

LATVIJAS UNIVERSITĀTE
FIZIKAS UN MATEMĀTIKAS FAKULTĀTE
FIZIKAS NODAĻA

PELDOŠĀS ZONAS SILĪCIJA
MONOKRISTĀLU AUDZĒŠANAS
PROCESA TRĪSDIMENSIONĀLO
ASPEKTU MATEMĀTISKĀ
MODELĒŠANA

BAKALAURA DARBS

Autors:

Kārlis Janisels,
stud. apl. kj09052

Darba vadītājs:

Asoc. prof., Dr. Phys.
Andris Muižnieks

Rīga 2012

Anotācija

Darbā ar skaitlisko aprēķinu palīdzību tiek pētīta kausējuma kustība un piemaisījumu pārnese silīcija monokristālu audzēšanas ar peldošās zonas metodi procesā. Izmantojot iepriekš izstrādātas programmas **FZone** un **FZsiFOAM**, kas ir veidota uz atvērtā koda bibliotēkas **OpenFOAM** bāzes, pētīta induktora strāvas un kausējuma formas ietekme uz īpatnējās pretestības radiālo sadalījumu izaudzētajā kristālā. Ir parādīta 3D aspektu precīzākas matemātiskās modelēšanas ietekme uz aprēķinu rezultātiem. Darbā arī tiek pētītas plūsmas īpatnības nesimetriskas kausējuma formas gadījumā, tiek sniegts HD aprēķina precizitātes novērtējums un veikts aktuāls salīdzinājums ar eksperimentu (*Institute of Crystal Growth*, Berlīne).

Atslēgvārdi: silīcija monokristāli, peldošās zonas metode, matemātiskā modelēšana, nespīējama šķidrums hidrodinamika, masas pārneses modelēšana.

Annotation

In this work using numerical calculations melt motion in the industrial floating zone silicon single crystal growth is investigated. Using previously developed programs **FZone** and **FZsiFOAM** which is based on open source library **OpenFOAM** influence of inductor current and shape of the molten zone on radial resistivity distribution are investigated. The influence of more precise mathematical modeling of 3D aspects of process on calculation results is shown. Within the work additionally mathematical modeling of nonsymmetric shape of the molten zone is investigated, the precision of HD calculation is estimated and actual comparison with experimental data from *Institute of Crystal Growth*, Berlin is carried out.

Keywords: Silicon mono crystal, floating zone, mathematical modeling, incompressible liquid hydrodynamics, modeling of mass transport.

SATURS

Apzīmējumu saraksts	1
1 Ievads	2
2 Literatūras apskats	3
2.1 Fāzu robežu aprēķins	3
2.2 3D AF EM lauks	3
2.3 HD aprēķins	4
2.4 Darba mērķi un izvirzītie uzdevumi	4
3 Matemātiskais modelis	6
3.1 Programmas FZone temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķina matemātiskais modelis	7
3.1.1 Siltuma pārnese modelēšana	7
3.1.2 Fāzu robežu pārvietojums	8
3.1.3 Vispārīgs aprēķina algoritms	11
3.2 Augstfrekvences aprēķins	12
3.2.1 2D AF EM lauka aprēķina galvenās idejas	12
3.2.2 3D AF EM lauka aprēķina matemātiskais modelis	13
3.3 3D HD, ātruma, temperatūras lauka un masas pārnese aprēķina matemātiskais modelis	14
3.3.1 Nestacionāra kausējuma kustība	15
3.3.2 Temperatūras lauks	16
3.3.3 Masas pārnese un segregācijas procesa modelēšana	17
3.3.4 Radiālais pretestības sadalījums izaudzētajā kristālā	17
4 Apskatāmās <i>Institute of Crystal Growth</i> sistēmas	18
5 Detalizēts viena raksturīga aprēķina piemērs	21
5.1 FZone fāzu robežu aprēķins	21
5.1.1 Induktora virsmas režģa izveide 3D AF EM lauka aprēķinam	21
5.1.2 2D fāzu robežu sākuma ģeometrijas izveidošana temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķinam	23
5.1.3 FZone aprēķina veikšana	23
5.1.4 Rezultātu vizualizācija	24

5.2	Silīcija kausējuma HD aprēķins	26
5.2.1	Silīcija kausējuma 3D tilpuma režģa izveide HD aprēķinam	26
5.2.2	Sistēmas 3D GEM režģa izveide AF EM lauka aprēķinam	28
5.2.3	3D AF EM aprēķins	28
5.2.4	3D HD aprēķinu veikšana	30
5.2.5	Rezultātu vizualizācija un procesa raksturīgāko pazīmju analīze	31
6	Dažādu faktoru ietekme uz kausējuma HD un uz radiālo pretestības sadalījumu kristālā	41
6.1	FZone 2D un 3D AF EM lauka aprēķina ietekme	41
6.2	Induktora strāvas vērtības ietekme	43
6.3	Kausējuma formas ietekme	44
7	Plūsmas modelēšana nesimetriskā kausējuma formā	47
8	HD aprēķina skaitliskās precizitātes novērtējums	51
9	Salīdzinājums ar eksperimentu	55
10	Secinājumi	60
	Izmantotā literatūra un avoti	61
	Pielikums	63
	Autora dalība konferencēs	63
	Autora publikācijas	63

APZĪMĒJUMU SARAKSTS

Šajā darbā parādās ar peldošās zonas metodi saistīti specifiski apzīmējumi un fizikālie lielumi:

Si	Silīcijs
PZ	peldošās zonas
AF	augstfrekvences
EM	elektromagnētiskais
HD	hidrodinamika
GEM	galīgo elementu metode
REM	robeželementu metode
ATP	ārējais trīskāršais punkts
ITP	iekšējais trīskāršais punkts

R_C	monokristāla rādiuss
R_F	izejmateriāla stieņa rādiuss
V_C	monokristāla vilkšanas ātrums
V_F	izejmateriāla stieņa stumšanas ātrums
H_Z	zonas augstums
H_C	kristalizācijas frontes dziļums
ω	rotācijas ātrums

T	temperatūra
I	strāvas stiprums
f	frekvence
j	lineārais strāvas blīvums
q	siltuma plūsmas blīvums
q^{EM}	inducētās jaudas virsmas blīvums
p^{EM}	elektromagnētiskais spiediens

1 IEVADS

Kopš pagājušā gadsimta vidus, kad elektronikā sāka izmantot pusvadītāju ierīces, aizvien ir audzis pieprasījums pēc augstas tīrības un kvalitātes silīcija monokristāliem. Mūsdienās gandrīz visa elektronika tiek balstīta uz silīcija pusvadītāju ierīcēm - tranzistoriem, diodēm utt.

Silīcija monokristāli industriāli galvenokārt tiek iegūti ar Čerhalska (CZ) un peldošās zonas (PZ) metodi. Aizvien attīstoties mikroelektronikai vislielākais silīcija monokristālu apgrozījums tiek iegūts ar CZ metodi. Tā kā šīs metodes realizācijai tiek izmantots kvarca tīģelis, kurā atrodas kausējums, ar to nav iespējams sasniegt pietiekami augstu tīrības pakāpi, kas nepieciešama jaudas elektronikā.

1952. gadā radusies PZ metode sniedz iespēju iegūt augstas tīrības silīcija monokristālus. Polikristālas stienis tiek lēnām bīdīts uz leju un augstfrekvences maiņstrāvas induktors inducējot stienī virpuļstrāvas kausē silīciju. Polikristāla stienim no apakšas pietuvina monokristāla stienīti, līdz nokausētā pile tiek "noķerta" ar silīcija monokristālu. Palēnām kontrolējot procesu tiek palielināts kristāla diametrs. Šī procesa galvenā priekšrocība ir tā, ka nav nepieciešams izmantot speciālu trauku silīcija kausējumam, proti, kristāls pats darbojas kā trauks.

Attītoties elektronikas industrijai, ir augušas prasības pēc silīcija monokristālu kvalitātes. Tiek audzēti aizvien lielāka diametra kristāli, kas atvieglo to tālāku apstrādi. 80-jos gados industriāli ar PZ metodi spēja izaudzēt kristālu ar diametru 100mm, bet šī gadsimta sākumā jau iegūts kristāls ar diametru 200mm. Aizvien vairāk palielinot iegūstamo kristāla diametru, lielākas problēmas sagādā nodrošināt kristāla stabilu augšanu, nepieciešams izvairīties no dislokācijām kristālā un nodrošināt pēc iespējas homogēnāku īpatnējās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā.

PZ procesa eksperimenti ir ļoti dārgi un spēj ilgt pat vairākas dienas (raksturīgie augšanas ātrumi ir 1,8-3,4 mm/min), tāpēc aizvien lielāko lomu ieņem procesa matemātiskā modelēšana. Iespējams pētīt procesa īpatnības neveicot dārgus eksperimentus un iegūt priekšstatus par procesa īpatnībām, kas eksperimentāli nav nosakāmas, piemēram, ātruma lauks kausējumā.

Attīstoties pieejamajiem datorresursiem aizvien vairāk aplūko procesa 3D dabu, izvairoties no 2D tuvinājumiem. Šis darbs ir veltīts PZ procesa matemātiskajai modelēšanai, pētot 3D aspektu ietekmi uz procesa matemātisko modelēšanu.

2 LITERATŪRAS APSKATS

2.1 Fāzu robežu aprēķins

Matemātiskās modelēšanas pielietošana PZ procesa izpētē tiek izmantota jau gandrīz 30 gadus. Pirmie izstrādātie modeļi ir stipri vienkāršoti un visbiežāk kā ieejas parametrs tiek pieprasīti arī eksperimentālie dati, piemēram, fāzu robežu ģeometrija. Darbā [1] pie fiksētas ģeometrijas tiek modelēta elektrodinamiskā konvekcija silīcija kausējumā, izmantojot vienkāršotus Navjē-Stoksa vienādojumus. Šis ir viens no pirmajiem nopientajiem darbiem, kur parādītos PZ procesa ar adatas-acs induktora matemātiskā modelēšana.

90-to gadu sākumā veikti pirmie mēģinājumi skaitliski noteikt fāzu robežu formu. Darbā [2] izveidots iteratīvs brīvās virsmas aprēķina modelis, kur tiek ņemts vērā indukcijas spoles radītais EM spiediens, hidrostatiskais spiediens un marangoni spēki uz brīvās virsmas. Jau daudz precīzāks fāzu robežu apraksts parādās rakstā [3], kur fāzu robežas tiek pētītas, ņemot vērā siltuma pārnesi un izkusušā silīcija kausējuma kustību. Darbā parādās pirmie mēģinājumi novērtēt radiālās pretestības sadalījumu.

Palenām attīstoties PZ procesa matemātiskajai modelēšanai, vērā tiek ņemtas aizvien vairāk specifiskas nianšes. Tā piemēram, darbā [4] vērā ņemta arī radiācijas izstarošana gan no silīcija cietajām virsmām, gan no brīvās virsmas. Rakstā [5] aprakstītais modelis 2D aksiālsimetriskā tuvinājumā rēķina fāzu robežas starp visiem trīs agregātstāvokļiem, ņemot vērā induktora inducēto siltumu un radiācijas apmaiņu. Iteratīvā pieejā tiek rēķināts temperatūras lauks visā sistēmā un fāzu robežas.

2.2 3D AF EM lauks

Visi iepriekš aplūkoti literatūras avoti ir veltīti 2D aksiālsimetrisku modeļu aprakstam, bet adatas-acs PZ procesam galvenās un papildspaudu dēļ piemīt arī nesimetriskas īpašības.

Rakstā [6] pirmo reizi aplūkots EM lauka aprēķins PZ sistēmai, kurš veikts ņemot vērā induktora 3D aprakstu. Aprēķins veicams pie fiksētas silīcija ģeometrijas, tiek iegūts strāvas līniju sadalījums uz silīcija virsmām, lineārās strāvas blīvuma sadalījums un inducētās jaudas sadalījums.

3D EM lauka aprēķins patērēja milzīgu datora resursus. Attīstoties pieejamajiem datoru resursiem, 3D EM lauka aprēķina nozīme pieauga, konferencē [7] prezentēti fāzu

robežu aprēķini ar programmu **FZone**, kur fāzu robežas rēķinātas 2D aksiālsimetriski, bet AF EM lauka aprēķinam izmantota 3D aprēķina pieja. Programmā iestrādātais modelis rotē fāzu robežas, tiek veikts AF EM lauka aprēķins trīs dimensijās un iegūtās inducētās jaudas vērtības tiek azimutāli vidējotas.

2.3 HD aprēķins

Gadsimta sākumā parādās pirmie mēģinājumi modelēt kausējuma plūsmu. Darbā [8] veikti 2D plūsmas kustības aprēķini, pētīta to ietekme uz fāzu robežu formu.

Pirmie 3D HD aprēķini pie fiksētas kausējuma formas parādās rakstā [9]. Prezentēti no laika neatkarīgi stacionāri kausējuma HD aprēķini ar paketi **CFD-ACE**, vērā ņemts rotējošs magnētiskais lauks, pētīta tā ietekme uz radiālās pretestības sadalījumiem. Mazliet vēlāk rakstā [10] ar šo paketi veikti nestacionāri HD aprēķini kausējumā, kur vērā tiek ņemtas hidrodinamiskās svārstības un analizēta to ietekme uz atrisinājumu.

Rakstā [11], izmantojot uz atvērtā koda bibliotēkas **OpenFOAM** bāzes izveidotu solveri *FZsiFOAM*, tiek analizēts segregācijas process uz kristalizācijas frontes. Iegūtie rezultāti tiek salīdzināti ar paketes **CFD-ACE** aprēķiniem. Vēlāk uz **OpenFOAM** bāzes veidotais solveris papildināts un rakstā [12] pētīta līdzstrāvas un maiņstrāvas ārējo magnētisko lauku ietekme uz plūsmas uzvedību un radiālās pretestības sadalījumiem izaudzētajā kristālā.

Ārējo magnētisko lauku ietekme uz kausējuma HD detalizētāk pētīta Kaspara Lāča disertācijā [13], kurā attēloti aprēķinu rezultāti ar abiem izstrādātajiem modeļiem, salīdzināšanas nolūkos veikti arī 3D HD aprēķini ar komercionālo paketi **FLUENT**. Disertācijas ietvaros kausējuma formas iegūtas, rēķinot fāzu robežas ar programmu **FZone**, izmantojot 2D AF EM lauka aprēķina pieeju, bet AF induktora inducētā strāvas sadalījuma 3D raksturs ņemts vērā tikai 3D HD aprēķinos.

2.4 Darba mērķi un izvirzītie uzdevumi

Pēdējos gados PZ sistēmu modelēšanai izstrādātais programmu komplekss ir piedzīvojis vairākus uzlabojumus, tai skaitā AF EM lauka aprēķina integrācija fāzu robežu aprēķināšanai paredzātajā programmā **FZone**. Ir nepieciešams uzkrāt pieredzi darbam ar šo kompleksu, veikt jaunas studijas procesa fizikālo īpatnību labākai izpratnei, aktualizēt dokumentāciju, veikt aktuālu salīdzinājumu ar eksperimentu.

Lai izpildītu darbā izvirzītos mērķus, izvirzīti sekojoši darba uzdevumi:

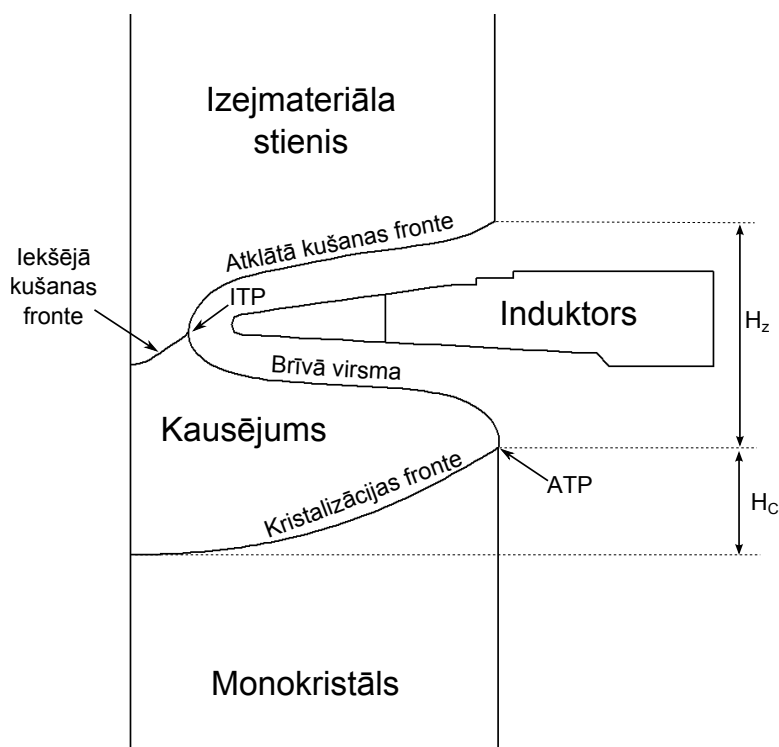
1. Iepazīties ar programmas **FZone** 2D aksiālsimetriskā temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķina ar iekļautu 3D AF EM aprēķina moduli un uz atvērtā koda bibliotēkas

OpenFOAM bāzes izveidotā solvera *FZsiFOAM*, kas paredzēts silīcija kausējuma HD, ātruma un temperatūras lauku ar iekļautu masas pārnesei modelēšanai, matemātisko modeli;

2. apgūt nepieciešamās iemaņas, lai spētu patstāvīgi veikt pilnu procesa modelēšanas gaitu, izveidot silīcija kausējuma plūsmas aprēķina lietotāja manuāli;
3. pielietot apgūtās iemaņas, lai patstāvīgi izpētītu vienu *Institute of Crystal Growth* PZ procesa sistēmu, izmantojot FZone fāzu robežu aprēķinu ar integrētu 3D AF EM lauka aprēķinu;
4. veikt skaitliskās studijas, lai novērtētu induktora strāvas un kausējuma formas ietekmi uz pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā, izpētīt 2D un 3D AF EM lauka aprēķina pieejas programmā FZone ietekmi uz pretestības sadalījumu kristālā;
5. novērtēt HD aprēķinu skaitlisko precizitāti;
6. izmantojot aktuālo aprēķinu programmu kompleksu, veikt skaitlisko aprēķinu salīdzinājumu ar eksperimentu, kas veikts *Institute of Crystal Growth*, un analizēt sakritības līmeni.

3 MATEMĀTISKAIS MODELIS

Bakalaura darba izstrādē, neņemot vērā nelielas palīdzprogrammas, izmantoti divi spēcīgi matemātiskās modelēšanas instrumenti: specializētā programma FZone silīcija fāzu robežu apreķinam un uz atvērta koda bibliotēkas OpenFOAM bāzes izveidots solvers fziFOAM, kas paredzēts hidrodinamikas un piemaisījumu koncentrācijas aprēķinam izkusušajā zonā.



Attēls 3.1. PZ sistēmas galvenie apzīmējumi 2D aksiālsimetriskā šķēlumā.

Programmas FZone matemātiskais modelis jau plaši aprakstīts publikācijā [5], kā arī bakalaura [14, 15] darbos, tāpēc šajā darbā fāzu robežu aprēķina matemātiskā modeļa apskats tiks sniegts tikai konspektīvā izklāstā.

Darba centrālais apskates objekts ir 3D plūsmas uzvedība silīcija kausējumā, tāpēc 3D AF EM lauka un hidrodinamikas aprēķinu matemātiskā modeļa aprakstam tiks pievērsta lielāka uzmanība.

Attēlā 3.1 ieskicēti galvenie matemātiskā modeļa izklāstā lietotie PZ procesu raksturojošie apzīmējumi.

3.1 Programmas FZone temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķina matemātiskais modelis

Reālā eksperimentā PZ process ir laikā mainīgs, bet industrijā izmantojamā izaudzētā monokristāla daļa veidojas laikā, kad process ir kļuvis stacionārs un kristāls aug vienmērīgi. Aprēķinos tiek izmantots kvazistacionārs sistēmas modelis; fāzu robežas tiek rēķinātas ar iteratīvu pieeju stacionāram stāvoklim induktora atskaites sistēmā, ieviešot fiktīvu laika soli.

Tabulā 3.1 uzskaitīti galvenie procesu raksturojošie silīcija fizikālie parametri, to apzīmējumi un vērtības, kas izmantotas FZone aprēķinos. Turpmākā izklāstā tiks izskaidroti tikai lielumi, kas nav atrodamā tabulā, bet jau norādītie apzīmējumi papildus netiks atšifrēti.

3.1.1 Siltuma pārnese modeļēšana

Tabula 3.1. Silīcija fizikālās īpašības dažādiem agregātstāvokļiem [16].

Silīcija fizikālais parametrs, mērvienība	Ciets (s)	Šķidr (m)
Blīvums $\rho, \frac{kg}{m^3}$	2329	2580
Īpatnējā siltumietilpība $c_p, \frac{J}{kg \cdot K}$	1032	960
Elektrovadītspēja $\sigma, \frac{S}{m}$	$5,0 \cdot 10^4$	$1,2 \cdot 10^6$
Siltumvadīšanas koeficients $\lambda, \frac{W}{m \cdot K}$	22	67
Īpatnējais kušanas siltums $q_0, \frac{J}{kg}$	$1,8 \cdot 10^6$	
Kušanas/kristalizācijas temperatūra T_0, K	1687	

Temperatūras lauks tiek rēķināts visās silīcija daļās - gan polikristāla un monokristāla stieņos, kas ir cietā agregātstāvoklī, gan kausējumā. Aplūko siltuma pārnese vienādojumu:

$$\rho_s c_p \left(u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (3.1)$$

kur ρ_s, c_p ir konstanti lielumi, kuru vērtības var atrast tabulā 3.1. Silīcija siltumvadīšanas koeficientu λ izsaka empīriskā izteiksme:

$$\lambda(T) = \lambda_s(T_0) \cdot \left(4,50 - 7,22 \cdot \frac{T}{T_0} + 3,73 \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 \right) \quad (3.2)$$

Vienādojumu (3.1) uzdod kopā ar robežnosacījumiem:

- $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ uz rotācijas ass;
- $T = T_0$ uz kušanas un kristalizācijas frontēm;

- $\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial n} = q^{EM} - q^{rad}$ uz visām pārējām virsmām,

kur q^{EM} ir augstfrekvences induktora inducētais siltuma jaudas virsmas blīvums, bet q^{rad} ir siltumstarojuma veidā izstarotais siltuma plūsmas blīvums.

Siltuma jaudas virsmas blīvumu aprēķina, zinot strāvas lineāro blīvumu j

$$q^{EM} = j^2 \sqrt{\frac{\pi \mu_0 f}{\sigma}}, \quad (3.3)$$

kas iegūts no augstfrekvences EM lauka aprēķina. Formulas (3.3) detalizētāks izklāsts atrodams nodaļā 3.2.

Radiācijas siltuma plūsmas blīvumu q^{rad} aprēķina iteratīvā pieejā, pielietojot redzamības faktorus (angl. *view factors*)

$$\dots \rightarrow T_i \rightarrow q_i^{rad} \rightarrow T_{i+1} \rightarrow q_{i+1}^{rad} \rightarrow \dots$$

Precīzāks radiācijas uzdevuma apraksts atrodams [16].

3.1.2 Fāžu robežu pārvietojums

PZ sistēmā pastāv gan ciets, gan šķidr, gan gāzveida stāvoklis un fāzu pārejas dažādos sistēmas reģionos notiek starp dažādiem agregātstāvokļiem (skat.att.3.2). Tāpēc fāžu robežu aprēķinam izdala trīs dažādus modeļus.

Uz kušanas un kristalizācijas frontes notiek fāzu pāreja no cieta uz šķidru un šķidra uz cietu silīciju, tāpēc abas frontes modelē līdzīgi. Tiek rakstīts siltuma balansa vienādojums apskatāmajai fronteī

$$V_n \rho_s q_0 = \lambda_s \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_s - \lambda_m \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_m, \quad (3.4)$$

kur pirmais loceklis ir latentā (kristalizācijas) siltuma daudzuma plūsma, bet vienādojuma labā puse starpība starp siltuma daudzumiem, kas izplūst no kausējuma un ieplūst cietajā silīcija daļā. Temperatūras atvasinājumi apskatīti uz atbilstošās frontes robežas, konstantes ρ_s , q_0 , λ_s , λ_m vērtības atrodamas tabulā 3.1. No šī vienādojuma, zinot temperatūras lauka atvasinājumus, iespējams izteikt apskatāmās frontes ātruma projekciju normāles virzienā cietā silīcija atskaites sistēmā. Gadījumā, kad $V_n > 0$, materiāls dotajā punktā kristalizējas. Lai pārietu uz laboratorijas sistēmu, kur induktors atrodas nekustīgā stāvoklī, bet silīcija stieņi tiek pārvietoti ar konstantu ātrumu, izmanto sakarību

$$v_n = \vec{V}_s \cdot \vec{n} - V_n, \quad (3.5)$$

kur v_n ir frontes ātrums laboratorijas atskaites sistēmā, bet V_s ir, attiecīgi, kristāla vilkšanas vai izejmateriāla stieņa stumšanas ātrumi. Apvienojot izteiksmes (3.4) un (3.5) un

izsakot v_n , iegūst vienādojumu kušanas un kristalizācijas fronšu ātrumu aprēķināšanai

$$v_n = \frac{1}{\rho_s q_0} \left(\lambda_s \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_s - \lambda_m \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_m \right) - V_s n_z \quad (3.6)$$

Temperatūras lauks tiek risināts pirms tam, parametrs V_s tiek uzdots pirms aprēķina sākuma, normāle tiek noteikta kā bisektrise, kuru veido blakus esošie elementi, un abu fronšu gadījumā vērsta kausējuma tilpumā. Punkts uz frontes ar ātrumu v_n laika momentā Δt pārvietojas par $v_n \Delta t$ frontes normāles virzienā.

Atklātās kušanas frontes ātrumu modelē līdzīgi, rakstot siltuma balansa vienādojumu

$$v(n) = \frac{1}{\rho_s Q} \left(\lambda_s \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_F + q^{rad} - q^{EM} \right) - V_F n_z, \quad (3.7)$$

kur loceklis $q^{EM} - q^{rad}$ ir no apkārtējās vides ieplūstošā siltuma plūsmas blīvums. Vienādojuma pēdējais loceklis norāda, ka uzreiz ņemta vērā pāreja no izejmateriāla stieņa uz laboratorijas atskaites sistēmu. q^{rad} tiek noteikts radiācijas uzdevumā, bet q^{EM} ietekmi nepieciešams novērtēt precīzāk.

Izejmateriāla stienim kustot, veidojas plāna šķidrums kārtiņa, kuras elektrovadītspēja ir par divām kārtām augstāka nekā cietam silīcijam (skat. tabulu 3.1). Ņemot vērā gravitācijas spēkus, šķidrums kārtiņas kustība pakļaujas Navjē-Stoksa vienādojumam:

$$\eta \frac{d^2 v}{dn^2} + \rho_l g \sin \Theta = 0, \quad (3.8)$$

kur η ir dinamiskā viskozitāte, g - brīvas krišanas paātrinājums, Θ - leņķis starp virsmas pieskari un horizontāli, bet $v = v(n)$ ir plūsmas ātrums pa virsmas normāli. Uzdotot papildus robežnosacījumus

- $v(n) = 0$ uz izejmateriāla stieņa virsmas;
- bīdes spriegumu neesamība uz brīvās virsmas,

iespējams analītiski atrisināt vienādojumu un iegūt ātruma sadalījumu, kas atkarīgs no radiālās koordinātes un šķidrums kārtiņas biezuma h

$$v(n) = \frac{\rho_m g \sin \Theta (h^2 - n^2)}{2\eta}. \quad (3.9)$$

Integrējot ātruma izteiksmi pa kārtiņas biezumu pareizinātu ar atbilstošo masas elementu, iespējams iegūt šķidrums masas plūsmu fiksētam punktam. Pielīdzinot šo izteiksmi kušanas ātrumam uz izejmateriāla stieņa virsmas virs apskatāmā punkta, iegūst sekojošu vienādību

$$2\pi r \cdot \rho_m \int_{-h}^0 v(n) dn = V_F \rho_s \pi (R_F^2 - r^2), \quad (3.10)$$

kuru atrisinot iegūst šķidrums slānīša biezuma izteiksmi

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\eta\rho_s V_F (R_F^2 - r^2)}{2\rho_m^2 g r \sin \Theta(r)}}. \quad (3.11)$$

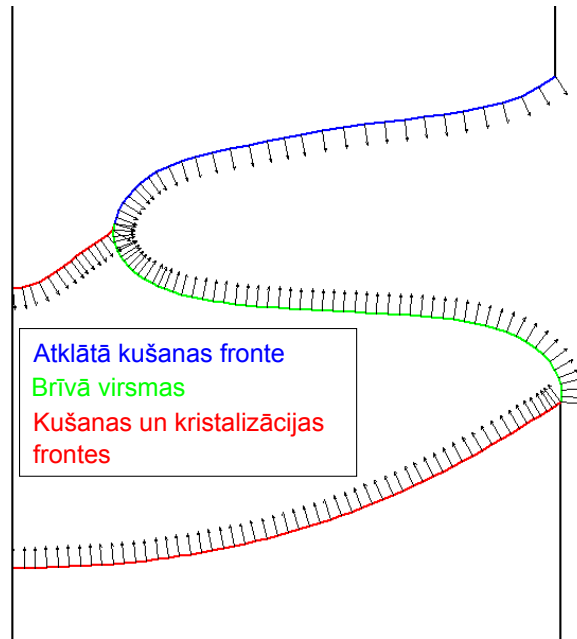
Lai novērtētu induktora inducēto siltuma plūsmas blīvumu uz atvērtās kušanas frontes, nepieciešams ņemt vērā, ka, gadījumā, kad plānās kārtiņas biezums h ir mazāks par skinslāņa biezumu, kopējā jauda ir summa no inducētās jaudas plānajā kārtiņā un izejmateriāla stienī. Šo summu iespējams aproksimēt sekojošā veidā

$$q^{EM} = q_F^{EM} + q_m^{EM} = \xi \cdot q_{h \rightarrow \infty}^{EM}, \quad (3.12)$$

kur $q_{h \rightarrow \infty}^{EM}$ ir fiktīvi ievesta jauda, kas raksturo gadījumu, kad plānās šķidrums kārtiņas biezums ir daudz lielāks par skinslāņa biezumu. Parametru $\xi = \xi(h, \delta)$ iespējams iegūt analītiski [16]

$$\xi(h) = \frac{1 - (1 - k)e^{-2l}}{1 - 2(1 - k)e^{-l} \cos l + (1 - k)^2 e^{-2l}}, \quad (3.13)$$

kur $k = \delta_m / \delta_s$ un $l = h / \delta_m$.



