



IEGULDĪJUMS TAVĀ NĀKOTNĒ

ESF projekts

”Atomāro un nepārtrauktās vides tehnoloģisko fizikālo procesu modelēšana, matemātisko metožu pilnveide un kvalitatīvā izpēte”, Nr. 2009/0223/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/008

Tematiskā aktivitāte

4.2. Tehnoloģisko procesu matemātiskā modelēšana

Tematiskā apakšaktivitāte

4.2.2. Silīcija monokristālu izdustriālās audzēšanas matemātiskā modelēšana

Programmu kompleksa

FZone3DHD

dokumentācija.

SATURS

1	Ievads	1
2	FZone fāzu robežu aprēķins	1
2.1	Induktora virsmas režģa izveide 3D AF EM lauka aprēķinam	1
2.2	2D fāzu robežu sākuma ģeometrijas izveidošana temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķinam	3
2.3	FZone aprēķina veikšana	3
2.4	Rezultātu vizualizācija	4
3	Silīcija kausējuma HD aprēķins	6
3.1	Silīcija kausējuma 3D tilpuma režģa izveide HD aprēķinam	6
3.2	Sistēmas 3D GEM režģa izveide AF EM lauka aprēķinam	8
3.3	3D AF EM aprēķins	8
3.4	3D HD aprēķinu veikšana	10
4	Rezultātu vizualizācija un procesa raksturīgāko pazīmju analīze	12
	Izmantotā literatūra un avoti	21

1 IEVADS

Programmu komplekss **FZone3DHD** ir izstrādāts, lai pētītu dažādu peldošas zonas (PZ) 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. Komplekss **FZone3DHD** ir izveidots, būtiski pilnveidojot un apvienojot divas iepriekš izstrādātas komponentes - specializēto programmu **FZone** [1, 2], kas paredzēta fāzu robežu iegūšanai, un 3D hidrodinamikas aprēķinu moduli **FZsiFOAM** [3, 4], kas izveidots uz atvērtā koda bibliotēkas **OpenFOAM** bāzes [5].

Lai efektīvi veiktu aprēķinus ar jaunizveidoto kompleksu, tajā ir iekļautas vairākas nelielas palīgprogrammas, kas paredzētas tādu darbību veikšanai kā režģa ģenerēšana, rezultātu pārinterpolēšana, rezultātu grafiska attēlošana un tml.

Šajā atskaitē detalizēti tiek apskatīta vienas raksturīgas PZ sistēmas modelēšanas gaita, paskaidrojot visas ietvertās darbības. Parādīta programmu **FZone** un **FZsiFOAM** aprēķinu veikšana, bet īpašs uzsvars likts uz starpposmos ietvertajām darbībām, jo tieši šīs komponentes ļauj apvienot 2D fāzu robežu aprēķinu ar 3D kausējuma hidrodinamikas aprēķinu. Pedējā nodaļā sniegti aprēķinu rezultāti ar kuru palīdzību, attēlojot fizikālos laukus, tiek skaidrotas procesa raksturīgākās pazīmes.

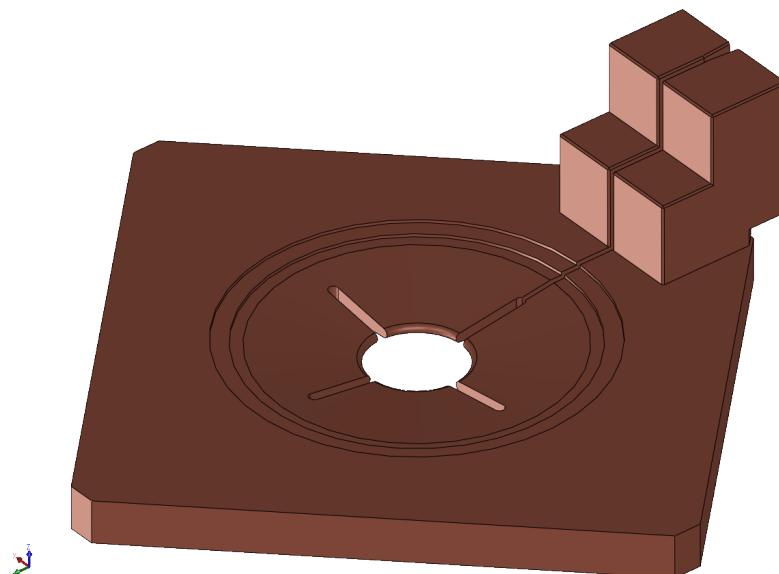
2 FZONE FĀZU ROBEŽU APRĒĶINS

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.

2.1 Induktora virsmas režģa izveide 3D AF EM lauka aprēķinam

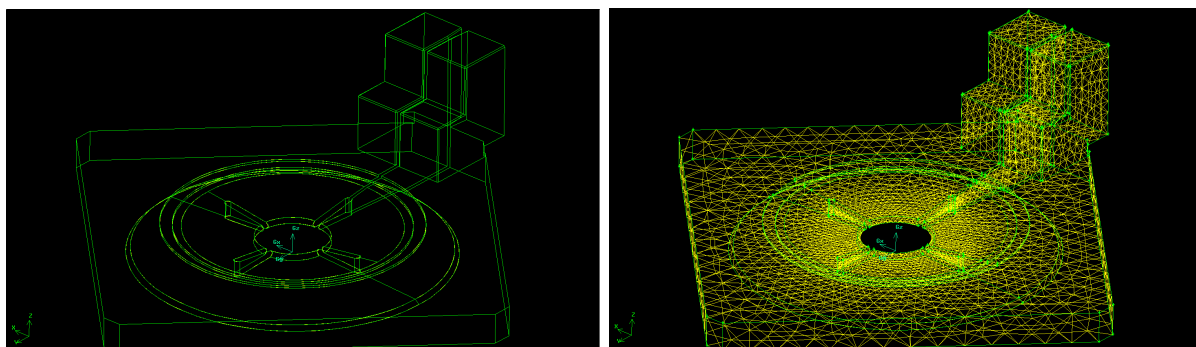
Lai izveidotu induktora 3D virsmas režģi, nepieciešams zināt tā ģeometriskos izmērus. Induktora tehniskie rasējumi tikai saņemti no ICG (*Institute of Crystal Growth*). No rasējumiem iespējams izveidot 3D induktora zīmējumu, konkrētajā gadījumā izmantota

programma SolidWorks. Attēlā 2.1 redzams izveidotais induktora modelis.



Attēls 2.1. 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 izveidots uz induktora spraugām, lai precīzāk aprakstītu liektās detaļas. Attēlā 2.2 attēlots programmas GAMBIT interfeiss ar tajā ielasītu induktora ģeometriju un izveidotais režģis.



Attēls 2.2. 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.

