



**LATVIJAS
UNIVERSITĀTE**

**Promocijas darba
kopsavilkums**

Kirils Surovovs

**LIELA DIAMETRA SILĪCIJA
KRISTĀLU AUDZĒŠANAS
AR PJEDESTĀLA PROCESU
SKAITLISKĀ MODELĒŠANA**

Rīga 2023



LATVIJAS UNIVERSITĀTE

FIZIKAS, MATEMĀTIKAS UN OPTOMETRIJAS FAKULTĀTE

Kirils Surovovs

LIELA DIAMETRA SILĪCIJA KRISTĀLU AUDZĒŠANAS AR PJEDESTĀLA PROCESU SKAITLISKĀ MODELĒŠANA

Promocijas darba kopsavilkums

Iesniegts doktora grāda fizikā iegūšanai
Apakšnozare: šķidrumu un gāzu mehānika

Rīga, 2023

Promocijas darbs izstrādāts Latvijas Universitātes Fizikas, matemātikas un optometrijas fakultātē, Skaitliskās Modelēšanas Institutā, laika posmā no 2015. gada līdz 2023. gadam.

Darbs sastāv no ievada, divām nodaļām, secinājumiem un literatūras saraksta.

Darba forma: publikāciju kopa fizikas nozarē, šķidrums un gāzu mehānikas apakšnozarē.

Darba zinātniskais vadītājs: *Dr. phys.* **Jānis Virbulis**

Darba recenzenti:

1. *Dr. phys.* **Imants Kaldre**, vadošais pētnieks Latvijas Universitātes Fizikas institūtā
2. *Dr. phys.* **Wolfram Miller**, vadošais pētnieks Berlīnes Kristālaudzēšanas Institutā, Vācijā
3. *Dr. phys.* **Gundars Ratnieks**, procesu attīstītājs Siltronic AG, Vācijā

Promocijas darba aizstāvēšana notiks 2023. gada 2. jūnijā plkst. 15:00 Rīgā, Jelgavas ielā 3, Latvijas Universitātes Fizikas nozares promocijas padomes atklātā sēdē. Ar promocijas darbu un tā kopsavilkumu var iepazīties Latvijas Universitātes Bibliotēkā Rīgā, Kalpaka bulvārī 4.

Promocijas darba autors piedalījās projektā “LU doktorantūras kapacitātes stiprināšana jaunā doktorantūras modeļa ietvarā” – Latvijas Universitāte, Līguma Nr. 8.2.2.0/20/I/006.

LU Fizikas zinātņu nozares promocijas padomes

priekšsēdētājs: _____ /*Dr. phys.* **Andris Jakovičs**/

sekretāre: _____ /**Sintiņa Siliņa**/

© Latvijas Universitāte, 2023

© Kirils Surovovs, 2023

ISBN 978-9934-36-001-5

ISBN 978-9934-36-002-2 (PDF)

Anotācija

Šis darbs ir veltīts silīcija kristālu audzēšanas ar pjedestāla metodi (rentabla alternatīva peldošās zonas procesam) skaitliskajai modelēšanai. Aplūkotajā pjedestāla procesa versijā sildīšana ir realizēta ar augstfrekvences induktoru, kas atrodas virs pjedestāla, un vidējas frekvences induktoru, kura vijumi aptver pjedestāla sānu virsmu. Šajā darbā ir aprakstīta siltuma pārneses un fāzu robežu modelēšana aksiāli simetriskajā tuvinājumā, lielākajā daļā aprēķinu neņemot vērā kausējuma plūsmu. Gadījumos ar mazu kristāla diametru (kristāla aizmetni), tika modelēta arī kausējuma plūsma, un tika analizēta kušanas frontes forma. Augstfrekvences induktora forma tika optimizēta, izmantojot gradienta metodi. Lai novērstu kausējuma centra sasāļšanu, attālums starp kušanas un kristalizācijas fronšu centriem tika izmantots kā mērķa funkcija. Kristālu audzēšanai ar diametru 100 mm tika iegūta optimāla augstfrekvences induktora forma, kā arī tika piedāvāts sildīšanas jaudas izmaiņas algoritms, kas ļautu visstabilāk realizēt konusa fāzi.

Atslēgvārdi: silīcijs, kristālu audzēšana, pjedestāla metode, skaitliskā modelēšana.

Satura rādītājs

Apzīmējumu un saīsinājumu saraksts	5
1. Vispārīgais darba raksturojums	6
1.1. Ievads	6
1.2. Motivācija	12
1.3. Literatūras apskats	13
1.4. Darba novitāte un autora ieguldījums	17
1.5. Darba mērķis un uzdevumi	18
1.6. Tēze	18
1.7. Rezultātu aprobācija	18
2. Matemātiskie modeļi	22
2.1. Augstfrekvences EM lauks	22
2.2. Vidējās frekvences EM lauks	23
2.3. Siltuma pārnese un fāzu robežas	23
2.4. Kausējuma plūsma	24
2.4.1. Nestacionāra kušanas fronte	25
2.5. Augstfrekvences induktora optimizācija	25
3. Aprēķinu rezultāti	28
3.1. Brīvās virsmas formas novērtējums	28
3.2. Sistēma bez sānu sildīšanas: ar reflektoru sildītāja vietā	29
3.2.1. Fāzu robežu forma	29
3.2.2. Kausējuma plūsma	29
3.3. Sistēma ar vienkāršoto pjedestāla sānu sildīšanu	36
3.3.1. Sānu sildītāja optimālās pozīcijas novērtējums	37
3.3.2. Fāzu robežu aprēķini un AF induktora optimizācija	39
3.4. Pilna sistēma: sānu sildīšana ar vidējās frekvences spoli	40
3.5. Modeļa verifikācija	50
3.6. Izaicinājumi liela diametra kristālu audzēšanā	55
3.6.1. Optimālās augstfrekvences induktora formas	55
3.6.2. Brīvās virsmas papildus sildīšana konusa fāzes laikā	58
4. Secinājumi	65
5. Atsauces	67

Apzīmējumu un saīsinājumu saraksts

Si	silīcijs
PZ	peldošās zonas [metode]
AF	augstfrekvences
VF	vidējās frekvences
EM	elektromagnētiskais
PM	pjedestāla metode
CZ	Čohralska [metode]
ETP	ārējais trīskāršais punkts
ITP	iekšējais trīskāršais punkts
PID	proporcionāli-integrāli-diferenciālā [regulēšana]
BV	brīvā virsma
HD	hidrodinamika
H_M	kausējuma augstums
D_C, R_C	kristāla diametrs, rādiuss
D_P, R_P	pjedestāla diametrs, rādiuss
H_P	pjedestāla augstums
H_Q	apsildāmā reģiona augstums
z_Q	apsildāmā reģiona attālums līdz ETP
f_t	mērķa funkcija
α_{ETP}	leņķis starp brīvo virsmu un vertikāli pie ETP
z_{max}	brīvās virsmas augstums
R_{ind}	induktora iekšējais rādiuss
H_{ind}	induktora augstums virs pjedestāla malas
r, z	radiālā un vertikālā koordinātes
T	temperatūra
\vec{v}	ātrums
q	siltuma plūsmas blīvums
Q	integrālā siltuma plūsma
I	induktora strāva
f	induktora frekvence
r_{ind}, z_{ind}	induktora šķēluma parametri (sk. Att. 2.3.): radiālā un vertikālā koordinātes
c_{ind}	liekuma rādiuss
k_{ind}	garums
α_{ind}	slīpuma leņķis

1 Vispārīgais darba raksturojums

*Man had admired crystals for long,
as he had appreciated their beauty*

B. Subashini and M. Geetha

1.1. Ievads

Mūsdienu pusvadītāju industrijā silīcija kristāli ir praktiski neaizstājami. Pateicoties ārkārtīgi lielam – līdz pat dažiem miljardiem dolāru 2020. gadā [1] – pasaules tirgus izmēram, pat ļoti mazi uzlabojumi silīcija ražošanas procesā ir izpētes vērti.

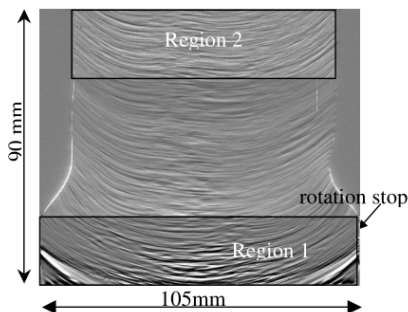
Skaitliskās modeļēšanas svarīgums

Kristālaudzēšanas eksperimenti, kas tiek veikti aprīkojuma uzlabošanas nolūkos, parasti ir ļoti dārgi un tehniski sarežģīti. Eksperimenta rezultātu kvalitāte bieži ir ierobežota un neļauj gūt ieskatu visos galvenajos audzēšanas procesa aspektos. Piemēram, kristalizācijas frontes forma var tikt eksperimentāli noteikta ar sānisko fotoelektrisko skenēšanu (angl. *lateral photovoltage scanning, LPS*) [2]. Viens no daudzajiem šīs metodes piemēriem Si kristālu raksturošanā ir pētījums no A. Lüdge [3]. Tas parāda vērtīgas atziņas par kristāla rotācijas ietekmi uz kristalizācijas frontes formu (sk. Att. 1.1.) un palīdz noskaidrot frontes formas attīstību laikā. Tomēr šis eksperiments neparāda izmaiņas temperatūras gradientos, brīvās virsmas formu, kausējuma plūsmu un citus aspektus, kas ietekmēja attēloto rezultātu. Lai pilnībā saprastu demonstrēto efektu un izmantotu to procesa attīstībai, ir nepieciešama sapratne par temperatūras lauku izkausētā silīcija *iekšienē*.

Lai iegūtu tāda veida sapratni par kristālaudzēšanas procesiem, plaši pielieto skaitlisko modeļēšanu. Tā atļauj ne tikai samazināt dārgu eksperimentu skaitu, bet arī papildināt esošos eksperimentus, aprakstot procesa raksturlielumus, kurus grūti izmērīt. Kā piemērus var nosaukt dažādu fizikālo lauku sadalījumu silīcijā un apkārtējā atmosfērā: temperatūra, ātrums, elektromagnētiskais lauks, piemaisījumu koncentrācija, termiskie

spriegumi utt.

Skaitlisko modelēšanu plaši izmanto industriālo procesu attīstībā, pat gadījumos, kad izmaiņas kristālu audzēšanas iekārtās ir mazas. Tāpēc jaunā industriālā procesa attīstības laikā skaitliskā modelēšana ir kritiski nepieciešama. Šis darbs apraksta **silīcija kristālu audzēšanas ar pjedestāla metodi skaitlisko modelēšanu, ar nolūku padarīt liela diametra kristālu audzēšanu iespējamu.**



Att. 1.1. LPS (angl. *lateral photovoltage scanning*) mērījums izaudzētā kristāla vertikālajā šķēlumā [3]. Reģions 1 atbilst procesa posmam ar kristāla rotāciju 5 apr./min, reģions 2 – posmam bez rotācijas.

Kristālu audzēšanas metožu īss apskats

Atkarībā no izmantotajiem materiāliem un paredzamiem pielietojumiem, tiek izmantotas dažādas kristālaudzēšanas metodes. Visas eksistējošās metodes var tikt klasificētas četrās kategorijās [4], kas ir aprakstītas zemāk, kopā ar komentāriem par to pielietojamību silīcija monokristālu audzēšanai.

Audzēšana no cietās fāzes

Audzēšana no cietās fāzes balstās uz atomu difūziju, kas parasti ir ļoti lēna. Šīs metodes piemēri ir atkvēlināšana, termiskā apstrāde, polimorfiskās fāzu pārejas utt., ko parasti izmanto metalurģiskajos procesos. Tikai nesen dažas no šīm metodēm, piemēram, graudu robežu migrāciju, sāka pētīt monokristāliem ar sarežģītu ķīmisko sastāvu vai inkongrētu kušanu [5]. Jebkurā gadījumā, audzēšana no cietās fāzes netiek aplūkota Si monokristālu gadījumā, jo citas metodes ir vienkāršākas, ātrākas un labāk izpētītas, kā tas būs parādīts vēlāk.

Audzēšana no šķīduma

Tā ir visvecākā un, iespējams, vispazīstamākā kristālu audzēšanas metožu kategorija – jonisko sāļu, kā NaCl, kristalizācija no ūdens šķīdumiem ir viens no piemēriem. Tās priekšrocības ir iekārtu vienkārša uzbūve un augsta kristālu tīrība (tāpēc ka kristāli aug pie temperatūrām, kas ir daudz zemākas par kušanas temperatūru). Tomēr šīs kategorijas metodes ir slikti piemērotas silīcijam: tas nešķīst ūdenī un prasa komplikētus šķīdinātājus [6].

Audzēšana no gāzveida fāzes

Šī metožu klase ietver metodes, kurās vielas atomi vai molekulas tiek ienestas reaktorā ar nesējgāzes plūsmas palīdzību. Tās izmanto, lai audzētu plānās kārtiņas un epitaksiālus slāņus (t.i. slāņus ar specifisku orientāciju pret substrātu). Šādas metodes parasti ietver trīs stadijas: iztvaicēšana, pārnese un nogulsnēšana. Silīcija gadījumā nogulsnēšana no gāzes fāzes tiek izmantota pārsvarā lai [7]:

- audzētu plānās kārtiņas,
- iegūtu augstās tīrības polikristāliskus stieņus, kuri pēc tam jāpārkausē, lai izaudzētu monokristālus.

Audzēšana no gāzes fāzes ir galvenā metode polikristāliskā Si ražošanā [8], tomēr nav rentabla monokristāliem procesa ilguma dēļ [9]. Vēl viens metodes trūkums ir ļoti toksisku gāžu [10] – galvenokārt trihlorsilāna SiHCl_3 un silāna SiH_4 – izmantošana [11].

Audzēšana no kausējuma

Vairāk nekā puse no kristāliem, ko izmanto tehnoloģiskajos procesos, ir izaudzēti no kausējuma [4]. Šī tehnika pieprasa, lai materiāls kustu bez sadalīšanās, būtu ar zemu ķīmisko aktivitāti un relatīvi zemu piesātināta tvaika spiedienu. Silīcijs atbilst šiem kritērijiem [12]. Eksistē vairākas metodes, kā izaudzēt kristālus no kausējuma

- **Bridžmana (*Bridgman*) metode** – materiāls tiek izkausēts slēgtā konteinerā, pēc tam atdzesēts, lēni bīdot konteineru no augstas temperatūras apgabala (parasti krāsns augšējā daļa) uz zemās temperatūras apgabalu (apakšējā daļa) [13]. Šīs metodes variācija, kas izmanto garenu nenoslēgtu konteineru ar īsām malām un horizontālo

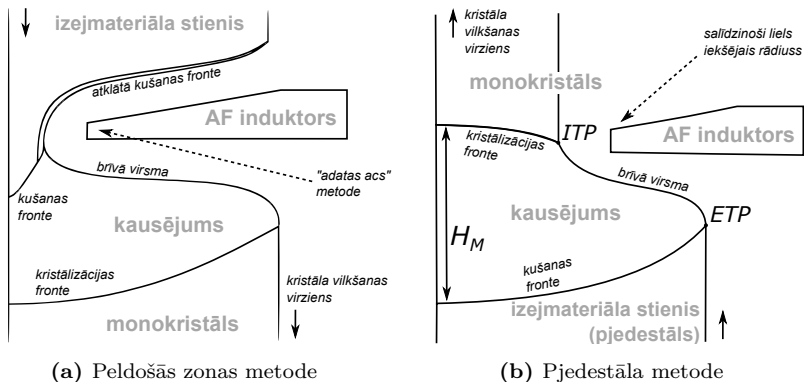
temperatūras gradientu, ir pazīstama kā horizontālā virzītas kristalizācijas vai Bagdasarova metode [14].