Attēls 3.2. Aplūkotās fāzu robežas un attiecīgās normāles.

Izdarītais secinājums ļauj secināt, ka plānās kārtiņas biezums ir daudz lielāks par skinslāņa dziļumu, varam izteikt fiktīvi ievesto jaudu

$$q_{h \rightarrow \infty}^{EM} = j^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi \mu_0 f}{\sigma_m}}. \quad (3.14)$$

Zinot šīs sakarības iespējams noteikt induktora inducēto jaudu uz atklātās kušanas frontes, lai pilnībā definētu vienādojumu (3.7).

Lai modelētu silīcija kausējuma brīvās virsmas formu, tiek pieprasīts, lai efektīvā spiediena disbalans

$$D = p_0 + \frac{1}{2}\rho_m\Omega_{Cr}^2r^2 - \rho_mgz - p^{EM} - \gamma\left(\frac{\cos\Phi}{r} + \frac{1}{R'}\right) \quad (3.15)$$

būtu vienāds ar nulli. p_0 ir atmosfēras spiediens, Ω_{Cr} - kristāla rotācijas ātrums, γ - virsmas spraiguma koeficients, Φ - leņķis starp virsmas pieskari un vertikāli. Otrais loceklis vienādojuma labajā pusē raksturo centrālās spēkus, trešais loceklis - hidrostatisko spiedienu kausējumā, bet pēdējais vienādojuma loceklis raksturo virsmas spraiguma radīto spiedienu. EM lauka radīto spiedienu p^{EM} iespējams aplūkot uz virsmas, pieņemot integrālās efektīvās vērtības tuvinājumu

$$p^{EM} = \frac{\mu_0 i_{ef}^2}{2}. \quad (3.16)$$

Uzdotot papildus nosacījumus, ņem vērā to, ka ATP punktam (tālākais brīvās virsmas punkts) ir fiksēta radiālā koordināte, kas vienāda ar kristāla radiusu. Tas nozīmē, ka ATP punktam ir tikai viena brīvības pakāpe. Ir zināms, ka vienmērīgas kristāla augšanas gadījumā, neatkarīgi no citiem apstākļiem, brīvā virsma ATP punktā ar vertikāli veido konstantu leņķi $\Phi_{ATP} = 11^\circ$. Attiecīgi spiediena disbalansa nosacījumam ATP punktā iegūstam:

$$p_0 = \rho_l g z_{ATP} - \frac{1}{2}\rho_l\Omega_{Cr}^2r_{ATP}^2 + p_{ATP}^{EM} + \gamma\left(\frac{\cos\Phi_0}{r_{ATP}} + \frac{1}{R_{ATP}}\right), \quad (3.17)$$

kur liekuma radiusu R_{ATP} izsaka, vadoties no ģeometriskiem apsvērumiem

$$R_{ATP} = \frac{L}{2\sin\Phi_0 - \alpha}, \quad (3.18)$$

kur L ir pirmā virsmas elementa garums, bet α - leņķis starp elementu un vertikāli. ITP punktam ir iespējamās vairākas brīvības pakāpes tāpēc tas tiek meklēts tāpat kā jebkurš cits punkts uz brīvās virsmas. Disbalansa minimizāciju veic ar iteratīvu pieeju visiem brīvās virsmas punktiem.

3.1.3 Vispārīgs aprēķina algoritms

Zinot laika soļa vērtību, iespējams iegūt fāzu robežu pārvietojumu pēc to lokālajiem ātrumiem. Kad frontes ir pārvietotas, notiek iteratīvs brīvās virsmas un EM lauka aprēķins. Kad ir atrasta ITP pozīcija (uzdots kritērijs), tiek veikts radiācijas uzdevums un visā sistēmā pārrēķina temperatūras lauku, kas, iegūstot temperatūras gradientus, ļauj noteikt attiecīgo fāzu ātrumus un iespējams veikt nākošo laika soļa iterāciju.

Detalizētāks aktuālās FZone versijas vispārīgā aprēķina algoritma apraksts atrodams [14].

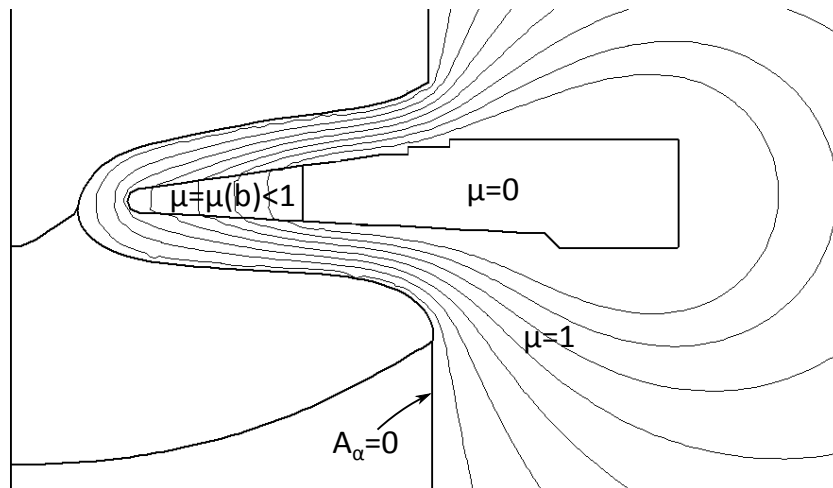
3.2 Augstfrekvences aprēķins

Vēsturiski EM lauka aprēķinam tika ieviests 2D aksiālsimetriskais tuvinājums, kurš vēlāk aizvietots ar precīzāku, 3D EM lauka aprēķinu, kur iegūtās inducētās jaudas vērtības tiek azimutāli vidējotas. Neskatoties uz to, ka darba ietvaros pētīta silīcija audzēšanas ar PZ procesu 3D aspektu modelēšana, darba izstrādes laikā ir veikti arī FZone aprēķini ar 2D EM lauka aprēķina pieeju, tāpēc, papildus detalizētam 3D AF EM lauka aprēķina matemātiskā modeļa izklāstam tiek izskaidrotas galvenās 2D AF EM lauka aprēķina induktora aksiālsimetriskās aproksimācijas idejas.

3.2.1 2D AF EM lauka aprēķina galvenās idejas

Lai AF EM lauku rēķinātu, izmantojot 2D induktora tuvinājumu, nepieciešams matemātiski aprakstīt induktora spraugu ietekmi uz magnētiskā lauka līnijām. Reālā procesā spraugas tiek veidotas, lai samazinātu magnētiskā lauka blīvumu ITP punkta reģionā, šādā veidā izvairoties no kakliņa pārkausēšanas.

Attēlā 3.3 shematiski ilustrētas galvenās aprēķina idejas. Izveidotais 2D induktora modelis tiek sadalīts divos reģionos; ārējam reģionam tiek uzdota nulles magnētiskās caurlaidības vērtība, bet spraugu reģionā uzdod no spraugas platuma atkarīgu magnētisko caurlaidību, pie tam tā ir robežās no 0 līdz 1. Pie lielāka spraugas platuma magnētiskā caurlaidība tiecas uz 1. Spraugas platums tiek uzdots aprēķina sākumā. Lai nodrošinātu magnētisko līniju neiespiešanos silīcija tilpumā, uz visām silīcija ārējām virsmām tiek uzdota vektorpotenciāla nulles vērtība.



Attēls 3.3. Ilustratīva 2D AF EM lauka aprēķina skice.

Detalizēts 2D AF EM lauka aprēķina modelis atrodams Gundara Ratnieka disertācijā [16] un publikācijā [5].

3.2.2 3D AF EM lauka aprēķina matemātiskais modelis

Izteiktā skinefekta dēļ ($f \sim 3MHz$) 3D augstfrekvences EM lauka aprēķins var tikts veikts, izmantojot GEM. Skinslāņa biezumu apraksta formula

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\pi f_{HF} \sigma_M \mu_0}} \quad (3.19)$$

Ievietojot $f \sim 3MHz$, $\sigma_M = 1,2 \cdot 10^6$, iegūst $\delta \sim 0,26mm$, kas, salīdzinot ar sistēmas kopējiem izmēriem, ir relatīvi mazs lielums, tāpēc inducētās strāvas sadalījumu iespējams aprakstīt kā virsmas funkciju, ieviešot lineāro strāvas blīvumu j .

$$j = \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_2} e_1 - \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_1} e_2, \quad (3.20)$$

kur ξ_1 un ξ_2 ir lokālās koordinātes, kas vērstas pa virsmas pieskari, bet ξ_3 vērtu tilpumā virsmas normāles virzienā. Attiecīgi lielumi e_1 , e_2 , un e_3 vienādojumā (3.20) ir attiecīgo lokālo koordinātu bāzes vektori. Lai aprēķinātu funkciju Φ , tiek izmantots Bio-Savāra likums, papildus, pamatojoties uz augsto strāvas frekvenci indukcijas spolē, pieprasot, lai magnētiskās plūsmas blīvums ir 0 virsmas normāles (ξ_3) virzienā.

Zinot j , iespējams aprēķināt induktora inducēto jaudas virsmas blīvumu

$$q = \frac{j_\tau^2}{\delta \sigma_M}, \quad (3.21)$$

kur δ izriet no formulas (3.19). Iegūtās vērtības tiek azimutāli vidējotas un padotas FZone temperatūras lauka un fāžu robežu aprēķinam.

3D EM lauka aprēķins papildus tiek izmantots silīcija kausējuma plūsmas aprēķinā, lai aprakstītu virsmas spēkus, kas darbojas uz kausējuma brīvās virsmas. Izteiktā skinefekta dēļ var uzskatīt, ka inducētās strāvas blīvums j un magnētiskais lauks B ir paralēli virsmai. No tilpuma spēku blīvuma izteiksmes

$$f_V = j \times B \quad (3.22)$$

seko, ka augstfrekvences EM spēku tilpuma blīvums ir perpendikulārs virsmai. No vienādojuma (3.22), ņemot vērā cirkulācijas teorēmu, iespējams iegūt izteiksmi

$$f_V = -\frac{1}{2\mu_0} \nabla B_{HF}^2 + \frac{1}{\mu_0} (B_{HF} \nabla) B_{HF} \quad (3.23)$$

Veicot vienādojuma (3.23) analīzi, redzams, ka otrais loceklis vienādojuma labajā pusē ir potenciāls spēks (pamatojoties uz iepriekš izdarīto pieņēmumu, ka j un B ir paralēli

virsmāi), kuru kompensē spiediena gradients kausējumā. Analizējot pirmo labās puses locekli, noderīgi ir atgriezties pie ieviestajām lokālajām koordinātēm

$$B = e_1 B_1 + e_2 B_2, B_3 = 0 \quad (3.24)$$

$$j = e_1 j_1 + e_2 j_2, j_3 = 0 \quad (3.25)$$

Ņemot vērā vienādojumus (3.24) un (3.25), izmantojot cirkulācijas teorēmu, no tilpuma spēku izteiksmes (3.23) iespējams ieviest tangenciālu tilpuma spēkus, kas ir atkarīgi no lokālās koordinātes ξ_3

$$f_\tau = \frac{1}{2\mu_0} \left(e_1 \frac{\partial B^2}{\partial \xi_1} + e_2 \frac{\partial B^2}{\partial \xi_2} \right) = \frac{1}{2\mu_0} \nabla_{1,2} B^2 \quad (3.26)$$

Tā kā hidrodinamikas aprēķiniem nepieciešama tikai laikā vidējotā spēku vērtība, tangenciālie spēki tiek vidējoti laikā un integrēti pa skinslāņa biezumu

$$f_\tau = \int_0^\infty \overline{f_V} d\xi_3 = \frac{1}{2\mu_0} \nabla_{1,2} \left[\int_0^\infty \overline{B_{HF}^2} d\xi_3 \right] \quad (3.27)$$

Izteiktā skinefekta dēļ, locekli $\overline{B^2}$ izteiksmē (3.27) var aizvietot ar

$$\overline{B_{HF}^2} = \mu_0^2 j_\tau^2 e^{-\frac{2\xi_3}{\delta}} \quad (3.28)$$

un iegūt galīgo EM spēku izteiksmi

$$f_\tau = \frac{1}{4} \mu_0 \delta \nabla_{1,2} [j_\tau^2]. \quad (3.29)$$

3.3 3D HD, ātruma, temperatūras lauka un masas pārnese aprēķina matemātiskais modelis

Silīcija kausējuma plūsmas aprēķinam tiek izmantots uz atvērtā koda bibliotēkas `OpenFOAM` [17] bāzes izveidots solveris `FZsiFOAM`. Papildus ātruma, temperatūras un spiediena lauku aprēķinam, solverī iekļauta masas pārnese, lai modelētu piemaisīju sadalījumu silīcija kausējumā. Uz brīvās virsmas uzdoti EM un Marangoni spēki, bojansī spēku aprakstam tiek izmantots Businesska tuvinājums, uz kristalizācijas frontes ņemts vērā segregācijas process, lai precīzi aprakstītu piemaisījumu koncentrācijas sadalījumu izaudzētajā kristālā, no kā iespējams iegūt radiālās pretestības grafikus.

Sekošajās apakšnodaļās secīgi izklāstīti matemātiskie vienādojumi, kas tiek risināti kausējuma apgabalā. Tabulā 3.2 uzskaitīti galvenie sistēmu raksturojošie fizikālie parametri, to apzīmējumi un aprēķinos izmantotās vērtības.

Tabula 3.2. Silīcija kausējuma fizikālās īpašības [13].

Fizikālais lielums, mērvienība	Vērtība
Kušanas temperatūra T_0, K	1687
Blīvums $\rho, \frac{kg}{m^3}$	2580
Viskozitāte $\eta, \frac{kg}{m \cdot s}$	$8,6 \cdot 10^{-4}$
Termiskās izplešanās koeficients β, K^{-1}	$1,0 \cdot 10^{-4}$
Virsmas spraiguma temperatūras atvasinājums $\frac{\partial \gamma}{\partial T}, \frac{N}{m \cdot K}$	$-1,3 \cdot 10^{-4}$
Siltumvadīšanas koeficients $\lambda_m, \frac{W}{m \cdot K}$	67

3.3.1 Nestacionāra kausējuma kustība

Zinot nepieciešamos silīcija kausējuma plūsmas raksturlielumus, iespējams novērtēt tās Reinoldsa skaitli

$$Re = \frac{\rho \bar{v} l}{\mu}, \quad (3.30)$$

kur blīvuma un viskozitātes vērtības iespējams atrast tabulā 3.2, bet raksturīgo izmēru l un vidējo plūsmas ātrumu iespējams novērtēt, zinot reālo sistēmas ģeometriju un veiktos skaitliskos aprēķinus.

Par raksturīgo izmēru var pieņemt apskatāmās sistēmas aptuveno augstumu, kurš nepārsniedz 30cm. Šādu pieņēmumu iespējams izdarīt, balstoties uz zināmajām plūsmas uzvedības īpatnībām, kas detalizētāk tiks aplūkotas darba turpinājumā. Par vidējo plūsmas ātrumu var pieņemt vērtību $\bar{v} \sim 0,03 \frac{m}{s}$, kas novērtējama no aprēķinu rezultātiem. Ievietojot vērtības vienādojumā (3.30), iegūst

$$Re = \frac{2580 \cdot 0,03 \cdot 0,03}{8,6 \cdot 10^{-4}} = 2700. \quad (3.31)$$

Ņemot vērā to, ka Reinoldsa skaitlis ir salīdzinoši mazs, plūsmu uzskata par lami-nāru, tāpēc tiek risināts Navjē-Stoksa vienādojums, kurš ir formā

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_0 (v \nabla) v = -\nabla p + \eta \Delta v - \rho_0 g \beta (T - T_0), \quad (3.32)$$

kur konstantes ρ_0, η, β un T_0 dotas tabulā 3.2, v ir ātrums, T - temperatūra, bet p - spie-diens. Trešais loceklis labajā pusē ir Businesska tuvinājums, kas tiek pieļauts, balstoties uz nelielajām blīvumu izmaiņām kausējumā.

Papildus vienādojumam 3.32 tiek uzdots šķidrums nesaspiežamības nosacījums

$$\nabla v = 0 \quad (3.33)$$

Uz kausējuma brīvās virsmas tiek uzdoti spēka avoti

$$f_{FS} = f_\tau + \frac{\partial \gamma}{\partial T} \nabla_{1,2} T, \quad (3.34)$$

kur f_τ ir elektromagnētiskie spēki, kas iegūti no 3D AF EM lauka aprēķina pēc formulas (3.29). Otrais loceklis raksturo marangoni virsmas spēkus un ir atkarīgs no temperatūras sadalījuma uz brīvās virsmas

Uzdevums tiek risināts, par atskaites sistēmu pieņemot nekustīgu kausējumu, tāpēc kušanas un kristalizācijas frontes attiecīgi tiek uzskatītas par šķidrums ieplūdes un izplūdes virsmām. Līdz ar to uz kristalizācijas frontes tiek uzlikti sekojoši robežnosacījumi:

- $v_x = -y \cdot 2\pi\omega_{Cr}$;
- $v_y = -x \cdot 2\pi\omega_{Cr}$;
- $v_z = -v_{Cr}$,

kur ω_{Cr} ir kristāla rotācijas ātrums, bet x, y, z - punkta koordinātes.

Uzdodot robežnosacījumus uz kušanas frontes, x un y komponentes uzdod līdzīgi, ω_{Cr} vietā ņemot izejmateriāla stieņa rotācijas ātrumu. Ātruma z komponentei tiek ņemts vērā masas saglabāšanas likums

$$v_z = -v_{Cr} \cdot \frac{r_{Cr}^2}{r_{ITP}^2}. \quad (3.35)$$

Šāda pieeja tiek izmantota tāpēc, ka kristāla vilkšanas ātrums un kristāla diametrs visu aprēķina laiku paliek nemainīgs, turpretī ITP punkta rāduss un attiecīgi arī šķidrums ieplūdes ātrums ir atkarīgs no FZone aprēķinātās ģeometrijas.

3.3.2 Temperatūras lauks

Apskatāmā problēma ir nestacionāra, tāpēc temperatūras aprēķinam izmanto sekojošu siltuma pārneses vienādojumu:

$$\rho_0 c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_0 c_p (v \nabla) T = \lambda \Delta T. \quad (3.36)$$

Papildus tiek uzdoti robežnosacījumi:

- uz kušanas un kristalizācijas frontēm uzdod kušanas temperatūru $T = T_0$,
- uz brīvās virsmas uzdod aprēķināto siltuma plūsmas blīvumu q^{EM} no vienādojuma (3.21).

3.3.3 Masas pārnese un segregācijas procesa modelēšana

Tā kā aplūkotā plūsma ir nestacionāra un ātruma lauks ir laika funkcija arī piemaisījumu sadalījums ir laikā mainīgs. Masas pārnesei modelēšanai izmanto vienādojumu

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (v(t)\nabla)C = D\Delta C, \quad (3.37)$$

kur D ir difūzijas koeficients kausējumā (skat. tabulu 3.2).

Lai modelētu segregācijas procesu kristalizācijas frontes tuvumā, uz kristalizācijas frontes uzdod sekojošu robežnosacījumu:

$$D\frac{\partial C}{\partial t} = v_{cr}(1 - k_0)C \cos \theta, \quad (3.38)$$

kur k_0 ir segregācijas koeficients, n ir kristalizācijas frontes virsmas normāles vektors vērsts telpumā, un Θ ir leņķis starp kristalizācijas fronti un xy plakni.

Ir izpētīts [13], ka uz kušanas frontes var uzdot pirmā veida robežnosacījumu. Konkrētajā darbā rezultātu uzskatāmības uzlabošanai vērtība vienmēr tiek normēta uz vienu

$$C_F = 1 \quad (3.39)$$

Darbā visos aprēķinos tiek pieņemts, ka piemaisījumi kausējumā iekļūst caur kušanas fronti, tāpēc uz brīvās virsmas tiek uzdots sekojošs robežnosacījums:

$$\frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad (3.40)$$

3.3.4 Radiālais pretestības sadalījums izaudzētajā kristālā

Katrā laika solī tiek noglabātas piemaisījumu koncentrācijas vērtības visos kristalizācijas frontes punktos. No šīm vērtībām pēc formulas

$$\rho = \frac{1}{k_0 C} \quad (3.41)$$

iespējams aprēķināt īpatnējo pretestību ρ izaudzētajā kristālā. Šādu pieeju var lietot tāpēc, ka katrā laika solī kristālā segregācijas procesa modelēšanas dēļ nonāk tāda koncentrācija, kāda ir uz frontes.

Lai grafiski vizualizētu pretestības sadalījumus izaudzētajā kristālā, tiek lietota neliela C++ programma. Datu apstrādes algoritms izstrādāts, lai pēc iespējas pietuvinātos eksperimentālo sadalījumu attēlošanai. Ar noteiktu soli tiek ņemtas vērtības dažādos laika soļos, no kristāla centra brīvi velk vairākas taisnes uz aprēķina ρ . Rezultātā iegūst radiālās pretestības sadalījumus dažādos laika momentos un dažādos kristāla apgabalos. Šīs vērtības attēlo grafikā kopā ar vidējoto līkni. Vidējā līkne tiek normēta uz 1, šādi iegūtie rezultāti ir reprezentatīvāki, savstarpēji salīdzinot tos.

4 APSKATĀMĀS *INSTITUTE OF CRYSTAL GROWTH* SISTĒMAS

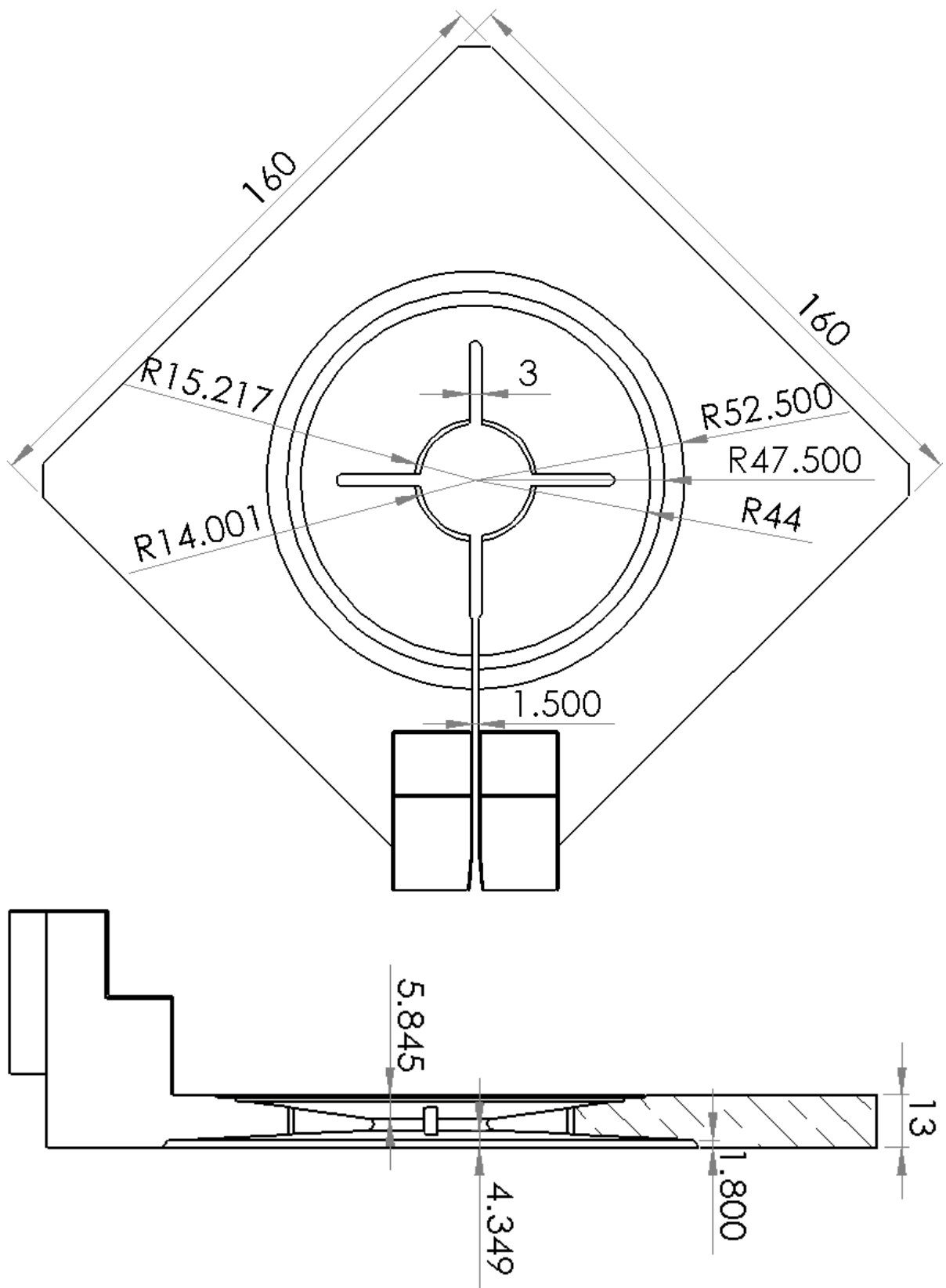
Darbā tiek aplūkotas divas 4 collu (kristāla diametrs apmēram 100mm) sistēmas, kuru parametri saņemti no *Institute of Crystal Growth* (turpmāk *ICG*), Berlinē (Dr. H.Riemann). Sistēmas savā starpā atšķiras kristāla un izejmateriāla stieņa radiusos un galvenokārt ar izmantotajām indukcijas spolēm. Darbā vairāk strādāts ar t.s. bāzes sistēmu, ar kuru veiktas skaitliskās studijas, pētot dažādu procesa parametru ietekmi uz plūsmas uzvedību kausējumā. Papildus darba beigās sniegts matemātiskās modelēšanas rezultātu salīdzinājums ar eksperimentu, kur izmantots cits induktors.

Tabulā 4.1 dota abu sistēmu silīcija ģeometrija un fizikālie lielumi. Bāzes sistēmai netiek norādīta konkrēta mērķa zonas augstuma vērtība, jo darba laikā veikti aprēķini, variējot šo parametru. Attēlos 5.1 un 5.1 redzami izmantoto induktoru tehniskie rasējumi ar ģeometriskajiem izmēriem.