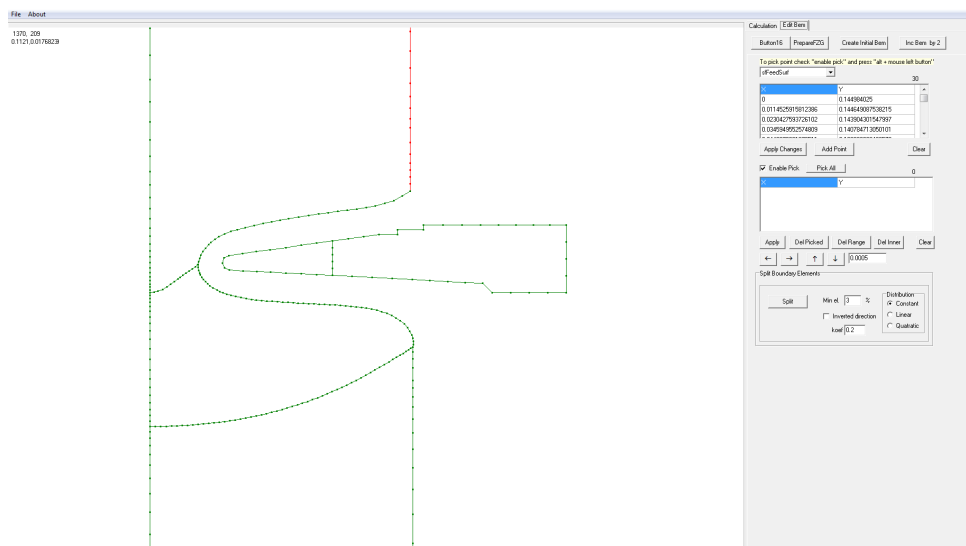
2.2 2D fāzu robežu sākuma ģeometrijas izveidošana temperatūras lauka un fāzu robežu aprēķinam

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 2.3 redzams programmas mFZone interfeiss ar izveidoto pirmo tuvinājumu. Programmā lietotājs izvēlas vēlamu robežu, pārvieto to un pievieno vai dzēš punktus uz tās.

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

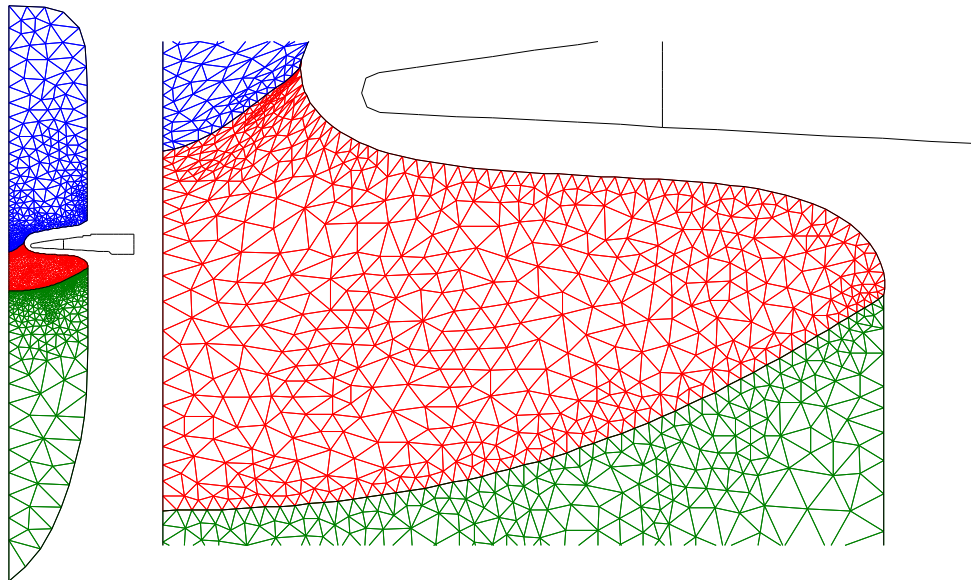
Aprēķina sākumā FZone automātiski ģenerē neregulāru trīsstūra elementu režģi visos silīcija apgabalos. Kā redzams attēlos 2.3 un 2.4, uz kausejuma robežas tiek veidots blīvāks punktējums, lai iegūtu smalkāku GEM režģi kausējumā.



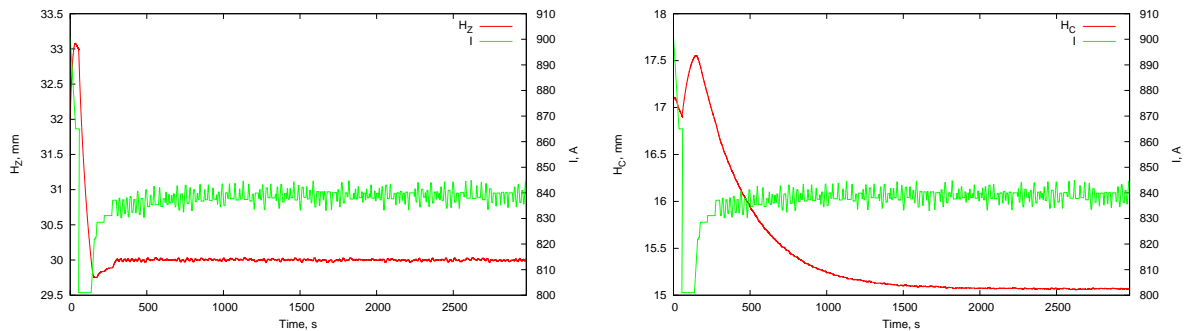
Attēls 2.3. Programmas mFZone interfeiss ar izveidoto fāzu robežu pirmo tuvinājumu.

2.3 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 (2.5). Frontes turpmākā pārvietošanās vairs neietekmē strāvas vērtību induktorā. Aprēķins turpinās, līdz kušanas un kristalizācijas fronšu ātrumi kļūst mazāki par uzdoto kritēriju.



Attēls 2.4. Izveidotais režģis visai sistēmai (pa kreisi) un detalizēti izzīmēts režģis kausējumā (pa labi).



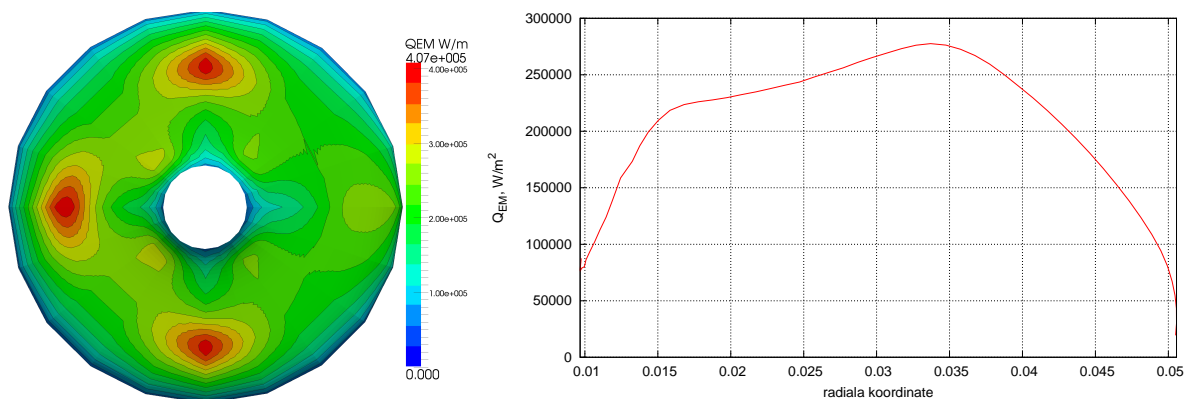
Attēls 2.5. Zonas augstuma (pa kreisi) un kristalizācijas frontes dziļuma (pa labi) konverģence laikā.

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 vidējas un padotas tālākajiem aprēķina moduļiem. Šī darbība vizuāli attēlota attēlā 2.6, kur attēlotas 3D q^{EM} vērtības uz brīvās virsmas un q^{EM} vērtības pēc azimutālās vidējošanas.