- **Virzītā kristalizācija** – vēl viena Bridžmana metodes modifikācija, kur konteineris ar materiālu ir nekustīgs, bet temperatūras izmaiņa tiek nodrošināta ar sildītāju jaudas kontroli [15].
- **Čohralska (*Czochralski*) metode** – polikristālisko materiālu izkausē tīgelī (Si gadījumā: kvarca tīgelī), pēc tam kristāla aizmetnis tiek pielikts brīvās virsmas centrā, un monokristāls tiek vilkts no kausējuma uz augšu. Šī metode ļāva iegūt Si monokristālu bez dislokācijām (kristāla režģa lineāriem defektiem, t.i., līnijām, gar kurām atomu izkārtojums pēkšņi izmainās) jau 1958. gadā [16], bet mūsdienās tā ir galvenā metode Si monokristālu ražošanā pateicoties lielam ātrumam un zemām izmaksām [17].
- **Tīgelis no granulām** – šī metode ir līdzīga Čohralska metodei, bet procesa sākumā kvarca tīgelis tiek piepildīts ar Si granulām, un siltuma pievadīšana notiek no augšas. Tas nodrošina, ka daļa no granulām neizkūst un izveido slāni, kas atdala šķidru Si no tīģeļa sienām [18]. Sildīšanu veic ar augstfrekvences induktoru: tas ļauj iztikt bez grafitā sildītāja, tādā veidā sasniedzot zemāku piemaisījumu saturu [19].
- **Peldošās zonas metode** – šī metode ir viena no beztīģeļa metodēm, t.i. izkusis materiāls nepieskaras citām sistēmas daļām, un izkususi zona “peld” starp izejmateriāla stieni (tiek padots no augšas) un izaudzēto monokristālu (atrodas apakšā), sk. Att. 1.2.(a). Sildīšanu var īstenot ar augstfrekvences induktoru vai ar optiskajām iekārtām [20]. Pirmie šīs metodes pielietojumi silīcijam sākās 20. gadsimta 50. gados [21], kad tika izaudzēti 5 mm diametra kristāli. Kopš tiem laikiem maksimāli iespējams monokristāla diametrs pieauga 40 reizes [22]. Šī metode ir otrā visplašāk lietota Si monokristālu audzēšanas metode (pēc Čohralska metodes) [17].
- **Pjedestāla metode** – šī metode ir līdzīga peldošās zonas metodei, toties izejmateriāla stienis, jeb pjedestāls, atrodas apakšā [23], uz tā izveidots kausējums, un monokristāls tiek izvilkts no kausējuma uz augšu, sk. Att. 1.2.(b). Šī metode ir detalizētāk aprakstīta nākamajā apakšnodaļā.

Beztīģeļa metodes

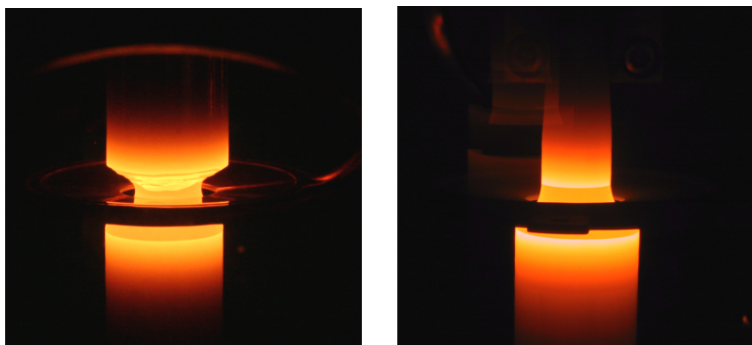
Dažās no kristālu audzēšanas metodēm (piemēram, Čohralska vai virzītas kristalizācijas) ir nepieciešams tīģelis, kas satur izkausēto materiālu. Tomēr pastāv pielietojumi, kuriem kristāla kvalitātes prasības ir tik augstas, bet pieļaujamā piemaisījumu koncentrācija ir tik zema, ka ir jāizmanto beztīģeļa metodes. Daži no šiem pielietojumiem ir augstās jaudas elektroniskās iekārtas un detektori. Vēl viens pielietojums ir polikristāla pārkausēšana un atkārtota kristalizācija, lai pēc tam to pētītu ar Furjē infrasarkanā (angl. *Fourier Transform InfraRed, FTIR*) spektroskopiju [24].

Visplašāk pazīstama beztīģeļa kristālaudzēšanas metode ir peldošās zonas (PZ) metode, kuras gaitā kausēšana tiek nodrošināta ar viena vijuma augstfrekvences (AF) elektromagnētisko (EM) induktoru. PZ metodē polikristāliskais stienis ir novietots virs induktora, un kušana notiek uz tā apakšējās virsmas (Att. 1.2.(a) un Att. 1.3.(a)). Šī virsma – atklātā kušanas fronte – kur izkusis izejmateriāls plūst uz leju, pieprasa augstu polikristāliskā stieņa kvalitāti un padara audzēšanas procesa kontroli sarežģītāku. Tas paaugstina arī polikristāliskā stieņa ražošanas izmaksas.



Att. 1.2. Peldošās zonas metodes un pjēdestāla metodes aksiāli simetriskas shēmas.

Vēl viena izvēle ir lietot nesēn piedāvāto granulētā tīģeļa metodi. Šīs metodes priekšrocība, salīdzinot ar PZ metodi, ir tāda, ka nav nepieciešama ilga un dārga polikristāliskā stieņa ražošana [26], tāpēc ka granulas var ražot tiešā veidā no trihlorsilāna [27]. No otras puses, šī metode vēl ir attīstības stadijā un tāpēc pagaidām netiek plaši pielietota pieredzes trūkuma dēļ.



(a) Peldošās zonas metode

(b) Pjedadāla metode

Att. 1.3. Kristālaudzēšanas procesu fotogrāfijas, autori M. Wünscher u.c. [25].

Pjedadāla metode (PM), ko pirmo reizi piedāvāja Viljams Dašs (*Dash*) jau 1958. gadā [23], ir vienkāršāka PZ metodes alternatīva. Atšķirībā no PZ metodes, pjedadāla metodē nav tik sarežģītas virsmas, kā atklātā kušanas fronte, tāpēc ka visu izejmateriāla stieņa augšējo virsmu noklāj kausējums (sk. Att. 1.2.(b)). Tātad, procesa kontrole var būt vienkāršāka, bet prasības pret izejmateriālu – zemākas, nekā PZ sistēmā.

No otrās puses, PM ir ierobežojumi attiecībā uz induktora formu: “adatas acs” induktori (t.i. ar iekšējo diametru, kas mazāks par monokristāla diametru, sk. Att. 1.2.(a)), kas tiek izmantoti PZ metodē, nevar tik izmantoti PM. Kopā ar 11° prasību pret meniska leņķi [28] cilindriskā kristāla audzēšanai, tas noved pie kausējuma centra sasalšanas riska, tāpēc ka induktors atrodas tālu no kausējuma centra. Sarežģījumi var parādīties arī kausējot pjedadāla virsmu procesa sākumā (vairāk informācijas 3.3.1. un 3.6.2. apakšnodalās).

Pjedadāla metodes tehnoloģiskais konteksts

PZ metodē izmantoto izejmateriāla stieņu ražošanas cenu var samazināt, izmantojot stieņus, kas izaudzēti ar Čohralska (CZ) metodi [29]. Tomēr AF indukcijas sildīšanas problēmas (piemēram, ģeneratora konstrukcija vai augsts spiediens iekārtā, lai novērstu izlādi augsta sprieguma dēļ) un augstas prasības pret stieņa kvalitāti (CZ procesā ir grūti nodrošināt zemu skābekļa koncentrāciju) joprojām pastāv [30]. Tāpēc, lai arī CZ metode ļauj izaudzēt kristālus ar diametriem līdz 300 mm, informācija par PZ kristāliem, kas pārsniedz 200 mm, pagaidām nav atrodama literatūrā.

Šie apstākļi motivē izpētīt PM pielietojamību Si monokristālu audzēšanā. Pjēdestālu var sildīt ne tikai ar AF (1–3 MHz) induktoru, bet arī ar papildus vidējās frekvences induktoru vai elektronstaru sildītāju [31]. Tas palīdz atrisināt tādas problēmas kā, piemēram, elektriskā izlāde pie AF induktora pievadiem un ģenerators konstrukcijas grūtības [32]. Vēl viena PM priekšrocība ir iespēja izmantot t.s. “dražēju legēšanu” (angl. *pill-doping*), kad piemaisījumus ievieto aksiālos caurumos, kas izurbti pjēdestālā. Pateicoties lielākam (salīdzinot ar FZ) kausējuma tilpumam, tas var saturēt vairāk piemaisījumu, tādā veidā nodrošinot vienmērīgāku piemaisījumu aksiālu sadalījumu izaudzētajā kristālā [33].

PM ir īpaši perspektīva pie nosacījuma, ka liela diametra augstas tīrības polikristāliskie stieņi ir relatīvi viegli pieejami. Šis nosacījums izpildās *KEPP EU* kompānijā [34, 35], kur polikristāliskie stieņi tiek iegūti ar metodi, kas līdzīga CZ metodei: audzēšana no kausējuma, kas atrodas cietā silīcija čaulā (sacietējis Si slānis uz tīģeļa sienām) izmantojot elektronstaru sildītāju [36]. Elektronstaru sildīšana atļauj samazināt enerģijas patēriņu un piemaisījumu saturu [30], salīdzinot ar CZ metodi [37]. Šāds rezultāts ir sasniegts pateicoties skaitliskās modelēšanas izmantošanai elektronu lielgabala optimizācijā [38].

1.2. Motivācija

Kā parādīts iepriekšminētajā apakšnodaļā, pjēdestāla metodi var uzskatīt par peldošās zonas metodes alternatīvu. Dažos aspektos pjēdestāla metode ir vienkāršāka par peldošās zonas metodi – piemēram, procesa kontrole, prasības pret izejmateriālu. Tā kā *KEPP EU* rūpnīcā tiek ražoti liela diametra polikristāla stieņi (diametri līdz 300 mm), PM realizēšana tajā pašā rūpnīcā var kļūt par priekšrocību no ražošanas procesa organizēšanas viedokļa.

Tomēr līdz šim liela diametra silīcija monokristāli vēl netika audzēti ar pjēdestāla metodi (sk. literatūras aprakstā zemāk), tāpēc šā audzēšanas procesa attīstībai ir nepieciešama skaitliskā modelēšana. Tas ir viens no iemesliem, kāpēc šis promocijas darbs ir svarīgs rūpnieciskās silīcija kristālu audzēšanas kontekstā Latvijā.

Latvijas Universitātes Skaitliskās Modelēšanas Institūtā, Pusvadītāju Tehnoloģiju Laboratorijā, ir uzkrāta liela pieredze Si kristālu audzēšanas modelēšanā, modelējot PZ un CZ procesus. Esošās iestrādes un institūta darbinieku pieredze atvieglo PM skaitliskā modeļa izveidi, tādā veidā

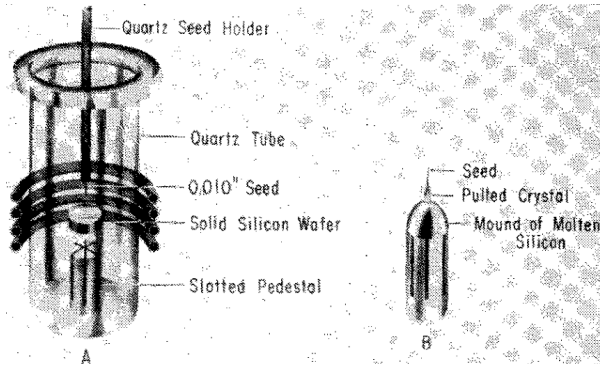
palielinot iespējas sasniegt šā promocijas darba mērķi.

1.3. Literatūras apskats

Īss kristālaudzēšanas metožu apskats ir sniegts 1.1. apakšnodaļā. Šī apakšnodaļa, savukārt, apraksta pjedestāla metodi detalizētāk un prezentē pārskatu par beztiģeļa Si kristālu audzēšanas modelēšanas attīstību.

Pjedestāla metode

Pirmais gadījums, kad Si kristālu audzēšana ar PM ir pieminēta literatūrā, ir atrodams 1958. gada Viljama Daša (*William C. Dash*) rakstā [23]. Viņš demonstrēja kristālu ar diametru līdz 12 mm audzēšanas iespēju no pjedestāla ar līdzīgu diametru. Pjedestālā tika izveidotas spraugas, tādā veidā palielinot tā virsmas laukumu un vienkāršojot kausēšanu ar AF induktoru. Viņš arī parādīja, ka kristāli var tikt izaudzēti bez dislokācijām: ja procesa sākumā kristāla aizmetni velk ar lielu ātrumu, un kristāla diametrs ir mazs, tad dislokācijas pārvietojas līdz kristāla virsmai un tiek likvidētas [39]¹. Pjedestāla formas izmaiņa no cilindriskās uz konisko ļāva uzlabot procesa stabilitāti un audzēt garākus kristālus ar diametru 12 mm (Si) or 6 mm (Ge) [40].



Att. 1.4. Pjedestāla metodes shēma (A) un kausējuma forma (B) audzēšanas procesā. Ilustrācija no Viljama Daša raksta, kas ir pirmā pjedestāla metodes pieminēšanas reize zinātniskajā literatūrā [23].

No pjedestāla izaudzēti Si kristāli, kas kopš tā laika tika pieminēti zinātniskajā literatūrā, ir ļoti mazi pēc mūsdienu tirgus standartiem.

¹Ir savā ziņā pārsteidzoši, ka t.s. *Dash neck* metode, ko tagad ļoti plaši pielieto CZ kristālu audzēšanā, tika pirmoreiz publicēta rakstā, kas veltīts pjedestāla metodei!

Piemēram, vēsturiska PM izmantošana iekļauj 4–5 mm diametra kristālu audzēšanu rentgenstaru topogrāfijas pētījumiem [41] un 9 mm diametra t.s. bi-kristālu (izaudzēti no aizmetņa ar graudu robežu) pētījumiem [42]. Tie tika izmantoti arī kā substrāti ķīmiskas tvaiku nogulsnešanas (angl. *chemical vapor deposition*) procesā [43]. Vēl mazāki diametri – zem 2 mm – dažreiz tiek izmantoti Si kristālu audzēšanā fotoelektriskiem pielietojumiem [44]. Tik mazu kristāla izmēru prevalēšana literatūrā var tikt izskaidrota ar faktu, ka PM ir ērtāka mazu kristālu beztīģeļa audzēšanai, nekā PZ metode: izejmateriāla stieņa augšējo daļu ir vieglāk izkausēt, nekā apakšējo daļu, kā arī pēc tam vieglāk pieskarties tai ar kristāla aizmetni.

Saskaņā ar fon Ammonu u.c. [45], ar PM izaudzēto Si kristālu diametrs var sasniegt tikai 20 mm, tāpēc ka pie lielākiem diametriem ir grūti stabilizēt zonas formu. H. Riemann u.c. arī pieminēja 15–20 mm Si kristālu audzēšanu no pjedestāla [33]. Tomēr eksistē PM modifikācija ar elektronstaru sildīšanu, ko piedāvāja T. F. Ciszek [46]. Šī modifikācija ļāva izaudzēt kristālu ar diametru 40 mm no pjedestāla ar diametru 100 mm. Apgabals, ko apsildīja elektronu stars, bija fiksēts attiecībā pret kristālu. Svarīga sistēmas īpašība bija ekscentrisks kristāla novietojums – tā ass bija nobīdīta no pjedestāla ass par 20 mm. Tādā veidā, pateicoties pjedestāla rotācijai, visa tā augšējā virsma tika pakļauta elektronstaru iedarbībai; pretstatā aksiāli simetriskajai konfigurācijai, kur apsildāmais apgabals ietvertu tikai daļu no augšējās virsmas un nesasniedtu tās ārējas malas. Tātad, ekscentriskā konfigurācija palīdzēja vienmērīgāk apsildīt pjedestālu.

Iepriekšminēto kristāla diametra ierobežojumu dēļ W. Zulehner un D. Huber nosauca PZ metodi par “vienīgo nopietno Čohralska metodes sāncensi” [47], kamēr PM pieminēja tikai mazu kristālu, piemēram kristāla aizmetņu, ražošanas kontekstā. Neskatoties uz tik pieticīgu PM raksturojumu, šā darba mērķis ir parādīt, ka lielu silīcija kristālu audzēšana no pjedestāla tomēr ir iespējama. Lai sasniegtu šo mērķi, tiek izmantota skaitliskā modelēšana.