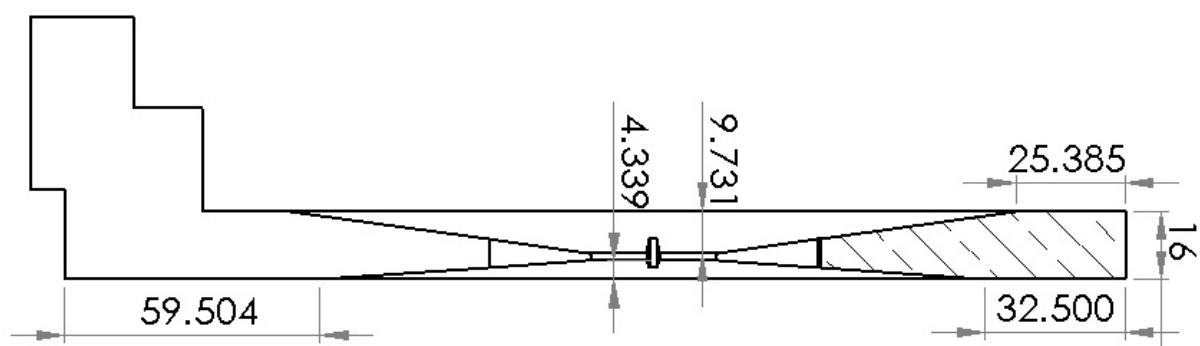
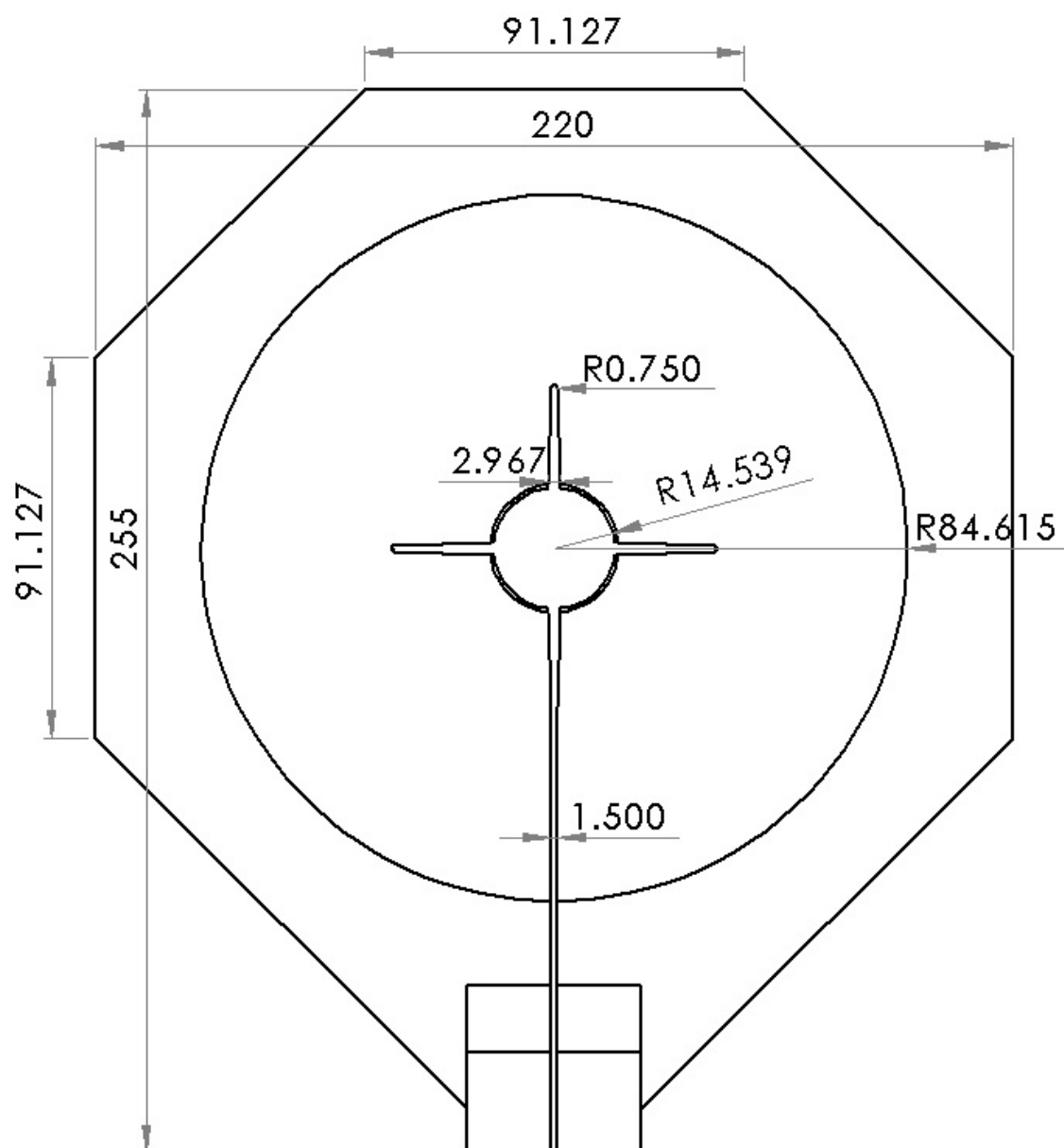
Tabula 4.1. Aplūkoto *ICG* sistēmu raksturīgie parametri.

Parametrs, mērvienība	Bāzes sistēma	Eksperimenta sistēma
Kristāla radiuss R_C , mm	50	51
Polikristāla radiuss R_F , mm	50,5	49
Zonas augstums H_Z , mm	30-36	34.87
Kristāla vilkšanas ātrums v_C , $\frac{mm}{min}$	3.2	3.4
Polikristāla stumšanas ātrums v_F , $\frac{mm}{min}$	3.262	3.68
Strāvas frekvence I_{ind} , MHz	3	3
Kristāla rotācijas ātrums ω , $\frac{apgriezieni}{min}$	4	6
Izmantotais induktors	nr.1	nr.2

Nekonsekventā dažādu induktoru pielietošana skaitliskajai studijai un eksperimenta salīdzinājumam skaidrojama ar to, ka bāzes sistēmas eksperimentālie dati, kuri tika saņemti no *ICG*, bija apšaubāmi pārlietu lielās izkliedes dēļ. Ar bāzes sistēmu tika veiktas visas skaitliskās studijas. Jaunus eksperimentālos datus no *ICG* izdevās saņemt tikai darba izstrādes noslēguma posmā, bet šie dati tika iegūti no eksperimenta, kurš veikts ar savādāku induktoru. Laika trūkuma dēļ, ar jauno induktoru veikts tikai eksperimenta salīdzinājums.



Attēls 4.1. Induktora nr.1 tehniskie rasējumi. Skats no augšas (augšējais attēls) un vertikāls šķērsgriezums strāvas pievadu plaknē (apakšējais attēls).



Attēls 4.2. Induktora nr.2 tehniskie rasējumi. Skats no augšas (augšējais attēls) un vertikāls šķēsgriezums strāvas pievadu plaknē (apakšējais attēls).

5 DETALIZĒTS VIENA RAKSTURĪGA APRĒĶINA PIEMĒRS

Darba galvenais uzdevums ir pētīt dažādu PZ zonas metodes silīcija monokristālu audzēšanas procesa parametru ietekmi uz plūsmas uzvedību izkusušajā zonā, kas savukārt ietekmē radiālās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā. Lai aprēķinātu radiālās pretestības sadalījumu, nepieciešams veikt aprēķinus, kas sastāv no vairākiem starpposmiem. Galvenokārt ir nepieciešams darboties ar diviem lieliem aprēķinu moduļiem - specializēto programmu *FZone*, kas paredzēta fāzu robežu iegūšanai, un 3D hidrodinamikas aprēķinu moduli *FZsiFOAM*, kas izveidots uz atvērtā koda bibliotēkas *OpenFOAM* bāzes. Papildus tam, izmantojot dažādas nelielas programmas un citus palīgriekus, jāveic aprēķinu sagatavošana un uzraudzīšana, kas sevī ietver tādas darbības kā režģa ģenerēšana, rezultātu pārinterpolēšana, rezultātu grafiska attēlošana un tml.

Šajā nodaļā detalizēti tiek apskatīta tikai vienas raksturīgas PZ sistēmas modelēšanas gaita, paskaidrojot visas ietvertās darbības. Aprēķinu rezultāti tiek ilustrēti, attēlojot fizikālos laukus, ar kuru palīdzību tiek skaidrotas procesa raksturīgākās pazīmes. Vēlākās studijās galvenokārt tiek prezentēti aprēķinu rezultāti.

Tā kā darbs ir koncentrēts uz kausējuma plūsmas īpatnību analīzi, detalizēts aprēķinu sistēmas izklāsts sniegts, sākot no brīža, kad iegūtas fāzu robežas. Rūpīgāks fāzu robežu modelēšanas, izmantojot 3D AF EM lauka aprēķina pieeju, gaitas izklāsts atrodams [14].

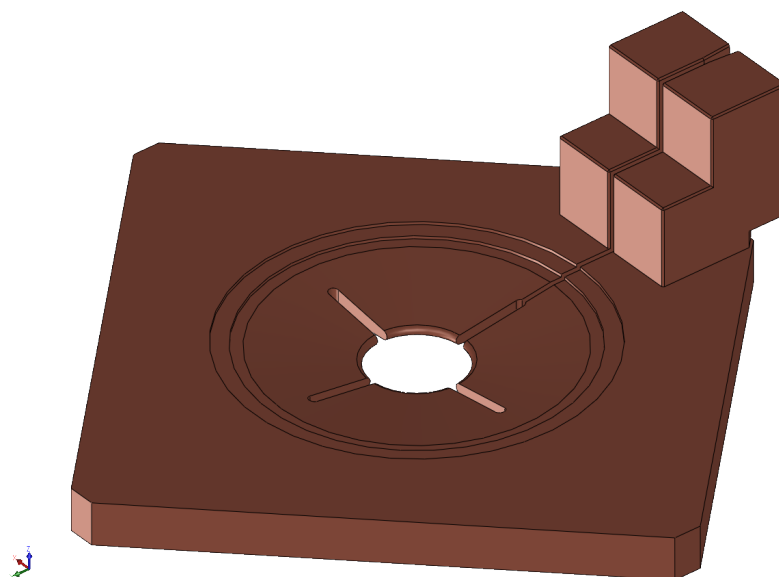
5.1 *FZone* fāzu robežu aprēķins

Lai aprēķinātu 2D fāzu robežas, programmai *FZone* nepieciešams definēt sistēmas ģeometriju - izveidot fāzu robežu pirmo tuvinājumu un izveidot 3D induktora virsmas režģi. Kad ir definēta sistēma ģeometrija, zinot sistēmu raksturojošos parametrus - zonas augstumu, kristāla un izejmateriāla stieņu rotācijas ātrumus, kā arī kristāla vilkšanas ātrumu - iespējams veikt fāzu robežu aprēķinu.

5.1.1 Induktora virsmas režģa izveide 3D AF EM lauka aprēķinam

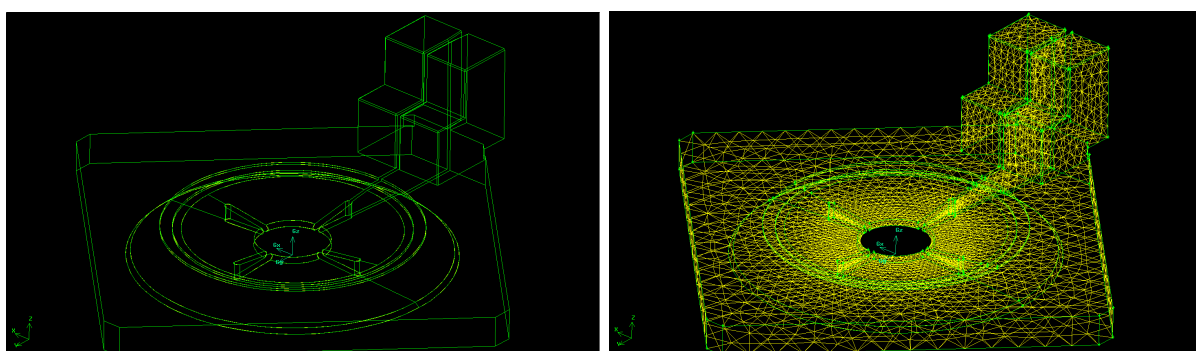
Lai izveidotu induktora 3D virsmas režģi, nepieciešams zināt tā ģeometriskos izmērus. Induktora tehniskie rasējumi tikai saņemti no *ICG*. No rasējumiem iespējams izveidot

3D induktora zīmējumu, konkrētajā gadījumā izmantota programma SolidWorks. Attēlā 5.1 redzams izveidotais induktora modelis.



Attēls 5.1. Programmā SolidWorks izveidotais 3D induktora modelis.

Izveidotā ģeometrija tiek saglabāta ar .IGES paplašinājumu un importēta režģa ģeneratorā GAMBIT. Virsma tiek noklāta ar trīstūrveida elementiem, īpašu vērību pievēršot induktora centrālajai daļai, jo testa rezultāti norāda, ka ārējās induktora detaļās inducētās jaudas sadalījumu uz silīcija virsmas ietekmē ievērojami mazāk. Tāpat smalkāks režģis tiek uzveidots uz induktora spraugām, lai precīzāk aprakstītu liektās detaļas. Attēlā 5.2 attēlots programmas GAMBIT interfeiss ar tajā ielasītu induktora ģeometrija un izveidotais režģis.



Attēls 5.2. Induktora ģeometrija (pa kreisi) un izveidotais virsmas režģis (pa labi).

AF EM lauka aprēķina programmai nepieciešams izdalīt induktora virsmas. Strāvas pievadi tiek definēti kā strāvas ieplūdes un izplūdes apgabali IN un OUT, bet pārējās induktora virsmas tiek nosauktas par INDUCTOR.

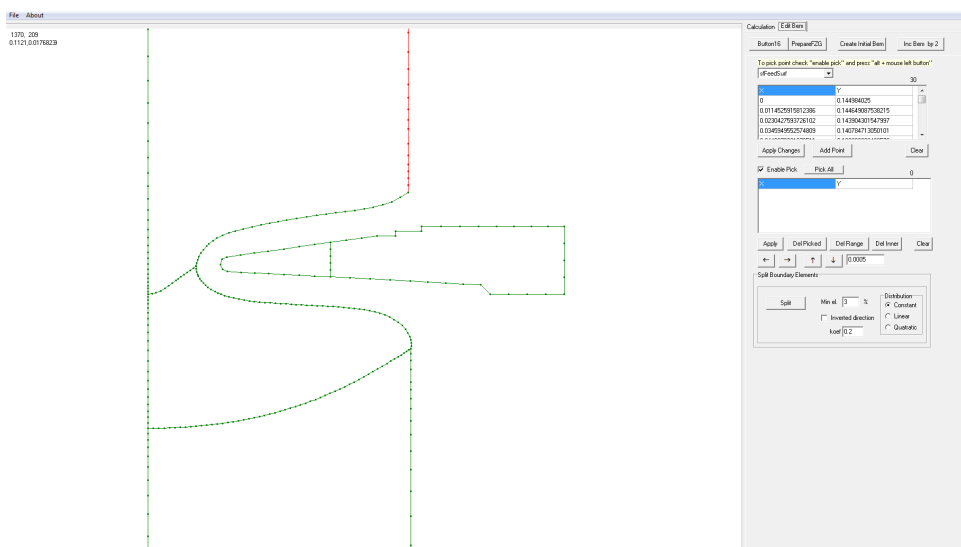
5.1.2 2D fāzu robežu sākuma ģeometrijas izveidošana temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķinam

Startējot aprēķinu, programmai FZone nepieciešams padot fāzu robežu pirmo tuvinājumu. Parasti cenšas izvēlēties kāda cita jau nokonverģējuša aprēķina robežas, lai konverģence būtu pēc iespējas ātrāka.

Uz visām apgabala robežām tiek izveidots punktējums. Attēlā 5.3 redzams programmas mFZone interfeiss ar izveidoto pirmo tuvinājumu. Programmā lietotājs izvēlas vēlamo robežu, pārvieto to un pievieno vai dzēš punktus uz tās.

Papildus tiek izveidots induktora 2D aksiālsimetriskā reprezentācija, kas nepieciešama radiācijas uzdevumam.

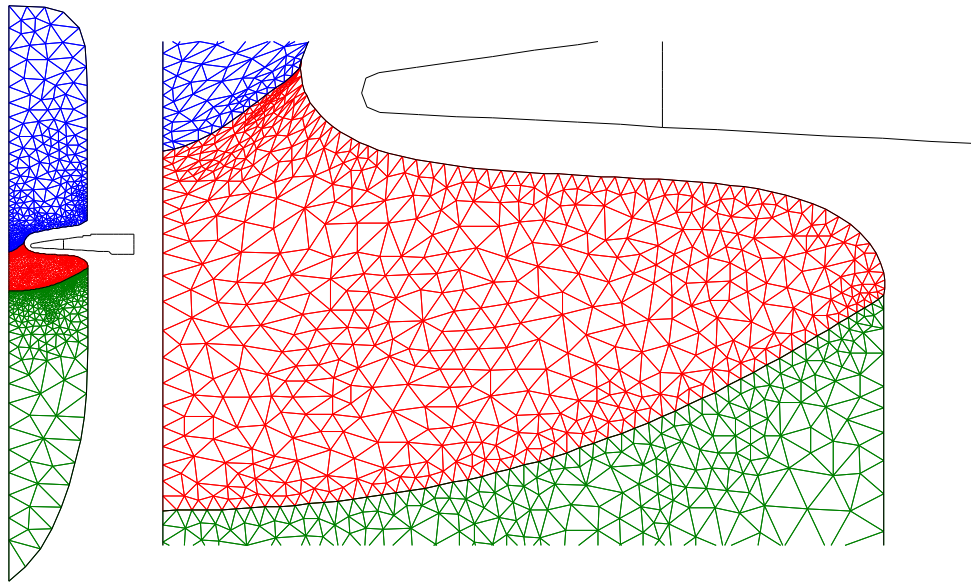
Aprēķina sākumā FZone automātiski ģenerē neregulāru trīsstūra elementu režģi visos silīcija apgabalos. Kā redzams attēlos 5.3 un 5.4, uz kausejuma robežas tiek veidots blīvāks punktējums, lai iegūtu smalkāku GEM režģi kausējumā.



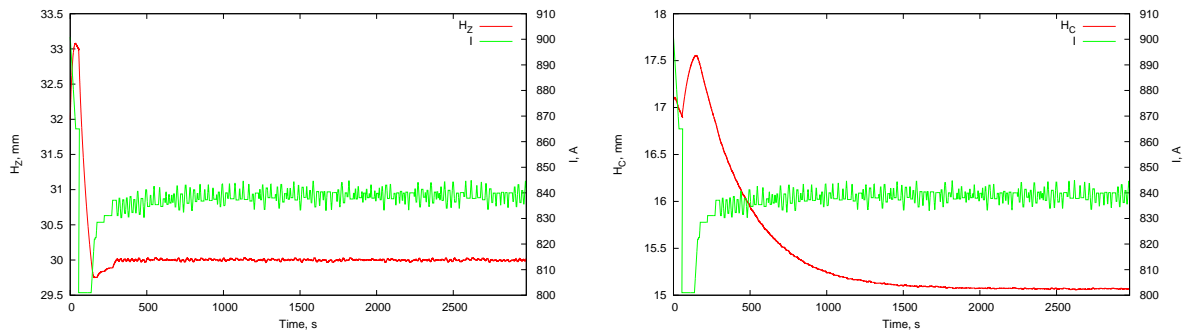
Attēls 5.3. Programmas mFZone interfeiss ar izveidoto fāzu robežu pirmo tuvinājumu.

5.1.3 FZone aprēķina veikšana

Process tiek rēķināts kā laikā mainīgs (laika solis $\Delta t = 0,1s$), iestrādātais algoritms maina strāvas vērtību ar soli $\Delta I = 0,1A$, lai iegūtu un uzturētu mērķa zonas augstumu. Kad zonas augstums ir nostabilizējies, arī strāva induktorā sāk svārstīties ap noteiktu vērtību, kura nosaka kristalizācijas frontes dziļumu (5.5). Frontes turpmākā pārvietošanās vairs neietekmē strāvas vērtību induktorā. Aprēķins turpinās, līdz kušanas un kristalizācijas fronšu ātrumi kļūst mazāki par uzdoto kritēriju.



Attēls 5.4. Izveidotais režģis visai sistēmai (pa kreisi) un detalizēti izzīmēts režģis kausējumā (pa labi).



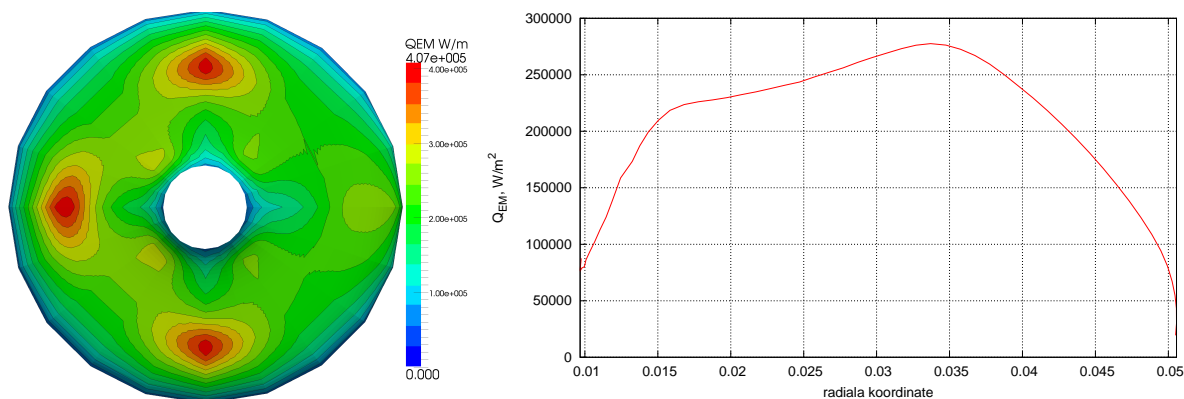
Attēls 5.5. Zonas augstuma (pa kreisi) un kristalizācijas frontes dziļuma (pa labi) konverģence laikā.

Ar aprēķina vispārīgā algoritma noteiktu laika soļu skaitu intervālu esošās fāzu robežas atklātajai kušanas frontei, brīvajai virsmai un polikristāla un kristāla virsmām tiek rotētas, lai veiktu 3D AF EM aprēķinu. Iegūtās siltuma plūsmas blīvuma vērtības q^{EM} tiek azimutāli vidējotas un padotas tālākajiem aprēķina moduļiem. Šī darbība vizuāli attēlota attēlā 5.6, kur attēlotas 3D q^{EM} vērtības uz brīvās virsmas un q^{EM} vērtības pēc azimutālās vidējošanas.

5.1.4 Rezultātu vizualizācija

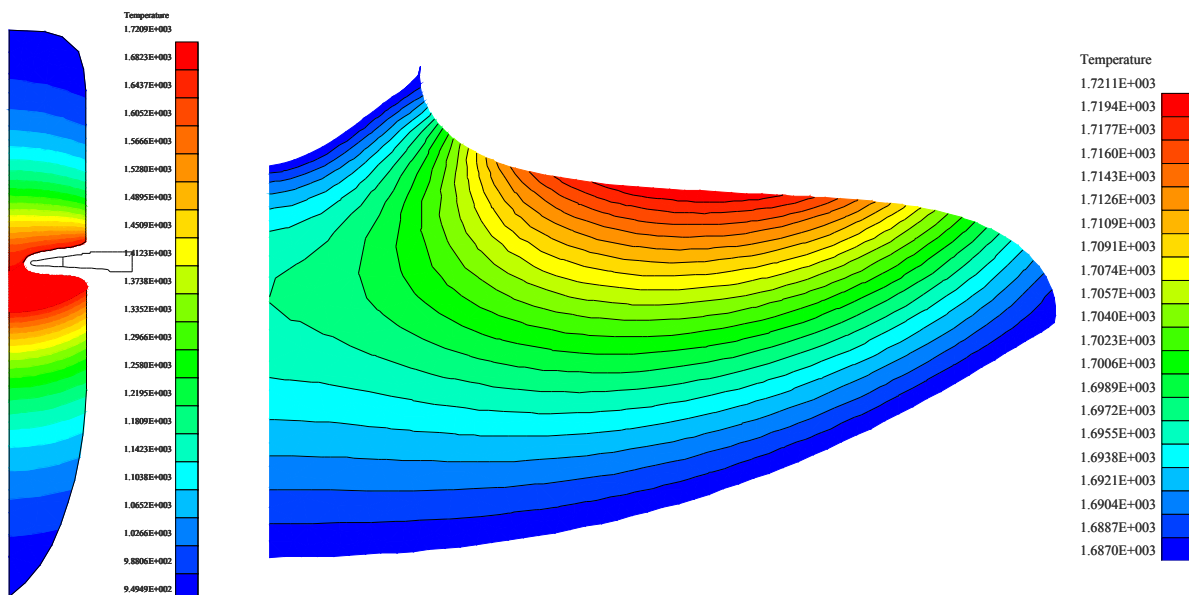
No HD kausējuma plūsmas aprēķina viedokļa galvenais FZone aprēķinu rezultāts ir divi teksta faili: *co.bem* fails, kurā tiek noglabātas visu sistēmas punktu koordinātes rz plaknē, un *phys.par* fails, kurā var atrast induktorā plūstošās AF strāvas vērtību.

Tomēr ir svarīgi aplūkot temperatūras lauku, lai pārliecinātos, ka aprēķinā nav pie-



Attēls 5.6. Inducētā siltuma plūsmas blīvums uz brīvās virsmas pirms (pa kreisi) un pēc (pa labi) azimutālās vidējošanas.

ļautas kādas rupjas kļūdas. Attēlā 5.7 redzams temperatūras lauks sistēmā un detalizēti aplūkots lauks kausējumā. Kā redzams, temperatūras diference kausējumā ir apmēram 35K, kas ir konsekventa vērtība PZ sistēmā.



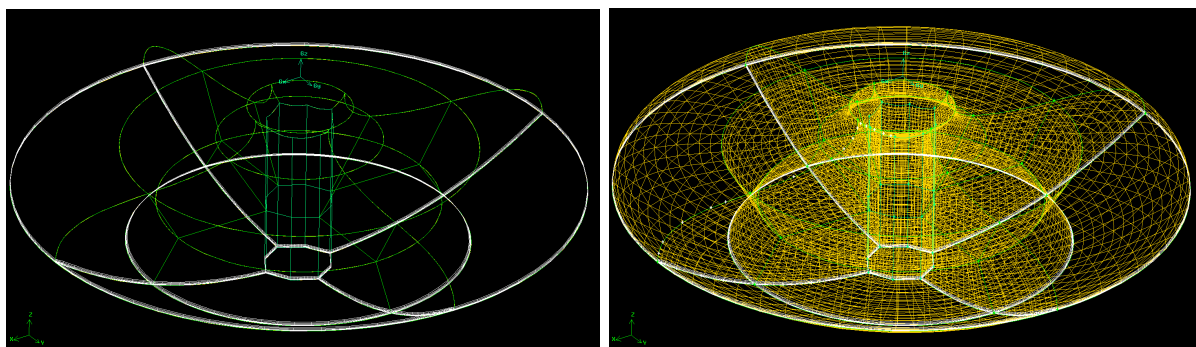
Attēls 5.7. Aprēķinātais temperatūras lauks visā sistēmā (pa kreisi) un detalizēti izzīmēts temperatūras lauks kausējumā (pa labi).

5.2 Silīcija kausējuma HD aprēķins

Silīcija audzēšanas ar PZ metodes kausējuma plūsmas, temperatūras un spiediena lauku, piemaisījumu koncentrācijas matemātiskā modelēšana sastāv no vairākiem svarīgiem posmiem: no iegūtajām 2D fāzu robežām nepieciešams izveidot gan kausējuma 3D tilpuma režģi, gan visas sistēmas 3D virsmas GEM režģi, pārrēķināt 3D AF EM lauku, kā arī sagatavot un uzraudzīt plūsmas aprēķinu OpenFOAM vidē.

5.2.1 Silīcija kausējuma 3D tilpuma režģa izveide HD aprēķinam

OpenFOAM plūsmas aprēķiniem nepieciešams strukturēts tilpuma režģis, kas sastāv no heksagonāliem elementiem. 3D kausējuma tilpumu iegūst, norotējot izrēķinātās 2D fāzu robežas kušanas un kristalizācijas frontēm un kausējuma brīvajai virsmai. Tā kā kausējuma formai ir deformēta lodveida forma, kausējuma iekšienē bez papildus darbību veikšanas nav iespējams izveidot vēlamo režģi, jo kādā reģionā noteikti neizdosies izveidot heksagonālu elementu.



Attēls 5.8. Kausējuma 3D ģeometrija bez asu nobīdes kopā ar izveidoto iekšējo struktūru un režģa robežslāni (pa kreisi) un pabeigts tilpuma režģis (pa labi).