2.4 Rezultātu vizualizācija

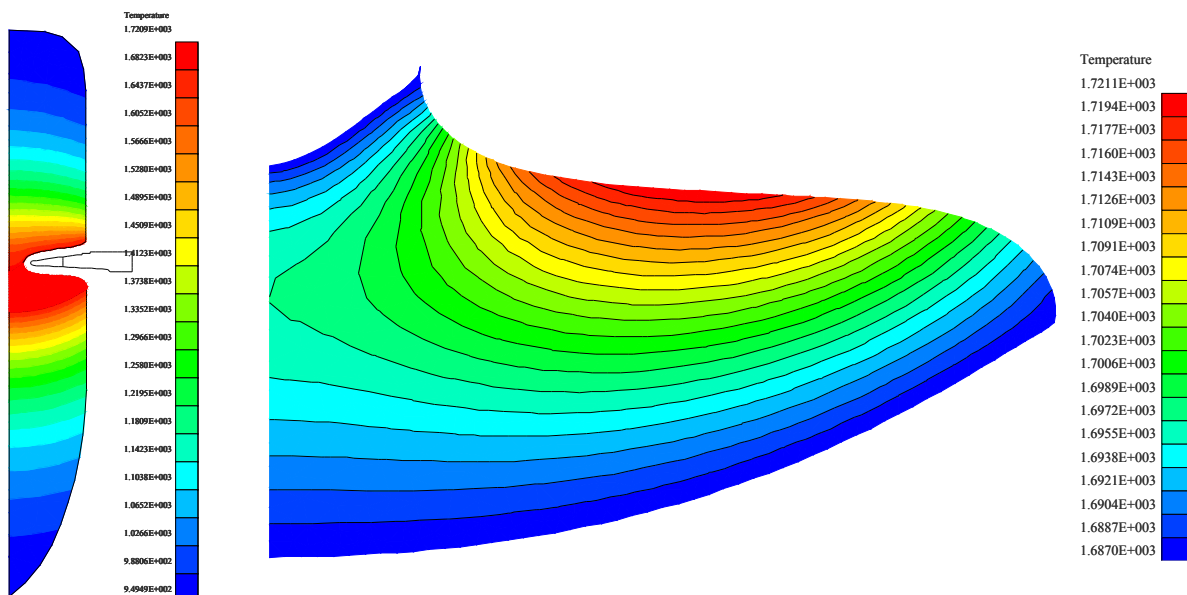
No HD kausējuma plūsmas aprēķina viedokļa galvenais FZone aprēķinu rezultāts ir divi teksta faili: *co.bem* fails, kurā tiek noglabātas visu sistēmas punktu koordinātes rz plaknē, un *phys.par* fails, kurā var atrast induktorā plūstošās AF strāvas vērtību.

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



Attēls 2.6. Inducētā siltuma plūsmas blīvums uz brīvās virsmas pirms (pa kreisi) un pēc (pa labi) azimutālās vidējošanas.

ļautas kādas rupjas kļūdas. Attēlā 2.7 redzams temperatūras lauks sistēmā un detalizēti aplūkots lauks kausējumā. Kā redzams, temperatūras diference kausējumā ir apmēram 35K, kas ir konsekventa vērtība PZ sistēmā.



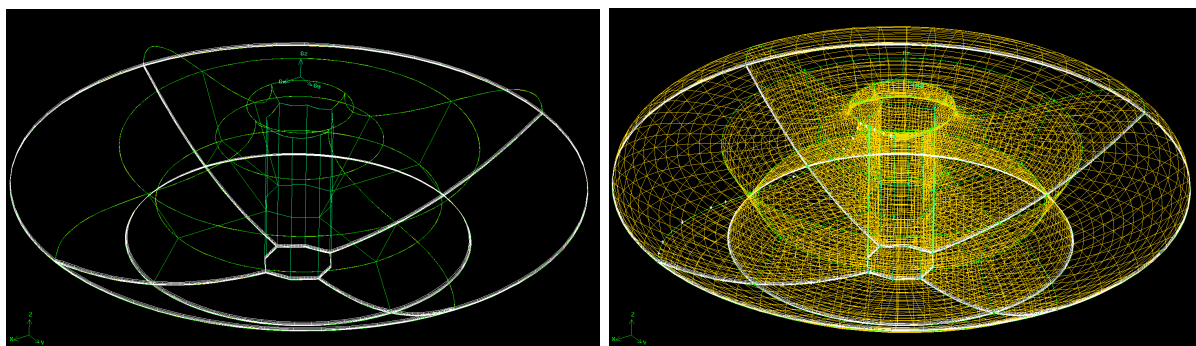
Attēls 2.7. Aprēķinātais temperatūras lauks visā sistēmā (pa kreisi) un detalizēti izzīmēts temperatūras lauks kausējumā (pa labi).

3 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.

3.1 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 vėlamo režģi, jo kādā reģionā noteikti neizdosies izveidot heksagonālu elementu.



Attēls 3.1. Kausējuma 3D ģeometrija bez asu nobīdes kopā ar izveidoto iekšējo struktūru un režģa robežslāni (pa kreisi) un pabeigts tilpuma režģis (pa labi).

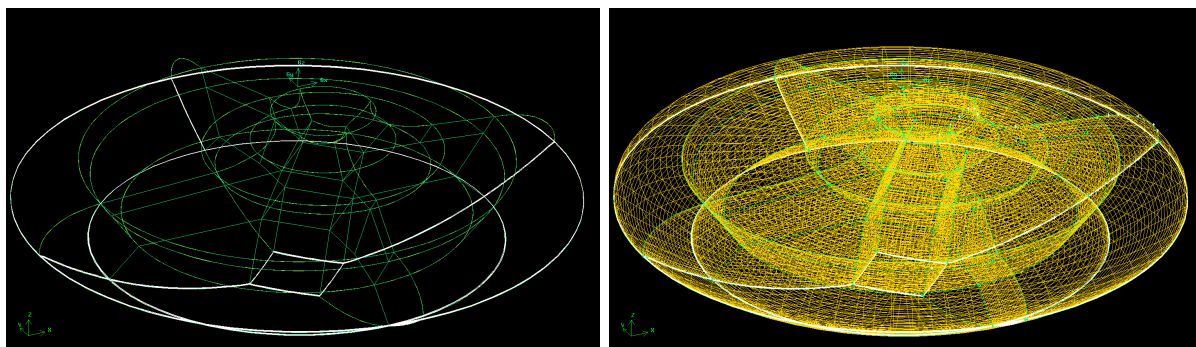
Lai izvairītos no šīs problēmas, kausējums tiek sadalīts atsevišķos reģionos (skat att.3.1). Darba ietvaros atšķirīgām kausējuma fāzu robežām piemeklētas dažādas režģa topoloģijas, bet visos gadījumos režģa iekšējā uzbūve balstīta uz vertikālas četrstūrainas serdes izveidošanu kausējuma centrā. Šādā 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 tilpumiem, 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 uz-būvēšanas iespējams sagrupēt atbilstošās šķautnes, lai izveidotu diskretizāciju, kas atbilst strukturētam režģim.



Attēls 3.2. 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* skripti, 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 saspiesti 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 3.1 un 3.2 redzams **GAMBIT** interfeiss ar izveidotajiem režģiem. Aksiālsimet-

riskais 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.

3.2 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 konsekvēnti pieturas pie AF EM lauka atkārtota aprēķina veikšanas arī aksiālsimetriskam kausējumam.

Induktora diskretizāciju mēs jau aplūkojām nodaļā 2.1. 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 brīvas 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.