Si kristālu audzēšanas beztīģeļa metožu skaitliskā modelēšana

Skaitliskā modelēšana tika izmantota, lai uzlabotu un attīstītu beztīģeļa metodes, sākot vismaz no 19. gadsimta 70. gadiem. Piemēram, izkusušās zonas forma PZ procesā tika matemātiski modelēta S. Coriell un M. Cordes darbā [48], neņemot vērā kausējuma plūsmu. Tomēr matemātisko modeļu attīstība bija ļoti strauja: jau 1978. gadā tika analizēta termiskā konvekcija FZ kausējumā [49], pēc tam tika modelēta Marangoni spēka [50] un EM

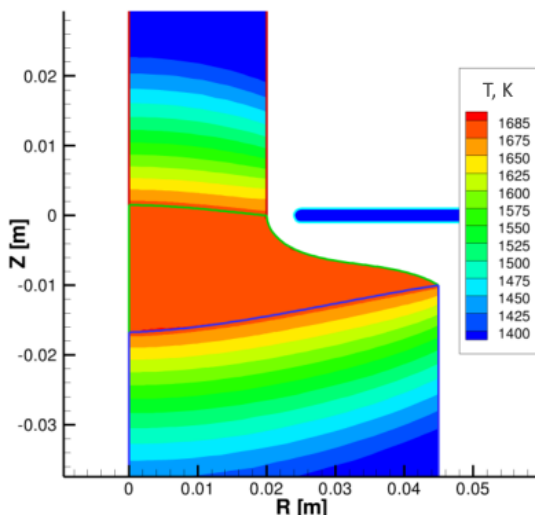
spēka [51] ietekme. Visi šie efekti (termiskā konvekcija, Marangoni spēks, EM spēks) tika sajūgti (angl. *coupled*) ar izkusušās zonas formas aprēķinu 1995. gadā; tika aprakstītas arī nestacionāras ātruma svārstības [52]. Sekojot datoru veikspējas palielināšanai, 3D modeļu ieviešana (atšķirībā no iepriekš lietotiem aksiāli simetriskajiem tuvinājumiem) notika 90-jos gados EM laukam [53] un 2000. gadā – kausējuma plūsmā [54].

Visi iepriekšminētie pētījumi aplūkoja PZ metodi, tāpēc ka tā ir vispopulārākā Si kristālu beztiģeļa audzēšanas metode. Bet eksistē pētījumi, kas parāda skaitliskās modeļēšanas noderīgumu arī citām metodēm. Piemēram, Si kristālu audzēšanas no granulētā tiģeļa (pati metode tika patentēta 2011. gadā [18]) attīstība bija intensīvi atbalstīta ar skaitlisko modeļēšanu. Simulāciju rezultāti tika publicēti pat pirms eksperimentu rezultātiem:

- Aksiāli simetriskais EM lauka un silīcija temperatūras modelis tika pirmo reizi aprakstīts 2014. gadā [55].
- Šis modelis tika uzlabots, izmantojot salīdzinājumu starp dažādām modeļēšanas programmām, papildināts ar 3D ģeometriju un verificēts salīdzinot ar vienkāršajiem gadījumiem (analītiskais atrisinājums, eksperimentāli izmērīts magnētiskais lauks ap atsevišķi stāvošo induktoru) 2017. gadā [56].
- Paziņots par 60 mm diametra kristālu iegūšanu un publicēti eksperimentālās iekārtas attēli – 2018. gadā [57].
- 2020. gadā izpētīts piemaisījumu un defektu sadalījums izaudzētajā 60 mm kristālā [19], izstrādāts procesa kontroles modelis un piemeklēti empīriskie parametri [58].

Pjēdestāla metodes skaitliskā modeļēšana

Pretstatā PZ un granulētā tiģeļa metodēm, pjēdestāla metodei gandrīz neeksistē literatūras avoti, kas aplūkotu tās skaitlisko modeļēšanu silīcija kristālu audzēšanas gadījumā. Vienīgais izņēmums ir programmas *FE-MAG/FZ* [59] īsa pieminēšana. Apgalvojums, ka tai ir potenciāls modelēt arī PM, tika pamatots ar vienu koncepcijas apliecinājuma (angl. *proof-of-concept*) simulāciju bez jebkādiem ievaddatiem no eksperimentālās sistēmas, sk. Att. 1.5.. Šajā piemērā izkusušās zonas augstums un brīvās virsmas forma tiek uzdoti kā patvaļīgi simulācijas ievaddati, nevis tiek aprēķināti.



Att. 1.5. Vienkāršots koncepcijas apliecinājuma pjedestāla metodes modelis: temperatūras lauks silīcijā, iegūts ar programmu *FEMAG-FZ* [25].

Turklāt, ja neņem vērā pjedestāla metodi ar lāzera sildīšanu (kas ir galvenokārt domāta tievu oksīda šķiedru audzēšanai, ar diametru mazāk par 1 mm [60]), literatūrā nav atrodamas publikācijas par PM modelēšanu *jebkuram materiālam*, izņemot M. Wünscher rakstu, kas veltīts germānija kristālu audzēšanai [61]. Šis raksts parāda, kā programma *FEMAG/FZ* tika adaptēta PM modelēšanai: brīvās virsmas koordinātes netika aprēķinātas, bet tika nolasītas no eksperimenta fotogrāfijas un padotas kā simulācijas ievaddati.

Tātad, neskatoties uz ilgu laiku kopš PM izgudrošanas, zinātniskajā literatūrā gandrīz nav aprakstīti tās skaitliskie modeļi. To var izskaidrot ar PM relatīvi zemu popularitāti, salīdzinot ar PZ un CZ metodēm, īpaši silīcija kristālu audzēšanas gadījumā. Tā kā PZ metode tika izgudrota agrāk, kā arī ļauj izmantot induktoru ar mazu iekšējo diametru (t.i., mazāku par izaudzētā kristāla diametru), tā attīstījās straujāk un rūpnieciskos procesos ir aktuālāka par PM. Līdz ar to vēl viens aspekts, kas apgrūtina PM modelēšanu, ir eksperimentālo datu trūkums. Tāpēc pjedestāla metode gandrīz nav līdz šim nonākusi skaitlisko modelētāju uzmanības lokā.

1.4. Darba novitāte un autora ieguldījums

No iepriekšējās apakšnodaļas var secināt, ka fāzu robežu aprēķini, kas ir iekļauti šajā promocijas darbā, ir savā ziņā unikāli: silīcija audzēšana ar pjedestāla metodi tiek skaitliski modelēta pirmo reizi. Pirmo reizi brīvās virsmas forma pjedestāla sistēmā ir aprēķināta skaitliski, nevis uzdota kā ievaddati. Novitāte piemīt arī kausējuma plūsmas aprēķiniem un augstfrekvences induktora optimizācijas aprēķiniem – šāda veida pētījumi pjedestāla sistēmām nav atrodamī literatūrā.

Promocijas darba autors uzlaboja un modificēja galveno PM modelēšanas programmu (ko sākotnēji uzrakstīja Gundars Ratnieks un Andis Rudevičš PZ metodei, pēc tam papildināja Andrejs Sabanskis, Armands Krauze, Matīss Plāte) un izmantoja to parametru pētījumu veikšanai. Autors uzrakstīja skriptus vienkāršotam sistēmas aprakstam (sk. 3.1. un 3.3.1. apakšnodaļas), izveidoja jaunu programmu kušanas frontes kustības modelēšanai ar šķidrums tilpuma metodi izmantojot *OpenFOAM C++* bibliotēku (sk. 2.4.1. apakšnodaļu), un izveidoja induktora optimizācijas programmu ar *Python* (sk. 2.5. apakšnodaļu). Autors komunicēja ar industrijas partneriem (Anatoly Kravtsov no *KEPP EU, Mašīnbūves kompetences centrs*) par sistēmas parametriem, projektu rezultātiem un darba uzdevumiem. Visi skaitliskie aprēķini, kas prezentēti zemāk, ir paša autora veikti.

Darba autors uzrakstīja četras zinātniskās publikācijas kā galvenais autors: [Dis1], [Dis2], [Dis3], [Dis4], un daļu no citas publikācijas kā līdzautors: [Dis5]. Darba rezultāti tika prezentēti starptautiskajās kristālaudzēšanas un materiālzinātņu konferencēs [Conf1], [Conf2], [Conf3], [Conf4], [Conf5], un Latvijas Universitātes konferencēs [Conf6], [Conf7], [Conf8], [Conf9].

Šis promocijas darbs tika izstrādāts doktorantūras studiju laikā un pēc tām, Latvijas Universitātē, Rīgā, no 2015. līdz 2023. gadam.

1.5. Darba mērķis un uzdevumi

Dažas no literatūras apskatā minētajām publikācijām piemin 20 mm [33, 45] vai 40 mm [46] ierobežojumu attiecībā uz kristāla diametru, ko iespējams izaudzēt ar pjedestāla metodi. Tomēr mūsdienu silīcija kristāla tīrgū ir pieprasījums galvenokārt pēc liela diametra kristāliem¹, sākot ar 100 mm. Pjedestāla metode agrāk netika modelēta zemās popularitātes dēļ, kā arī tāpēc, ka peldošās zonas metodei bija priekšrocības liela diametra silīcija kristālu audzēšanai.

Šā darba mērķis ir **izmantojot skaitlisko modelēšanu, demonstrēt iespējamību audzēt liela diametra (100 mm) silīcija kristālus ar pjedestāla metodi, kā arī dot praktiskus padomus atbilstošas eksperimentālās iekārtas projektēšanai un procesa realizācijai.** Šis mērķis tika sasniegts ar šādiem uzdevumiem:

1. Izveidot PM modelēšanas programmatūru, bāzējoties uz PZ metodes modelēšanas programmatūru, kas tika iepriekš izstrādāta Skaitliskās Modelēšanas Institutā.
2. Pārbaudīt programmatūru un uzlabot to, ņemot vērā industriālo partneru (*KEPP EU* kompānijas) eksperimentālās iekārtas attīstību.
3. Verificēt programmatūru, salīdzinot aprēķinu rezultātus ar pieejamiem eksperimentu datiem.
4. Optimizēt augstfrekvences induktora formu 100 mm diametra kristālu audzēšanai.

1.6. Tēze

Modelēšanas rezultāti apstiprina, ka ir iespējams izaudzēt lielus (100 mm diametrā) silīcija kristālus, ja pjedestāla metode tiek atbilstoši attīstīta.

1.7. Rezultātu aprobācija

Autora publikācijas

[Dis1] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Numerical Modelling for the Diameter Increase of Silicon Crystals Grown with the Pe-

¹ Jo lielāks ir kristāla diametrs, jo vairāk mikroshēmu var vienlaicīgi saražot no vienas kristāla plāksnes.

- destal Method,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 563, p. 126095, 2021.
- [Dis2] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Modelling of the Pedestal Growth of Silicon Crystals,” *Lithuanian Journal of Physics*, vol. 61, no. 3, pp. 151–156, 2021.
- [Dis3] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Optimization of the Shape of High-Frequency Inductor for the Pedestal Growth of Silicon Crystals,” *Magnetohydrodynamics*, vol. 55, no. 3, pp. 353–366, 2019.
- [Dis4] K. Surovovs, M. Plāte, and J. Virbulis, “Modelling of Phase Boundaries and Melt Flow in Crucible-Free Silicon Crystal Growth Using High-Frequency Heating,” *Magnetohydrodynamics*, vol. 53, no. 4, pp. 715–721, 2017.
- [Dis5] A. Kravtsov, K. Surovovs, and J. Virbulis, “Float Zone Single Crystals for Testing Rods, Pulled under Electron Beam Heating,” in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 503, 2019.

Autora publikācijas, kas netika iekļautas promocijas darbā, ir uzskaitītas zemāk:

- K. Surovovs, M. Surovovs, A. Sabanskis, J. Virbulis, K. Dadzis, R. Menzel and N. Abrosiov, “Numerical Simulation of Species Segregation and 2D Distribution in the Floating Zone Silicon Crystals”. *Crystals*, vol. 12, no. 12, 1718, 2022.
- A. Sabanskis, K. Surovovs and J. Virbulis, “3D Modeling of Doping From the Atmosphere in Floating Zone Silicon Crystal Growth”. *Journal of Crystal Growth*, vol. 457, pp. 65–71, 2017.
- A. Sabanskis, K. Surovovs, and J. Virbulis, “Three-dimensional Modelling of Dopant Transport in Gas and Melt During FZ Silicon Crystal Growth”. *Magnetohydrodynamics*, vol. 51, pp. 157–170, 2015.
- A. Sabanskis, K. Surovovs, A. Krauze, M. Plāte, and J. Virbulis, “Modelling of the Influence of Electromagnetic Force on Melt Convection and Dopant Distribution at Floating Zone Growth of Silicon”. *Magnetohydrodynamics*, vol. 51, pp. 375–384, 2015.

- K. Surovovs, A. Muiznieks, A. Sabanskis, and J. Virbulis, “Hydrodynamical Aspects of the Floating Zone Silicon Crystal Growth Process”. *Journal of Crystal Growth*, vol. 401, pp. 120–123, 2014.
- K. Surovovs, V. Valle, A. Sorokins, J. Timošenko, D. Docenko, A. Cēbers and D. Bočarovs, “Latvijas 42. atklātā fizikas olimpiāde”. *Zvaigžņotā debess*, vol. 238, pp. 52–59, 2017.

Autora dalība konferencēs

- [Conf1] K. Surovovs, M. Surovovs, A. Sabanskis, J. Virbulis, K. Dadzis, R. Menzel, and N. Abrosimov, “Effect of Melt Flow on Dopant and Impurity Segregation During Floating Zone Growth of Silicon,” in *7th European Conference on Crystal Growth*. Paris, France, July 2022.
- [Conf2] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Modelling of the Pedestal Growth of Silicon Crystals,” in *Electromagnetic Processing of Materials*. Riga, Latvia, June 2021.
- [Conf3] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Modelling of the Pedestal Growth of Silicon Crystals,” in *Functional Materials and Nanotechnologies*. Vilnius, Lithuania, November 2020.
- [Conf4] K. Surovovs, A. Kravtsov, A. Sabanskis, and J. Virbulis, “Optimization of the Inductor Shape for the Pedestal Growth of Silicon Crystals Using Mathematical Modelling,” in *Sixth European Conference on Crystal Growth*. Varna, Bulgaria, September 2018.
- [Conf5] K. Surovovs and J. Virbulis, “The Modelling of Phase Boundaries and Melt Flow in the Crucible-Free Silicon Crystal Growth Using High-Frequency Induction Heating,” in *VIII International Scientific Colloquium “Modelling for Materials Processing”*. Riga, Latvia, September 2017.
- [Conf6] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Heterogēna sildīšanas sistēma Si kristālu audzēšanai ar pjedestāla metodi,” *LU 80. conference*. Rīga, Latvija, 2022. gada janvāris.
- [Conf7] K. Surovovs, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Kušanas frontes formas uzlabošana Si kristālu audzēšanā no pjedestāla,” *LU 77. Zinātniskās konferences sekcija “Matemātiskās metodes pētījumam izcilībai”*. Rīga, Latvija, 2019. gada janvāris.

- [Conf8] K. Surovovs, A. Sabanskis, A. Kravtsov, and J. Virbulis, “Silīcija audzēšanas no pjedestāla matemātiskā modelēšana ar mērķi palielināt kristāla diametru,” *LU 76. Zinātniskās konferences sekcija “Matemātiskās metodes pētījumu izcilībai”*. Rīga, Latvija, 2018. gada februāris.
- [Conf9] M. Plāte and K. Surovovs, “Modelēšana silīcija kristālu audzēšanas procesam ar beztīģeļa induktīvu kausēšanu,” *LU 75. Zinātniskās konferences sekcija “Matemātiskās metodes pētījumu izcilībai”*. Rīga, Latvija, 2017. gada februāris.

Autora dalība zinātniskajos projektos

Šis promocijas darbs ir balstīts uz rezultātiem, kas iegūti zemāk pieminētos ERAF projektos, kuru ietvaros darba autors un darba vadītājs sadarbojās ar *KEPP EU*:

- “Tehnoloģiskie pētījumi un silīcija ražošana ar diametru līdz 100 mm izmantošanai vājstrāvas un lieljaudas mikroelektronikas cietvielu ierīcēs” – ERAF “Mašīnbūves Kompetences centrs”, Id. Nr. 1.2.1.1/18/A/008.
- “Silīcija bezdislokācijas monokristālu audzēšanas no pamatnes izpēte” – ERAF “Mašīnbūves Kompetences centra izveide”, Id. Nr. 1.2.1.1/16/A/003.