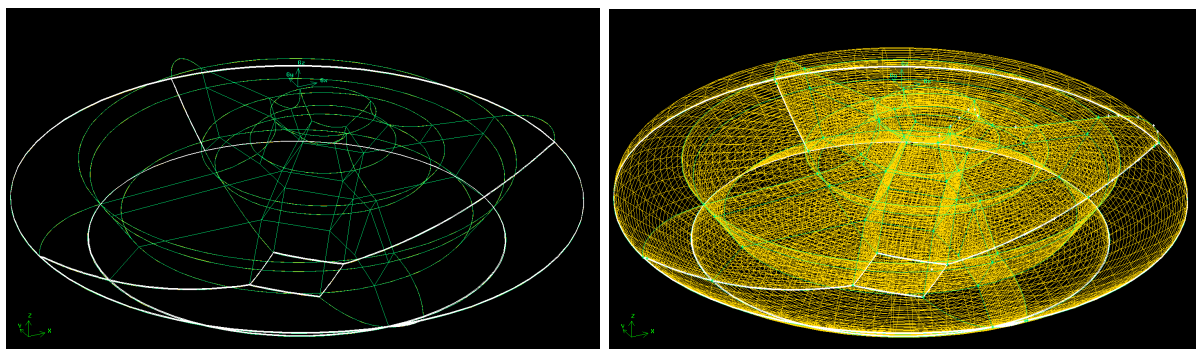
Lai izvairītos no šīs problēmas, kausējums tiek sadalīts atsevišķos reģionos (skat att.5.8). Darba ietvaros atšķirīgām kausējuma fāzu robežām piemeklētas dažādas režģa topoloģijas, bet visos gadījumos režģa iekšējā uzbūve balstīta uz vertikālas četrstūrainas serdes izveidošanu kausējuma centrā. Šādā veidā iespējams izveidot režģi ar vienmērīgu azimutālo dalījumu, izvairoties no trīsstūrveida elementiem uz centrālās ass.

Aprēķina matemātiskais modelis sevī iekļauj arī segregācijas procesa modelēšanu uz kristalizācijas frontes, tāpēc uz visām kristalizācijas frontes virsmām tiek izveidots režģa robežslānis (angl. *boundary layer*). Apskatāmajam režģim pirmā robežslāņa šūnas biezums ir 0,04 mm, augšanas koeficients ir 1,4 un robežslānis kopā sastāv no 6 šūnu kārtām.

3D silīcija kausējuma tilpuma režģis sastāv no vairāk nekā 10 savienotiem tilpu-

miem, kuru struktūrā izmantots vēl lielāks skaits taisņu un dažādu papildpunktu. Veidojot režģi, bieži redzams, ka nepieciešamas topoloģijas izmaiņas, ko izdarīt programmā **GAMBIT** ir sarežģīti un laikietilpīgi. Lai izveidotu strukturētu režģi, visos tilpuma apgabalos nepieciešams precīzi diskretizēt taisnes uz liektās līnijas.

Lai atvieglotu darbu, ir izveidoti vairāki *Pearl* skripti, kas ģenerē **GAMBIT** žurnāla failu, kurā ierakstītas visas veicamās darbības. Ja nepieciešams izmainīt kāda punkta koordinātes, skriptā atrod vietu, kur punkts tiek definēts, un nomaina tā koordinātes. Pēc skripta izpildes jaunais žurnāla fails tiek ielasīts **GAMBIT** un režģis aplūkots no jauna. Skripta izmantošanas galvenā priekšrocība ir iespēja piešķirt nosaukumu katram punktam, taisnei vai virsmai. Šādā veidā skriptā pēc režģa ģeometrijas izveides un topoloģijas uzbūvēšanas iespējams sagrupēt atbilstošās šķautnes, lai izveidotu diskretizāciju, kas atbilst strukturētam režģim.



Attēls 5.9. Kausējuma 3D ģeometrija ar asu nobīdi 5mm kopā ar izveidoto iekšējo struktūru un režģa robežslāni (pa kreisi) un pabeigts tilpuma režģis (pa labi).

Reālos procesos bieži veic kausējuma kakliņa nobīdi. Tas nozīmē, ka polikristāla un induktora asis tiek nobīdītas pret kristāla asi. Aplūkotajai sistēmai papildus tika izveidots režģis ar asu nobīdi 5mm, kas atbilst eksperimentam. Tiek izmantots *Pearl* skripts, kurš vertikālo serdi izveido no trīs tilpumiem. Vidējais un apakšējais serdes apgabals tiek sasniegts. Lai slīpums būtu minimāls, topoloģiju veido tādu, lai šie apgabali serdē būtu garāki z ass virzienā. Asu nobīdi veic tajā brīvās virsmas daļā, kur virsma ir praktiski horizontāla, punktus, kas atrodas tuvāk ITP punktam, rotējot ap nobīdīto asi. Rezultātā kausējuma augšējā daļā izveidojas gredzenveida tilpums, kura vienā pusē ir izstiepti, bet pretējā pusē saspīesti elementi. Lai samazinātu relatīvo atšķirību starp sastieptajiem un izstieptajiem elementiem, reģionu, kurā notiek nobīde, izvēlas pēc iespējas garāku (maksimālais ierobežojums ir horizontālā brīvās virsmas daļa).

Attēlos 5.8 un 5.9 redzams **GAMBIT** interfeiss ar izveidotajiem režģiem. Aksiālsimetriskais režģis sastāv no 71 000 šūnām, bet papildus tika izveidots arī režģis ar 162 000 šūnām. Rupjākais režģis domāts aprēķina iesākšanai, lai iegūtās aptuvenās lauku vērtības interpolētu uz smalkāka režģa. Šādā veidā tiek ietaupīts aprēķiniem veltītais laiks.

Gadījumam ar nobīdītu kakliņu liekto elementu dēļ ir grūtāk izveidot rupju režģi, tāpēc aprēķinam izmantots tikai režģis ar 143 000 šūnām.

5.2.2 Sistēmas 3D GEM režģa izveide AF EM lauka aprēķinam

3D silīcija kausējuma plūsmas aprēķinos uz kausējuma brīvās virsmas kā robežnosacījumi ātruma laukam tiek uzdoti elektromagnētiskie spēki un temperatūras laukam inducētā siltuma jauda.

Programma FZone jau ir veikusi un saglabājusi AF EM lauka aprēķina rezultātus, bet šie rezultāti ir derīgi tikai gadījumam ar aksiālsimetrisko kausējuma režģi. Nesimetriskā gadījumā ir nepieciešams izveidot induktora-silīcija sistēmu ar asu nobīdi un pārrēķināt AF EM lauka aprēķinu. Pieredze rāda, ka šādā veidā iespējams panākt smalkāku brīvās virsmas diskretizāciju, tāpēc šī darba ietvaros konsekventi pieturas pie AF EM lauka atkārtota aprēķina veikšanas arī aksiālsimetriskam kausējumam.

Induktora diskretizāciju mēs jau aplūkojām nodaļā 5.1.1. Ielasot šo induktoru programmā GAMBIT, tam nepieciešams pievienot un diskretizēt silīcija ģeometriju. Silīcija ģeometrija tiek izveidota programmā SolidWorks. Ģeometrija tiek definēta, izmantojot *sketch on plane* funkciju, ievadot polikristāla un kristāla virsmu, atvērtās kušanas frontes un brīvās virsmas punktu koordinātes no *co.bem* faila, tiek izveidots 2D kontūrs, 3D virsma tiek iegūta, rotējot kontūru ap asi ar iebūvēto funkciju *Revolved Boss/Base*. Gadījumā ar asu nobīdi tiek izveidoti divi kontūri, polikristālam atbilstošais kontūrs tiek rotēts ap nobīdītu asi, bet izveidotie tilpumi tiek savienoti ar iebūvēto funkciju *Lofted Boss/Base*.

Režģa ģeneratorā GAMBIT tiek ielasīts diskretizētais induktors, kuru jau izmantojām FZone aprēķinam, un papildus tiek importēta izveidotā silīcija ģeometrija. Silīcija virsma tiek diskretizēta ar neregulāriem trīsstūrveida elementiem, īpašu vērību pievēršot kausējuma brīvās virsmas diskretizācijai. Induktora virsmas jau ir definētas, bet papildus nepieciešams silīcija virsmas nosaukt par SILICON. Asu nobīdes gadījumā induktors tiek pozicionēts atbilstoši nobīdes vērtībām.

5.2.3 3D AF EM aprēķins

3D AF EM lauka aprēķinam tiek izmantota programma HFEM3D. Šis pats modelis ir iestrādāts programmā FZone, bet, lietojot aprēķinu atsevišķi, nepieciešams prast to lietot.

Aprēķina veikšana notiek ar komandrindiņu palīdzību. Attēlā 5.10 redzams programmas interfeiss. Lai definētu aprēķinu, lieto *import* funkciju:

```
hfem3d.exe import sistema.neu rez
```

```

Copyright (C) 1996-2000 Eugene Roshal, Copyright (C) 2000-2011 Far Group
D:\...rys_32\2D_HFEM\2\nobidits\hfem3d>hfem3d_v1_0_2.exe
HFEM3D - Version 1.0.2 (2011 May)
Usage: hfem3d.exe <action> [source] [destination]

Where <action> is one of the following:
?      - detailed documentation
import - for the import of Gambit NEU files
calcpsi - calculates stream function
calcgen - calculates EM power and pressure
calcvol - calculates voltage
paraview - creates files for paraview
calc    - calculates stream function, EM power and pressure, finally generates
paraview files

Where <source> can be:
1) Gambit NEU file if action=import else
2) folder with files needed for calculation (mesh and parameters)

Where [destination] is the folder for generated results, if omitted then destina
tion=source

D:\...rys_32\2D_HFEM\2\nobidits\hfem3d>
1Help 2UserMn 3View 4Edit 5Copy 6RenMov 7kFold 8Delete 9ConfMn 10Quit

```

Attēls 5.10. HFEM3D interfeiss.

Šajā gadījumā *sistema.neu* fails ir GAMBIT izveidotais sistēmas režģis. Darba mapē tiek izveidota apakšmape ar nosaukumu *rez*, kurā glabājas divi faili - režģa informācijas fails un parametru fails, kura struktūra ir šāda:

[Parts]

SILICON=1.2e6 electrical conductivity [S/m]

INDUCTOR=5e7 electrical conductivity [S/m]

[PsiSolver]

Tolerance=1e-6 numerical precision for LA solver

MaxIter=15000 maximal count of iterations for LA solver

Omega=1.8 numerical parameter for LA solver, must be in range 0..2

ConvCrit=0 convergence criterion absolute - 0,relative - 1

[QemSolver]

Frequency=3.00e6 EM field frequency [HZ]

Current=899.1 total current of the inductor [A]

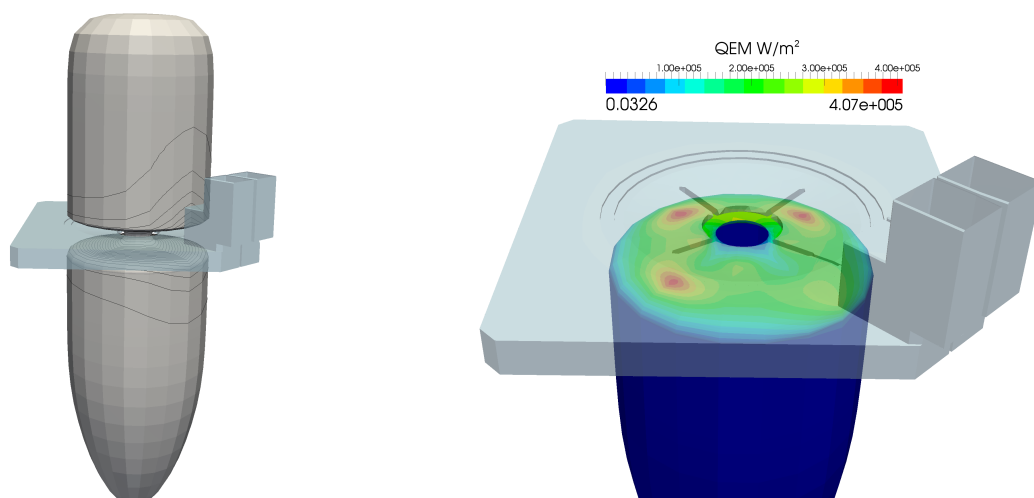
Failā nepieciešams definēt silīcija un induktora elektrovadītspējas vērtības, solvera konverģences kritērijus un fizikālos parametrus - induktorā plūstošās AF strāvas frekvenci un stiprumu ampēros. Pēdējās divas vērtības tiek saņemtas no FZone aprēķina rezultāta *phys.par* faila.

Kad ievadīti nepieciešamie lielumi, ar komandas

`hfem3d.exe calc rez`

palīdzību iespējams startēt aprēķinu. Komanda *calc* nodrošina, ka tiks izrēķināta strāvas funkcija Ψ , izrēķinātas siltuma plūsmas blīvuma vērtības un izveidoti izejfaili, kas atbilst programmas Paraview pieprasītajam formātam. Attēlā 5.11 redzami programmā Paraview attēlotie aprēķina rezultāti - strāvas līnijas uz silīcija un inducētā siltuma blī-

vuma sadalījums. Zem induktora papildspraugām redzams strāvas līniju sablīvējums, kas atbilst inducētās siltuma plūsmas maksimumam.



Attēls 5.11. Sistēma ar strāvas līnijām uz silīcija visām daļām (pa kreisi) un inducētā siltuma blīvuma sadalījums (pa labi) uz silīcija brīvās virsmas.

5.2.4 3D HD aprēķinu veikšana

3D plūsmas aprēķins ir apjomīgs un tiek veikts uz LU klāstera. Aprēķini tiek veikti izmantojot atvērtā koda bibliotēku **OpenFOAM**, līdz ar to nepieciešams darboties Linux vidē. Visas darbības tiek veiktas ar komandrindīņas palīdzību.

OpenFOAM aprēķina darba mapei ir strikti noteikta struktūra, kura ir jāievēro katru reizi, veicot aprēķinu. Uzsākot aprēķinu, darba mapē jāatrodas iepriekš izveidotajam režģim un četrām apakšmapēm:

- 0 - satur informāciju par temperatūras, ātruma, koncentrācijas un spiediena laukiem aprēķina sākumā. Uzdotas sākuma vērtības kausējuma tilpumā un robežnosacījumi uz visām virsmām;
- constant - satur informāciju par fizikālajām konstantēm;
- emdir - teksta failus, kas kopā nosaka EM lauka aprēķina sistēmas ģeometriju un iegūtos rezultātus;
- system - satur aprēķina skaitliskos parametrus.

GAMBIT izveidotais režģis ir metru skalā, tāpēc ar komandas

```
meshconvert.pl ./71k/71k.msh ./71k/a.msh
```

palīdzību režģi samazina 1000 reizes. *meshconvert.pl* ir skripts, kurš veic konvertēšanu, bet *a.msh* ir mm skalā iegūtais režģis.

Izveidoto režģi iespējams pārvērst par OpenFOAM režģi ar komandas

```
fluentMeshToFoam . 71k ./71k/a.msh
```

palīdzību. Mapē *constant* tiek izveidota apakšmape *mesh*, kurā noglabāta visa režģa informācija, ieskaitot īpaši izdalītās zonas.

Lai iegūtu aprēķina laiku, izveidoto režģi nepieciešams pārnumurēt. To var izdarīt ar sekojošu komandu:

```
renumberMesh ./71k
```

Kad pilnībā definēts aprēķina režģis, uz kausējuma brīvās virsmas iespējams interpolēt EM spēku vērtības, kas iegūtas 3D AF EM lauka aprēķinā. Šim nolūkam tiek izmantota sekojoša komanda:

```
./mkEM ./71k/emdir ./71k,
```

kur *mkEM* ir skripts, kurš veic rezultātu interpolāciju. Mapē *constant* tiek izveidots fails *emsurf.immu*, kuru nepieciešams pārvietot uz mapi *exchange*.

Tā kā aprēķini ir ļoti apjomīgi, tiek izmantota daudzprocesoru pieeja. Silīcija kausējuma režģis, atkarībā no režģa izmēriem, tiek dalīts četros vai astoņos apgabalos. Informācija par to, kā tiks dalīts aprēķina apgabals, atrodas *system* mapē failā *decomposeParDict*. Šim aprēķinam izmantots dalījums četrās daļās, šķēlot kausējumu ar *xz* un *yz* plaknēm. Palaižot komandu

```
decomposePar . 71k
```

darba mapē parādās četras jaunas mapes, katra saturot informāciju par vienu no procesoriem. Katrā no šīm mapēm atrodas apakšmape 0, kas satur lauku sākuma vērtības atbilstošajā apgabalā.

Kad viss sagatavots, ar komandas

```
nohup ./fzsiDirectMulti4 . 71k >./71k/log.txt &
```

palīdzību startē aprēķinu. Pirmā komanda nodrošina to, ka aprēķins turpināsies arī tad, ka pametīsiet LiNux vidi, kas ir ļoti parocīgi, ņemot vērā, ka aprēķins var ilgt vairākas dienas. Pēdējā komanda nodrošina, lai izveidotu failu *log.txt*, kurā saglabātu visu informāciju par ritošo aprēķinu.

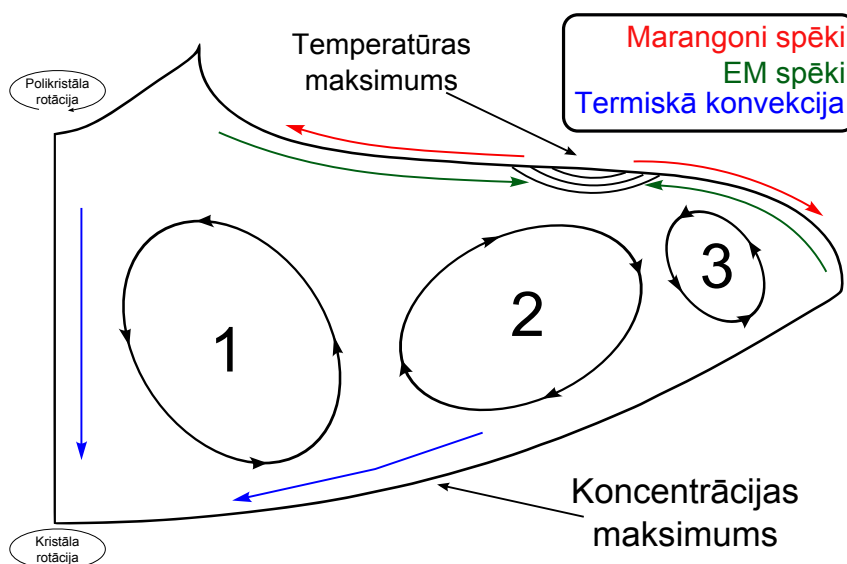
5.2.5 Rezultātu vizualizācija un procesa raksturīgāko pazīmju analīze

Lai labāk izprastu darbā veiktās studijas, šajā apakšnodaļā tiks izskaidrota plūsmas virpuļu forma un uzvedība, rašanās iemesli un plūsmas ietekme uz īpatnējās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā. Aprēķināto lauku vizualizācijai izmantota programma

Paraview. Tā kā plūsma ir nestacionāra, tiek attēlotas laikā vidējotās lauku vērtības, laiks, pār kuru notiek vidējošana, tiek izvēlēts tāds, lai aptuveni sakristu ar vienu rotācijas periodu.

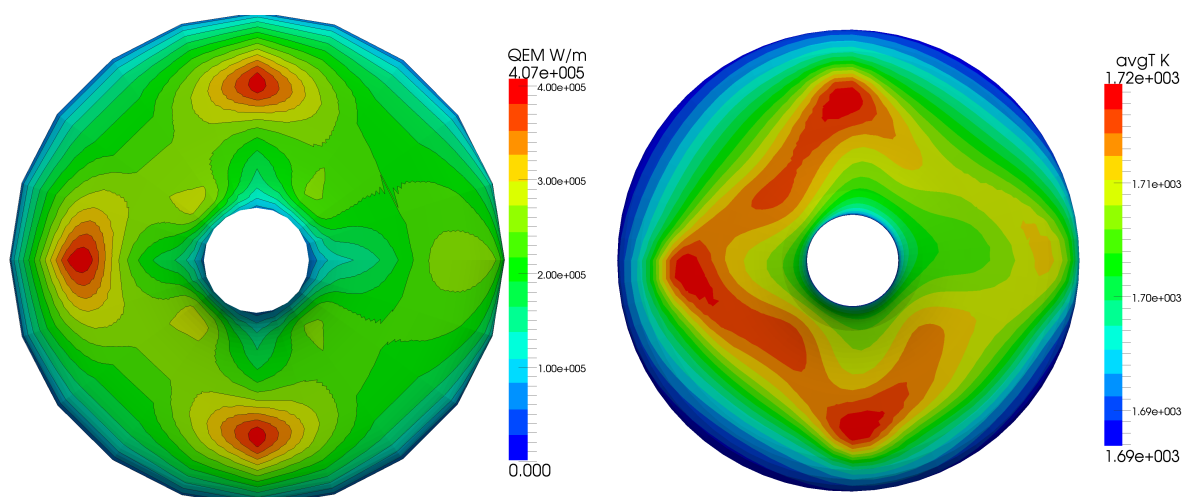
Attēlā 5.13 redzams induktora inducētās jaudas blīvums un laikā vidējots temperatūras sadalījums uz kausējuma brīvās virsmas. Analītiski šo lauku sadalījumus uz virsmas jābūt proporcionāliem, bet redzams, ka temperatūras lauks ir mazliet izplūdis. Šis efekts skaidrojams ar to, ka, kristālam rotējot, tiek iekustināts viss šķidrums kausējuma tilpumā. Attēlā 5.14 vizuāli attēlots azimutālā ātruma vektorlauks ETP līnijas plaknē. Azimutālā ātruma vērtības sasniedz nedaudz vairāk par 2 cm/s plūsmas virpuļu reģionos, bet pārējā kausējuma tilpumā saglabā apmēram 1 cm/s vērtību.

Neraugoties uz kausējuma rotācijas kustību, uz brīvās virsmas saglabājas liels temperatūras gradients, it īpaši reģionos zem papildspraugām. Šie maksimumi uz kausējuma virsmas rada EM un marangoni spēkus, kuru dēļ kausējumā veidojas izteikti plūsmas virpuļi. Attēlā 5.12 shematiski parādīti uz sistēmu darbojošie spēki un to ietekme uz plūsmas kustību. Marangoni spēki darbojas uz virsmas, velkot šķidrumu prom no karstākās vietas uz aukstāko, un ir proporcionāli virsmas sprieguma gradientam pēc temperatūras (marangoni koeficients). EM spēki darbojas pretēji Marangoni spēkiem un ir proporcionāli strāvas blīvuma kvadrātam. Svarīgi ņemt vērā, ka pie tik augstām inducētās jaudas vērtībām EM spēkiem šajā mijiedarbībā ir lielāka ietekme, tāpēc plūsmas virpuļi tilpumā vērsti virzienā uz temperatūras maksimumu.



Attēls 5.12. Plūsmas virpuļu veidošanās shematisks zīmējums.

Attēlā 5.15 parādīts laikā vidējota ātruma moduļa sadalījums raksturīgos kausējuma šķēlumos. Ātruma vērtības uz brīvās virsmas temperatūras maksimumu tuvumā skaitlisku efektu dēļ mēdz sasniegt vērtības līdz pat 8 cm/s, bet šīs vērtības ļoti ātri nodilst kausējuma tilpumā. Lai uzskatāmāk parādītu ātruma sadalījumus, vērtības attēlotas



Attēls 5.13. Inducētā siltuma blīvuma sadalījums (pa kreisi) un laikā vidējotas temperatūras sadalījums (pa labi) uz kausējuma brīvās virsmas.

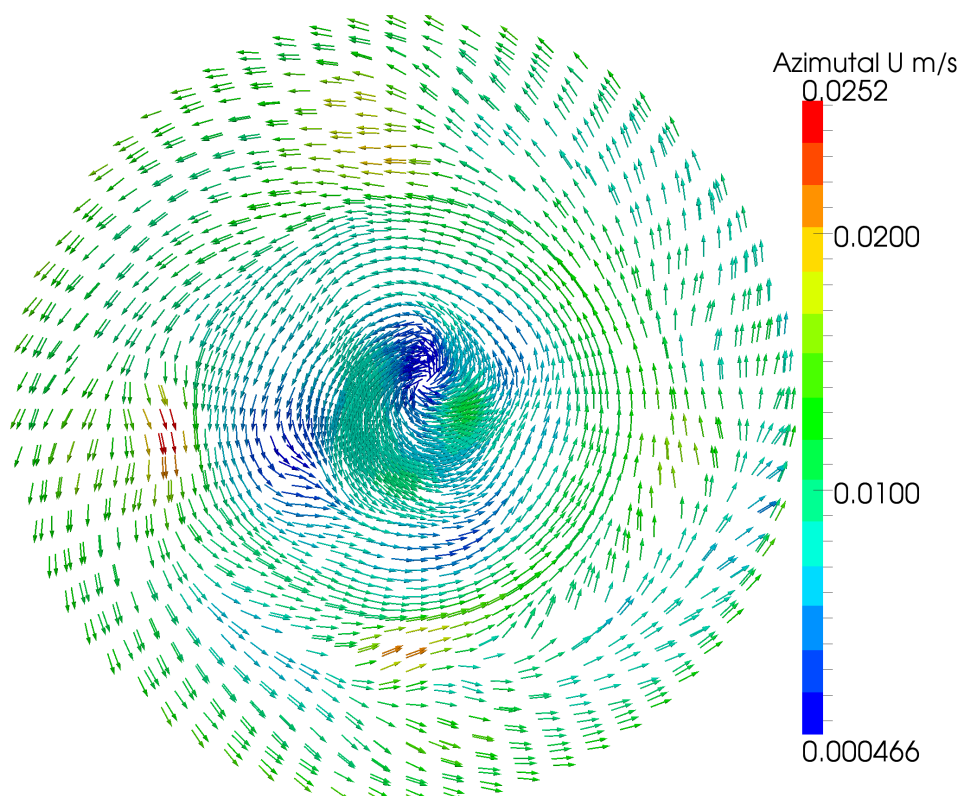
ierobežotā intervālā. Aplūkojot laukus, redzams, ka reģionos zem papildspraugām kausējuma kustība ir aktīvāka, pie tam zem papildspraugas pretī galvenajai spraugai plūsmas ātruma vērtības ir augstākas nekā zem blakus papildspraugām. Neliels ātruma lauka maksimums redzams arī zem galvenās spraugas, bet, salīdzinot vērtības, tas jau ir tuvāks videjai kausējuma kustībai.

Attēlos 5.16 un 5.17 attēlota plūsmas vertikālā šķērsriezuma komponentes ar detalizēti izzīmētiem temperatūras un koncentrācijas maksimumiem. Aplūkojot ātruma vektorlauku šķēlumā perpendikulāri induktora galvenās spraugas plaknei, redzama pret centrālo asi simetriska aina, bet galvenās spraugas plaknes šķēlumā šī simetrija vairs nav tik izteikta, jo virpuļi zem galvenās spraugas ir daudz vājāki nekā tam pretējais.

Detalizētajos papildattēlos ilustrēts, kā temperatūras maksimumos darbojas 5.12 attēlā ieskicētie spēki un izveidojas plūsmas virpuļi. Šis pats efekts uz brīvās virsmas ilustrēts 3D attēlā 5.18. Redzams, ka ātruma vektori tiek "ierauti" temperatūras maksimumā arī no sāniem, tātad plūsmas līnijas zem temperatūras maksimumiem veido nesimetrisku tora formu. Attēlos 5.16 un 5.17 izzīmētas arī vietas, kur virpuļi "sadzen" piemaisījumus. Šajos reģionos izveidojas koncentrācijas maksimumi, kas atbilst īpatnējās pretestības minimumam.