3.3 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.

```

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
calcgem   - 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 3.3. HFEM3D interfeiss.

Aprēķina veikšana notiek ar komandrindiņu palīdzību. Attēlā 3.3 redzams programmas interfeiss. Lai definētu aprēķinu, lieto *import* funkciju:

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

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]

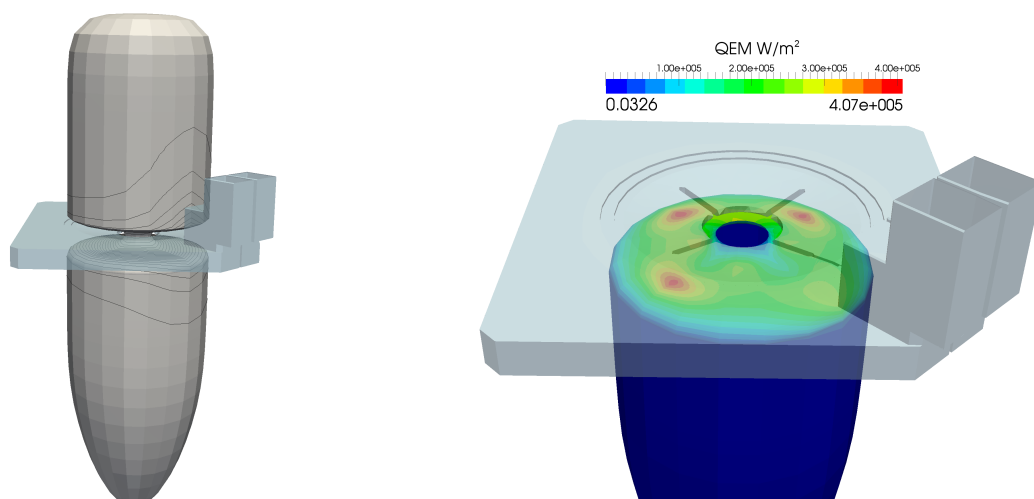
```

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 3.4 redzami programmā Paraview attēlotie aprēķina rezultāti - strāvas līnijas uz silīcija un inducētā siltuma blīvuma sadalījums. Zem induktora papildspraugām redzams strāvas līniju sablīvējums, kas atbilst inducētās siltuma plūsmas maksimumam.



Attēls 3.4. Sistēma ar strāvas līnijām uz silīcija visām daļām (pa kreisi) un inducētā siltuma blīvuma sadalījums (pa labi) uz silīcija brīvās virsmas.

3.4 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 komandrindiņas 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 pārnurēt. 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.

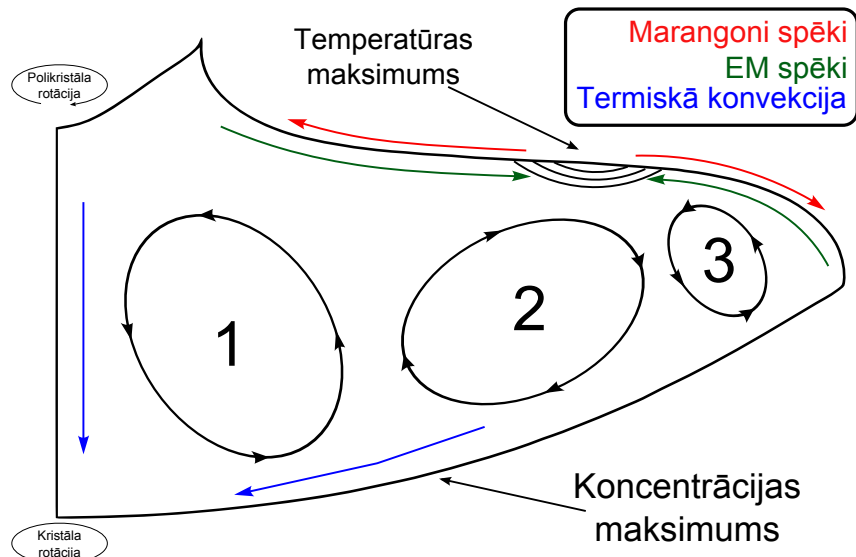
4 REZULTĀTU VIZUALIZĀCIJA UN PROCESA RAKSTURĪGĀKO PAZĪMJU ANALĪZE

Lai labāk izprastu ar programmu kompleksu FZone3DHD veiktos pētījumus, šajā nodaļā tiks izskaidrota plūsmas virpuļu forma un uzvedība, rašanās iemesli un plūsmas ietekme uz īpatnējās pretestības sadalījumu izaudzētajā kristālā. Aprēķināto lauku vizualizācijai izmantota programma *Paraview* [6]. 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.

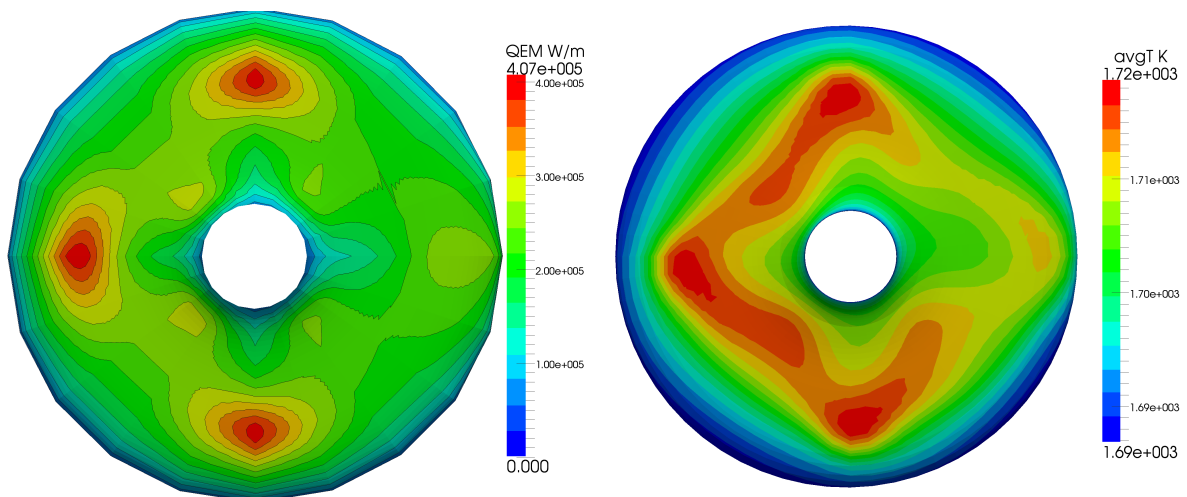
Attēlā 4.2 redzams induktora inducētas jaudas blīvums un laikā vidējots temperatūras sadalījums uz kausējuma brīvās virsmas. Analītiski šo lauku sadalījumiem uz virsmas jābūt proporcionāliem, bet redzams, ka temperatūras lauks ir mazliet izplūdis. Šis efekts skaidrojams ar to, ka, kristālam rotējot, tiek iekustināts viss šķidrums kausējuma tilpumā. Attēlā 4.3 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 4.1 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.

Attēlā 4.4 parādīts laikā vidējota ātruma moduļa sadalījums raksturīgos kausējuma šķēlumos. Ātruma vērtības uz brīvas 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 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



Attēls 4.1. Plūsmas virpuļu veidošanās shematiskais zīmējums.