Darbs pie promocijas darba tika atbalstīts arī no šā projekta:

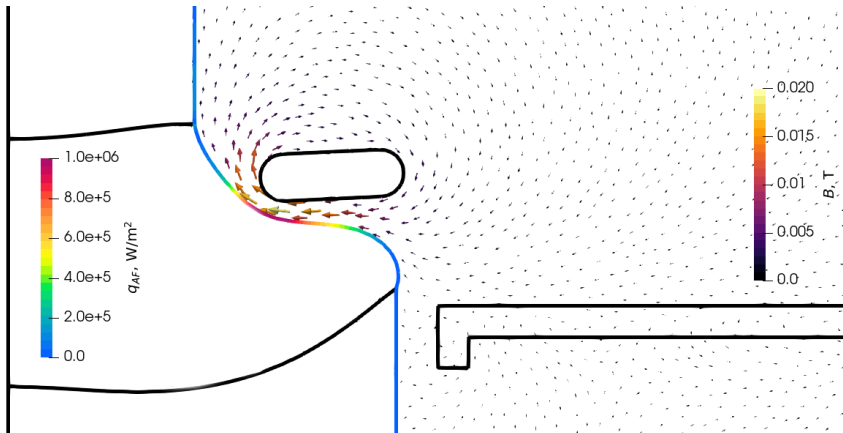
- “LU doktorantūras kapacitātes stiprināšana jaunā doktorantūras modeļa ietvarā” – Latvijas Universitāte, Līguma Nr. 8.2.2.0/20/I/006.

2 Matemātiskie modeļi

Aprēķinu procedūru detalizēts apraksts ir pieejams publikācijās [62] un [63], tāpēc iepriekš izstrādātie modeļi ir tikai īsi aprakstīti, bet promocijas darba ietvaros ieviestie modeļi (2.2., 2.4.1., 2.5. apakšnodaļas) aprakstīti detalizētāk. EM lauka aprēķini ir sajūgti ar fāzu robežu aprēķiniem un sastāv no divām daļām: augstfrekvences (AF, tipiski 1–3 MHz) un vidējās frekvences (VF, tipiski 50–100 kHz) lauki.

2.1. Augstfrekvences EM lauks

Šaurs skinslānis ar biezumu δ (pie AF induktora frekvences $f_{AF} = 2.6$ MHz, $\delta = 1.4$ mm cietajā silīcija pie kušanas temperatūras) atļauj izmantot AF tuvinājumu augšējā induktora EM lauka aprēķiniem. Šis modelis ir implementēts izmantojot robeželementu metodi [54]. Aprēķinātā magnētiskā lauka un inducētās jaudas blīvuma piemērs ir parādīts Att. 2.1..



Att. 2.1. Augstfrekvences EM inducētā siltuma virsmas blīvums uz silīcija virsmām q_{AF} un magnētiskais lauks B , ko rada augstfrekvences induktors. Aprēķina piemērs ar kristāla diametru $D_C = 36$ mm un pjedestāla diametru $D_P = 75$ mm.

2.2. Vidējās frekvences EM lauks

VF lauka aprēķiniem tika izmantota programma *GetDP* [64]. Tā izmanto šādu vienādojumu vektorpotenciālam \vec{A} visos tilpuma apgabalos (ieskaitot gāzes apgabalu; bet neņemot vērā iekārtas sienas, pieņemot, ka tās atrodas pietiekami tālu no induktora):

$$\nabla \times \nabla \times \vec{A} = \mu_0 \sigma (-i\omega \vec{A}) + \mu_0 \vec{J}, \quad (2.1)$$

kur $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ H/m, $\omega = 2\pi f_{VF}$ ir leņķiskā frekvence, \vec{J} – strāvas blīvums VF induktorā, un σ – silīcija elektriskā vadītspēja: $1.2 \cdot 10^6$ S/m šķidrajā stāvoklī un no temperatūras atkarīga vadītspēja ar $3.3 \cdot 10^4$ S/m pie kušanas temperatūras cietajā stāvoklī [65].

Pateicoties aksiālai simetrijai, vektorpotenciālam ir tikai azimutālā komponente: A_φ . Robežnosacījumi ir $A_\varphi = 0$ uz sistēmas ass un $\frac{\partial A_\varphi}{\partial n} = 0$ uz gāzes apgabala robežām, kur n ir virsmas normāle. Inducētā siltuma blīvums tiek aprēķināts kā

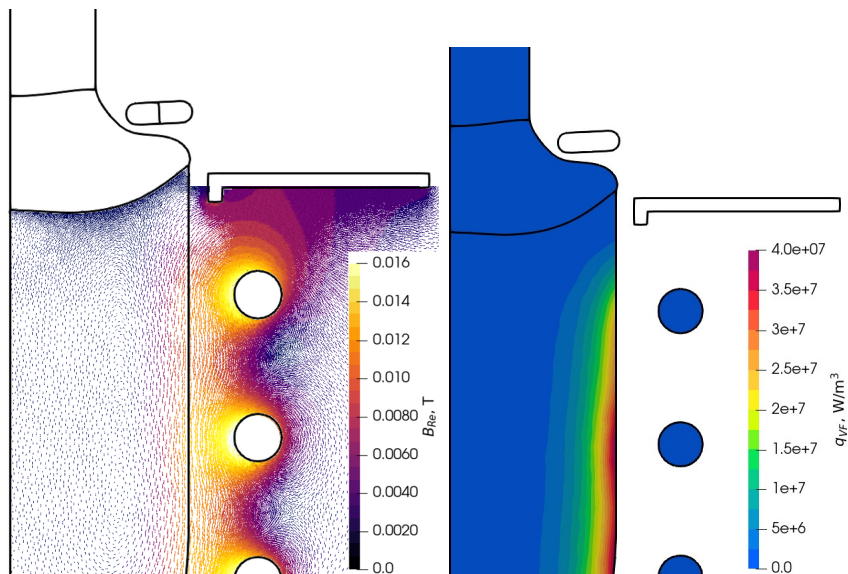
$$q_{VF} = \frac{j^2}{2\sigma} = \frac{\sigma E^2}{2} = \frac{\sigma}{2} \omega^2 A^2, \quad (2.2)$$

kur j, E, A ir inducētā strāvas blīvuma, elektriskā lauka un vektorpotenciāla amplitūdas. VF magnētiskā lauka un inducētā siltuma (izreķināti ar $f_{VF} = 100$ kHz) piemērs ir parādīts Attēlā 2.2.

2.3. Siltuma pārnese un fāzu robežas

Lai iegūtu temperatūras lauku T , tiek reķināts stacionārais siltuma pārnese vienādojums, izmantojot AF un VF inducētos siltuma avotus. Neskatoties uz kristāla vilkšanu, audzēšanas process var tikt uzskatīts par kvazistacionāru (t.i., fāzu robežas nemainās laboratorijas atskaites sistēmā) cilindriskajā fāzē, kad kristāla diametrs nemainās laikā. Tas nozīmē, ka gan fāzu robežas, gan temperatūras sadalījums nemainās laboratorijas atskaites sistēmā. Pēc noklusējuma, kausējuma plūsma netiek ņemta vērā, un tā tikai dažos gadījumos analizēta ar specifisku programmu (sk. 2.4.1. apakšnodaļu). Fāzu robežu forma tiek aprēķināta sekojošā veidā:

- Kušanas un kristalizācijas frontes tiek pārvietotas atbilstoši siltuma līdzsvaram režģa punktos (citiem vārdiem, lokāli izmantojot 1D Stefanā problēmas atrisinājumu), kamēr tiek sasniegta kvazistacionāra fāzu robežu forma.



(a) Vidējās frekvences magnētiskais lauks, (b) Inducētais siltuma blīvums silīcijā reālā daļa B_{Re} q_{VF}

Att. 2.2. Vidējās frekvences magnētiskā lauka modelēšanas rezultātu piemērs ar kristāla diametru $D_C = 36$ mm un pjestāla diametru $D_P = 75$ mm.

- Brīvās virsmas forma tiek iegūta, ņemot vērā hidrostatisko spiedienu, EM inducēto spiedienu un virsmas spraigumu.
- Citas kristāla un pjestāla virsmas netiek pārvietotas, tikai “pagarinātas”, līdz krustojas ar kušanas vai kristalizācijas fronti.

Induktora strāva, kas nodrošina lietotāja uzdoto ārējā trīskāršā punkta (angl. *external triple point* – ETP, sk. Att. 1.2.) augstumu, tiek atrasta ar proporcionāli-integrāli-diferenciālo (PID) regulēšanu. Siltuma pārneses un fāzu robežu modeļa detalizēts apraksts (PZ metodes gadījumā) atrodas publikācijā [62].

2.4. Kausējuma plūsma

Pirmais kausējuma plūsmas modelis apskata nemainīgas fāzu robežas. Tas izmanto Navjē-Stoksa vienādojumu nesaspiežamam šķīdumam laminārā tuvīnājumā, ar Busineska pieeju termiskās konvekcijas aprakstam. Uz brīvās virsmas tiek ņemti vērā EM spēka blīvums un Marangoni spēka

blīvums, izmantojot Marangoni koeficientu $M = 2 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}\cdot\text{K}$. Klasiskais konvekcijas-difūzijas vienādojums izmantots kausējuma temperatūras aprakstam, ar EM inducēto siltumu un siltuma starojumu kā robežnosacījumiem uz brīvās virsmas. Šis modelis tika implementēts ar *OpenFOAM* atvērtā koda bibliotēku un aprakstīts (PZ metodes gadījumā) publikācijā [63].

2.4.1. Nestacionāra kušanas fronte

Lai ņemtu vērā nestacionāru Si kušanu, dažos gadījumos tika izmantots otrs kausējuma plūsma modelis, kas līdzīgs šķidrums tilpuma (angl. *volume of fluid*) metodei: pirmais modelis papildināts ar fāzes mainīgo f_c , kas mainās no 0 (kausējums) līdz 1 (cietais Si), kā parādīts (2.3.), kur $T_0 = 1687 \text{ K}$ ir Si kušanas temperatūra. Kristalizācija tiek vienkāršoti modelēta ar kausējuma viskozitātes palielināšanu, kā arī blīvuma un siltumvadītspējas samazināšanu, palielinoties f_c . Kristalizācijas latentais siltums tiek ņemts vērā kā papildus siltuma avots $\rho L \frac{\partial f_c}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$ klasiskajā konvekcijas-difūzijas vienādojumā Si temperatūrai T , kur ρ ir Si blīvums, L – īpatnējais kušanas siltums un t – laiks. “Izmērēšanas intervāls” ΔT , kurā f_c mainās lineāri atkarībā no temperatūras, tika pakāpeniski samazināts, kamēr atrisinājums vairs nebija no tā atkarīgs. Tādā veidā iegūts $\Delta T = 0.5 \text{ K}$.

$$f_c(T) = \begin{cases} 0, & \text{for } T > T_0 + \frac{\Delta T}{2} \\ \frac{1}{\Delta T} (T_0 + \frac{\Delta T}{2} - T), & \text{for } T_0 - \frac{\Delta T}{2} < T < T_0 + \frac{\Delta T}{2} \\ 1, & \text{for } T < T_0 - \frac{\Delta T}{2} \end{cases} \quad (2.3)$$

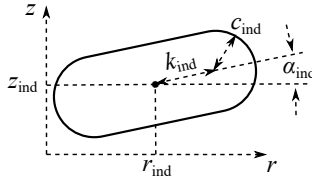
Kristāla klātbūtne modelēta ar konstanta temperatūras gradienta $\frac{\partial T}{\partial n} = 5 \text{ K/mm}$ iestatīšanu augšējās aprēķina apgabala virsmas centrā, kur n ir virsmas normālā koordināte. Aprēķina apgabals sastāv no pjedestāla (kur $f_c = 1$) un kausējuma ($f_c = 0$). Uz citām virsmām tika lietots siltuma starojuma un inducētā EM siltuma robežnosacījums.

2.5. Augstfrekvences induktora optimizācija

Fāzu robežu aprēķinu (sk. 2.3. apakšnodaļu) gaitā induktora strāva tiek automātiski regulēta, lai nodrošinātu nemainīgu ETP punkta augstumu. Citiem vārdiem, tiek piemeklēta tāda strāva, kas nodrošina pjedestāla

kušanu ar ātrumu, kas nepieciešams kvazistacionāram procesam. Induktora frekvence šā algoritma pielietošanas gaitā ir nemainīga, jo to nosaka eksperimentālie apsvērumi, piemēram, ģenerators konstrukcijas īpašības. Tāpēc šajā darbā tiek optimizēti tikai AF induktora ģeometriskie parametri.

Tiek pieņemts, ka AF induktors ir aksiāli simetrisks, un tā forma ir parametrizēta kā parādīts Att. 2.3.: r_{ind} , z_{ind} ir induktora šķēluma centra radiāla un aksiāla koordinātes, $2k_{\text{ind}}$ – šķēluma garums, c_{ind} – liekuma rādiuss, un α_{ind} ir šķēluma slīpuma leņķis attiecībā pret horizontāli.



Att. 2.3. Augstfrekvences induktora šķēluma shēma ar parametriem, kas izmantoti induktora optimizācijai.

Kā mērķa funkcija tika izvēlēts kausējuma augstums H_M (sk. Att. 1.2.(b)). Šī izvēle nodrošina maksimālo attālumu starp pjedestāla un kristāla centriem, kas palīdz novērst vienu no galvenajām problēmām lielu kristālu audzēšanā – kausējuma centra sasalšanu [46]. Optimizācija tiek veikta ar gradienta metodi: aplūkota induktoru parametru telpa (r_{ind} , z_{ind} , c_{ind} , k_{ind} , α_{ind}). Šajā telpā aprēķināts ∇H_M , jeb virziens, kurā pieaug H_M . Optimizācijas algoritma soļi ir izklāstīti zemāk:

1. ar fāzu robežu modelēšanas programmu aprēķināt H_M , izmantojot parametru kopu (jeb punktu parametru telpā) $\vec{p} = (r_{\text{ind}}, z_{\text{ind}}, c_{\text{ind}}, k_{\text{ind}}, \alpha_{\text{ind}})$, turpmāk apzīmēts ar $H_M(\vec{p})$;

- ja aprēķins diverģē, tad pieņem, ka $H_M = 0$;

2. aprēķināt piecas H_M vērtības pieciem punktiem: $\vec{p}_r, \vec{p}_z, \vec{p}_c, \vec{p}_k, \vec{p}_\alpha$, kas nobīdīti no \vec{p} par attālumu $d = 0.01$ mm, katrs attiecīgajā virzienā;

3. izrēķināt $\nabla H_M = \sum_i \frac{H_M(\vec{p}_i) - H_M(\vec{p})}{d} \vec{e}_i$, kur i ir viens no induktora parametriem $\{r_{\text{ind}}, z_{\text{ind}}, c_{\text{ind}}, k_{\text{ind}}, \alpha_{\text{ind}}\}$ un \vec{e}_i – attiecīgais bāzes vektors parametru telpā;

4. izrēķināt soli $\vec{s} = s_0 \frac{\nabla H_M}{|\nabla H_M|}$, kur s_0 ir soļa amplitūda (lietotāja definēta pirms aprēķinu sākuma, parasti ar kārtu 1 mm);
5. aprēķināt H_M punktā $\vec{p} + \vec{s}$;
 - ja $H_M(\vec{p} + \vec{s}) < H_M(\vec{p})$, tad samazināt s_0 divreiz un atkārtot algoritmu no 4. soļa;
6. nomainīt induktora pozīciju parametru telpā no \vec{p} uz $\vec{p} + \vec{s}$;
7. atkārtot no 1. soļa, kamēr tiek sasniegts konverģences kritērijs.