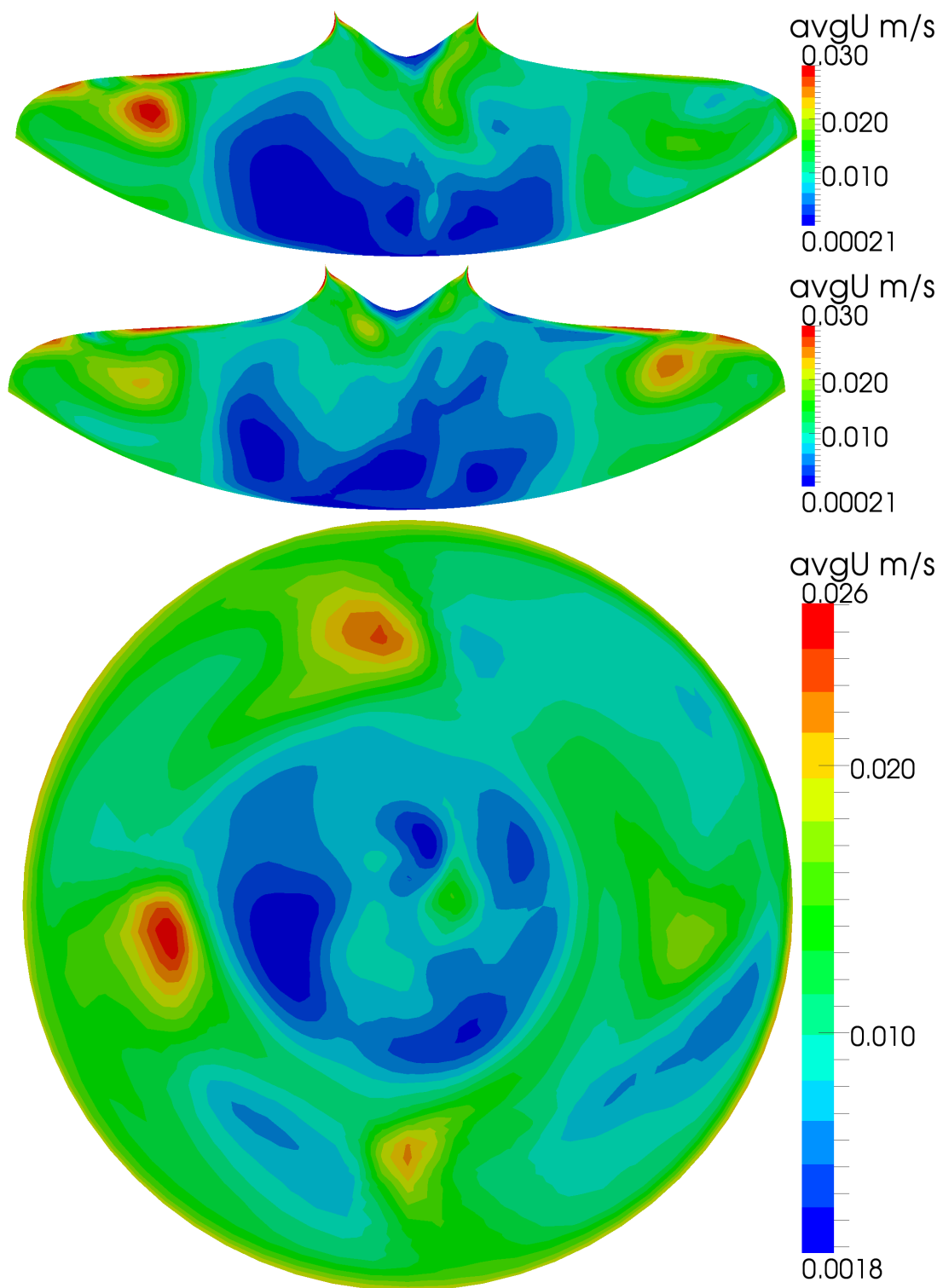
Kristāla rotācijas dēļ virpuļu izveidotie koncentrācijas maksimumi tiek izsmērēti pa visu kristalizācijas fronti, veidojot paaugstinātas koncentrācijas riņķi. Attēlā 5.21 redzams laikā vidējots koncentrācijas sadalījums uz kristalizācijas frontes un pēc formulas (3.41) iegūtais normalizēts radiālās pretestības grafiks. Ja iegūto grafiku zīmētu pilnam diametram, iegūtu "W" formas profilu, kas ir klasiski sagaidāma pretestības profila izskats. Šāds profils jau iegūts skaitliskajos aprēķinos [13] kā arī eksperimentālajos datos [18].

Pretestības grafika izkliede no vidējotās līknes (sarkanā līkne) skaidrojama ar di-

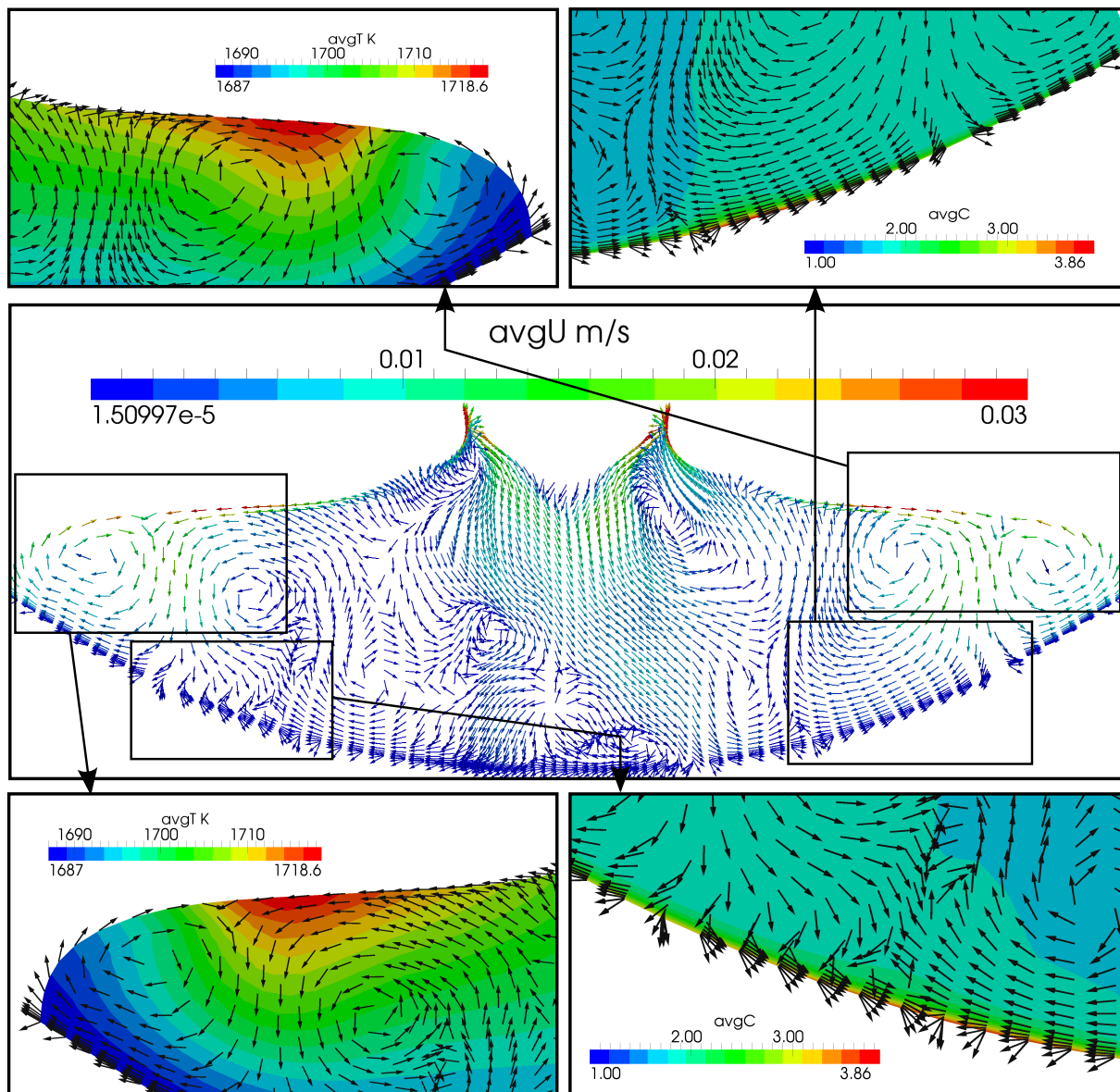


Attēls 5.14. Azimutālā ātruma vektori horizontālā kausējuma šķēlumā ETP līnijas plaknē.

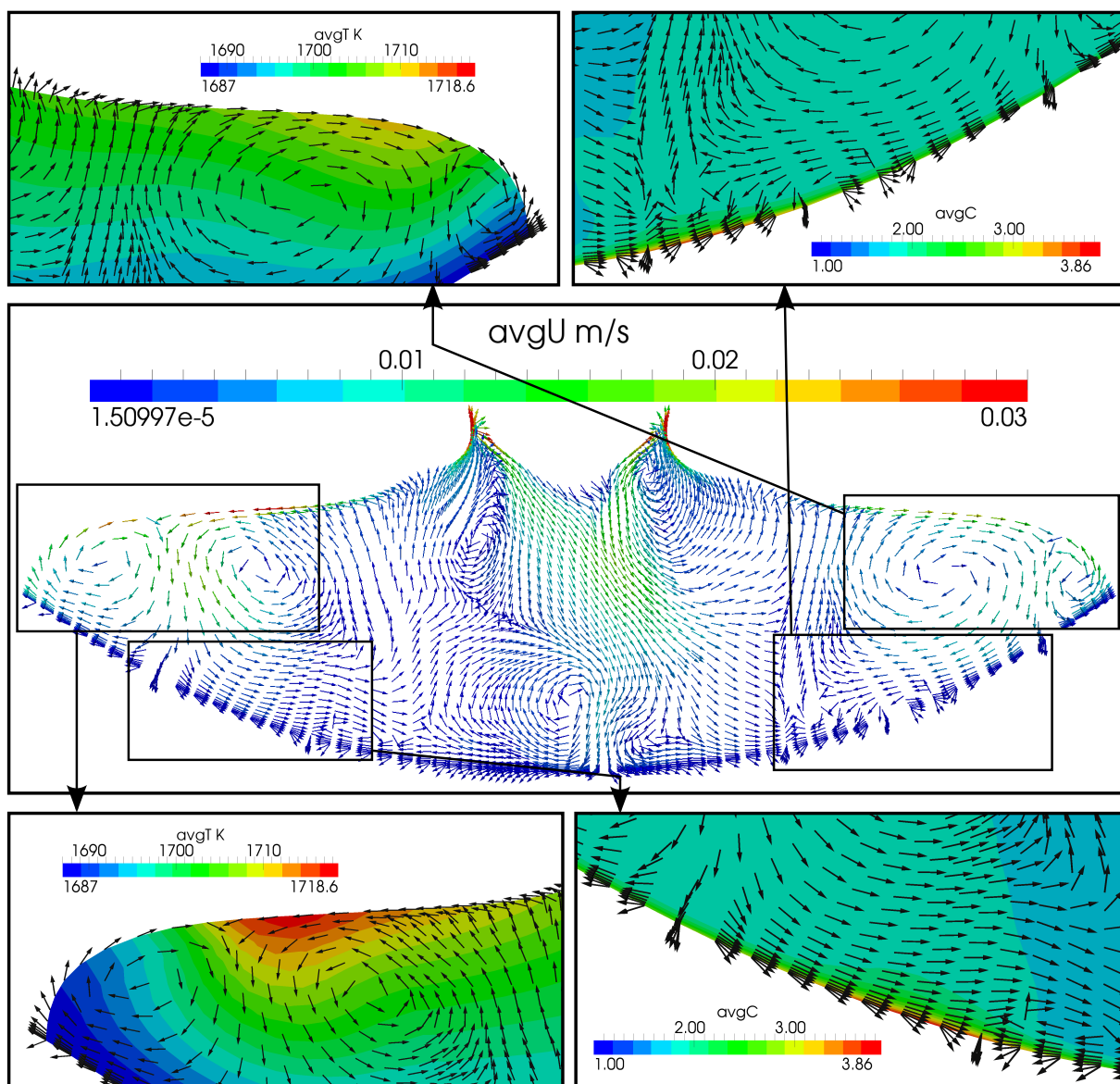
viem iemesliem: stari, uz kuriem tiek rēķināts $\rho(r)$, tiek vilkti pēc gadījuma principa dažādos laika soļos un hidrodinamisko svārstību dēļ. Lai novērtētu, kurā brīdī hidrodinamiskās svārstības ir izgājušas uz kādu stacionāru stāvokli, uz kristalizācijas ass un divos kristāla radiusa viduspunktos tiek definēti probu punkti 0,5, 1,5 un 3 mm augstumā virs kristalizācijas frontes, kuros tiek ierakstītas visu fizikālo lauku vērtības visos laika soļos. Attēlā 5.20 attēlotas ātruma un koncentrāciju oscilācijas laikā. Redzams, ka ātruma lauka oscilācijas ietekmē koncentrācijas sadalījumu kristalizācijas frontes tuvumā. Radiālās pretestības sadalījumu zīmē, ņemot vērtības, sākot no 120. sekundes.



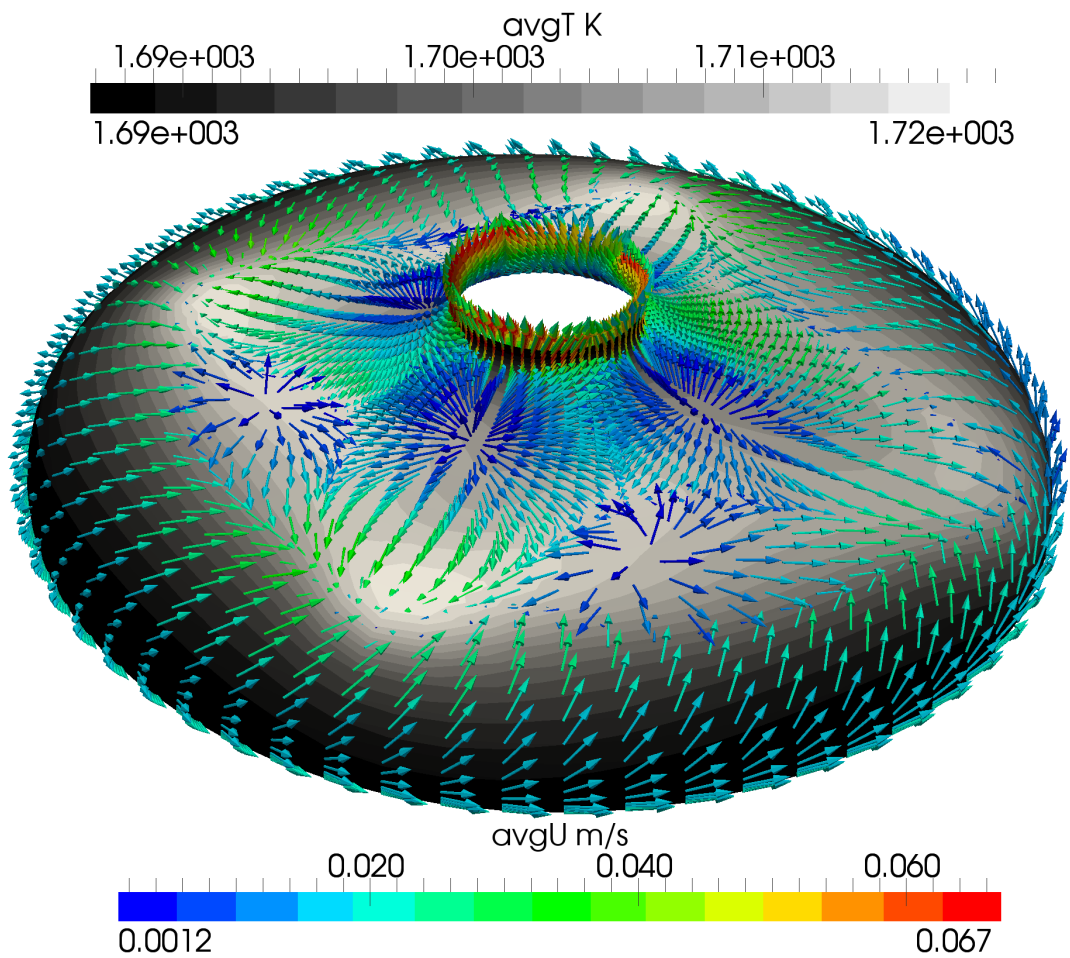
Attēls 5.15. Laikā vidējots ātruma moduļa lauks. No augšas uz leju - vertikāls šķērsriezums induktora galvenās spraugas plaknē, vertikāls šķērsriezums induktora galvenajai spraugai perpendikulārā plaknē un horizontālā šķērsgriezumā ATP līnijas plaknē.



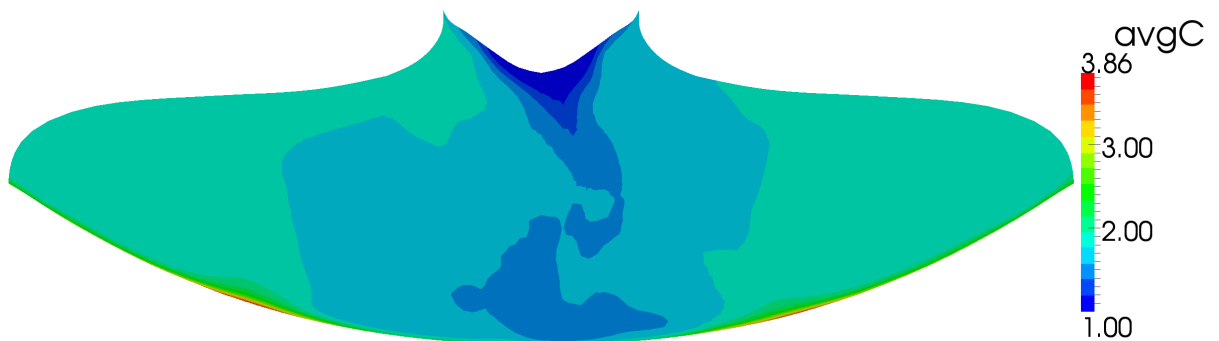
Attēls 5.16. Ātruma vektori vertikālā kausējuma šķērs griezumā perpendikulāri induktora galvenās spraugas plaknei ar detalizēti izzīmētiem temperatūras maksimumiem zem induktora spraugām un piemaisījumu koncentrācijas maksimuma un minimuma apgabaliem uz kristalizācijas frontes.



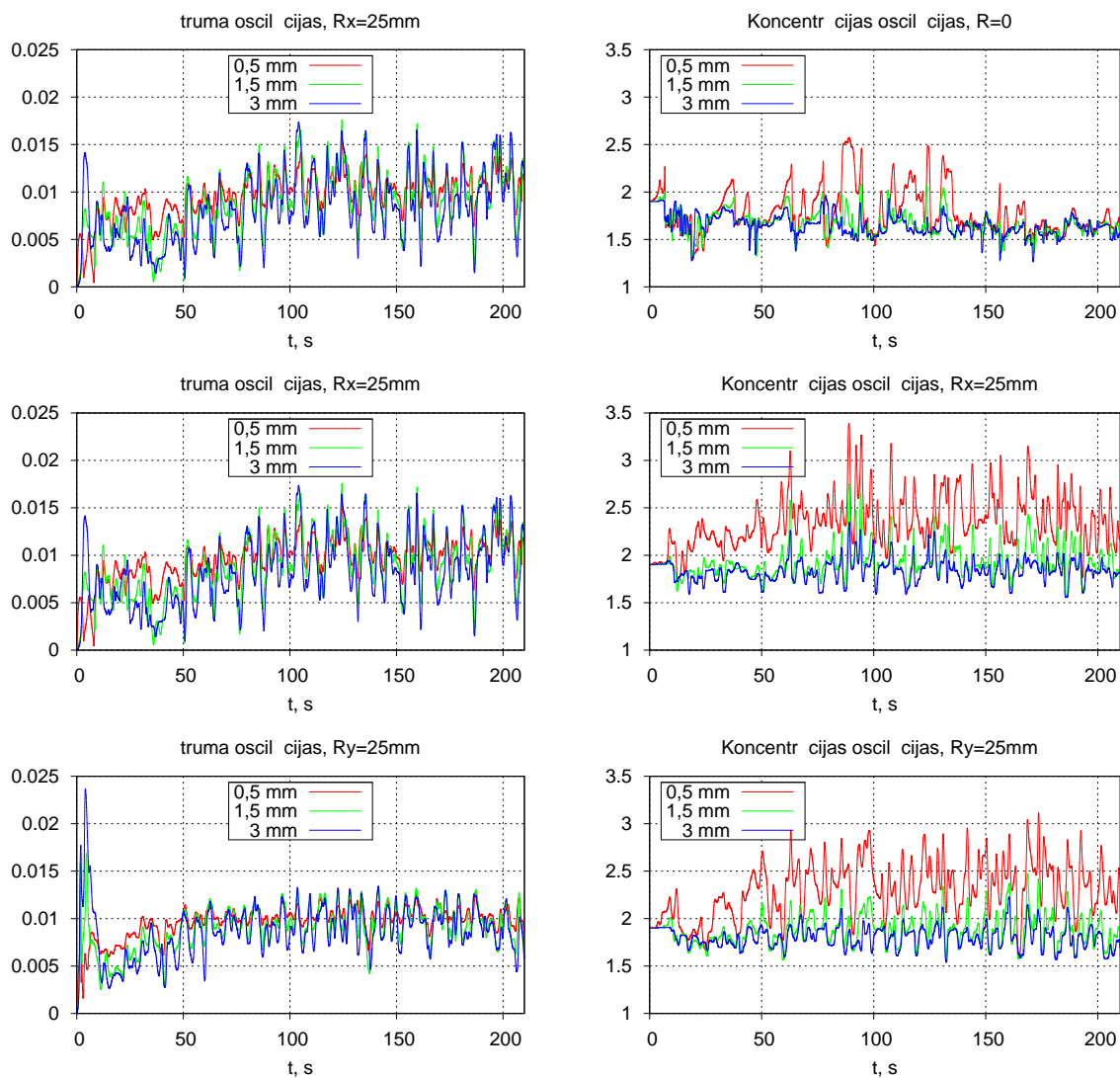
Attēls 5.17. Ātruma vektori vertikālā kausējuma šķērs griezumā induktora galvenās spraugas plaknē ar detalizēti izzīmētiem temperatūras maksimumiem zem induktora spraugas pretī galvenajai spraugai (apakšējie attēli) un zem induktora galvenās spraugas (augšējie attēli) un piemaisījumu koncentrācijas maksimuma un minimuma apgabaliem uz kristalizācijas frontes.



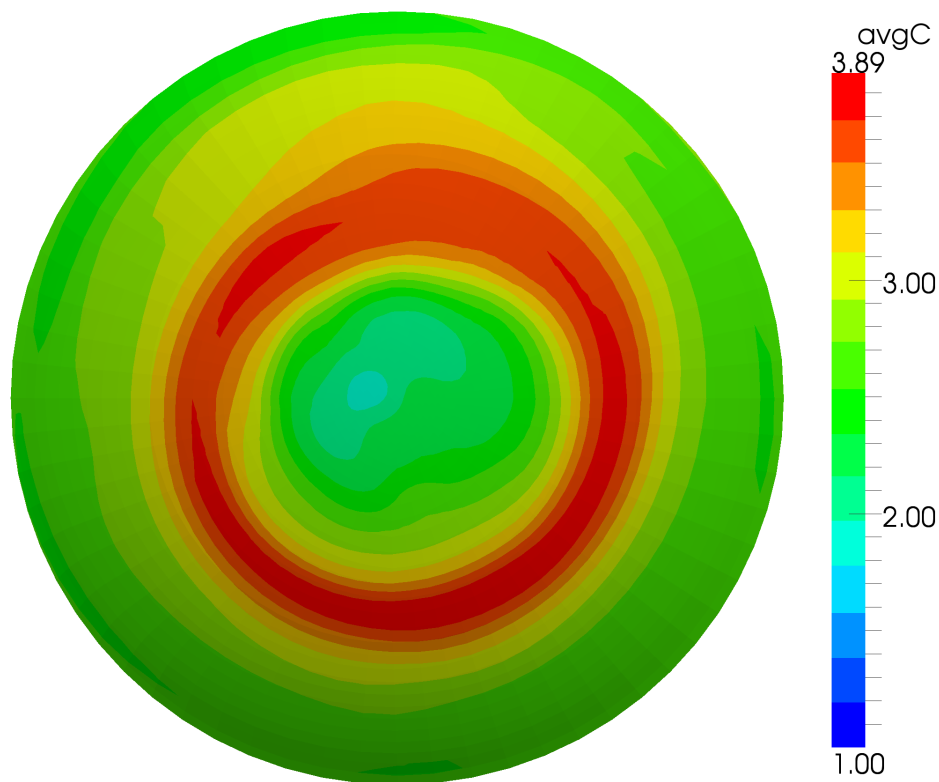
Attēls 5.18. Laikā vidējots temperatūras sadalījums un laikā vidējots ātruma vektorlauks uz kausējuma brīvās virsmas.



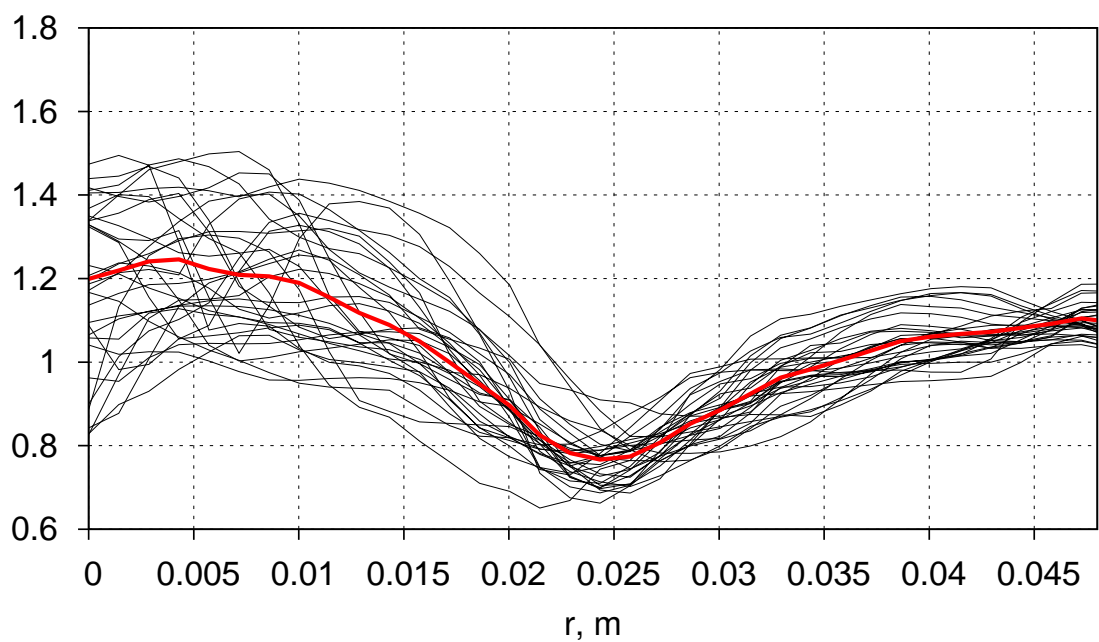
Attēls 5.19. Laikā vidējots koncentrācijas lauks induktora galvenās spraugas plaknes vertikālā šķērsgriezumā.



Attēls 5.20. Ātruma moduļa (pa kreisi) un koncentrācijas (pa labi) svārstības laikā. No augšas uz leju - punkti uz centrālās ass, punkti radiusa viduspunktā zem induktora galvenās spraugas un punkti radiusa viduspunktā zem sānu papildspraugas.



Radiālās pretestības sadalījums



Attēls 5.21. Laikā vidējots koncentrācijas lauks uz kristalizācijas frontes (augšā) un normalizēts radiālās pretestības sadalījums (apakšā).

6 DAŽĀDU FAKTORU IETEKME UZ KAUSĒJUMA HD UN UZ RADIĀLO PRETESTĪBAS SADALĪJUMU KRISTĀLĀ

Šajā nodaļā prezentēti skaitlisko studiju aprēķinu rezultāti, pētīta dažādu faktoru ietekme uz radiālās pretestības sadalījumiem.

Pirmajā apakšnodaļā veikti FZone fāzu robežu aprēķini, izmantojot 2D un 3D AF EM lauka aprēķina pieejas, veikti HD aprēķini un salīdzināti iegūtie radiālās pretestības grafiki. Talāk nodaļā veiktas studijas, lai novērtētu atsevišķu parametru ietekmi uz kausējuma HD un radiālās pretestības sadalījumiem. Nodaļas beigās apkopoti iegūtie priekšstati un secinājumi par plūsmas jutīgumu uz pētītajiem aspektiem.

