Fundamentals of Matrix Computations (Second Edition)*. John Wiley & Sons, (2002).
- [43] G. H. GOLUB, C. F. VAN LOAN. *Matrix Computations (Third Edition)*. The Johns Hopkins University Press, (1996).
- [44] G. E. FORSYTHE, C. B. MOLER. *Computer Solution Of Linear Algebraic Systems*. PRENTICE-HALL, INC., (1967).
- [45] A. GEORGE. *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems*. PRENTICE-HALL, INC., (1981).
- [46] FRANK P. INCROPERA, DAVID P. DEWITT. *Introduction to Heat Transfer (Third Edition)*. John Wiley & Sons, (1996).
- [47] M.F.COHEN, J.R.WALLACE. *Radiosity and Realistic Image Synthesis*. Academic Press, (1993).
- [48] SZIRMAY-KALOS LASZLO: RADIOSITY METHOD. <http://www.fsz.bme.hu/szirmay/radiosit/radiosit.html>.
- [49] C. A. BREBBIA. *Boundary Element Techniques*. Springer-Verlag, (1984).
- [50] JOHN P. WOLF. *The Scaled Boundary Finite Element Method*. John Wiley & Sons Inc., (2003).
- [51] F. HARTMANN. *Introduction to Boundary Elements*. Springer-Verlag, (1989).
- [52] BIOENGINEERING INSTITUTE, THE UNIVERSITY OF AUCKLAND, NEW ZEALAND. <http://www.bioeng.auckland.ac.nz/cmmiss/fembemnotes/fembemnotes.pdf>.
- [53] G. STRANG, G.J. FIX. *An Analysis of the Finite Element Method*. Prentice-Hall Inc., (1973)
- [54] P.P. SILVESTER, R.L. FERRARI. *Finite Elements For Electrical Engineers*. Cambridge University Press, (1986)
- [55] O. C. ZIENKIEWICZ. *The Finite Element Method In Engineering Science*. MCGRAW-HILL, (1971)
- [56] O. C. ZIENKIEWICZ, R. L. TAYLOR. *The Finite Element Method (Fifth edition)*.

- Butterworth-Heinemann*, (2000)
- [57] O. C. ZIENKIEWICZ, K. MORGAN. *Finite Elements And Approximation*. John Wiley & Sons, (1983)
- [58] L. M. SMITH, D. V. GRIFFITHS. *Programming the Finite Element Method*. John Wiley & Sons, (1988)
- [59] D. V. HUTTON. *Fundamentals of Finite Element Analysis*. McGraw Hill, (2004)
- [60] *Annual Report 2004/05, Institute for Crystal Growth, Berlin, Germany*. www.ikz-berlin.de.
- [61] G. BOOCH. *Object-Oriented Analysis and Design with Applications (second edition)*. Addison-Wesley, (1998).
- [62] S. E. DONALDSON, S. G. SIEGEL. *Successful Software Development (second edition)*. Prentice Hall PTR, (2000).
- [63] A. COCKBURN. *Agile Software Development*. Addison-Wesley, (2000).
- [64] M. FELLEISEN, R. B. FINDLER, M. FLATT, S. KRISHNAMURTHI. *How to Design Programs*. The MIT Press Cambridge, (2000).
- [65] R. MALVEAU, T. J. MOWBRAY. *Architect Bootcamp*. Prentice Hall PTR, (2000).
- [66] E. GAMMA, R. HELM, R. JOHNSON, J. VLISSIDES. *Design Patterns: Elements of Reusable Object-Oriented Software*. Addison-Wesley, (1995).
- [67] A. SHALLOWAY, J. R. TROTT. *Design Patterns Explained: A New Perspective on Object-Oriented Design*, (2001).
- [68] B. STROUSTRUP. *The C++ Programming Language (third edition)*. Addison-Wesley, (1999).
- [69] J. LIBERTY. *Beginning Object-oriented Analysis and Design with C++*, (1998).
- [70] B. R. PREISS. *Data Structures and Algorithms with Object-Oriented Design Patterns in C++*, (1998).
- [71] A. ALEXANDRESCU. *Modern C++ Design: Generic Programming and Design Patterns Applied*. Addison-Wesley, (2001).
- [72] JONATHAN RICHARD SHEWCHUK, UNIVERSITY OF CALIFORNIA AT BERKELEY. *Triangle - A Two-Dimensional Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator*.
- [73] OPENGL. <http://www.opengl.org/>.

Pateicības

Vēlos izteikt sirsnīgu pateicību asoc. prof. Andrim Muižniekam par promocijas darba izstrādes vadīšanu, kā arī par sagādātajām iespējām stažēties tādās institūcijās kā: *Institute for Crystal Growth* (ICG, Berlīne, Vācija), *Institut für Elektrothermische Processstechnik* (Hanovere, Vācija) un *Siltronic AG* (kristālu audzēšanas rūpnīca Burghauzenā, Vācija). Tā rezultātā tika iegūta vērtīga pieredze silīcija kristālu audzēšanas tematikā, kas deva būtisku ieguldījumu izstrādājot atbilstošos matemātiskos modeļus šajā darbā.

Esmu pateicīgs arī citiem cilvēkiem, kas atbalstījuši mani šī darba tapšanā:

G. Ratniekam (*Siltronic AG*) par komunikāciju, izstrādājot un pilnveidojot FZ procesa nestacionāro modeli.

Dr. H. Riemann un Dr. A. Lüdge (*Institute for Crystal Growth*) par iepazīstināšanu ar reālo FZ procesu un par noderīgu informāciju izstrādājot 3D kvazi stacionāro FZ procesa modeli.

Kolēģiem no asoc. prof. A. Muižnieka vadītās projektu grupas *Modelling in Crystal Growth* (Latvijas Universitāte) A. Krauzem, K. Lācim un K. Dadzim par koleģiālo atbalstu un sniegtajiem padomiem strādājot pie šī promocijas darba.

Izsaku pateicību arī Latvijas Universitātes Fizikas Institutam (Salaspils) par iespēju piedalīties projektā: *Development of Institute of Physics of University of Latvia for European centre of MagnetoHydroDynamics research*, (2003-2005) realizācijā. Pateicos arī eiropas sociālajam un reģionālās attīstības fondiem par finansiālo atbalstu, kuru saņēmu pietaloties sekojošos projektos: "Doktorantu un jauno zinātnieku pētniecības darba atbalsts LU" un "Nano-, elektronikas un kompozītmateriālu un tehnoloģiju matemātiskā modelēšana".

Nobeigumā izsaku vissirsnīgāko pateicību savai sieviņai Ingai Rudevičai, kura ikdienā mani ir atbalstījusi un tādējādi būtiski palīdzējusi šī darba tapšanā.