3 Aprēķinu rezultāti

3.1. Brīvās virsmas formas novērtējums

Kausējuma brīvās virsmas formas vienkāršotais novērtējums un tā sadzīnināšana ar PZ gadījumu tika aprakstīta² publikācijā [Dis3]. Šajā novērtējumā tika ņemti vērā tikai virsmas spraiguma un gravitācijas spēki. Virsmas forma var tikt aprakstīta cilindriskajās koordinātēs r un z izmantojot Laplasa-Janga vienādojumu specifiskajā formā [48]:

$$r'(s) = \sin \phi(s), \quad (3.1)$$

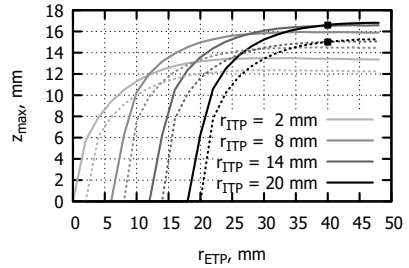
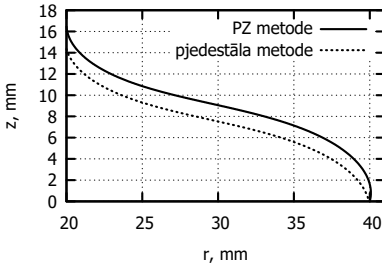
$$z'(s) = \cos \phi(s), \quad (3.2)$$

$$\phi'(s) = \frac{\cos \phi(s)}{r(s)} + \frac{\rho g(z(s) - z_0)}{\gamma}, \quad (3.3)$$

kur s ir loka garums: $ds = \sqrt{dr^2 + dz^2}$, ϕ ir leņķis starp brīvo virsmu un vertikāli, $\rho = 2580 \text{ kg/m}^3$ ir silīcija blīvums, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ ir brīvās krišanas paātrinājums, $\gamma = 0.88 \text{ N/m}$ ir silīcija virsmas spraigums, un z_0 ir parametrs ar garuma mērvienībām, kas nosaka kausējuma tilpumu (šis parametrs nav zināms, t.i. kausējuma tilpums var būt dažāds; tāpēc z_0 tika piemeklēts iteratīvi, lai maksimizētu brīvās virsmas augstumu). Lai modelētu cilindriskā kristāla augšanu, $\phi = 11^\circ$ leņķis [28] tika uzdots iekšējā trīskāršajā punktā (ITP) PM gadījumā (sk. shēmu Att. 1.2.), un ārējā trīskāršajā punktā (ETP) PZ metodes gadījumā. Pateicoties EM spiediena stabilizējošai iedarbībai [66], kas netiek ņemta vērā šajā novērtējumā, iegūtās zonas formas (sk. Att. 3.1.(a)) ir brīvās virsmas augstuma jeb zonas augstuma z_{\max} novērtējums no apakšas. Novērtējumu no apakšas var uzskatīt par sliktākā gadījuma novērtējumu (angl. *worst-case estimate*), jo lielāks z_{\max} samazina kausējuma vidus sasalšanas risku.

Galvenais secinājums ir tāds, ka maksimālais zonas augstums – 17 mm PZ metodes gadījumā, 15 mm PM gadījumā – tiek sasniegts tad, kad ETP un ITP rādiusu attiecība ir vismaz 2. Tika parādīts arī, ka $z_{\max} = 0$ (tātad, audzēšanas process nav iespējams) PM gadījumā, kad $r_{\text{ETP}} = r_{\text{ITP}}$.

²Šeit un tālāk tiek izmantoti attēli un teksta fragmenti no darba autora publikācijām.



(a) Aprēķinātās brīvās virsmas formas pie- (b) Maksimāli iespējamais brīvās virsmas mēri ar $r_{ETP} = 40$ mm un $r_{ITP} = 20$ mm augstums z_{max} ar dažādiem r_{ETP} un r_{ITP}

Att. 3.1. Vienkāršotā brīvās virsmas formas novērtējuma rezultāti: virsmas forma un zonas augstums peldošās zonas (PZ) metodē (nepārtrauktas līnijas) un pjedestāla metodē (punktētas līnijas). Kvadrāti labajā attēlā atbilst brīvās virsmas formām, kas parādītas kreisajā attēlā. Ārējā trīskāršā punkta un iekšējā trīskāršā punkta rādiusi ir apzīmēti attiecīgi ar r_{ETP} un r_{ITP} .

3.2. Sistēma bez sānu sildīšanas: ar reflektoru sildītāja vietā

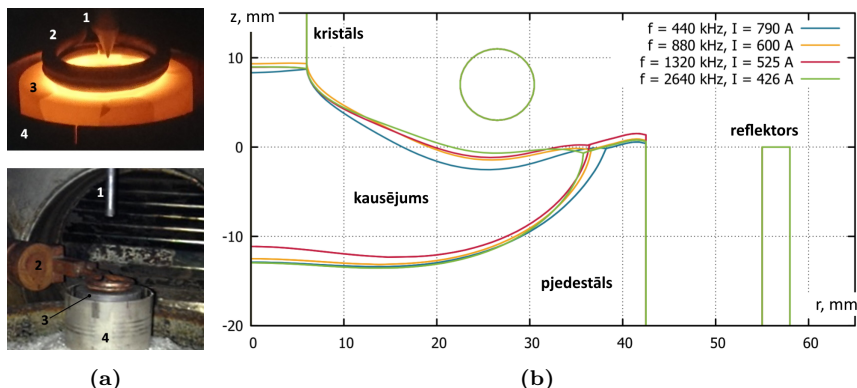
3.2.1. Fāzu robežu forma

Pētījumu sākumā pjedestāla sānu sildītāja nepieciešamība vēl nebija zināma, un šim nolūkam tika izmantots nevis VF induktīvais sildītājs, bet vara reflektors (sk. Att. 3.2.(a)). Pirmajiem aprēķiniem izvēlēts kristāla diametrs $D_C = 12$ mm un pjedestāla diametrs $D_P = 85$ mm. Attēla (b) daļa parāda fāzu robežas, kas aprēķinātas ar dažādām induktora frekvencēm f_{AF} no 440 līdz 2640 kHz. Attālums starp induktoru un kausējumu samazinās, palielinoties f_{AF} , pateicoties zemākam EM spiedienam. Šajos aprēķinos pjedestāla mala nav pilnībā izkausēta, tāpēc ka pētījuma sākumā cilindriskā audzēšana ar vienmērīgu pjedestāla pārvietošanu augšup vēl netika apskatīta. Iegūtās fāzu robežas izmantotas, lai ģenerētu režģus kausējuma plūsmas aprēķiniem, kas aprakstīti nākamajā apakšnodaļā.

3.2.2. Kausējuma plūsma

Stacionāra fāzu robežu forma

Kausējuma plūsmas modelis (pirmais modelis no 2.4. apakšnodaļas) parādīja, ka augstākās frekvences inducē mazāku kausējuma ātrumu (Att. 3.3.(b)), un tātad arī augstāku maksimālo temperatūru (Att. 3.3.(a)). Ātruma azimutālā komponente ir ļoti maza, tāpēc ka kristāls un pjedes-

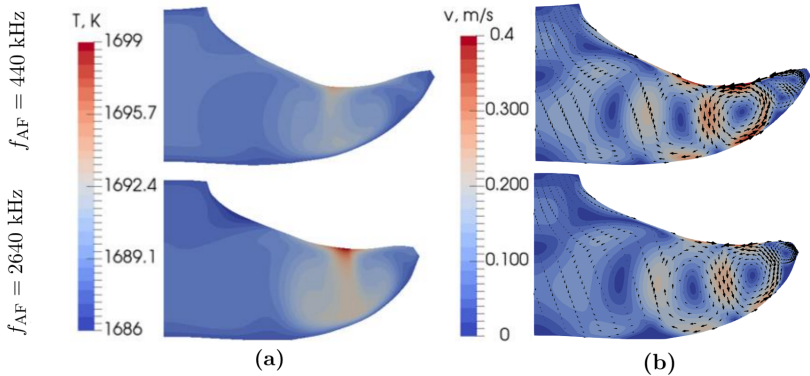


Att. 3.2. (a) – audzēšanas sistēmas bez sānu sildīšanas (reflektors sānu sildītāja vietā) fotogrāfijas ar kristāla aizmetni 1, augstfrekvences induktoru 2, pjedestālu 3 un reflektoru 4. (b) – fāzu robežu formas, aprēķinātas ar dažādām induktora frekvencēm. Augstfrekvences induktora frekvence apzīmēta ar f , strāva – ar I .

tāls šajā gadījumā netika rotēti. Detalizētāka frekvences ietekmes analīze ir parādīta Attēlā 3.4.. Pateicoties mazākai induktora strāvai (Att. 3.4.(a)) un mazākam kausējuma ātrumam (b), augstākas f_{AF} ir piemērotākas audzēšanas sistēmai. No otras puses, frekvences palielināšana palielina nepieciešamo spriegumu (c), kas padara ģenerators konstrukciju dārgāku. Maksimālā temperatūra aprēķinos ar kausējuma plūsmu ((d), dzeltenās līnijas) ir daudz zemāka, nekā bez tās (t.i., izrēķināta tikai ar siltuma pārneses un fāzu robežu modeli, kas aprakstīts 2.3. apakšnodaļā). Kausējuma plūsmas ietekme ir tik liela, tāpēc ka sistēmā notiek intensīva konvekcija – gan termāla, gan EM spēku rādīta. Šī konvekcija ievērojami palielina maksimālo siltuma plūsmu (e) uz kušanas frontes, tāpēc ir svarīgi izpētīt kausējuma plūsmas ietekmi uz kušanas frontes formu.

Nestacionāra kušanas fronte

Aprēķinos ar kausējuma plūsmu konvektīva siltuma pārnese ir 2-3 reizes intensīvāka par pārnesi siltumvadīšanas ceļā (sk. Att. 3.4.(e)). Tas liek domāt, ka kausējuma plūsmai ir ievērojama ietekme uz fāzu robežām. Lai to izpētītu, tika izveidots kausējuma plūsmas modelis ar nestacionāro kušanas fronti, izmantojot šķidrums tilpuma metodi, kā aprakstīts 2.4.1. apakšnodaļā. Šis modelis parāda kausējuma kustības nestacionārus aspektus, ieskaitot pjedestāla kausēšanu paša procesa sākumā, sk. Att. 3.5.. Kausējuma plūsma attīstās ātri un ir ļoti haotiska, galvenais virpulis var pat



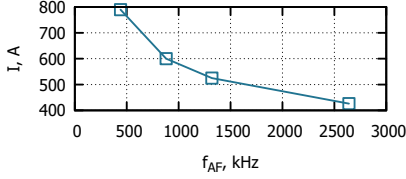
Att. 3.3. Kausējuma temperatūra T (a) un ātrums v (b), aprēķināti ar induktora frekvenci $f_{AF} = 440$ kHz (augšā) un $f_{AF} = 2640$ kHz (apakšā), pie kristāla diametra $D_C = 12$ mm un pjedestāla diametra $D_P = 85$ mm.

izmainīt savu virzienu (no pulksteņrādītāja virziena uz pretējo), piemēram laikā $t = 110$ s. Pirmie testa aprēķini parādīja, ka pjedestāla augstums $H_P = 40$ mm ir pārāk mazs, tāpēc ka pastāv pjedestāla apakšas izkausšanas risks intensīvas karstā Si plūsmas dēļ. Turpmākiem aprēķiniem, lai novērstu pjedestāla apakšas izkausēšanu, tika izvēlēts garāks pjedestāls ($H_P = 60$ mm).

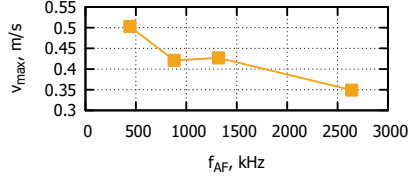
Att. 3.6.(a) parāda aprēķināto Si temperatūru un ātrumu patvaļīgi izvēlētajā laika brīdī. Lai novērstu kausējuma centra sasalšanu, kristālaudzēšanas eksperimentos ir jānodrošina pietiekami liels izkausētā reģiona augstums H_M . Tomēr šajā procesā nav iespējams tiešā veidā novērot vai izmērīt H_M . Lai palīdzētu eksperimentu norisei, skaitliskā modeļa rezultātos tika analizēta saistība starp temperatūrām dažādos punktos uz pjedestāla virsmas un izkausētā reģiona augstumu. Tika secināts, ka sānu virsmas temperatūra 40 mm zem pjedestāla malas ļauj visprecīzāk novērtēt H_M , sk. Att. 3.6.(b).

PID regulēšana

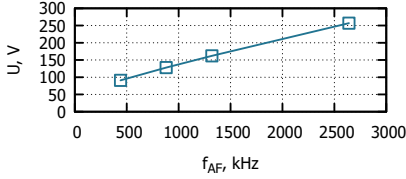
Iepriekš aprakstīti aprēķini tika veikti ar fiksētu elektriskās strāvas I vērtību AF induktorā (Att. 3.5.) vai ar manuālu pakāpienveida I izmaiņu (Att. 3.6.). Tomēr īstajā kristālaudzēšanas procesā sildīšanas jauda parasti tiek regulēta, lai nodrošinātu kāda ģeometriskā parametra (piemēram, zonas augstums PZ procesā) nemainīgumu. Pjedestāla metodes gadījumā kā kontroles parametrs tika izvēlēta ETP vertikāla koordināte z_{ETP} ,



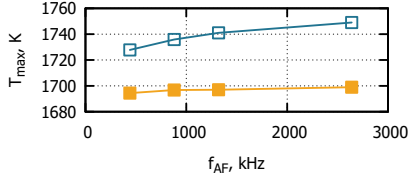
(a) Induktora strāva



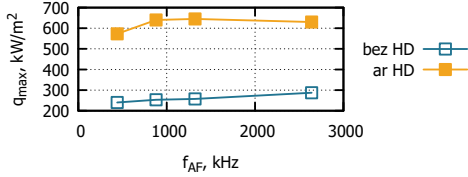
(b) Maksimālais kausējuma ātrums



(c) Induktora spriegums



(d) Maksimālā kausējuma temperatūra



(e) Maksimālā siltuma plūsma uz kušanas frontes

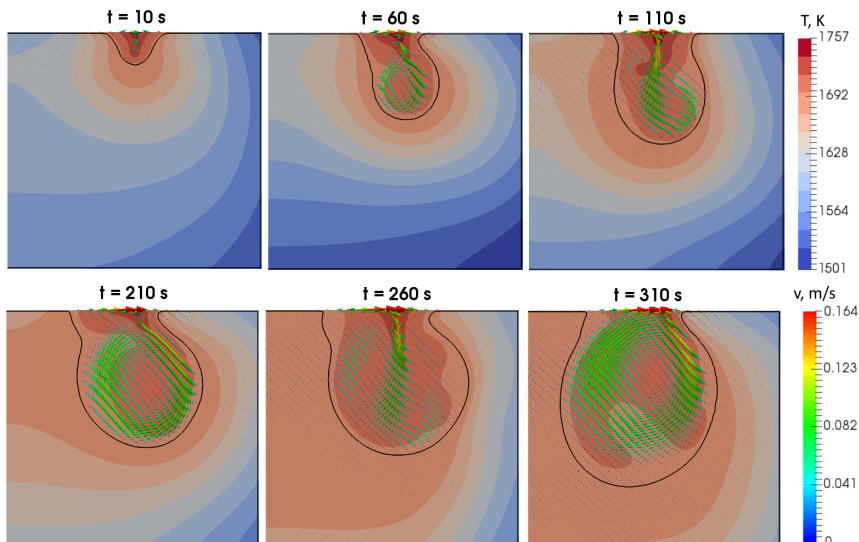
Att. 3.4. Induktora frekvences f_{AF} ietekme aprēķinos bez hidrodinamikas (zila krāsa) un ar hidrodinamiku (dzeltena krāsa). Aprēķini veikti ar kristāla diametru $D_C = 12$ mm un pjedestāla diametru $D_P = 85$ mm.

ar lietotāja definētu mērķi $z_{ETP, 0}$. Tika pielietota proporcionāli-integrāli-diferenciālā (PID) regulēšana:

$$e(t) = z_{ETP}(t) - z_{ETP, 0}(t), \quad (3.4)$$

$$\Delta I(t) = K_p \left(e(t) + K_i \int_0^t e(\tau) d\tau + K_d \frac{de(t)}{dt} \right), \quad (3.5)$$

kur $e(t)$ ir starpība starp ETP koordināti un ETP koordinātes mērķa vērtību, ΔI ir induktora strāvas izmaiņa, un (K_p, K_i, K_d) ir regulēšanas algoritma koeficienti. Induktora strāvas konverģence ir parādīta Att. 3.7.. Var secināt, ka jāizmanto visas trīs regulēšanas daļas: integrālā daļa palīdz sasniegt ETP koordinātes mērķa vērtību ātrāk, diferenciālā daļa nobremzē tās svārstības. Optimālās vērtības, kas nodrošina visātrāko konverģenci uz kvazistacionāro stāvokli, un līdz ar to lietotas turpmāk aprakstītajos aprēķinos, ir $K_p = 80$ A/mm, $K_i = 0.1$ 1/s, $K_d = 10$ s.