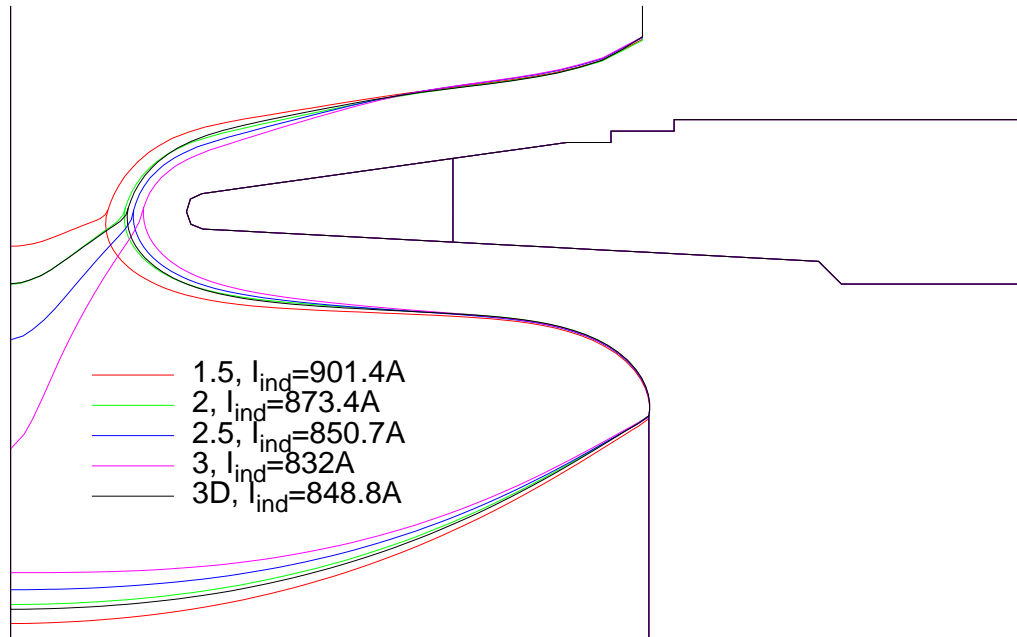
6.1 FZone 2D un 3D AF EM lauka aprēķina ietekme

Darbā [14] izpētīts, ka, salīdzinot aprēķinus, kur lietoti 2D un 3D AF EM moduļi, sakrītošas fāzu robežas iegūst aprēķiniem, kur izmantotās efektīvās spraugas platums ir mazāks nekā 3D induktoram. Šajā nodaļā tiek pētīts, kādu ietekmi 3D AF EM moduļa iekļaušana FZone aprēķinā atstāj uz radiālajiem pretestības sadalījumiem.

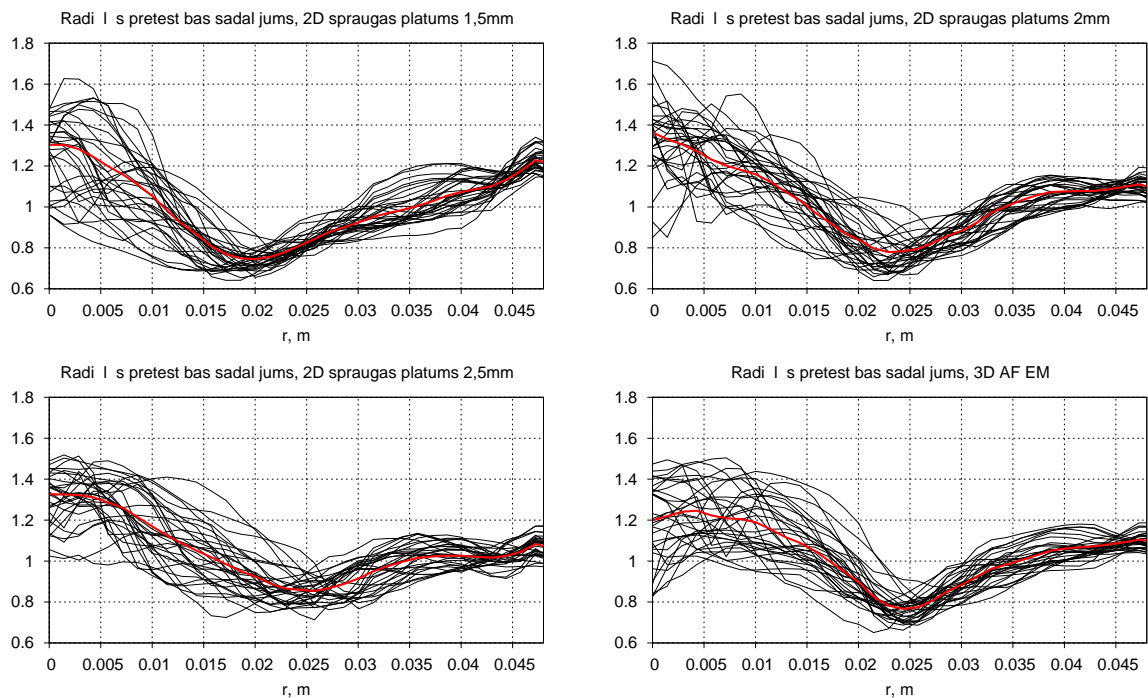
Šim nolūkam tika veikti vairāki FZone fāzu robežas aprēķini, variējot induktora efektīvo spraugas platumu robežās 1-4mm ar soli 0,5mm. Gadījumi ar lielu spraugas platumu nekonverģēja, jo pārāk vājais magnētiskais lauks kakliņa reģionā nespēja nokausēt kušanas fronti un tā ietricās kristalizācijas frontē. Attiecīgi gadījumi ar mazu efektīvās spraugas platumu pārkausēja kakliņu, jo lauks spraugu reģionā ir pārāk spēcīgs.

Attēlā 6.1 apkopotas iegūtās fāzu robežas un salīdzinātas ar 3D AF EM aprēķina rezultātu. Kā redzams, tad, lietojot īsto spraugas platumu 3mm, robežas uzrāda sliktu sakritību, tāpēc šis variants tālāk netiek aplūkots. Labākā sakritība redzama pie spraugas platuma 2mm, bet arī pie 1,5 un 2,5mm spraugas platumiem fāzu robežas ir tuvas 3D AF EM moduļa aprēķinātajām.

Aplūkojamiem četriem variantiem tika veikti HD aprēķini. Visiem aprēķiniem tika izmantoti režģi ar 75 000 šūnām, laika solis 1ms. Katram aprēķinam tika pielāgota atbilstošā no FZone aprēķiniem iegūtā induktora strāvas vērtība. Attēlā 6.2 redzami iegūtie radiālās pretestības sadalījumi.



Attēls 6.1. Aprēķinātās fāzu robežas. Dažādi efektīvo spraugas platumi salīdzināti ar 3D AF EM aprēķina pieejas fāzu robežām.



Attēls 6.2. Iegūtie radiālās pretestības grafiki.

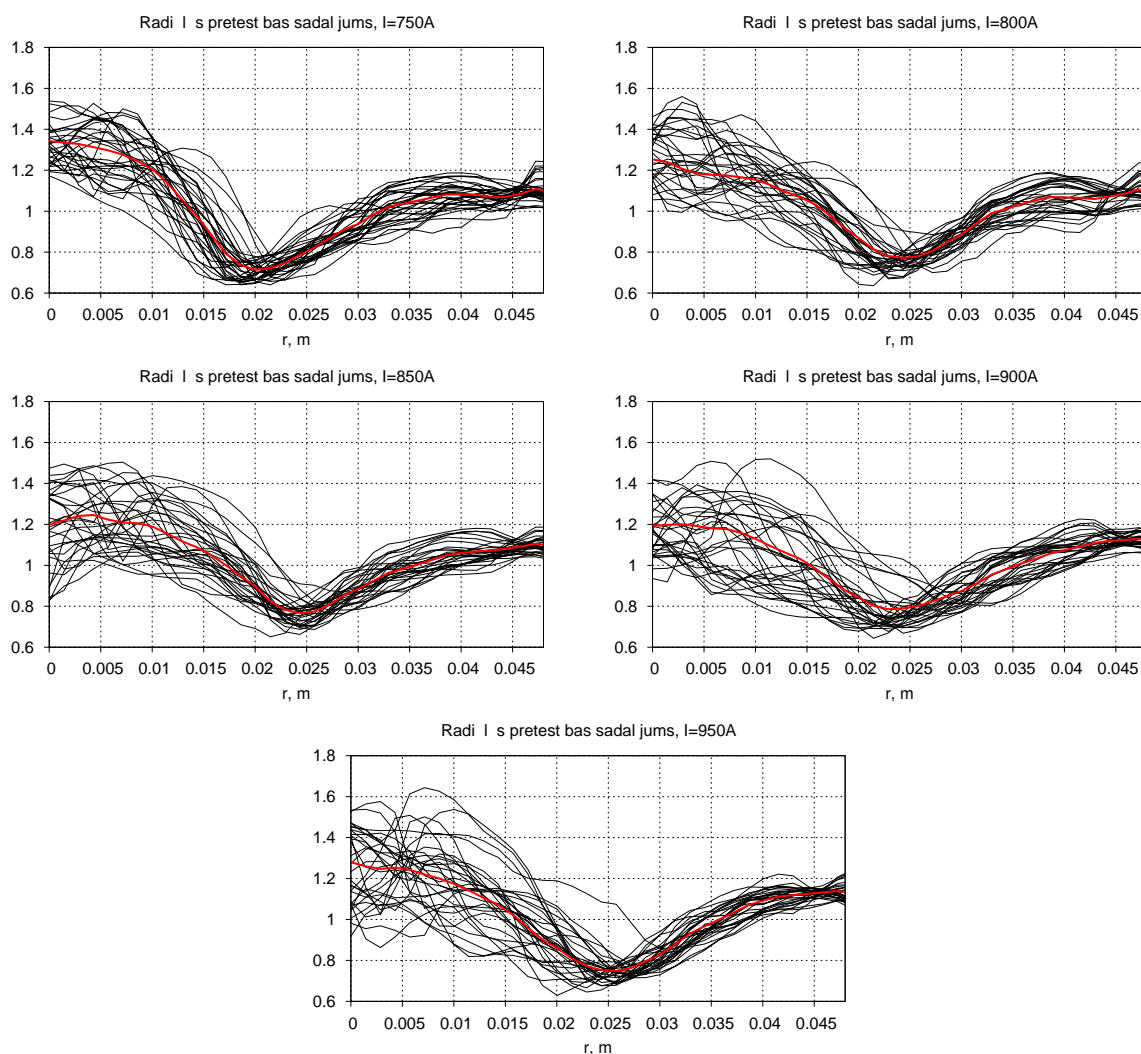
Visos gadījumos redzams klasiskais "W" profils, bet radiālo pretestību grafiku forma katrā gadījumā ir savādāka, tāpēc varam secināt, ka 2D AF EM aprēķina izmantošanai FZone fāzu robežu aprēķinā ir ietekme uz radiālās pretestības sadalījumu kristālā.

6.2 Induktora strāvas vērtības ietekme

Šajā apakšnodaļā pētīta AF induktora strāvas ietekme uz radiālās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā. Šim nolūkam veikti pieci aprēķini pie fiksētas kausējuma ģeometrijas, režģa un silīcija fizikālajiem parametriem, mainot strāvas vērtību.

Aprēķinā izmantotās kausējuma formas iegūšana un tilpuma režģa izveide jau izklāstīta nodaļā 5. Lai modelētu atšķirīgas strāvas, EM lauks tika pārrēķināts piecas reizes, mainot strāvas vērtību no 750A uz augšu ar soli 50A. Visos gadījumos tika lietots viens un tas pats 3D REM režģis.

Attēlā 6.3 apkopoti iegūtie normalizētie radiālās pretestības grafiki. Kā redzams, izmantojot mazāku strāvas vērtību, pretestības minimums pārbīdās tuvāk uz centrālās ass pusi. EM spēki ir vājāki nekā lielu strāvu gadījumā un attēlā 5.12 ilustrētais otrais virpulis iespīžas dziļāk kausējumā, tāpēc arī koncentrācijas maksimums uz kristalizācijas frontes pietuvojas centram.



Attēls 6.3. Pie dažādām induktora strāvas vērtībām iegūtie radiālās pretestības grafiki.

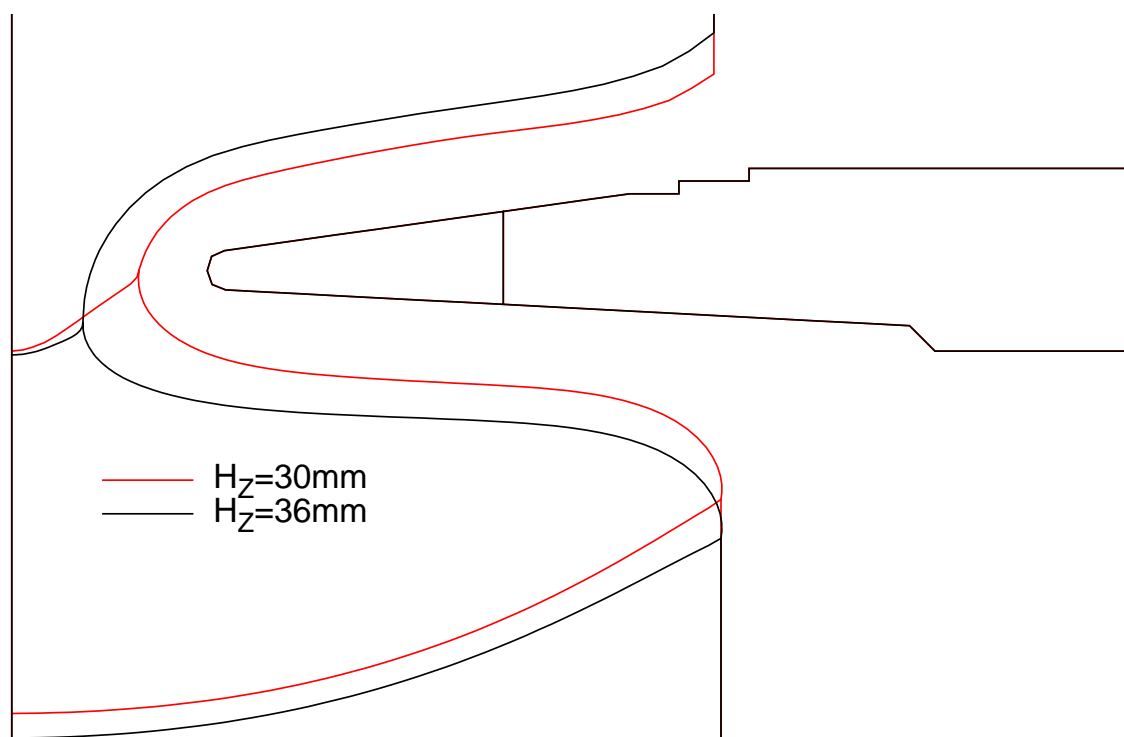
6.3 Kausējuma formas ietekme

Šajā apakšnodaļā pētīta kausējuma ģeometrijas ietekme uz radiālās pretestības sadalījumiem. Šim nolūkam salīdzināti divu HD aprēķinu rezultāti, izmantojot dažādu kausējuma ģeometriju, bet saglabājot konstantu induktora stāvas vērtību.

Tabula 6.1. Nokonverģējušu aprēķinu raksturlielumi.

Parametrs, mērvienība	$H_Z = 30mm$	$H_Z = 36mm$
Strāva induktorā I_{ind} , A	848	924
Kristalizācijas frontes dziļums H_C , mm	15,3	14,2

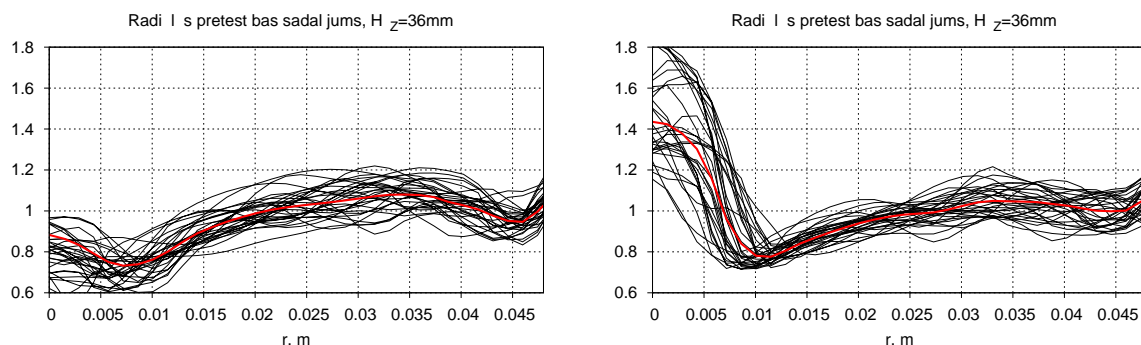
Veidojot kausējuma tilpuma režģi, programmā **GAMBIT** iespējams modificēt kausējuma ģeometriju, bet, pielietojot šādu pieeju, nav iespējams apgalvot, ka izmantotā forma ir reāli iespējama. Šī iesmesla dēļ tika veikts papildus **FZone** fāzu robežu aprēķins, mainot mērķa zonas augstumu no 30 uz 36mm. Attēlā 6.4 redzamas iegūtas fāzu robežas abiem aprēķina gadījumiem. Tabulā 6.1 salīdzināti induktora strāvas un kristalizācijas frontes dziļumi.



Attēls 6.4. Aprēķinātās fāzu robežas. Sarkana krāsa - $H_Z = 30mm$, melna krāsa - $H_Z = 36mm$.

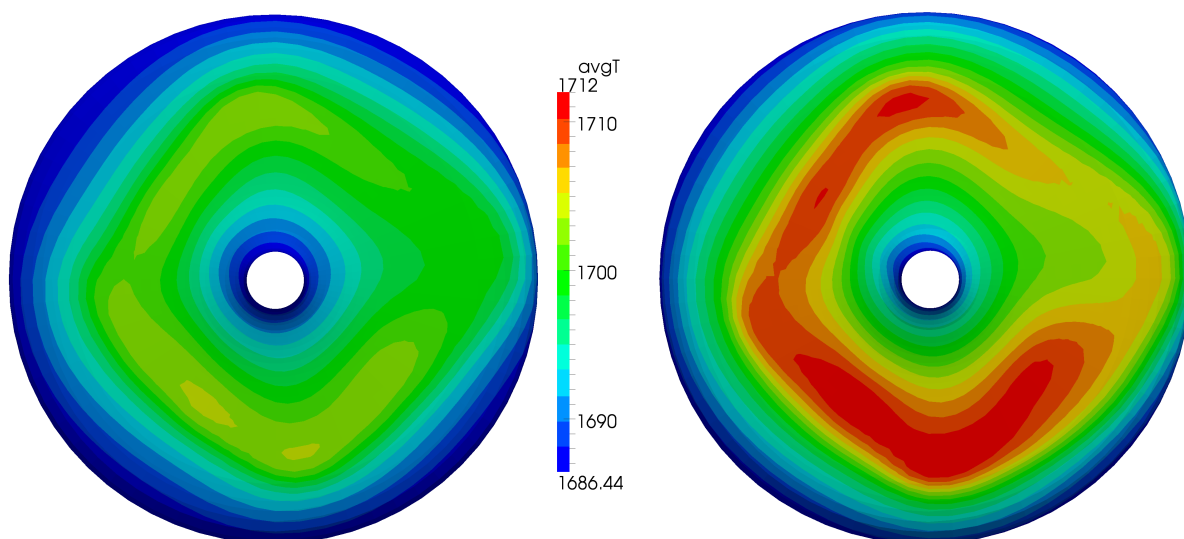
Lai novērtētu tikai formas ietekmi uz radiālās pretestības sadalījumu kristālā, gadī-

jumam ar $H_Z = 36\text{mm}$ tika veikts HD aprēķins, izmantojot $H_Z = 30\text{mm}$ aprēķina strāvas vērtību $I_{ind} = 848\text{A}$. Iegūtais radiālās pretestības grafiks (att.6.5 pa labi) ir pazaudējis klasiskā "W" profila formu. Papildus veikts aprēķins ar īsto strāvas vērtību $I_{ind} = 924$ un iegūts pretestības sadalījums, kas kvalitatīvi atgādina "W" profilu, bet minimums ir ļoti tuvu centrālajai asij.



Attēls 6.5. Radiālie pretestības sadalījumi. Pa kreisi - gadījums ar strāvu induktorā 848A, pa labi - 924A.

Lai izskaidrotu iegūtos rezultātus, aplūkosim plūsmas vektorus vertikālā šķērs griezumā (att.6.7). Gadījumam ar zemāku strāvas vērtību ierastā virpuļu struktūra saskatāma tikai brīvās virsmas tuvumā, bet kristalizācijas frontes tuvumā šī struktūra ir izzudusi. Aplūkojot attēlu 6.6, redzams, ka, neskatoties uz to, ka saglabājas sadalījums, temperatūras vērtības uz brīvās virsmas ir ar neraksturīgi zemām vērtībām, līdz ar to spēki uz brīvās virsmas ir vājāki.

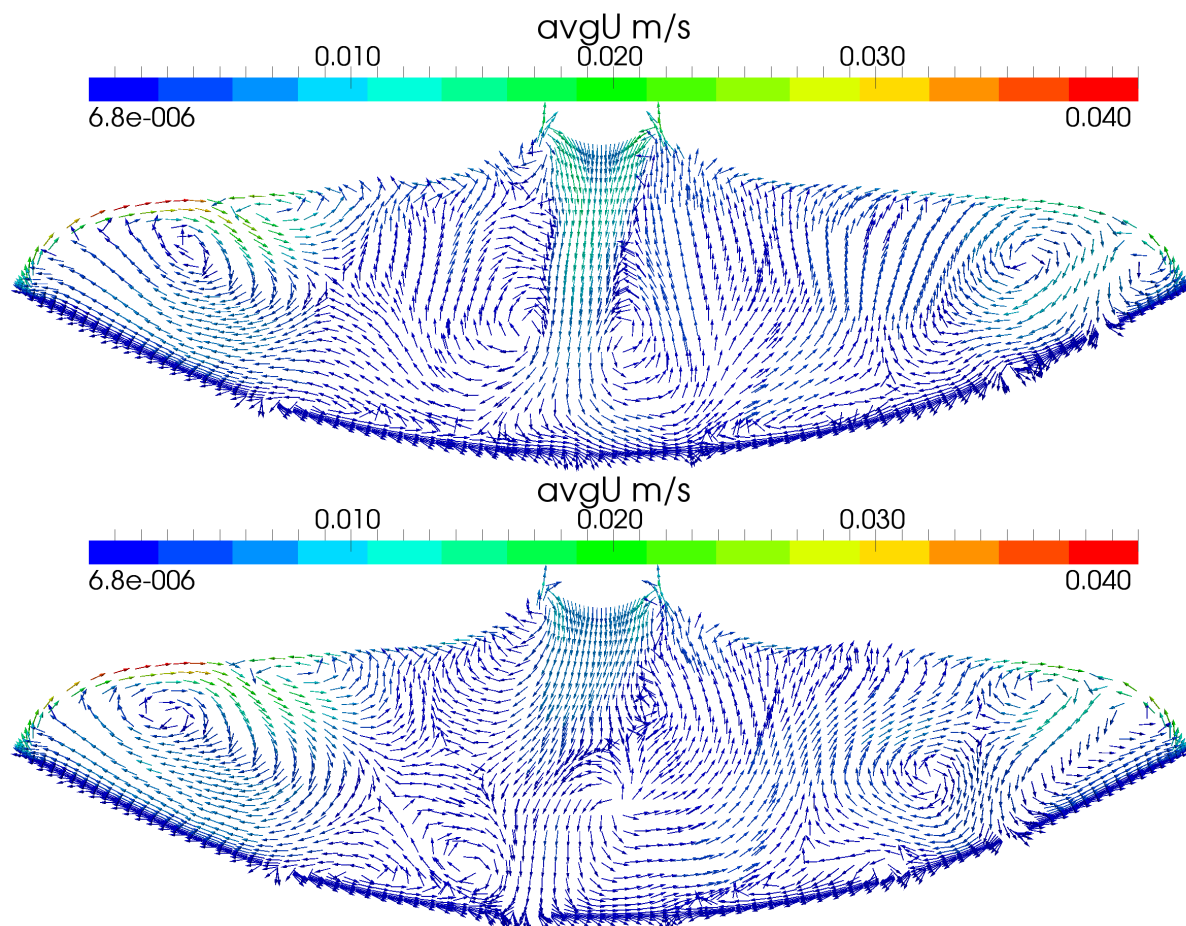


Attēls 6.6. Laikā vidējots temperatūras sadalījums uz brīvās virsmas. Pa kreisi - $I_{ind} = 848\text{A}$, pa labi - $I_{ind} = 924\text{A}$.

Vēl svarīgi piefiksēt, ka induktora lielās strāvas dēļ ir samazinājies ITP punkta rādiuss. Tā kā ātruma nosacījums uz kušanas frontes HD aprēķinam tiek uzdots, izmantojot

masas saglabāšanās likumu, samazinot ITP radiusu, būtu jāpalielinās vertikālajai ātruma komponentei uz kušanas frontes, kas labi redzams attēlā 6.7.

Analizējot gadījumu, kur izmantota precīzā induktora strāva, redzams klasisks temperatūras sadalījums uz brīvās virsmas. Tomēr virpuļi kausējuma tilpumā veido haotisku kustību, jo spēcīgā plūsma no kušanas frontes sāk ietekmēt plūsmas uzvedību kausējumā.



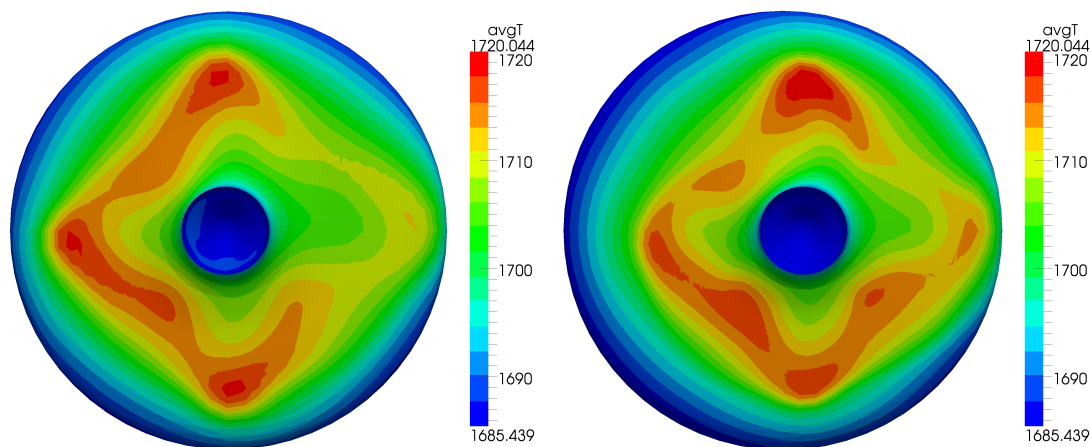
Attēls 6.7. Ātruma vektorlauka perpendikulārā šķēluma komponentes. Augšā - 848A, apakšā - 924A.

7 PLŪSMAS MODELĒŠANA NESIMETRISKĀ KAUSĒJUMA FORMĀ

Nodaļā 5 aplūkotajam aprēķina piemēram papildus aksiālsimetriskam kausējuma gadījumam tika izveidots un veikts aprēķins variantam ar polikristāla un kristāla asu nobīdi 5mm. Šajā nodaļā tiks aplūkoti aprēķinātie fizikālie lauki un pētīta nobīdes ietekme uz kausējuma plūsmu un radiālās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā.

Asu nobīdes dēļ kausējuma tilpumā parādās sašķiebti režģa elementi, kas apgrūtina aprēķina veikšanu, tāpēc izveidotais režģis ir daudz smalkāks (143 000 elementu) un tika izmantots samazināts laika solis $\Delta t = 0,5ms$.

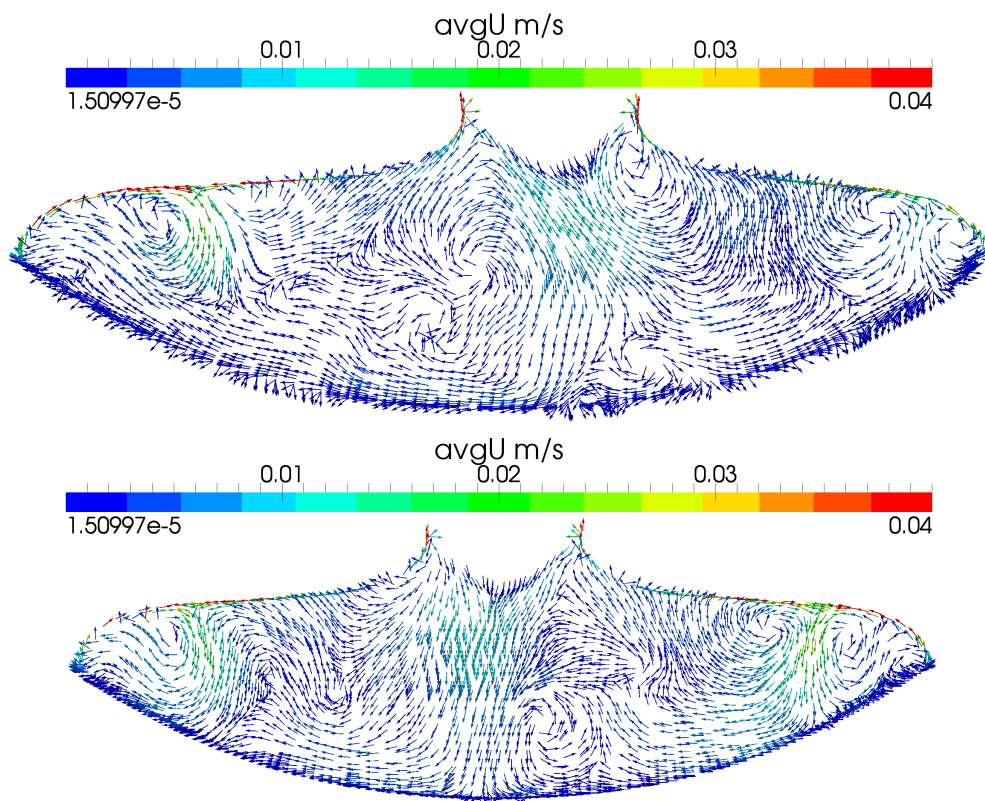
Plūsmas uzvedībai nobīdīta kakliņa gadījumā var pielietot līdzīgu analīzi, kādu jau veicām nodaļā 5. Kristāla un izejmateriāla stieņa rotācijas ātrumi plūsmai piešķir tikai azimutālo ātruma komponenti, bet vertikālās ātruma komponentes sadalījumu tilpumā nosaka temperatūras sadalījums uz brīvās virsmas. Attēlā 7.1 redzams laikā vidējots temperatūras sadalījums uz brīvās virsmas. Nobīdot polikristālu induktors tiek nobīdīts līdz ar to, tāpēc temperatūras sadalījums saglabā savu formu, bet ir nobīdījies virzienā uz induktora galveno spraugu.