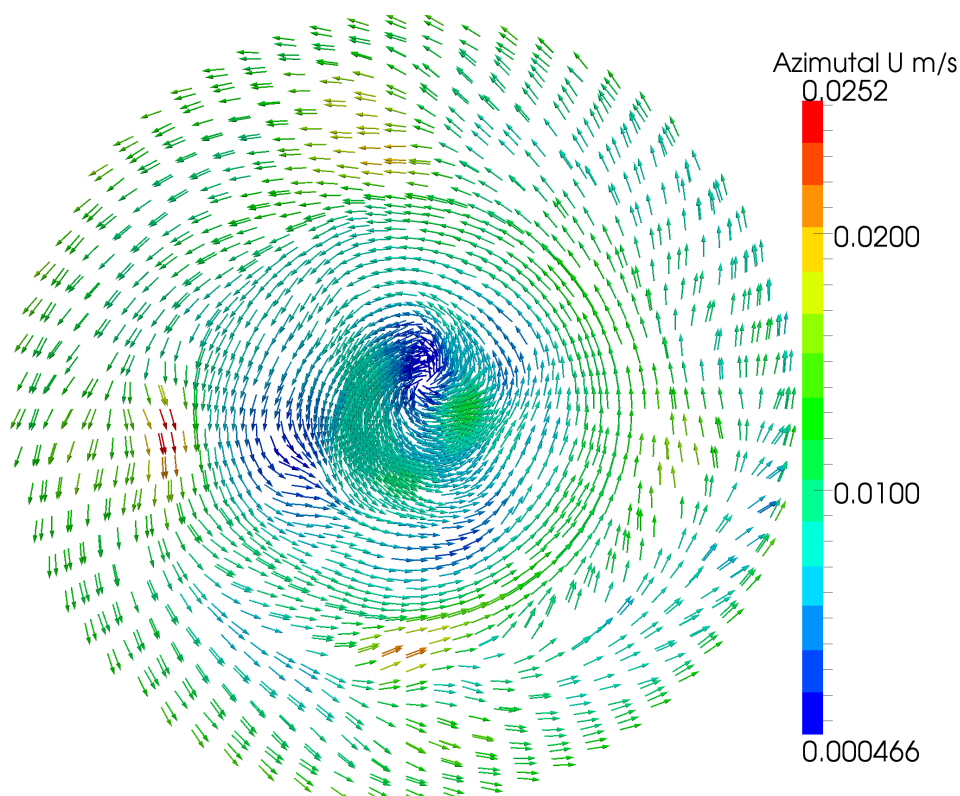


Attēls 4.2. Inducētā siltuma blīvuma sadalījums (pa kreisi) un laikā vidējotas temperatūras sadalījums (pa labi) uz kausējuma brīvās virsmas.

videjai kausējuma kustībai.

Attēlos 4.5 un 4.6 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 4.1 attēlā ieskicētie spēki un izveidojas plūsmas virpuļi. Šis pats efekts uz brīvās virsmas ilustrēts 3D attēlā 4.7. Redzams, ka ātruma vektori tiek "ierauti" temperatūras maksimumā arī no sāniem, tātad plūsmas līnijas zem temperatūras maksimumiem veido nesimetrisku tora formu. Attēlos 4.5 un 4.6 izzīmētas arī vietas, kur virpuļi "sadzen" piemaisījumus.

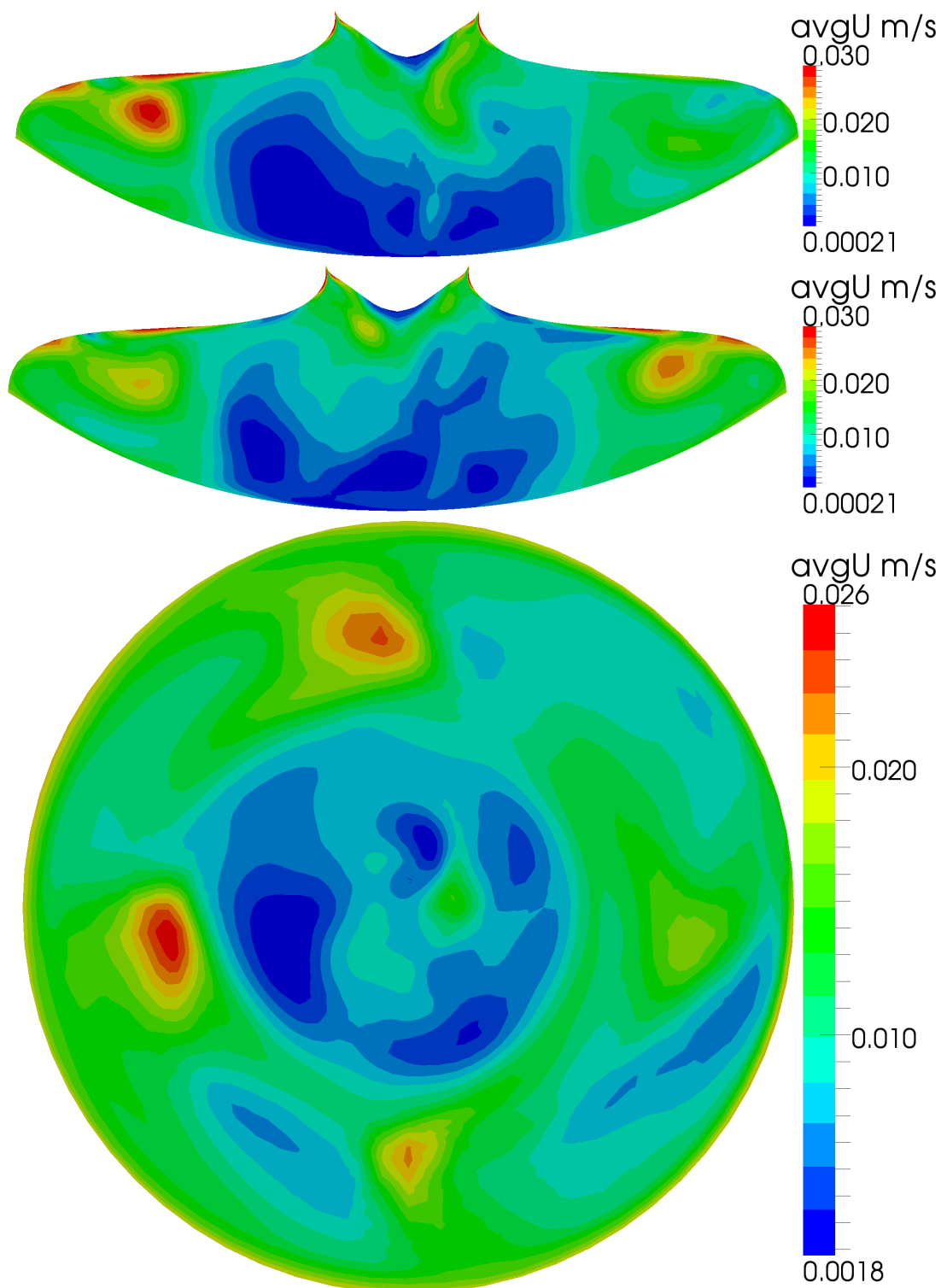


Attēls 4.3. Azimutālā ātruma vektori horizontālā kausējuma šķēlumā ETP līnijas plaknē.