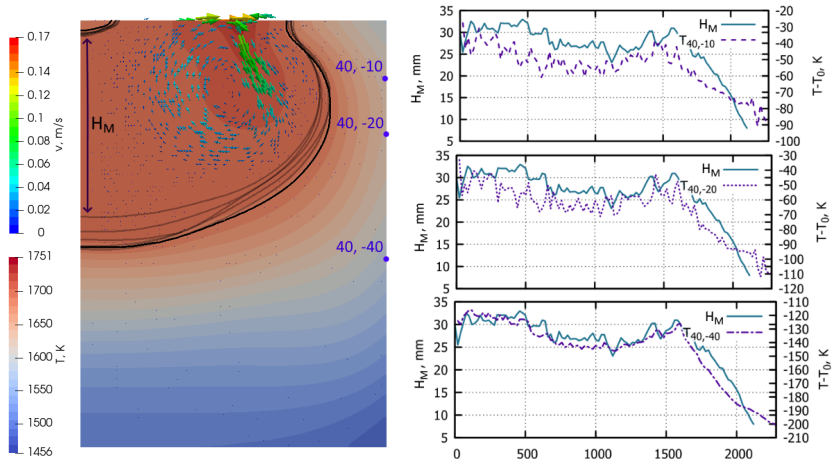


Att. 3.5. Silīcija temperatūra T un ātrums v dažādos laika momentos (laiks no procesa sākuma, induktora jaudai esot nemainīgai). Pjēdastāla augstums $H_P = 40$ mm, diametrs $D_P = 80$ mm.

Induktora optimizācija: pakāpeniska metode

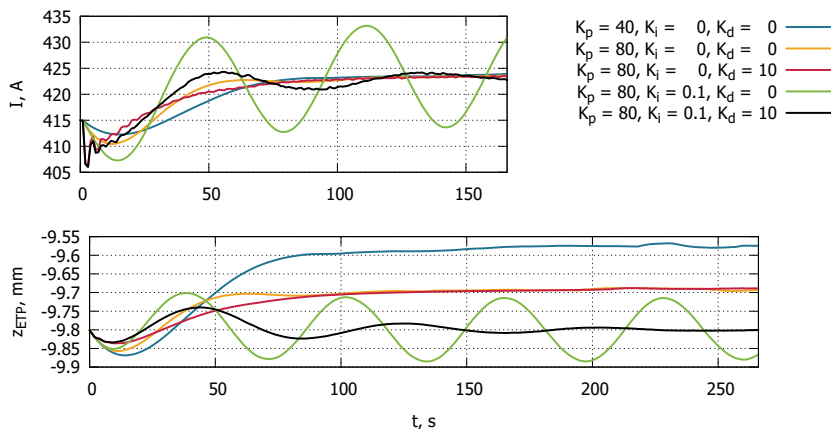
Lai veiktu induktora optimizāciju, ir nepieciešams ļoti liels aprēķinu daudzums. Katrā algoritma iterācijā nepieciešami vairāki fāzu robežu aprēķini, lai iegūtu kausējuma augstumu pie dažādām induktora izmaiņām. Tas pats jāatkārto katrā nākamajā iterācijā, un kopējais aprēķinu skaits sastāda vairākus desmitus vienai sistēmai un vairākus simtus visām šajā darbā minētām sistēmām. Vēl lielāks aprēķinu skaits bija veikts citiem projekta uzdevumiem un nav ietverts šajā darbā. Tāpēc, neskatoties uz lielu kausējuma plūsmas ietekmi, šajā un visās nākamajās apakšnodaļās kausējuma kustība netiek ņemta vērā, lai palielinātu aprēķinu ātrumu un iegūtu iespēju veikt plašākus parametru pētījumus.

Šī apakšnodaļa apraksta aprēķinus, kas veikti sistēmai ar šādiem parametriem: kristāla diametrs $D_C = 36$ mm, pjēdastāla diametrs $D_P = 75$ mm (izvēlēts pamatojoties uz vienkāršotiem optimālā diametra novērtējumiem no 3.1. apakšnodaļas), kristāla vilkšanas ātrums $v_p = 2$ mm/min, AF induktora frekvence $f_{AF} = 2.64$ MHz.



(a) Silīcija temperatūra un ātrums kādā (b) Saistība starp izkausētā reģiona augstuma laika brīdī, kušanas frontes formas no H_M un silīcija temperatūrām pjedestāla tiem laika brīžiem parādītas ar pelēkajām sānu virsmas dažādos punktos līnijām

Att. 3.6. Nestacionārās kušanas frontes modelēšana ar pjedestāla augstumu $H_P = 60$ mm un diametru $D_P = 80$ mm.



Att. 3.7. Induktora strāvas I (augšā) un ETP vertikālās koordinātes z_{ETP} (apakšā) attīstība aprēķinu gaitā ar dažādiem PID regulēšanas parametriem, sk. vienādojumu (3.5.).

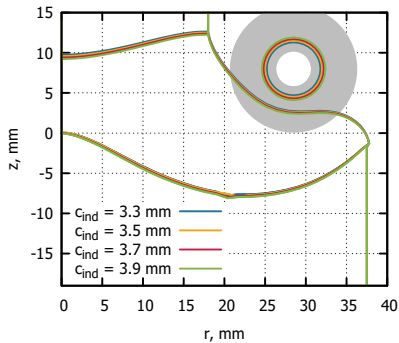
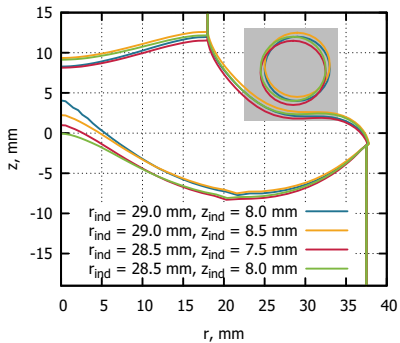
Induktora parametru apzīmējumi ir definēt Att. 2.3.. Pakāpeniska metode nozīmē sākumā piemeklēt optimālos r_{ind} un z_{ind} (ar fiksētiem $c_{\text{ind}}, k_{\text{ind}}, \alpha_{\text{ind}}$), pēc tam atrast c_{ind} optimālo vērtību (nemainot pārējos parametrus), un beigās piemeklēt k_{ind} un α_{ind} (nemainot pārējos parametrus). Pakāpeniskās metodes priekšrocības, salīdzinot ar gradienta metodi, ir realizācijas vienkāršība un iespēja noklāt lielu parametru apgabalu.

Pirmie aprēķini tika veikti ar $k_{\text{ind}} = \alpha_{\text{ind}} = 0$, $c_{\text{ind}} = 4$ mm, un dažādiem $r_{\text{ind}}, z_{\text{ind}}$ (sk. Att. 3.8.(a)), tomēr tikai daļa no tiem konverģēja (10 no 64), un ērtības labad grafikā ir parādīti tikai daži no konverģējušiem aprēķiniem. Pārējie aprēķini diverģēja vai nu kausējuma sasalšanas dēļ (kad induktora rādiuss r_{ind} bija pārāk liels), vai nu kausējuma izlīšanas pār pjestāla malu dēļ (kad induktors bija novietots pārāk tālu no ETP). Apgabals, kurā atrodas izmēģināto induktora šķēlumu formas, ir parādīts ar pelēko krāsu.

Nākamais pakāpeniskās metodes solis bija izvēlēties gadījumu ar vislielāko H_M un optimizēt citus induktora parametrus. Izmēģināts plašs c_{ind} vērtību apgabals, bet konverģējošie aprēķini parādīja mazu ietekmi uz H_M , sk. Att. 3.8.(b). Pēc tam izmantoti dažādi k_{ind} un α_{ind} – sk. Att. 3.8.(c). Var secināt, ka k_{ind} palielināšana paaugstina H_M jutību pret α_{ind} . Vislielākais pakāpeniskās metodes rezultātā iegūtais H_M bija 12.0 mm. Šis gadījums atbilst horizontālam ($\alpha_{\text{ind}} = 0$) un izstieptam ($k_{\text{ind}} = 2$ mm) induktora šķēlumam. Tomēr šī metode negarantē, ka sasniegts kaut vai lokālais H_M maksimums.

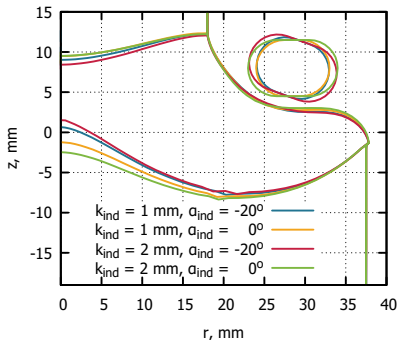
Induktora optimizācija: gradienta metode

Gradienta metode ir aprakstīta 2.5. apakšnodaļā. Aplūkotajai sistēmai šī metode konverģēja (sk. Att. 3.9.) un deva nedaudz labāku rezultātu, nekā pakāpeniska metode, sasniedzot $H_M = 12.2$ mm. Tomēr diemžēl, neskatoties uz visu aprēķinu sekmīgu konverģenci, induktora izmaiņas, ko metode paredz, bija mazākas par 1 mm – apskatītie induktora šķēlumi noklāja daudz mazāku apgabalu, nekā pakāpeniskajā metodē. Tas ilustrē faktu, ka ar gradienta metodi var atrast tikai lokālo H_M maksimumu, tā-tad rezultātā iegūtā induktora forma ir lielā mērā atkarīga no induktora sākuma parametriem (vairāk par šo tēmu sk. nākamo apakšnodaļu). Salīdzinājums starp šiem rezultātiem un iepriekš iegūtām fāzu robežām, kas bija attēlotas Att. 3.8., arī liecina, ka gradienta metode nav izmēģinājusi pietiekami plašu parametru kopu, piemēram k_{ind} praktiski nepalielinājās, un induktora šķēlums joprojām palika apaļš.



(a) Optimizējot induktora šķēluma koordinātes r_{ind} , z_{ind}

(b) Optimizējot tikai induktora šķēluma rādīšus c_{ind}



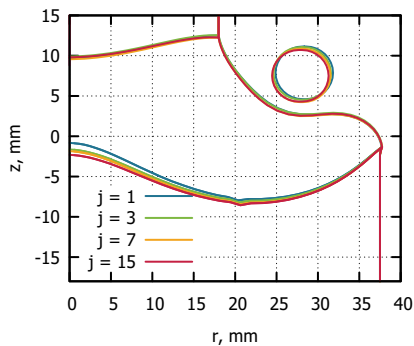
(c) Optimizējot induktora šķēluma garumu un slīpuma leņķi k_{ind} , α_{ind}

Att. 3.8. Fāzu robežas, kas iegūtas pakāpeniskās optimizācijas metodes laikā.

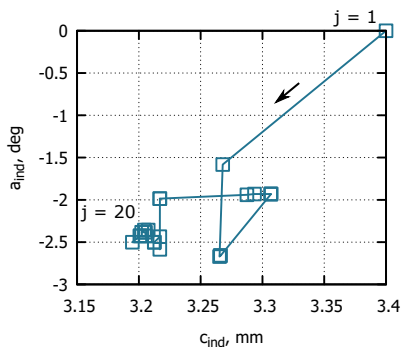
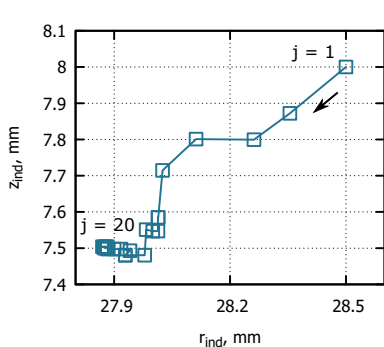
Induktora optimizācija tika veikta arī divām citām sistēmām: ar $D_C = 60$ mm un $D_C = 90$ mm [Dis3], tomēr šie rezultāti nav parādīti šeit, jo analogiski rezultāti iekļauti nākamajā apakšnodaļā, kur tiek aprakstīta pilnīgāka kristālaudzēšanas sistēma.

3.3. Sistēma ar vienkāršoto pjedestāla sānu sildīšanu

Pirmajos eksperimentos KEPP EU kompānijā izmantoja vara reflektoru, kas bija novietots ap 85 mm diametra pjedestālu, sk. Att. 3.2.. Šie eksperimenti demonstrēja, ka ar AF induktora inducēto siltumu nepietiek: augšējā pjedestāla virsma netika izkausēta pilnībā. Atšķirībā no skaitliskā



(a) Fāzu robežas



(b) Induktora šķēluma centra koordinātes r_{indr} un z_{indr} (c) Induktora šķēluma slīpuma leņķis α_{indr} un liekuma rādiuss c_{indr}

Att. 3.9. Fāzu robežu (a) un induktora parametru (b, c) konverģence gradienta metodes laikā, kur j ir metodes iterācijas numurs.

modeļa, kurā AF induktora jauda nebija ierobežota, eksperimentā lietotais augstfrekvences ģenerators [Dis5] nevarēja nodrošināt nepieciešamo strāvas vērtību. Ņemot vērā, ka arī skaitliskais modelis paredzēja grūtības lielāku pjedestālu virsmas izkausēšanā, mēs secinājam, ka ir nepieciešama pjedestāla sānu sildīšana.

3.3.1. Sānu sildītāja optimālās pozīcijas novērtējums

Projekta sākumā pjedestāla sānu sildīšana tika realizēta vienkāršotā veidā, uzdodot vienmērīgu siltuma plūsmas blīvumu uz pjedestāla sānu malas. Galvenais mērķis bija atrast sildītāja aptuvenu pozīciju un jau-

du, kas ir vispiemērotākā, lai novadītu siltumu uz pjedestāla centru. Tika izmantots aksiāli simetriskais tuvinājums. Apsildāmā reģiona augstums apzīmēts ar H_Q , un šis reģions atrodas z_Q attālumā no ETP (sk. Att. 3.10.(a)).

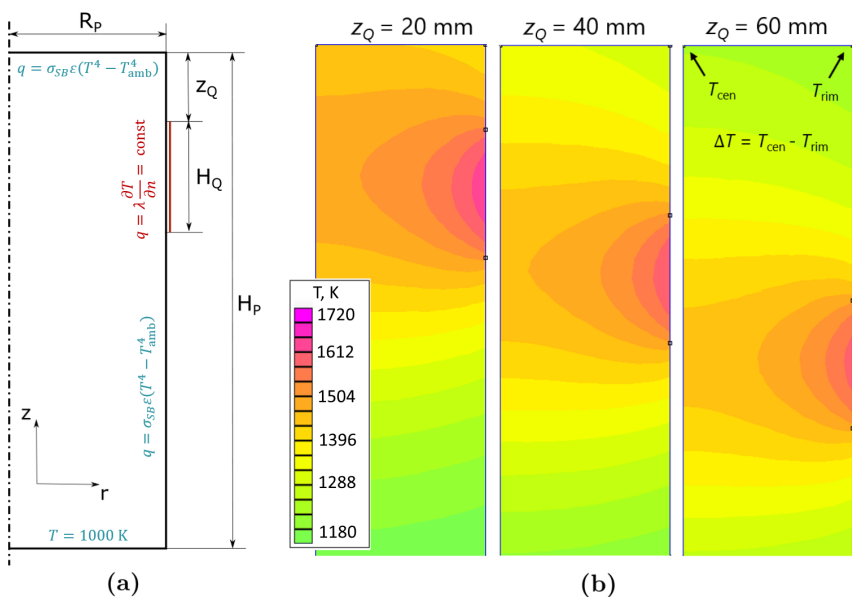
Aprēķinu parametri ir uzskaitīti Tab. 3.1.. Vienkāršības labad, silīcija siltumvadītspējas un emisivitātes atkarība no temperatūras nav ņemta vērā, jo svarīgākais aprēķina apgabals atrodas pjedestāla augšdaļā.

Tab. 3.1. Ģeometriskie parametri un materiāla īpašības, kas izmantotas sānu sildītāja optimālās pozīcijas novērtējumā.