Attēls 7.1. Laikā vidējota temperatūra uz brīvās virsmas simetriskam kausējumam (pa kreisi) un gadījumam ar asu nobīdi 5mm (pa labi).

Tā kā uz brīvas virsmas saglabājas trīs izteikti maksimumi, varam sagaidīt, ka kausējumā saglabāsies plūsmas virpuļu forma, bet, aplūkojot attēlu 7.2, redzams, ka tikai galvenajai spragai perpendikulārā vertikālā šķērsgriezumā saglabājas simetrisks ātruma vektorlauks, bet galvenās spraugas plaknē veidojas grūti aprakstāma nesimetriska ātruma lauka struktūra. Arī azimutālā ātruma vektori (att.7.4) zaudē savu orientētību, it īpaši

kausējuma centrālajā reģionā. Attēlā 7.3 redzams, ka nestrukturētās plūsmas dabas dēļ ātruma lauka maksimumi plūsmas virpuļu reģionos kļuvuši mazāk izteikti.

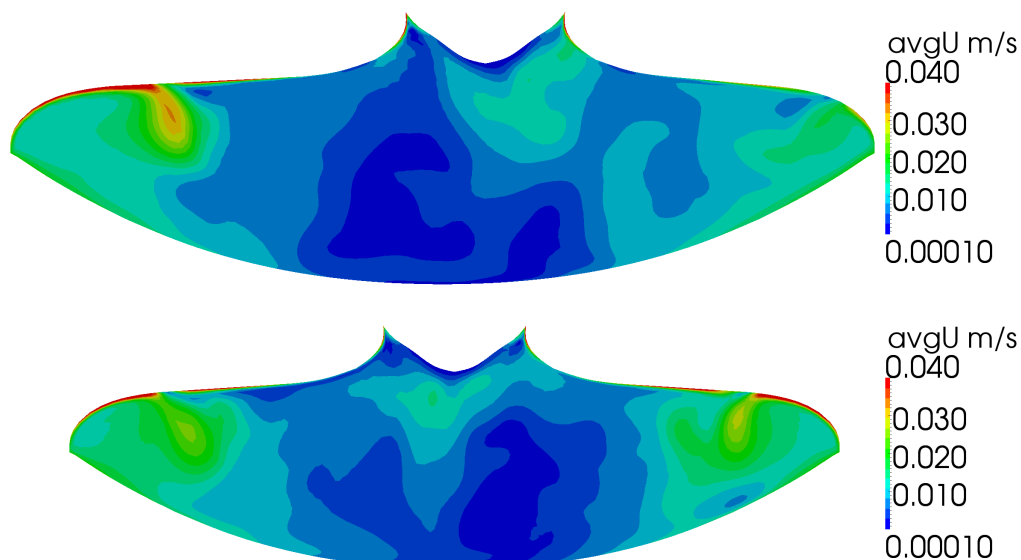


Attēls 7.2. Laikā vidējoti ātruma vektori. Augšā - vertikāls šķērsgriezums induktora galvenās spraugas plaknē, apakšā - induktora galvenās spraugas plaknei perpendikulārs šķēlums caur polikristāla centrālo asi.

Rūpīgi apskatot ātruma vektorlauku uz kristalizācijas frontes, iespējams atrast vietas, kur sadurtos divi plūsmas virpuļi, kas atbilst koncentrācijas maksimumiem, bet kristālam rotējot, šīs vietas nepārtraukti pārvietojas pa kristalizācijas fronti ne tikai azimutālā, bet arī radiālā virzienā. Attēlā 7.5 demonstrēts, kā izskatās piemaisījumu koncentrācijas sadalījums uz kristalizācijas frontes fiksētā laika solī un kā šis pats sadalījums izskatās, vidējojot laikā pāri vienam pilnam rotācijas periodam.

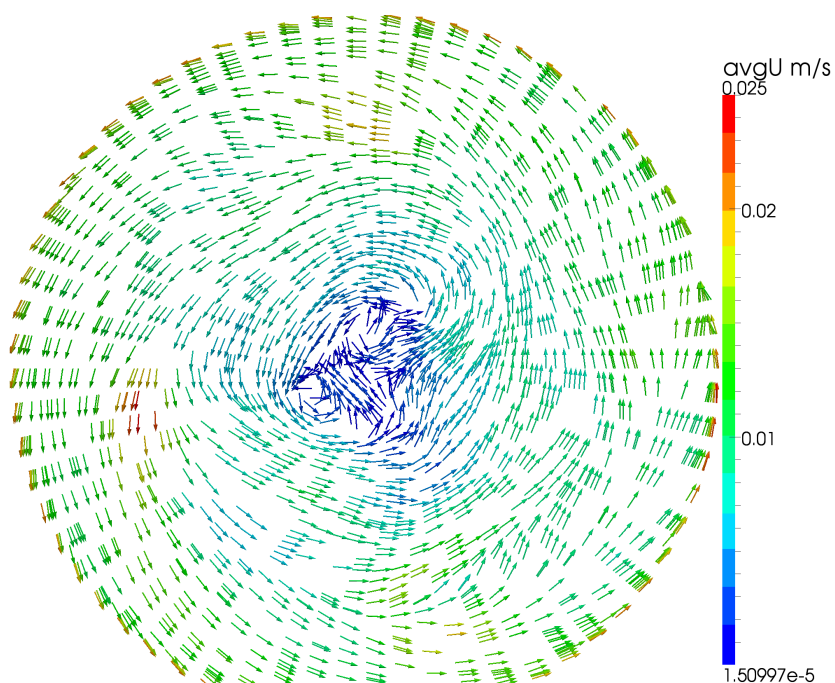
Attēlā 7.6 redzams iegūtais radiālās pretestības grafiks. Grafīkam pazūd klasiskā "W" profila forma, tā vietā iegūstam salīdzinoši horizontālu vidējo līkni. Salīdzinot ar gadījumu bez asu nobīdes, varam novērot lielāku gadījuma izkliedi, kas viegli skaidrojama, atgriežoties pie attēla 7.5 analīzes - atšķirīgos laika momentos koncentrācijas sadalījums uz frontes kristāla rotācijas dēļ ir ievērojami atšķirīgs, homogenitāti pretestības sadalījums iegūst, tikai vidējojot laikā.

Varam secināt, ka nesimetriskas kausējuma formas gadījumā plūsmas īpatnības un tās ietekmi uz pretestības sadalījumu kristālā vairs nav iespējams skaidrot, izmantojot priekšstatus, kurus iegūvām aplūkojot simetrisku kausējumu. Līdz ar kakliņa nobīdīša-

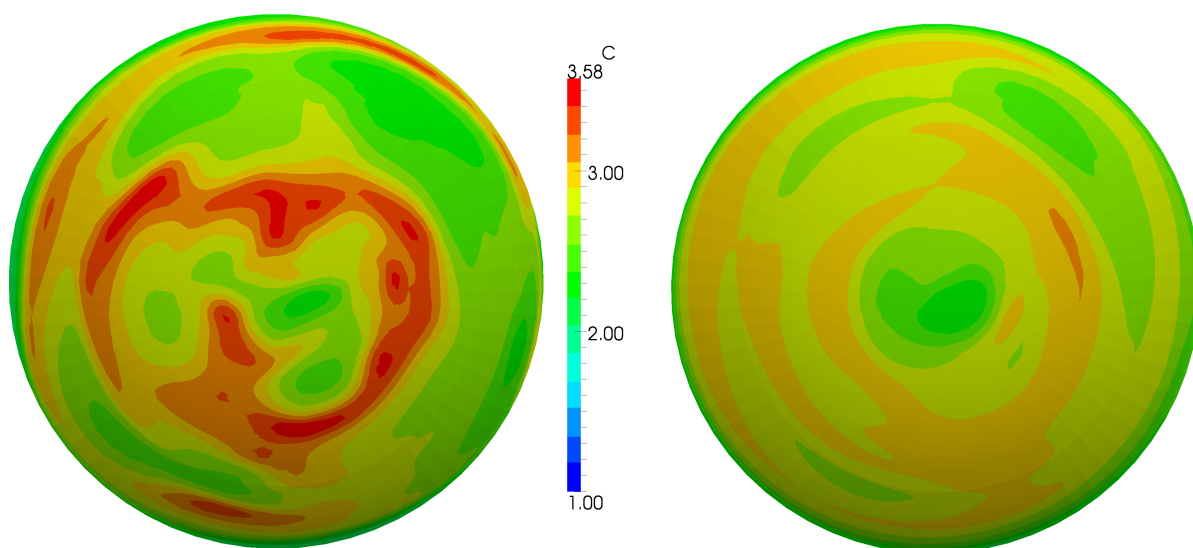


Attēls 7.3. Laikā vidējota ātruma moduļa lauks vertikālā šķērs griezumā induktora galvenās spraugas plaknē (augšā) un induktora galvenās spraugas plaknei perpendikulārā šķērs griezumā caur polikristāla centrālo asi (apakšā).

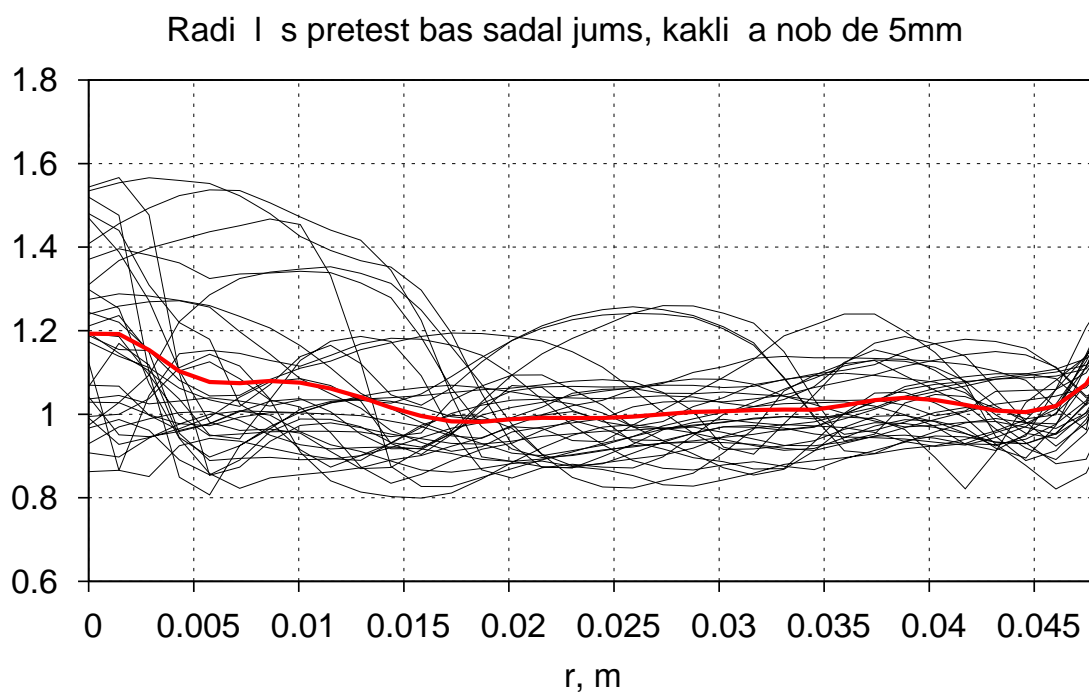
nu arī īpatnējās pretestības sadalījums kristālā zaudē savas simetrijas īpašības. Virpuļu struktūra saglabājas tikai daļēji, induktora galvenās spraugas plaknē iegūstot jaunas ātruma komponentes, tāpēc ir grūti izdarīt nopietnus secinājumus, aplūkojot tikai vienu aprēķinu.



Attēls 7.4. Azimutālā ātruma vektorlauks horizontālā šķērs griezumā ATP līnijas plaknē.



Attēls 7.5. Momentānā (pa kreisi) un laikā vidējota (pa labi) koncentrācija uz kristalizācijas frontes.

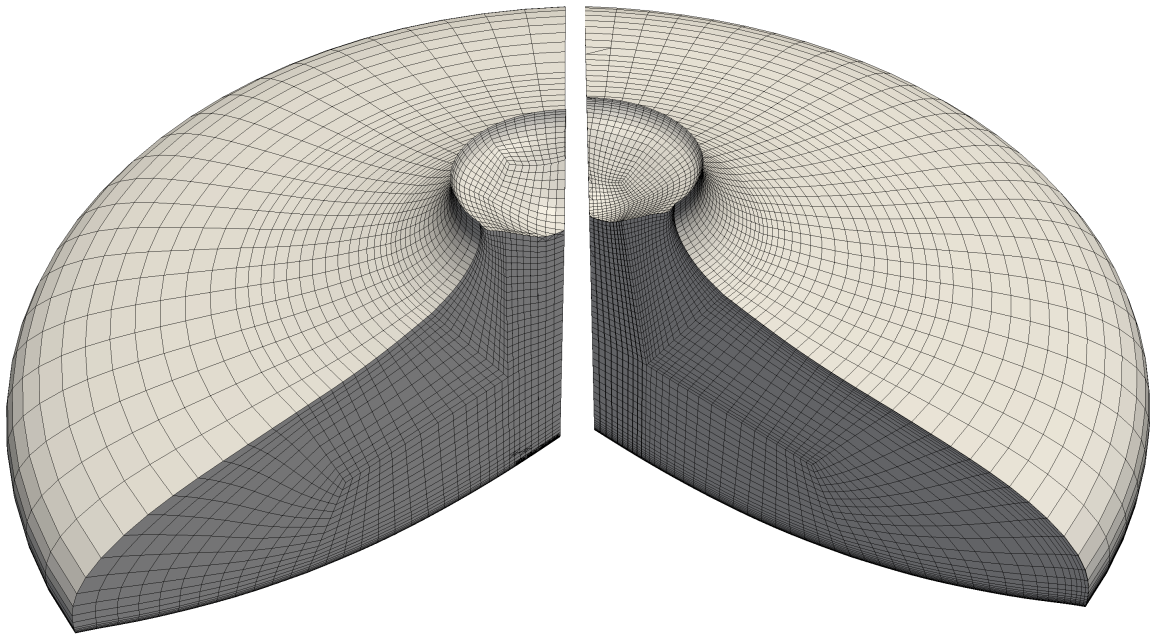


Attēls 7.6. Iegūtais radiālais pretestības sadalījums gadījumam ar asu nobīdi 5mm.

8 HD APRĒĶINA SKAITLISKĀS PRECIZITĀTES NOVĒRTĒJUMS

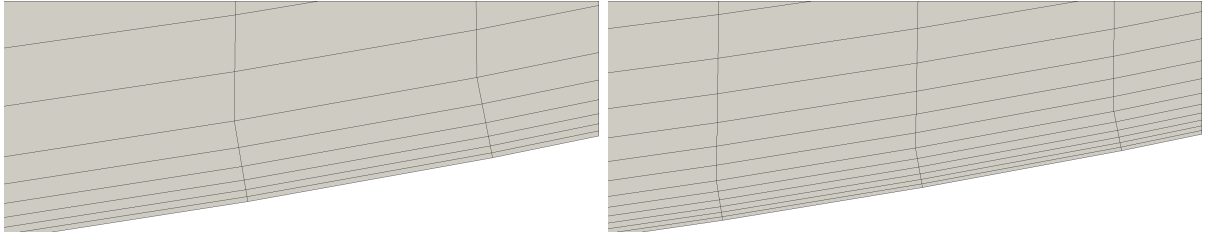
FZone fāzu robežu un 3D AF EM lauka aprēķina precizitāte jau novērtēta darbā [14], šajā darbā pētīts OpenFOAM HD aprēķina rezultātu jutīgums uz režģa un laika soļa izmaiņām. Attējot fizikālos laukus, ir grūti novērtēt atrisinājuma izmaiņas hidrodinamisko svārstību dēļ, tāpēc pētītas dažādu lauku oscilācijas probu punktos kristalizācijas frontes tuvumā.

Lai novērtētu laika soļa ietekmi uz atrisinājumu, nodaļā 5 aplūkots aprēķins turpināts ar samazinātu laika soli $\Delta t = 0,25ms$ ($\Delta t_1 = 4 \cdot \Delta t_2$). Attēlā 8.3 vizualizētas ātruma, koncentrācijas un temperatūras oscilācijas kristalizācijas frontes tuvumā radiusa viduspunktā zem induktora galvenās un vienas no blakus papildspraugām. Visos grafikos novilkta melna līnija pie $t = 210s$, kas atbilst brīdim, kad mainīts laika solis. Kā redzams, ne oscilāciju periods, ne amplitūda nereaģē uz laika soļa izmaiņām.



Attēls 8.1. Pa kreisi - rupjais (71 000 elementu) režģis, pa labi - smalkais (162 000 elementu) režģis.

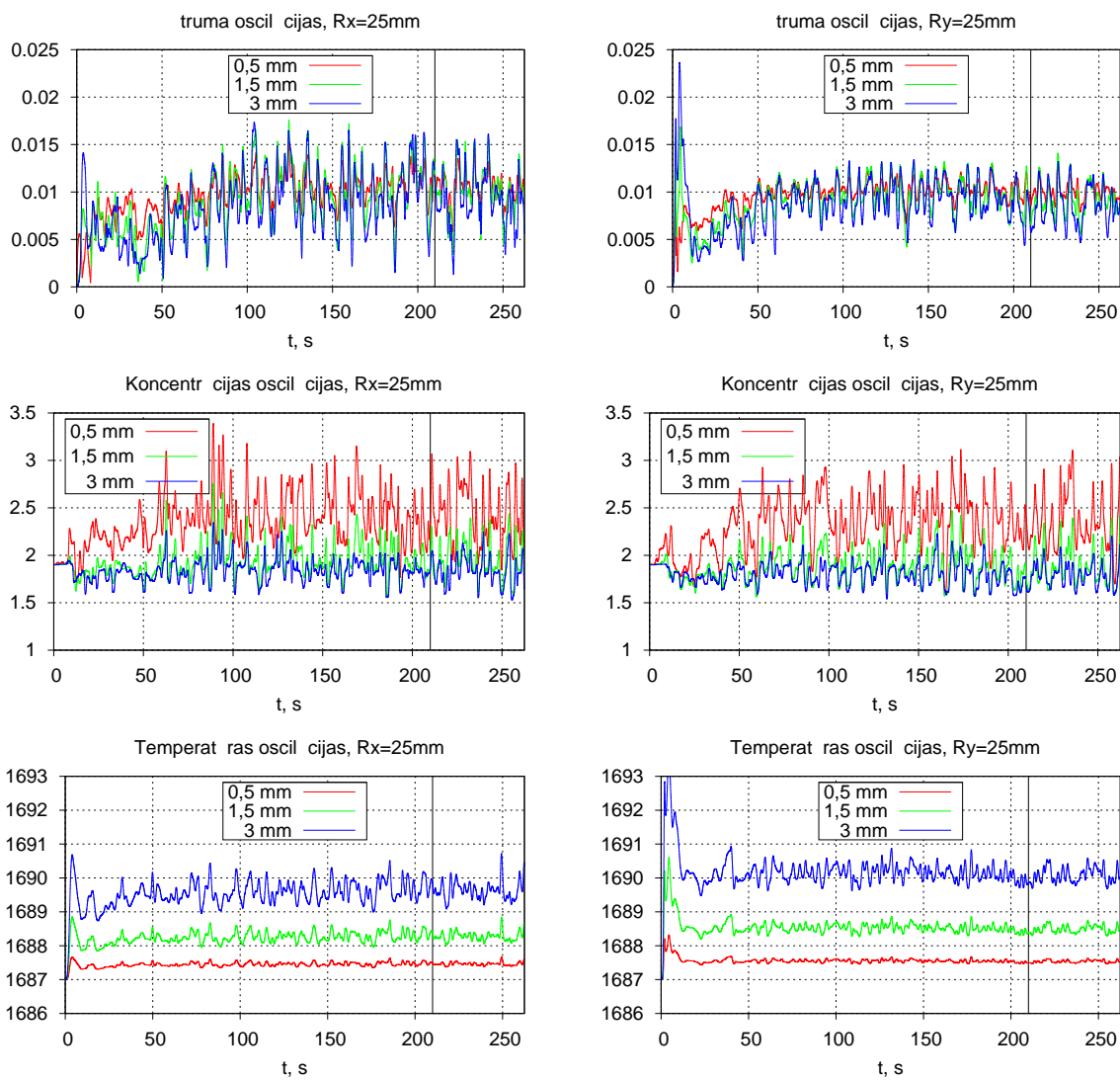
Lai novērtētu režģa ietekmi, nodaļā 5 veiktajam aprēķinam tika izveidots apmēram 2,5 reizes smalkāks režģis. Attēlos 8.1 un 8.2 parādīti abi izmantotie režģi un izveidotais robežslānis uz kristalizācijas frontes. Aprēķins ar smalko režģi ilgst ievērojami ilgāk. Lai paātrinātu aprēķinu, ar rupjo režģi iegūtās lauku vērtības tika pārinterpolētas jaunajā



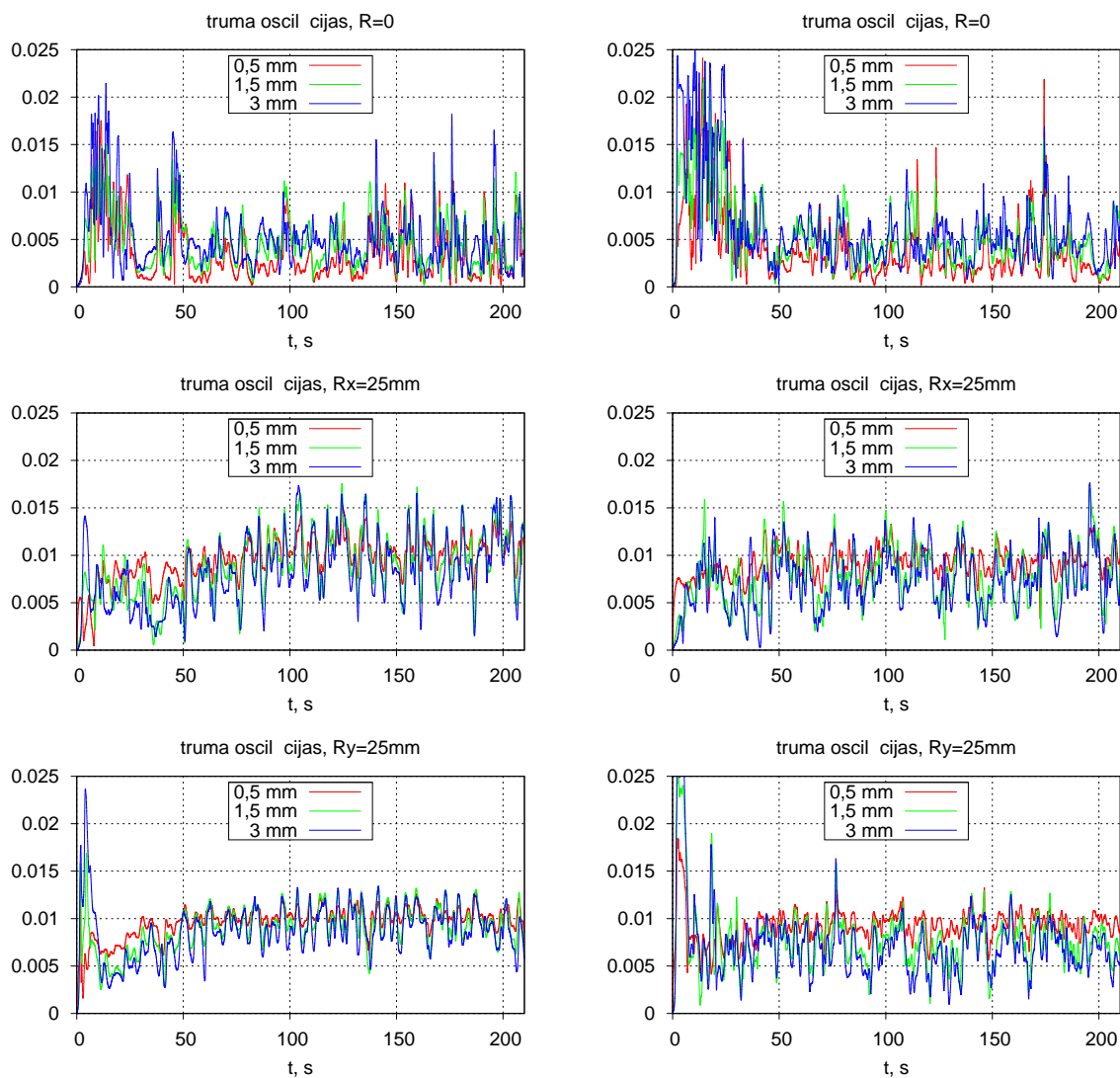
Attēls 8.2. Režģa robežslānis uz kristalizācijas frontes rupjam (pa kreisi) un smalkam (pa labi) režģim.

režģī. Interpolējot laukus, bieži neizdodas sākt aprēķinu, jo, interpolējot ātruma vērtības, uz brīvās virsmas izveidojas liela normālā ātruma komponente, tāpēc ātruma laukam tiek uzdots nulles sākuma nosacījums. Attēlā 8.4 salīdzinātas ātruma oscilācijas. Abos gadījumos oscilācijas iziet uz stacionāru stāvokli ar vienādiem periodiem un amplitūdām. Citu lauku oscilācijas neapskata, jo iepriekš jau parādīts, ka temperatūras un koncentrācijas oscilācijas veidojas ātruma lauka hidrodinamisko svārstību dēļ.

Ar aprēķinu rezultātiem parādīts, ka darbā izmantoto režģu smalkums un laika soļa izvēle ir pietiekama, lai iegūtu stabilu skaitlisko atrisinājumu.



Attēls 8.3. Fizikālo lauku oscilācijas probu punktos radiusa viduspunktā zem induktora galvenās spraugas (kreisā kolonna) un radiusa viduspunktā zem blakus papildspraugas (labā kolonna). Vertikālā līnija pie $t = 210s$ reprezentē brīdi, kad samazināts laika solis.



Attēls 8.4. Ātruma moduļa oscilācijas aprēķinam ar rupjo (kreisā kolonna) un smalko (laba kolonna) režģi. No augšas uz leju - oscilācijas probu punktus uz centrālās ass, radiusa viduspunktā zem induktora galvenas spraugas un radiusa viduspunktā zem blakus papildspraugas.

9 SALĪDZINĀJUMS AR EKSPERIMENTU

Šajā nodaļā veikts skaitlisko aprēķinu salīdzinājums ar eksperimentālajiem datiem. Eksperimentālie dati un aprēķiniem nepieciešamie ieejas parametri saņemti no *ICG*, tabulā 9.1 parādīti procesa parametri, aprēķiniem izmantots otrais induktors. Plašāks eksperimenta norises apraksts atrodams publikācijas [18] melrakstā.

Tabula 9.1. Veiktā eksperimenta procesa fizikālie parametri.