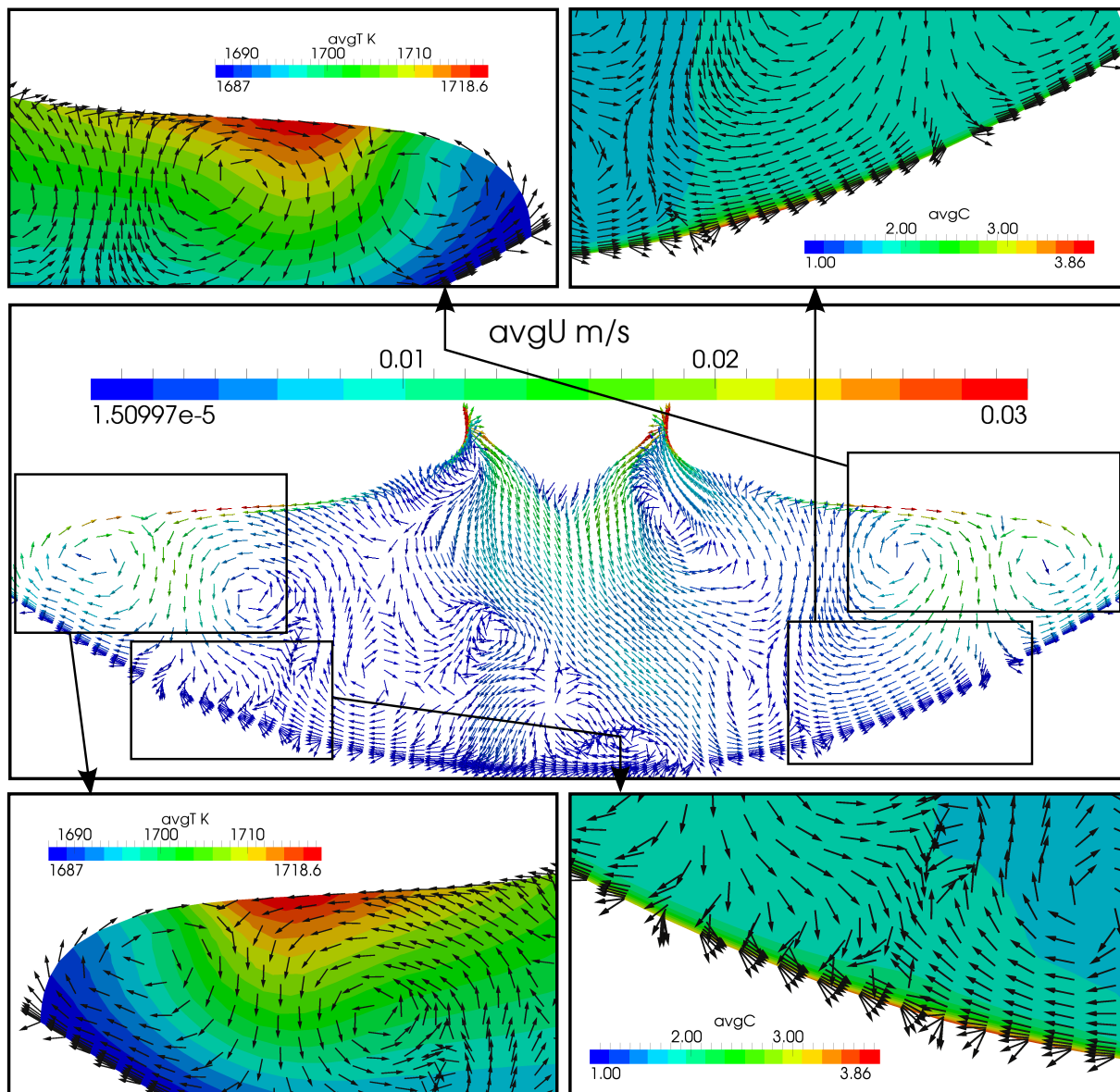
Šajos reģionos izveidojas koncentrācijas maksimumi, kas atbilst īpatnējās pretestības minimumam.

Kristāla rotācijas dēļ virpuļu izveidotie koncentrācijas maksimumi tiek izsmērēti pa visu kristalizācijas fronti, veidojot paaugstinātas koncentrācijas riņķi. Attēlā 4.10 redzams laikā vidējots koncentrācijas sadalījums uz kristalizācijas frontes un pēc formulas $\rho = \frac{1}{k_0 \cdot C}$ 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 [3, 1] kā arī eksperimentālajos datos [7].

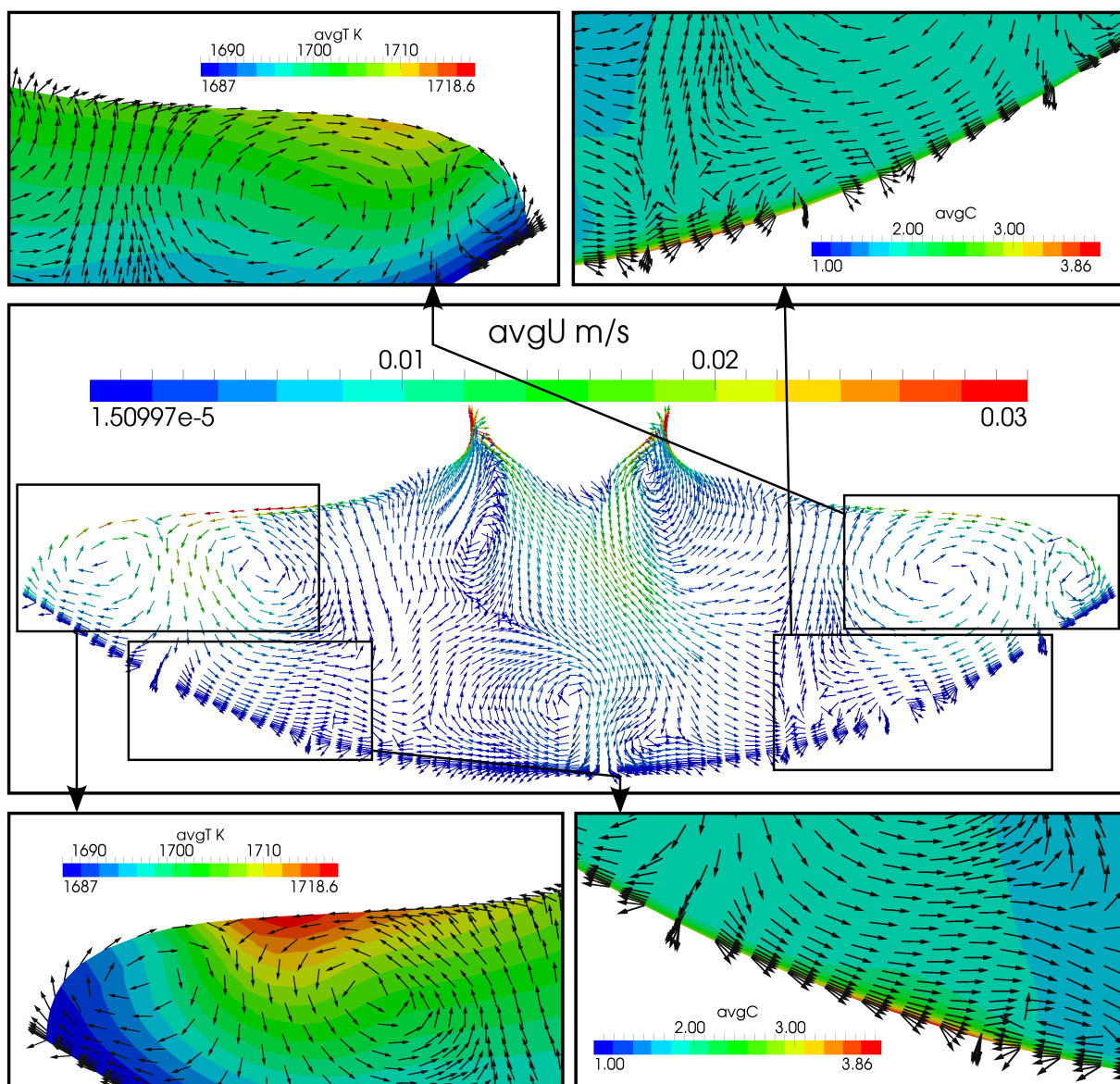
Pretestības grafika izkliede no vidējotās līknes (sarkanā līkne) skaidrojama ar diviem iemesliem: stari, uz kuriem tiek rēķināts $\rho(r)$, tiek vilkti pēc gadījuma principa dažādos laika soļos un hidrodinamisko svārstību dēļ. Lai novērtētu, kurā brīdī hidrodinamiskās svārtības ir izgājušas uz kādu stacionāru 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 4.9 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.