Pjedestāla augstums H_P	240 mm
Pjedestāla rādiuss R_P	40..100 mm
Apsildāmā reģiona augstums H_Q	30 mm
Attālums no apsildāmā reģiona līdz ETP z_Q	10..100 mm
Integrālā siltuma plūsma Q	2 kW
Apkārtnes temperatūra T_{amb}	1000 K
Silīcija emisivitāte ε	0.6
Siltumvadītspēja λ	26 W/m·K

Apsildāmajā reģionā tika uzdota konstanta siltuma plūsma $q = \lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{Q}{S_Q} = \frac{Q}{2\pi R_P H_Q}$, kur S_Q ir reģiona laukums un R_P ir pjedestāla rādiuss. Uz pjedestāla apakšējās virsmas tika uzdota fiksēta temperatūra $T = 1000$ K, lai nodrošinātu aprēķinu konverģenci. Uz citām robežām tika izmantots siltuma starojuma robežnosacījums. Silīcija apgabalā tika rēķināts klasiskais temperatūras difūzijas vienādojums (Laplasa vienādojums) $\nabla^2 T = 0$, izmantojot *FEMM* programmu ar *Mathematica* interfeisu [67]. Daži aprēķinu rezultātu piemēri, kas parāda temperatūras lauku pjedestālā, ir sniegti Att. 3.10.(b).

Temperatūras pjedestāla augšējās virsmas centrā un uz tās malas (T_{cen} un T_{rim} , definētas Att. 3.10.(b)) bija atkarīgas no apsildāmā reģiona pozīcijas z_Q dažādos veidos, kā parādīts Att. 3.11.(a). Palielinot z_Q , pjedestāla augšējās malas temperatūra samazinājās ātrāk par centra temperatūru, jo pjedestāls gan tiek apsildīts no sāniem, gan zaudē siltumu no sāna neapsildītās daļas: pie maziem z_Q rezultātā sanāk $T_{cen} < T_{rim}$, pie lieliem z_Q – $T_{cen} > T_{rim}$. Tātad, $\Delta T = T_{cen} - T_{rim}$ atkarība no z_Q nav monotona, sk. Att. 3.11.(b).

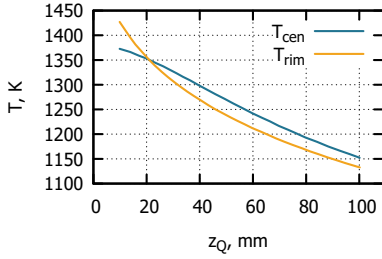


Att. 3.10. (a) – izmantotās ģeometrijas un robežnosacījumu shēma (vertikālais izmērs nav parādīts pilnā mērogā). (b) – *FEMM* temperatūras lauka aprēķinu piemēri ar $R_P = 40$ mm, $Q = 2$ kW un dažādām apsildāmā reģiona pozīcijām z_Q .

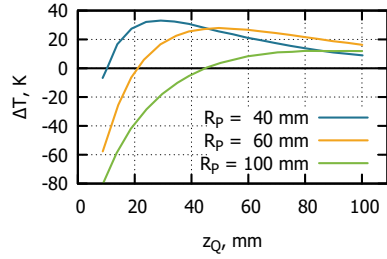
Tā kā šīs pētījuma daļas mērķis bija uzlabot pjedestāla centra sildīšanu, sistēmas ar maksimālo ΔT ir vispiemērotākās. Var secināt, ka optimālajam attālumam z_Q jābūt ~ 30 mm, kad pjedestāla rādiuss ir 40 mm; un šis attālums palielinās līdz ~ 50 mm, kad $R_P = 60$ mm, un līdz 80..100 mm, kad $R_P = 100$ mm. Šie rezultāti tika izmantoti, lai uzsāktu parametru pētījumus ar vienkāršoto sānu sildīšanu, kas aprakstīti nākamajā apakšnodaļā. Šis modelis, toties, neder gadījumam ar vēlāk attīstīto vidējās frekvences induktoru (2.2. apakšnodaļā), tāpēc ka tā jauda inducējas tilpumā, nevis tikai uz virsmas.

3.3.2. Fāzu robežu aprēķini un AF induktora optimizācija

Sānu sildīšana tika sākumā iekļauta fāzu robežu modeli vienkāršotā veidā: vienmērīgs siltuma plūsmas blīvums uzdots 30 mm platā joslā uz pjedestāla sāniem, 20 mm zem ETP. Integrālā $Q = 1$ kW jauda ievērojami paaugstināja pjedestāla temperatūru un palielināja kausējuma augstumu, sk. Att. 3.12.. Tā kā liela daļa no siltuma, kas nepieciešama pjedestāla



(a) Temperatūra pjedestāla augšējās virsmas centrā T_{cen} un uz tās malas T_{rim} gadījumā ar pjedestāla rādiusu $R_P = 60$ mm



(b) Starpība starp centra un malas temperatūrām ΔT dažādiem pjedestāla izmēriem

Att. 3.11. Vienkāršoto temperatūras lauka aprēķinu ar programmu *FEMM* rezultāti atkarībā no apsildāmā reģiona pozīcijas z_Q .

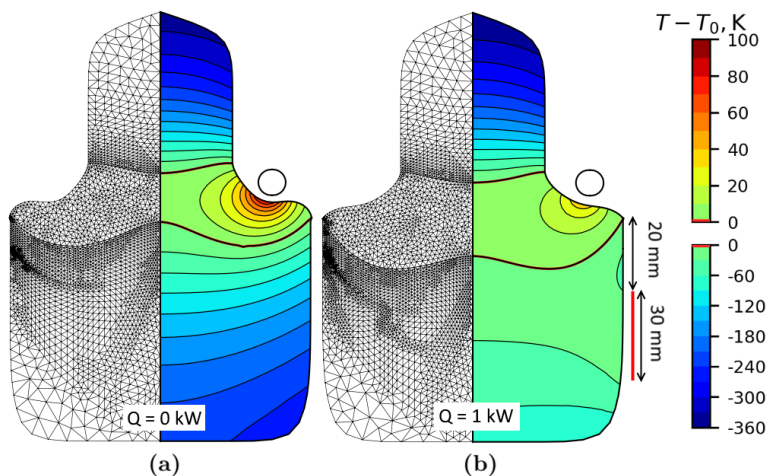
kušanai, tiek pievadīta no sāniem, AF induktors tiek “atslogots”, un strāva tajā samazinās par 20%. Tāpēc uz brīvās virsmas inducējas mazāk siltuma, un maksimālā kausējuma temperatūra ir zemāka gadījumā ar sānu sildīšanu.

Lielāks kausējuma augstums stabilizēja sistēmu un ļāva izmantot gradienta algoritmā daudz lielāku sākotnējo soli, nekā aprēķinos bez sānu sildīšanas (2 mm, nevis 0.3 mm), un tādā veidā pārklāt lielāku induktora parametru telpas apgabalu, sk. Att. 3.13.. Rezultātā iegūtais kausējuma augstums sasniedza $H_M = 25.2$ mm, kas ir divreiz vairāk, nekā iepriekšējos aprēķinos bez sānu sildīšanas.

Jāpiebilst, ka induktora sākotnējā forma (gradienta metodes sākumpunkts) tika piemeklēta manuāli – modelējot fāzu robežu formu vairākām induktora parametru kopām. Daudzi no šiem aprēķiniem diverģēja, īpaši pie lieliem kristāla diametriem, kas ir aprakstīti nākamajā apakšnodaļā. Induktora formas, kas deva labāku rezultātu, tika izvēlētas kā sākuma nosacījumi gradienta metodei. Tas ir iemesls tam, ka induktora sākotnējās formas atšķiras dažādos attēlos. Sākuma nosacījumu ietekme tiek demonstrēta nākamajā apakšnodaļā.

3.4. Pilna sistēma: sānu sildīšana ar vidējās frekvences spoli

Šajā apakšnodaļā ir aprakstīti aprēķinu rezultāti dažādiem kristāla un pjedestāla diametriem. To iegūšanai lietots kristāla vilkšanas ātrums 2 mm/min. Eksperimentālās sistēmas attīstības dēļ, skaitliskais modelis



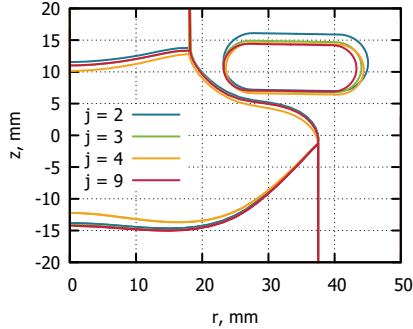
Att. 3.12. Skaitliskais režģis un silīcija temperatūra, iegūta ar vienkāršoti aprakstītā sānu sildītāja jaudu $Q = 0$ (a) un $Q = 1$ kW (b). Kristāla diametrs $D_C = 36$ mm, pjedestāla diametrs $D_P = 75$ mm.

tika papildināts ar vara aizsargekrānu un ar precīzu vidējās frekvences induktora formu, sk. Att. 3.14.. Galvenie sistēmas parametri ir apkopoti Tab. 3.2.. Nākamajās apakšnodaļās tiek prezentēti induktora optimizācijas rezultāti sistēmām ar kristāla diametriem 36, 60 un 100 mm.

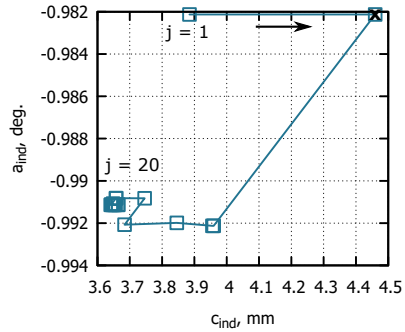
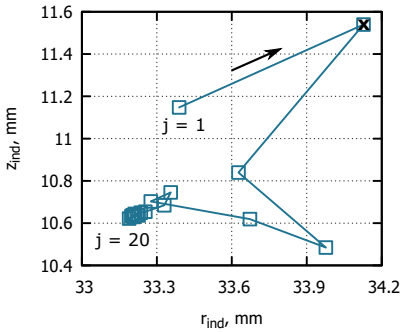
Kristāla diametrs 36 mm

Lai optimizētu induktoru 36 mm kristāla sistēmā, izvēlēts pjedestāls ar diametru $D_P = 75$ mm. Kā sākuma stāvoklis ir izvēlēta salīdzinoši gara induktora forma ($k_{\text{ind}} = 5$ mm), lai palielinātu algoritma jutību pret α_{ind} , atbilstoši rezultātiem no iepriekšējās apakšnodaļas. Gradianta metode konverģēja uz kausējuma augstumu $H_M = 24$ mm, sk. Att. 3.15.(a), kur fāzu robežas ir parādītas pie dažādām iterācijām. Optimizācijas laikā H_M palielinājās, tāpēc ka AF EM jauda tika pārdalīta uz kausējuma centru, palielinoties induktora šķēluma orientācijas leņķim α_{ind} . Līdzīga tendence novērota arī tad, kad izmēģināta cita sākotnējā ģeometrija (“šaurš”, nevis “plats” induktors, sk. Att. 3.15.(b)).

Detalizēta induktora parametru attīstība ir parādīta Att. 3.16.. Var secināt, ka tika pārklāts relatīvi liels parametru telpas apgabals – vairāki mm un gandrīz 10° . Gadījumos, kad aprēķini diverģēja, algoritms atgriezās pie iepriekšējās induktora ģeometrijas un uz pusi samazināja soļa garumu (kā



(a) Fāzu robežas



(b) Šķēluma centra koordinātes r_{ind} un (c) Induktora šķēluma slīpuma leņķis α_{ind} un liekuma rādiuss c_{ind}

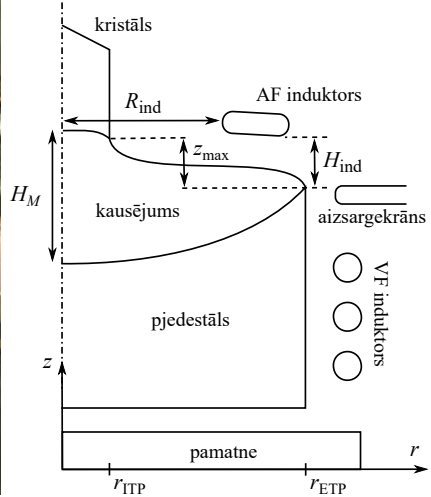
Att. 3.13. Fāzu robežu (a) un induktora parametru (b, c) konverģence gradienta metodes laikā, kur j ir metodes iterācijas numurs. Vienkāršotās sānu sildīšanas jauda $Q = 1$ kW. Diverģējuši aprēķini ir apzīmēti ar \times .

aprstīts 2.5. apakšnodaļā), un tas ļāva turpināt līdz lietotāja iestatītajai iterāciju skaita robežai. Tomēr H_M vērtība bija ļoti tuvu pie optimālās jau pēc ceturtais iterācijas, sk. Att. 3.16.(d).

Rezultējošas induktora formas, kas iegūtas no dažādiem sākuma nosacījumiem, bija diezgan atšķirīgas. Tas nozīmē, ka $H_M = 24$ mm var arī nebūt globālais maksimums. No otrās puses, ar dažādiem sākuma nosacījumiem iegūtās H_M vērtības ir pietiekami līdzīgas, lai optimizācijas algoritms būtu noderīgs praktiskajam mērķim: atbilstoša induktora izvēle pirmajiem eksperimentiem ar lielākiem kristāla diametriem.

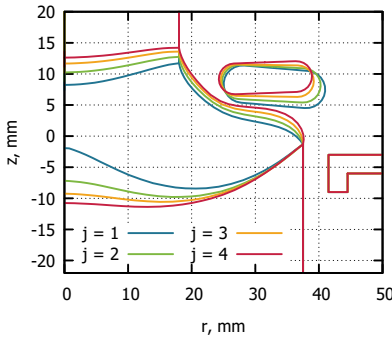


(a) Audzēšanas iekārtas fotogrāfija

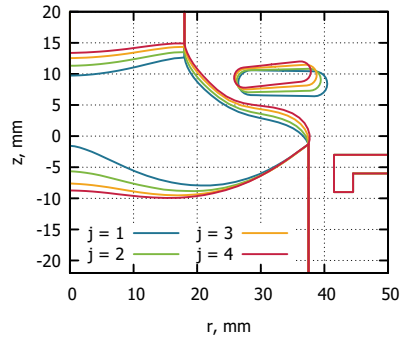


(b) Pjēdētāla sistēmas shēma

Att. 3.14. Audzēšanas iekārtas fotogrāfija (a) un sistēmas shēma (b) ar izaudzēto neregulārās formas kristāla paraugu 1, augstfrekvences un vidējās frekvences induktoriem 2-3, vara aizsargekrānu 4 un pjēdestālu 5.



(a) Sākuma ģeometrija Nr. 1: “plats” induktors



(b) Sākuma ģeometrija Nr. 2: “šaurš” induktors

Att. 3.15. Fāzu robežas induktora optimizācijas procesā (j ir iterācijas kārtas numurs), ar dažādiem induktora formas sākuma nosacījumiem.

Kristāla diametrs 60 mm

Lai modelētu 60 mm kristālu audzēšanu, tika izvēlēts $D_P = 150$ mm, tāpēc ka 3.1. apakšnodaļā tika iegūts $D_P \geq 2D_C$ kritērijs. Att. 3.17.(a)

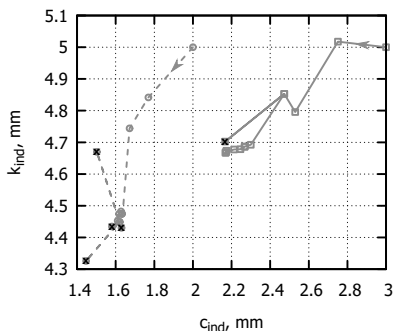
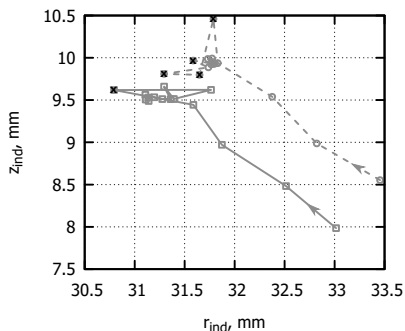
Tab. 3.2. Izmantoto sistēmas parametru apkopojums.