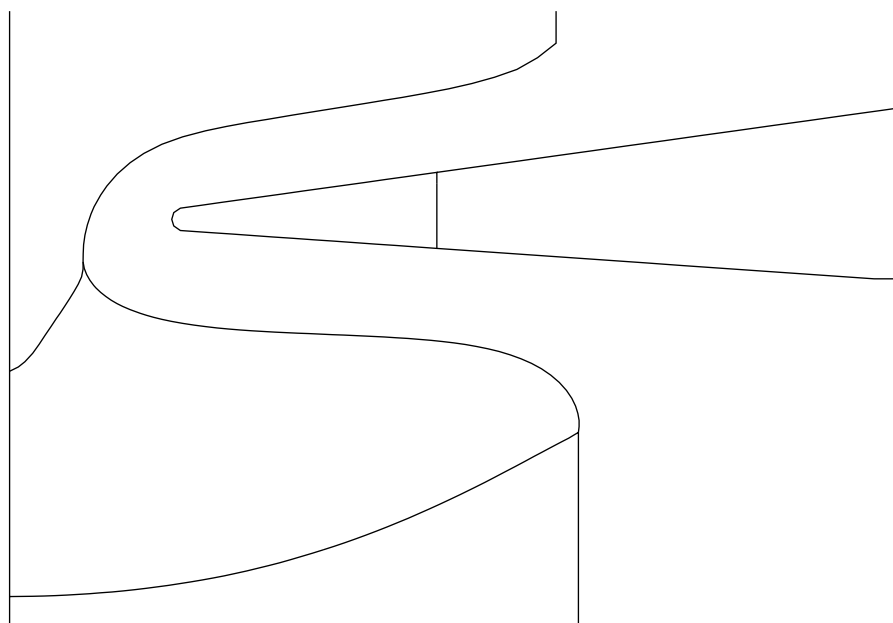
Parametrs, mērvienība	Vērtība
Kristāla radiuss R_C , mm	51
Polikristāla radiuss R_F , mm	49
Zonas augstums H_Z , mm	34.87
Kristāla vilkšanas ātrums v_C , $\frac{mm}{min}$	3.4
Polikristāla stumšanas ātrums v_F , $\frac{mm}{min}$	3.68
Strāvas frekvence I_{ind} , <i>MHz</i>	3
Kristāla rotācijas ātrums ω , $\frac{apgriezieni}{min}$	6

FZone fāzu robežu aprēķins tika veikts, izmantojot tabulā 9.1 atrodamās fizikālo parametru vērtības, $\Delta t = 0,1s$ un $\Delta I = 0,1A$. Aprēķins konverģēja apmēram pēc norēķinātām 2500 sekundēm pie strāvas vērtība induktorā $I_{ind} = 906,7A$ un kristalizācijas frontes dziļuma $H_C = 14,7mm$. Attēlā 9.1 redzamas iegūtās fāzu robežas.

Attēlā 9.2 salīdzināta kristalizācijas frontes forma. Reālā eksperimentā formu nosaka kā $H_C = H_C(D)$, aprēķina forma iegūta, izveidojot FZone aprēķinātās kristalizācijas formas spoguļattēlu un attēlojot abus kopā. Eksperimentālie dati pozicionēti tā, lai ATP līnija sakristu ar aprēķina atskaites sistēmu. Redzams, ka uz centrālās ass eksperimentālā forma ir par 2mm dziļāka, relatīvā atšķirība uz ass ir apmēram 13,5%.

Veicot silīcija kausējuma HD modelēšanu nav iespējams precīzi noteikt, kāds ir marangoni koeficients uz kausējuma virsmas. Literatūrā atrodami dati ir robežās no $-0,7 \cdot 10^{-4} \frac{W}{m \cdot K}$ līdz $-2,5 \cdot 10^{-4} \frac{W}{m \cdot K}$ [19]. Kaspars Lācis, izstrādājot savu disertāciju [13], novērtēja marangoni koeficientu esam $-1,3 \cdot 10^{-4} \frac{W}{m \cdot K}$, bet šī vērtība nav viennozīmi noteikta. Šajā nodaļā ar eksperimentu salīdzināti divi aprēķina rezultāti, papildus pievienojot gadījumu ar marangoni koeficientu $-2,5 \cdot 10^{-4} \frac{W}{m \cdot K}$.

Attēlā 9.3 vienās asīs attēloti normalizēti eksperimentālie pretestības sadalījumi un abi aprēķinu rezultāti. Eksperimentāli tika veikti trīs īpatnējās pretestības mērījumi iz-

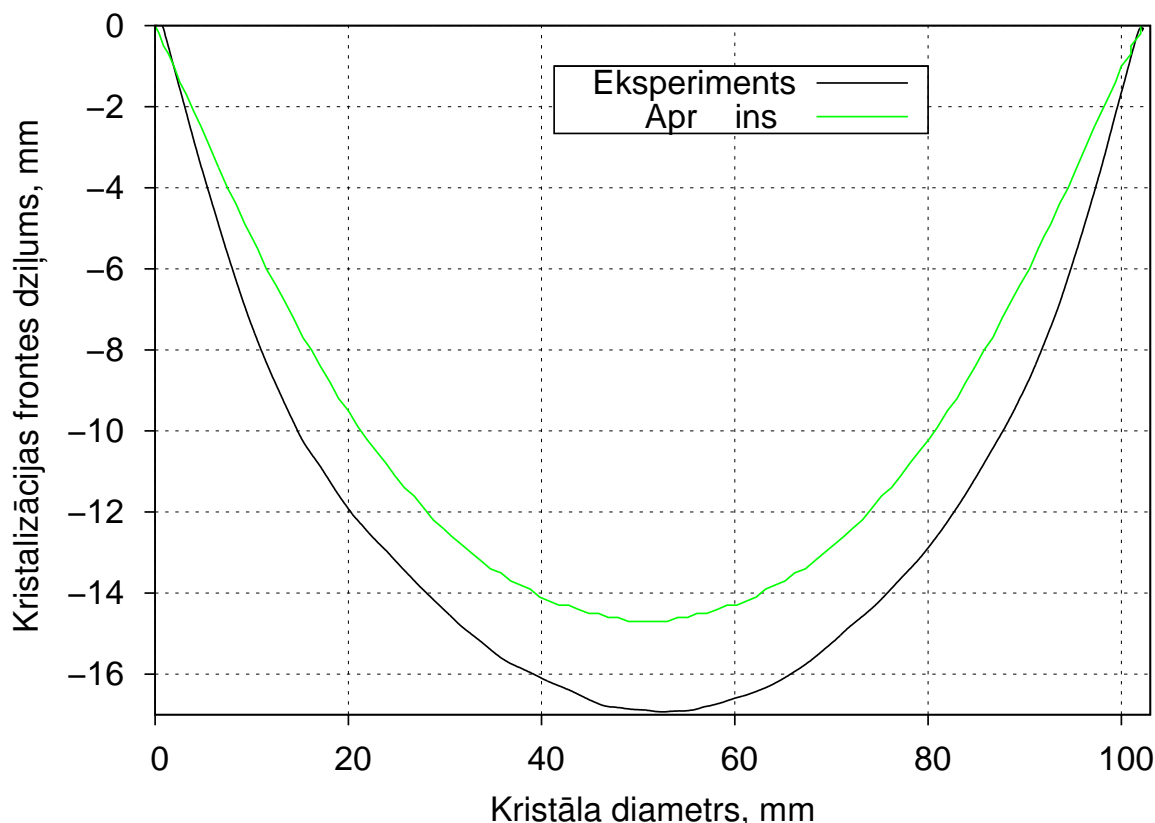


Attēls 9.1. Ar FZone aprēķinātās apskatāmās sistēmas fāzu robežas.

audzētajā kristālā. Eksperimentāli ērtāk ir nomērīt pretestības sadalījuma atkarību no diametra, tāpēc iegūtā vidējā līkne tika sadalīta divās radiālajās pretestības līknēs. Veicot iegūto rezultātu analīzi, redzams, ka visiem gadījumiem līknes minimums pie radiusa vērtībām 0,02-0,03. Attālinoties radiālā virzienā abi aprēķinu rezultāti uzrādā labu sakritību ar eksperimentālajiem datiem, bet centrālās ass tuvumā aprēķinātās radiālās pretestības līknes uzrāda negaidīti augstas vērtības, kas nesakrīt ar eksperimentu. Interesanti piezīmēt, ka ar bāzes sistēmu iegūtie radiālās pretestības sadalījumi uzrādītu labu sakritību ar eksperimentālajiem datiem ne tikai kvalitatīvi, bet arī kvantitatīvi.

Lai izskaidrotu aprēķināto radiālo pretestību augstās vērtības centrālās ass tuvumā, aplūkosim jau ierasto plūsmas vektorlauku vertikālā šķērsgriezumā (att.9.4). Redzams, ka zem kušanas novērojama spēcīga plūsmas kustība z ass negatīvajā virzienā. Šīs plūsmas ar lielu spēku ietricas kristalizācijas frontē un aizplūst prom radiālā virzienā. Attēlā 9.5 labi redzams piemaisījumu koncentrācijas sadalījums uz kristalizācijas frontes. Spēcīgās plūsmas aizstumj piemaisījumus prom no frontes centra, radot pazeminātas koncentrācijas apgabalu uz centrālās ass. Svarīgi atcerēties, ka piemaisījumi kausējumā iekļūst no kušanas frontes, tātad spēcīgajai plūsmai pakļaujas visi piemaisījumi.

Vēlreiz aplūkojot iegūtās fāzu robežas (att.9.1), iespējams izskaidrot, kāpēc plūsmā ierasto virpuļu vietā dominē vertikālā ātruma komponente zem kušanas frontes. Salīdzinot fāzu robežu aprēķinu ar bāzes studiju laikā veiktajiem pētījumiem, redzams, ka eksperimentālajai sistēmai iegūtas robežas ar ievērojami šaurāku kakliņu. Tas skaidrojams ar to, ka polikristāla stienis tiek stumts ātrāk un ir nepieciešama lielāka induktora strāva, lai nokausētu silīciju. Augstās induktora strāvas dēļ ITP punkts tiek atspiests prom



Attēls 9.2. Kristalizācijas frontes formas salīdzinājums aprēķinam ar eksperimentāli nomērīto.

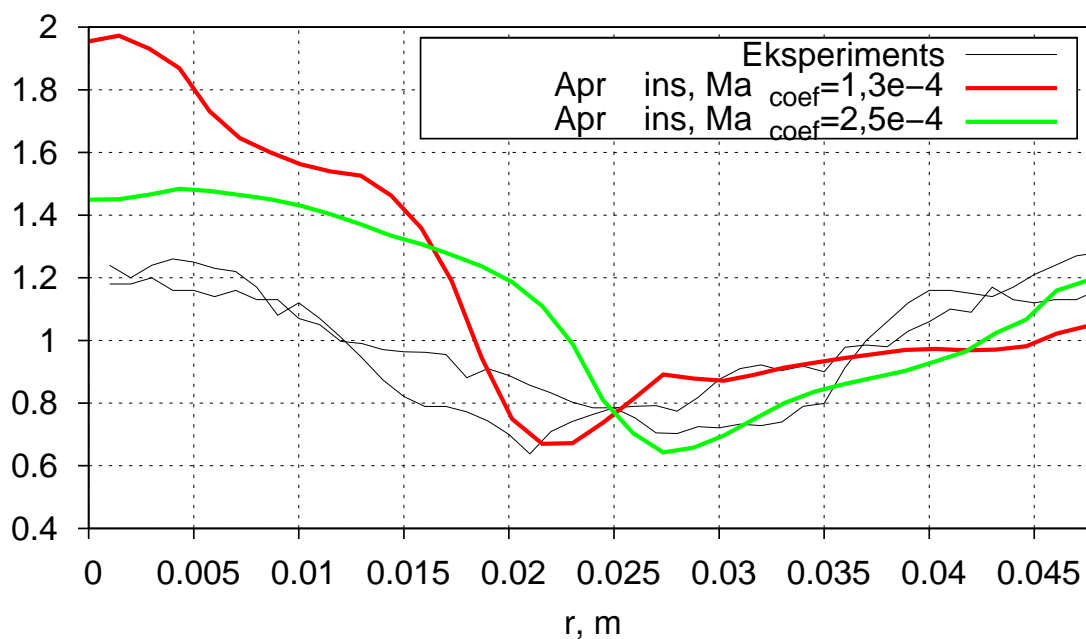
no induktora. Salīdzinot ar bāzes sistēmu, eksperimentālajai sistēmai ir lielāks kristāla vilkšanas ātrums un mazāks ITP punkta radiuss, tāpēc arī iegūst lielu vertikālo ātruma komponenti uz kušanas frontes.

Analizējot aprēķina rezultātus, varam secināt, ka HD aprēķins veikts korekti un plūsmas uzvedība labi atspoguļo aprēķināto radiālās pretestības grafiku formu. Pretestību nesakritību ar eksperimentu var skaidrot ar neprecīzi veiktu fāzu robežu aprēķinu. Būtu nepieciešams saņemt informāciju par eksperimentā nomērīto kakliņa diametru, lai izdarītu tālākus spriedumus.

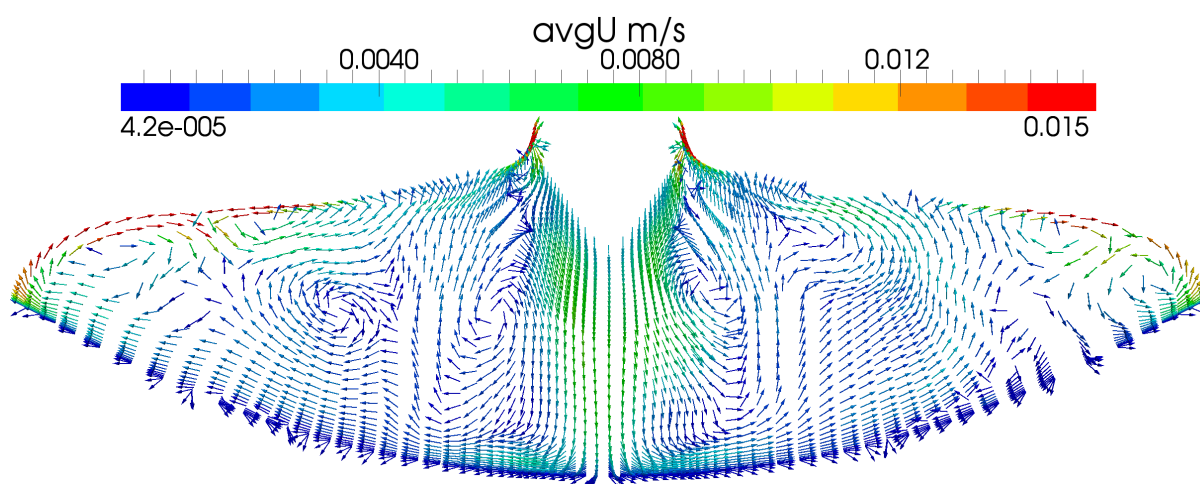
No skaitlisko aprēķinu viedokļa nesakritību varētu samazināt, veicot aprēķinus ar palielinātu polikristāla radiusu, bet šādā gadījumā iegūtu vēl sliktāku sakritību ar kristalizācijas frontes formu, jo samazinātos induktora strāvas vērtība.

Būtu svarīgi uzzināt, kādā veidā eksperimentā ir veikta piemaisījumu dopēšana. Darbā izmantotais modelis balstīts uz pieņēmumu, ka piemaisījumi kausējumā iekļūst no polikristāla stieņa. Ja eksperimentā piemaisījumi tiek iejaukti atmosfērā, būtu nepieciešams atkārtot HD aprēķinu, masas pārnesei vienādojumu uzdot ar otrā veida robežnosacījumu uz brīvas virsmas. Šādā gadījumā daļa piemaisījumu ļautos virpuļu kustībai, nevis spēcīgajai plūsmai zem kušanas frontes.

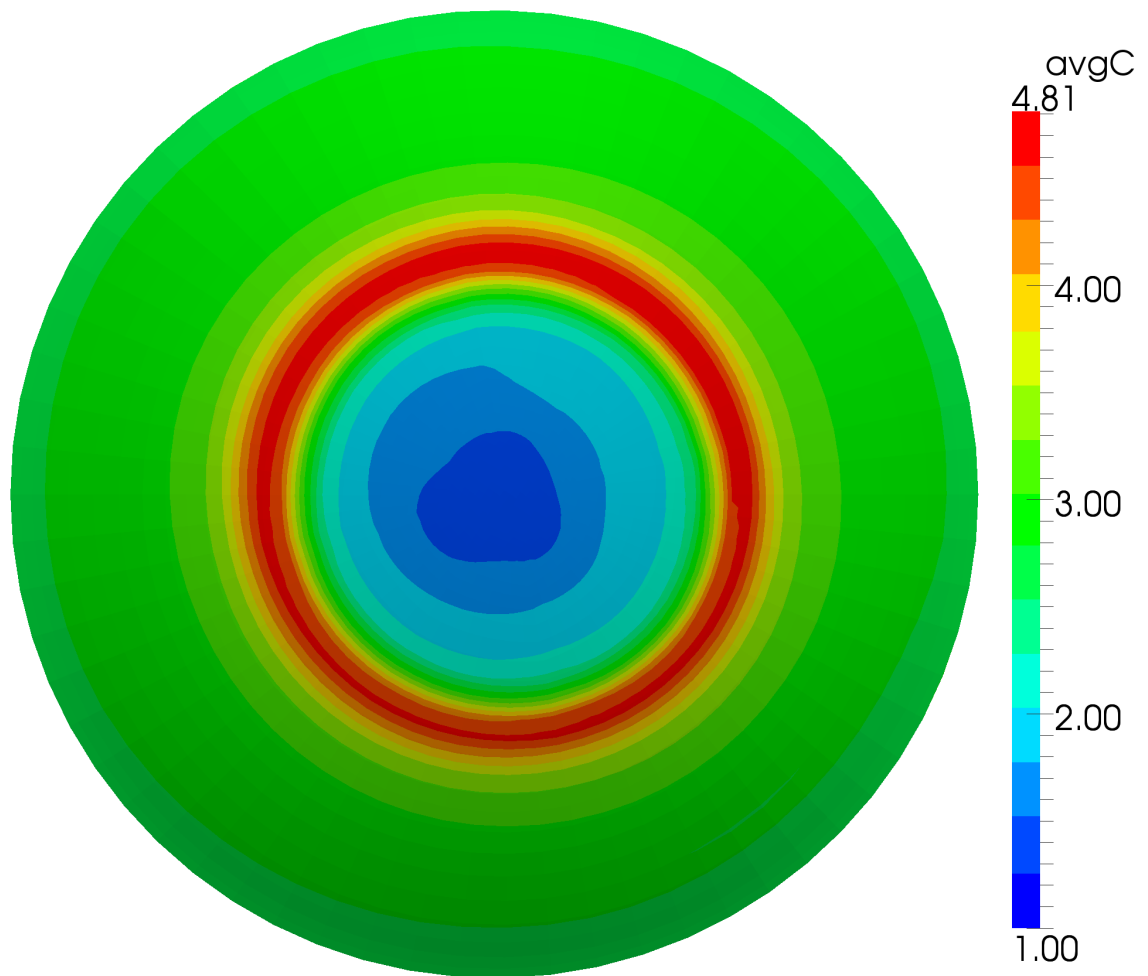
Radiālais pretestības sadalījums



Attēls 9.3. Pretestības sadalījumi.



Attēls 9.4. Laikā vidējota ātruma vertikālā šķērsriezuma komponentes induktora galvenās spraugas plaknē. $\frac{\partial \gamma}{\partial T} = 1,3 \cdot 10^{-4} \frac{W}{m \cdot K}$



Attēls 9.5. Laikā vidējota piemaisījumu koncentrācija uz kristalizācijas frontes.

10 SECINĀJUMI

Darbā izvirzītie uzdevumi tikai veiksmīgi izpildīti. Tika iepazīts programmu FZone un FZsiFOAM matemātiskais modelis un apgūts darbs ar programmām, lai patstāvīgi izpētītu vienu raksturīgu *Institute of Crystal Growth* 4 collu sistēmu. Izmantojot iegūtās ziņāšanas, veiktas skaitliskas studijas, lai novērtētu induktora strāvas un kausējuma formas ietekmi uz radiālo pretestības sadalījumu. Ir novērtēta HD aprēķinu skaitliskā precizitāte un veikts aktuāls aprēķinu salīdzinājums ar eksperimentu.

No darbā veiktajām skaitliskajām studijām tika iegūti sekojoši secinājumi:

1. Aplūkotajai 4 collu sistēmai uzdotās zonas augstuma izmaiņai par 1mm atbilst induktora strāvas izmaiņa par aptuveni 12A.
2. Zemāka induktora strāvas vērtība pie fiksētas kausējuma formas pārbīda radiālā pretestības grafika minimumu kristāla ass virzienā. Šis rezultāts atbilsts darbā lietotajai kvalitatīvajai EM un marangoni spēku analīzei.
3. Kausējuma formas gadījumā, kas atbilst lielākam zonas augstumam, pretestības radiālā sadalījuma minimums tiek būtiski pārbīdīts kristāla ass virzienā.
4. Nesimetriskas kausējuma formas gadījumā būtiski izmainās plūsmas struktūra. Pazūd 3 virpuļu struktūra un nav iespējams pielietot kvalitatīvo EM un marangoni spēku analīzi, kas labi strādāja simetriskas kausējuma formas gadījumā.
5. Pārbaudīts, ka darbā izmantotais režģis ar apmēram 70 000 tipluma elementiem ir ar pietiekami augstu izšķirtspēju un laika solis 1ms. ir pietiekami mazs, lai ar pietiekamu precizitāti aprēķinātu aplūkotās nestabilās laminārās plūsmas.
6. Berlīnes *Institute of Crystal Growth* veiktam 4 collu kristāla audzēšanas eksperimentam tika veikts atbilstošs aprēķins. Aprēķinātais radiālās pretestības sadalījums uzrāda kvalitatīvu un daļēji kvantitatīvu sakritību ar eksperimentāli iegūto. Iegūstot papildus informāciju par eksperimenta norisi, iespējams turpināt iesākto pētījumu. Pastāv iespēja, ka piemaisījumu iekļūšana kausējumā tiek modelēta neatbilstoši eksperimentam.

IZMANTOTĀ LITERATŪRA UN AVOTI

- [1] **A.Muhlbauer, W.Erdmann, and W.Keller.** Electrodynamic convection in silicon floating zones. *Journal of Crystal Growth*, 64:529–545, 1983.
- [2] **K.H. Lie, J.S.Walker, and D.N.Riahi.** Free surface shape and ac electric current distribution for float zone silicon growth with radio frequency induction coil. *Journal of Crystal Growth*, 100(3):450–458, 1990.
- [3] **A.Muhlbauer, A.Muižnieks, J.Virbulis, A.Luedge, and H.Riemann.** Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystal with needle-eye technique. *Journal of Crystal Growth*, 151:66–79, 1995.
- [4] **Z.Guo, S.Maruyama, and S.Togawa.** Combined heat transfer in floating zone growth of large silicon crystals with radiation on diffuse and specular surfaces. *Journal of Crystal Growth*, 194:321–330, 1998.
- [5] **G.Ratnieks, A.Muižnieks, and A.Muhlbauer.** Modelling of phase boundaries for large industrial fz silicon crystal growth with needle-eye technique. *Journal of Crystal Growth*, 255(3):227–240, 2003.
- [6] **A.Muhlbauer, A.Muižnieks, and H.-J.Lebmann.** Berechnung von dreidimensionalen elektromagnetischen feldern bei der induktiven erwarmung. *Archiv fur Elektrotechnik*, 77:157–168, 1994.
- [7] **A.Muhlbauer, A.Muižnieks, and H.-J.Lebmann.** Comparison between 2d and 3d modelling of hf electromagnetic field in fz silicon crystal growth process. *Modelling for Material Processing*, pages 61–65, 2010.
- [8] **K.Dadzis.** Kausējuma kustības ietekme uz fāzu robežu formu silīcija monokristālu audzēšanā ar peldošās zonas metodi. 207.
- [9] **K.Lācis, A.Muižnieks, and G.Ratnieks.** 3d mathematical model system for melt hydrodynamics in the silicon single crystal fz-growth process with rotation magnetic fields. *Magnetohydrodynamics*, 41(2):147–158, 2005.
- [10] **A.Muižnieks, K.Lācis, and B.Nacke.** 3d unsteady modelling of the melt flow in the fz silicon ceystal growth process. *Magnetohydrodynamics*, 43(3):377–386, 2007.
- [11] **A.Muižnieks, K.Lācis, N.Jēkabsons, A.Rudevičs, and B.Nacke.** unsteady 3d and analytical analysis of segregation process in floating zone silicon single crystal growth. *Magnetohydrodynamics*, 45(4):549–556, 2009.

- [12] **K.Lācis, A.Muižnieks, A.Rudevičs, and A.Sabanskis.** Influence of dc and ac magnetic fields on melt motion in fz large si crystal growth. *Magnetohydrodynamics*, 46(2):199–218, 2010.
- [13] **Kaspars Lācis.** Magnētisko lauku ietekmes 3d modelēšana peldošās zonas kristālu audzēšanā. 2010.
- [14] **Matīss Plāte.** Kausējuma formas skaitliska modelēšana kristālu audzēšanas peldošās zonas procesā. 2011.
- [15] **Andrejs Sabanskis.** Kausējuma kustības ietekme uz zonas formu rūpnieciskās kristālu audzēšanas peldošās zonas procesā modelēšana. 2009.
- [16] **Gundars Ratnieks.** Modelling of the floating zone growth of silicon single crystals with diameter up to 8 inch. 2007.
- [17] Openfoam mājaslapa. Internet lapa. <http://www.openfoam.org//>.
- [18] **H.-J.Rost, R.Menzel, A.luedge, and H.Riemann.** Float-zone silicon crystal growth at reduced frequencies. *Journal of Crystal Growth*, 2012.
- [19] **M.Przyborowski, T.Hibiya, M.Eguchi, and I.Egry.** Surface tension measurement of molten silicon by the oscillating drop method using electromagnetic levitation. *Journal of Crystal Growth*, 151:60–65, 1995.

PIELIKUMS

Autora dalība konferencēs

- Workshop „Multiphysical Modelling in OpenFOAM”. *Modeling of melt flow in FZ silicon single crystal growth system using OpenFOAM*. 20–21.10.2011.
- Deutsche Kristallzuchtstagung 2012. *Further development of 3D modeling of single crystal growth process* (stenda referāts). 7–9.03.2012.
- Latvijas Universitātes 70. zinātniskā konference. *Silīcija kausējuma hidrodinamikas peldošās zonas procesā matemātiskā modelēšana*. 3.02.2012.
- Functional Materials and Nanotechnologies 2012. *Phase shapes and melt motion modeling for FZ silicon single crystal growth process* (stenda referāts). 17–20.04.2012.

Autora publikācijas

- A. Krauze, A. Muiznieks, K. Bergfelds, K. Janisels, G. Chikvaidze. *Reduction of Silicon Crust on the Crucible Walls in Silicon Melt Purifying Processes with Electron Beam Technology by means of Low-frequency Traveling Magnetic Fields*. *Magneto-hydrodynamics*, 47(4):369–383, 2011.

Pateicība

Lielāko pateicību esmu parādā savam bakalaura darba vadītājam asoc. prof. Andrim Muižniekam, kurš ir ne tikai veltījis man savu laiku, bet arī devis iespēju piedalīties starptautiskās konferencēs, apmeklēt kristālu audzēšanas rūpnīcu *Siltronic AG*, Vācijā un nodrošinājis sadarbību ar *Institute of Crystal Growth*(ICG, Berlīne, Vācija).

Vēlos pateikties arī saviem vecākajiem darba kolēģiem no asoc. prof. Andra Muižnieka vadītās projekta grupas *Modelling for Crystal Growth*, kas nekad nav atteikuši padomu, un it īpaši dr. Kasparam Lācim, kurš, vairs nebūdam šīs grupas loceklis, vēl joprojām palīdz neskaidrību gadījumā.

Par neatsveramu finansiālo atbalstu jāpateicas Eiropas sociālajam fondam (ESF) projekta nr.2009/0223/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/008.

Bakalaura darbs „Peldošās zonas silīcija monokristālu audzēšanas procesa trīsdimensio-
nālo aspektu matemātiskā modelēšana” izstrādāts LU Fizikas un matemātikas fakultātē.

Ar savu parakstu apliecinu, ka pētījums veikts patstāvīgi, izmantoti tikai tajā norādītie
informācijas avoti un iesniegtā elektroniskā kopija atbilst izdrukai.

Autors: *Kārlis Janisels*

(paraksts)

(datums)

Rekomendēju darbu aizstāvēšanai.

Vadītājs: *asoc. prof., Dr. Phys. Andris Muižnieks*

(paraksts)

(datums)

Recenzents:

Darbs iesniegts Fizikas nodaļā

Metodiķis(-e):

(vārds, uzvārds)

(paraksts)

(datums)

Darbs aizstāvēts bakalaura gala pārbaudījumu komisijas sēdē

(datums)

(protokola nr.)

(vērtējums)

Komisijas sekretārs(-e):

(vārds, uzvārds)

(paraksts)