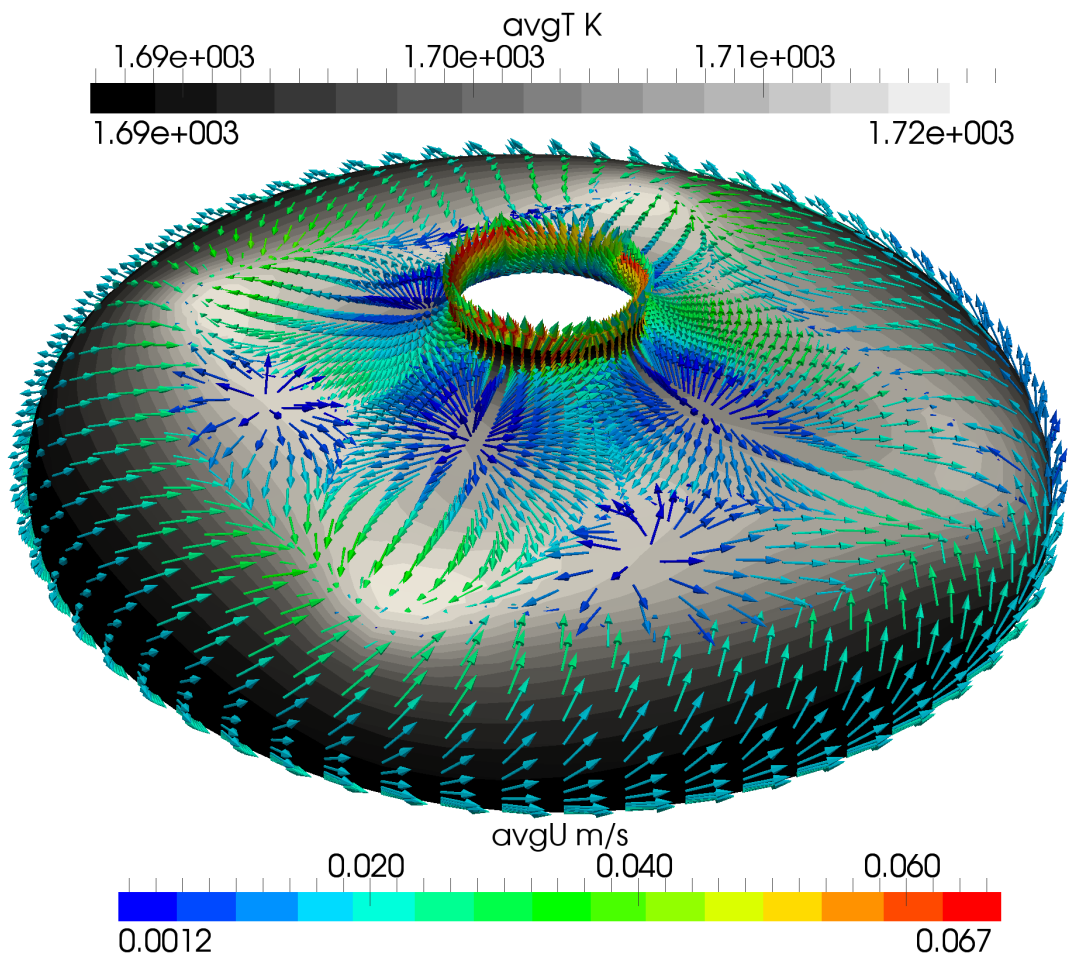
Attēls 4.4. Laikā vidējots ātruma moduļa lauks. No augšas uz leju - vertikāls šķērsriezums induktora galvenās spraugas plaknē, vertikāls šķērsriezums induktora galvenajai spraugai perpendikulārā plaknē un horizontālā šķērsriezumā ATP līnijas plaknē.



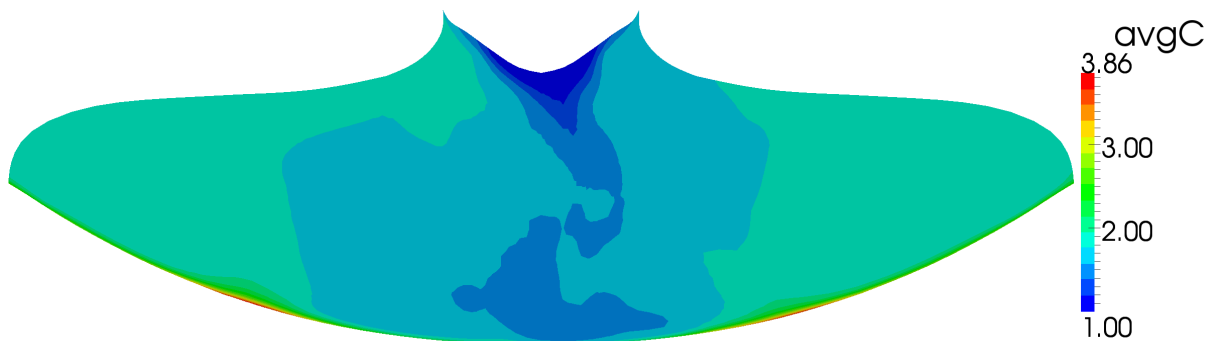
Attēls 4.5. Ātruma vektori vertikālā kausējuma šķērs griezumā perpendikulāri induktora galvenās spraugas plaknei ar detalizēti izzīmētiem temperatūras maksimumiem zem induktora spraugām un piemaisījumu koncentrācijas maksimuma un minimuma apgabaliem uz kristalizācijas frontes.



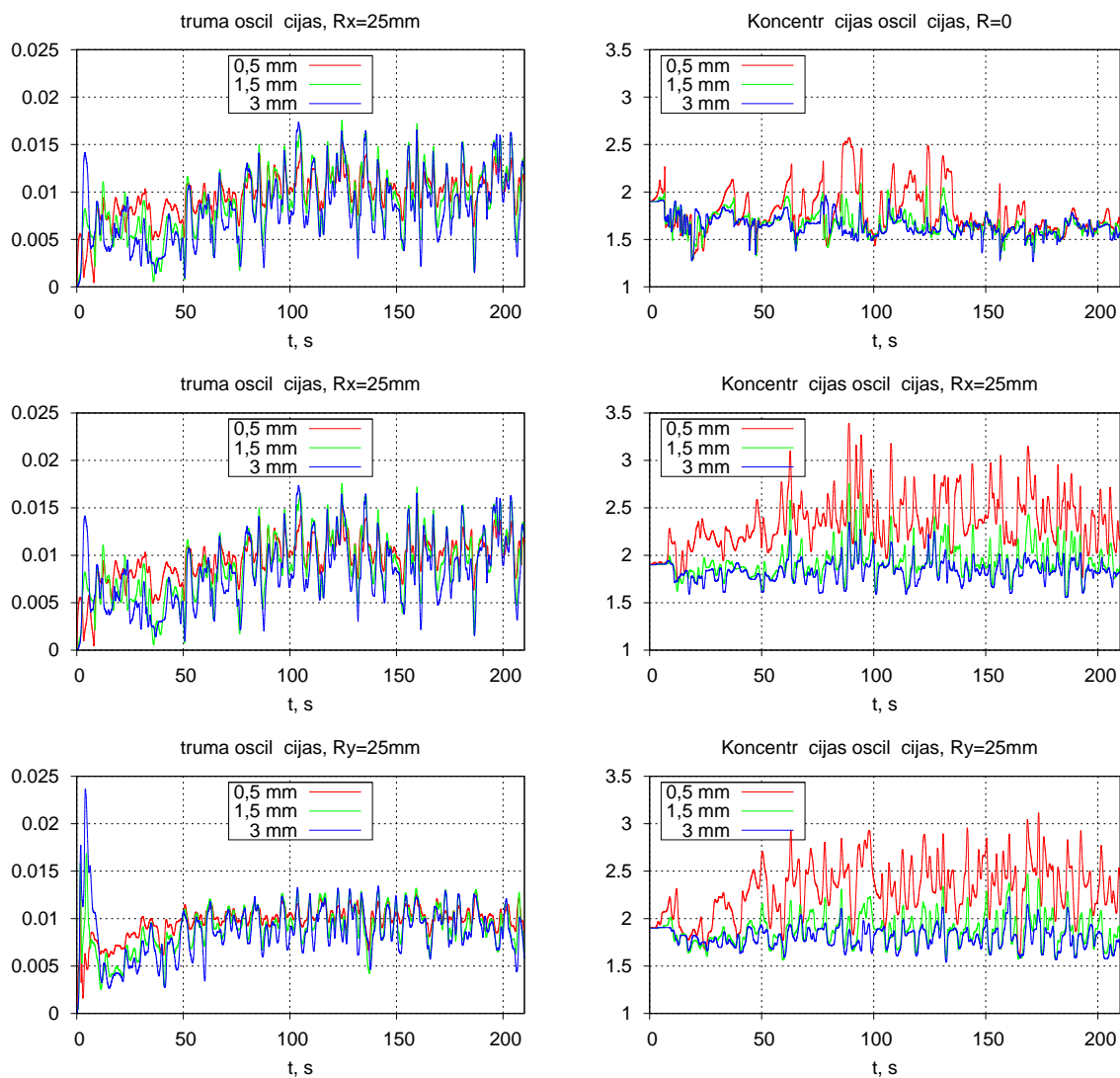
Attēls 4.6. Ātruma vektori vertikālā kausējuma šķērs griezumā induktora galvenās spraugas plaknē ar detalizēti izzīmētiem temperatūras maksimumiem zem induktora spraugas pretī galvenajai spragai (apakšējie attēli) un zem induktora galvenās spraugas (augšējie attēli) un pie-maisījumu koncentrācijas maksimuma un minimuma apgabaliem uz kristalizācijas frontes.



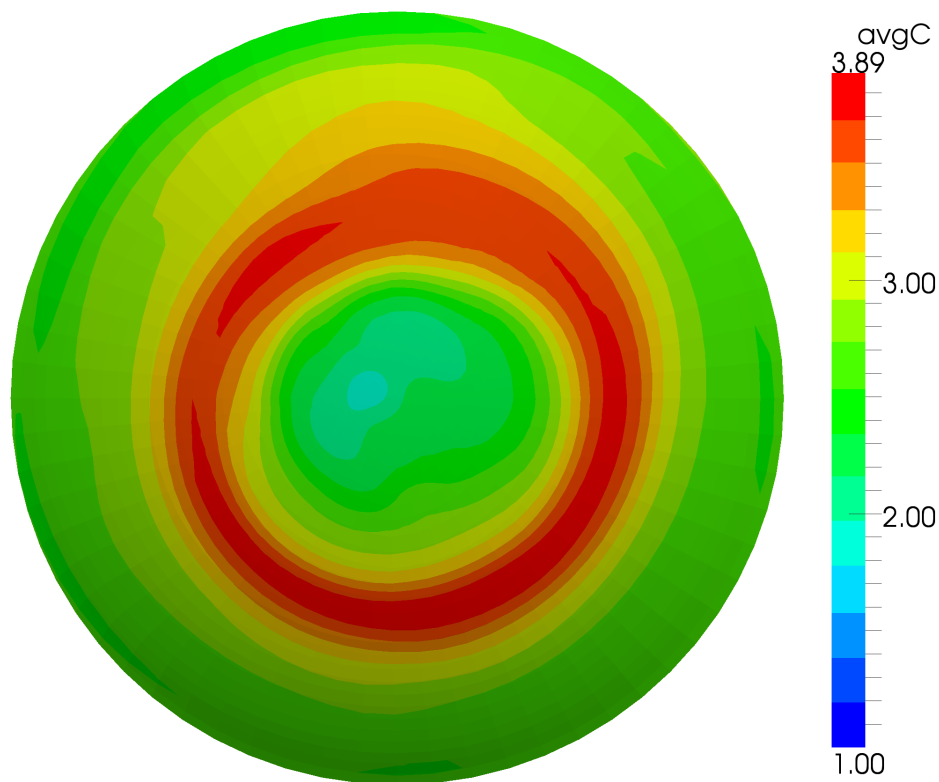
Attēls 4.7. Laikā vidējots temperatūras sadalījums un laikā vidējots ātruma vektorlauks uz kausējuma brīvās virsmas.



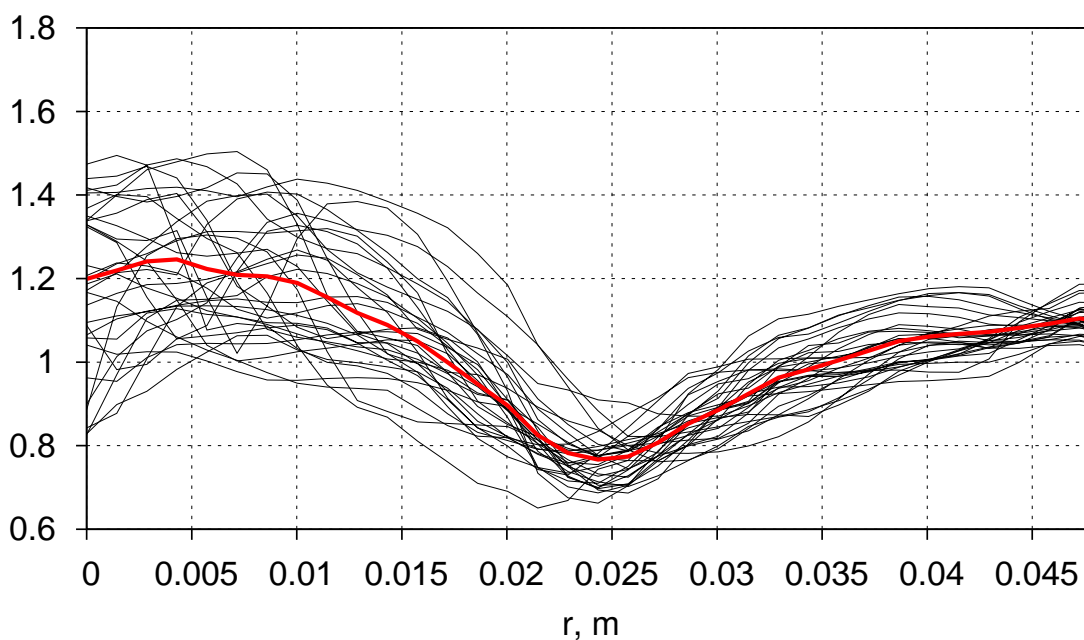
Attēls 4.8. Laikā vidējots koncentrācijas lauks induktora galvenās spraugas plaknes vertikālā šķērsgriezumā.



Attēls 4.9. 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 4.10. Laikā vidējots koncentrācijas lauks uz kristalizācijas frontes (augšā) un normalizēts radiālās pretestības sadalījums (apakšā).

IZMANTOTĀ LITERATŪRA UN AVOTI

- [1] **Gundars Ratnieks**. Modelling of the floating zone growth of silicon single crystals with diameter up to 8 inch. 2007.
- [2] **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.
- [3] **Kaspars Lācis**. Magnētisko lauku ietekmes 3d modelēšana peldošās zonas kristālu audzēšanā. 2010.
- [4] **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.
- [5] Openfoam mājaslapa. <http://www.openfoam.org/>.
- [6] Paraview mājaslapa. <http://www.paraview.org/>.
- [7] **H.-J.Rost, R.Menzel, A.luedge, and H.Riemann**. Float-zone silicon crystal growth at reduced frequencies. *Journal of Crystal Growth*, 2012.