Kristāla garums	60 mm
Pjedestāla augstums	120 mm
AF induktora frekvence f_{AF}	2.8 MHz,
Vara aizsargekrāns	
Sprauga starp ekrānu un pjedestālu	4 mm
Ekrāna malas platums	6 mm
Vertikālā pozīcija	\sim ETP līmenī
VF induktors	
Caurules diametrs	10 mm
Attālums starp vijumiem	20 mm
Attālums līdz aizsargekrānam	15 mm
Attālums līdz pjedestāla malai	9 mm
Frekvence f_{VF}	100 kHz
Sildīšanas jauda Q_{VF}	atkarīga no D_C , sk. Tab. 3.3.

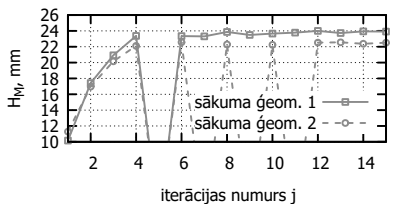
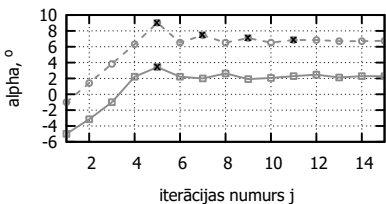
ir parādītas fāzu robežas, kas iegūtas ar iepriekšējo (vienkāršoto) sānu sildīšanas modeli, kas tika aprakstīts 3.3.2. apakšnodaļā. Vienkāršotā modeļa trūkumu dēļ (viendabīga inducētā jauda VF EM aprēķinu vietā, kā arī aizsargekrāna neesamība), aprēķini bija nestabili un optimizācijas solis tika samazināts, lai novērstu aprēķinu diverģenci. Rezultātā induktora izmaiņas bija ļoti mazas. Šis neveiksmīgs optimizācijas mēģinājums ir pieminēts tikai kontekstam, bet turpmākā tekstā un Att. 3.17.(b–d) ir apskatīti rezultāti, kas iegūti ar aktuālo VF EM lauka modeli (aprakstīts 2.2. apakšnodaļā).

Visu induktora parametru optimizācija. Att. 3.17.(b) parāda, ka induktora forma ievērojami izmainās optimizācijas laikā, un šķeluma slīpuma leņķis α_{ind} pakāpeniski palielinās, līdzīgi kā gadījumā ar 36 mm kristālu. Tomēr jāpiebilst, ka skaitliskā modeļa stabilitāte samazinājās: lai uzsāktu optimizācijas algoritmu, sākotnējā induktora forma, ar kuru process ir vismaz iespējams, ir “jāuzmin”, un šo minējumu ir grūtāk izdarīt pie lieliem D_C .

Visu induktora parametru optimizācija, izņemot α_{ind} . Algoritma implementācija ļauj izņemt vienu vai vairākus induktora parametrus no optimizācijas, t.i. atstāt tos nemainīgus iterāciju gaitā. Piemēram,



(a) Šķēluma centra koordinātes r_{ind} un z_{ind} (b) Induktora šķēluma liekuma rādiuss c_{ind} un garums k_{ind}

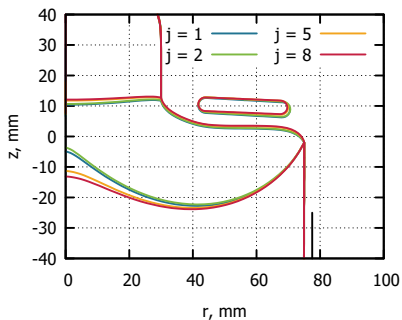


(c) Induktora šķēluma slīpuma leņķis α_{ind} (d) Kausējuma augstums H_M

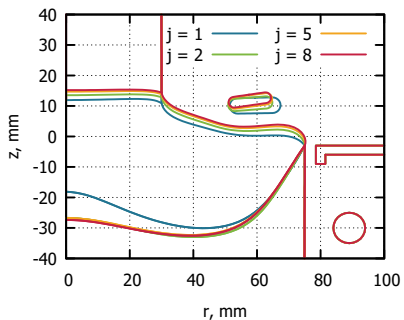
Att. 3.16. Induktora parametru un kausējuma augstuma H_M izmaiņas induktora optimizācijas laikā, ar kristāla diametru $D_C = 36$ mm un pjedestāla diametru $D_P = 75$ mm. Diverģējuši aprēķini ir apzīmēti ar \times . Nepārtrauktas līnijas – optimizācija uzsākta ar “platu” induktoru, raustītas līnijas – ar “šauru” induktoru.

Att. 3.17.(c) parāda fāzu robežu formu, kad tiek optimizēti visi induktora parametri, izņemot α_{ind} . Optimālā H_M vērtība ir, par pārsteigumu, pat lielāka, nekā gadījumā ar visu parametru optimizāciju. Iespējams, tas notika tāpēc, ka mērķa funkcijas izskats parametru telpā ir ļoti sarežģīts, un vienas koordinātes fiksēšana ļauj “izvairīties” no nokļūšanas tuvākā lokālā maksimumā.

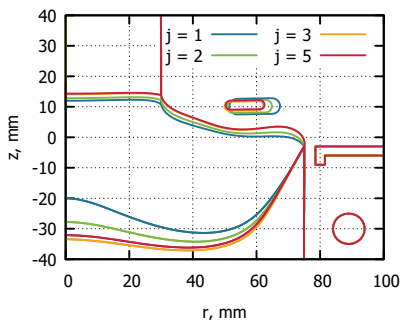
Optimizēti tikai r_{ind} un z_{ind} . Induktora izgatavošanas ērtībām (piemēram, lai būtu iespējams izgatavot vairākus induktorus no vienas saplacinātas vara caurules) tika veikti testi samazinātā parametru telpā, kur atstātas tikai divas koordinātes: r_{ind} un z_{ind} . Šajā gadījumā, kā parādīts Att. 3.17.(d), optimizācijas algoritms noved pie atrisinājuma ar tikpat lielu H_M , kāds bija sasniegts optimizējot visus induktora parametrus. Tātad,



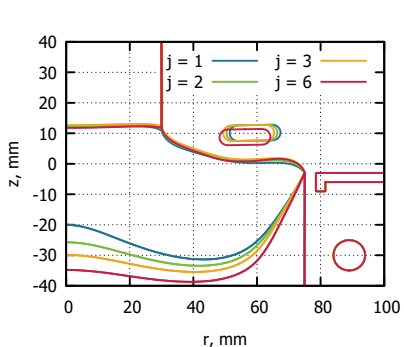
(a) Visu induktora parametru optimizācija, sistēma ar vienkāršotu sānu sildīšanu.



(b) Visu induktora parametru optimizācija, aktuālais VF EM lauka modelis.



(c) Visu induktora parametru optimizācija, izņemot α_{ind} , aktuālais VF EM modelis.



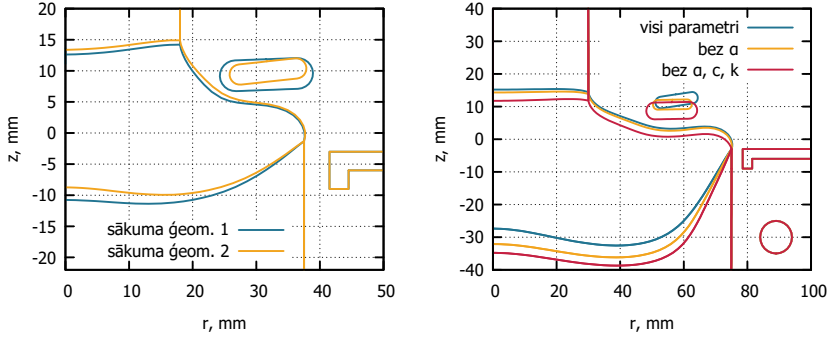
(d) Optimizēti tikai r_{ind} un z_{ind} , aktuālais VF EM lauka modelis.

Att. 3.17. Fāzu robežu piemēri induktora optimizācijas laikā ar kristāla diametru $D_C = 60$ mm un pjeđestāla diametru $D_P = 150$ mm.

konkrētā induktora šķēluma forma nav svarīga, un daudz lielāku lomu spēlē ģeometrijas pamatparametri (detalizētāka analīze ir sniegta 3.6.1. apakšnodaļā).

Optimizācijas rezultātu salīdzināšana. Optimizētās induktoru formas kopā ar attiecīgajām fāzu robežām ir parādītas Att. 3.18.. Pa kreisi parādīti rezultāti, kas iegūti no dažādām induktoru sākotnējām formām sistēmā ar 36 mm kristālu. Var secināt, ka induktoru formas “nepietuvojās” viena otrai optimizācijas rezultātā – tās ir apmēram tikpat atšķirīgas kā sākotnējās formas, kas parādītas Att. 3.15. ar zilajām līnijām. Att. 3.18.(b) ir parādīti induktora optimizācijas rezultāti ar dažādiem ie-

robežojumiem, sistēmā ar 60 mm kristālu. Rezultējošās induktoru formas un pozīcijas ir diezgan atšķirīgas, tomēr induktora augstums virs kausējuma šajos trijos gadījumos ir līdzīgs – attiecīgi 5,9, 6,2 un 5,2 mm.



(a) $D_C = 36$ mm, $D_P = 75$ mm, dažādi (b) $D_C = 60$ mm, $D_P = 150$ mm, dažādi induktora formas sākumnosacījumi. parametri izslēgti no optimizācijas.

Att. 3.18. Optimizācijas rezultātā iegūtās induktora formas un fāzu robežas, (b) attēlā parādīti arī gadījumi, kur daži induktora parametri netika optimizēti: šķēluma slīpuma leņķis α_{ind} , liekuma rādiuss c_{ind} , šķēluma garums k_{ind} .

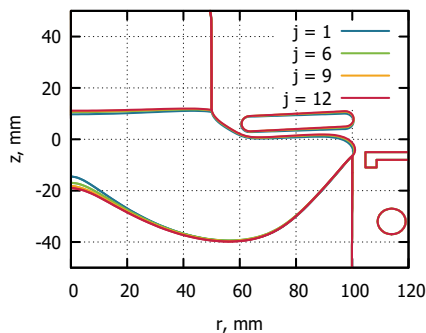
Kristāla diametrs 100 mm

Kad kristāla un pjedestāla diametri ($D_C = 100$ mm, $D_P = 200$ mm) bija tik lieli, atrast atbilstošu sākotnējo induktora formu bija ļoti grūti. Turklāt optimizācijas solim jābūt ļoti mazam (šeit aprakstītajos aprēķinos $s = 0.4$ mm), jo sistēma ir ļoti jūtīga pret induktora formu. Tāpēc induktora izmaiņas optimizācijas laikā bija pavisam mazas, sk. Att. 3.19.(a). Diverģējošo aprēķinu skaits bija lielāks, un aplūkotā fāzu telpas reģiona izmērs bija mazāks, nekā pie mazākiem D_C , sk. Att. 3.19.(b). Optimālā induktora parametri ir ļoti tuvu diverģējošo gadījumu parametriem, kur kausējums izlīst pāri pjedestāla malai, jo meniska leņķis kļūst pārāk liels.

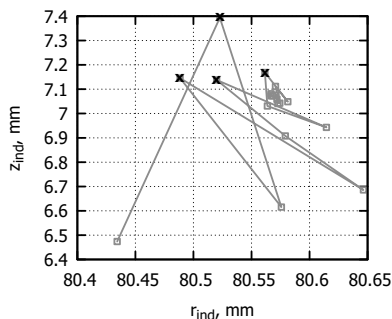
Mērķa funkcijas modifikācija

Kausējuma izlīšanas problēma tika atrisināta, modificējot optimizācijas algoritma mērķa funkciju: tajā tika iekļauts meniska leņķis α_{ETP} (leņķis starp brīvo virsmu un z asi ETP punktā, definēts Att. 3.20.):

$$f_t(H_M, \alpha_{\text{ETP}}) = \begin{cases} H_M, & \text{for } \alpha_{\text{ETP}} < 0 \\ H_M \cdot \left(1 - \frac{\alpha_{\text{ETP}}}{30^\circ}\right), & \text{for } \alpha_{\text{ETP}} > 0 \end{cases} \quad (3.6)$$



(a) Fāzu robežas

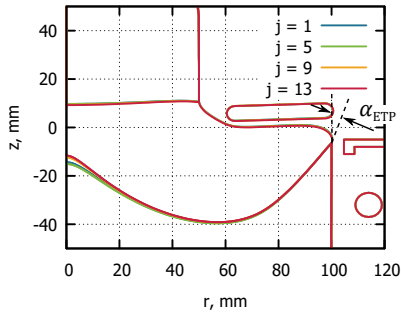


(b) Induktora šķēluma centra koordinātas

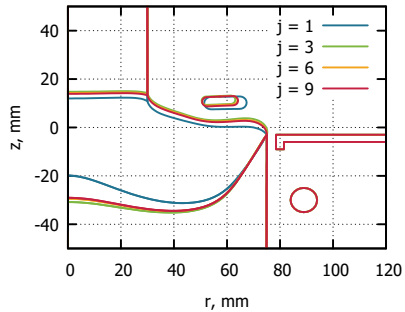
Att. 3.19. Fāzu robežu (a) un induktora šķēluma centra koordināšu (b) attīstība induktora optimizācijas laikā ar kristāla diametru $D_C = 100$ mm, pjedestāla diametru $D_P = 200$ mm; j ir iterācijas numurs. Diverģējuši aprēķini ir apzīmēti ar \times .

Šīs formulas izmantošana uzlaboja aprēķinu stabilitāti un samazināja diverģējušo gadījumu skaitu. Optimizācijas rezultāti 100 mm kristāla sistēmai ir parādīti Att. 3.20.(a). Atšķirībā no iepriekšējās mērķa funkcijas, ar modificēto mērķa funkciju H_M nedaudz samazinājās optimizācijas laikā. Iemesls ir tāds, ka f_t pieaugums modificētajā gadījumā ir ļoti atkarīgs no α_{ETP} , sk. Att. 3.21.(a); un α_{ETP} samazinājums parasti nozīmē EM lauka pārdalīšanos virzienā prom no kausējuma centra, kas samazina H_M . Tomēr tad, kad H_M ir pietiekami liels, tā samazināšanās nav problēma, jo procesa stabilitāte šajā gadījumā ir vairāk atkarīga no α_{ETP} – uz pjedestāla malas jānovērš kausējuma izlīšanas risks.

100 mm kristāla sistēmas induktora parametri optimizācijas gaitā, lai arī konverģēja, bija tik un tā ierobežoti ļoti mazā apgabalā, sk. Att. 3.21.(b). No otrās puses, induktora optimizācija mazāka kristāla ($D_C = 60$ mm) audzēšanai izraisa lielas induktora formas izmaiņas, kas veiksmīgi palielina H_M , vienlaicīgi saglabājot pietiekami mazu α_{ETP} , sk. Att. 3.20.(b).

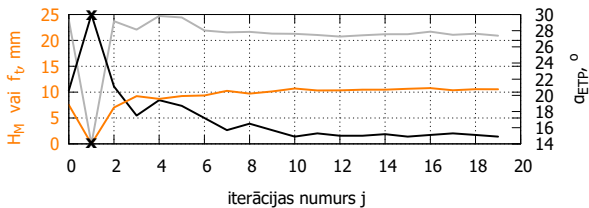


(a) $D_C = 100$ mm, $D_P = 200$ mm

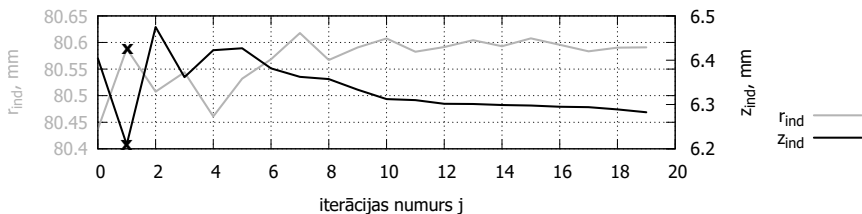


(b) $D_C = 60$ mm, $D_P = 75$ mm

Att. 3.20. Fāzu robežas induktora optimizācijas laikā ar modificētu mērķa funkciju $f_t(H_M, \alpha_{ETP})$, ar dažādiem kristāla un pjeđestāla diametriem. H_M ir kausējuma augstums, α_{ETP} – leņķis starp brīvo virsmu un vertikāli ārējā trīs-kāršajā punktā.



(a) Kausējuma augstums H_M , meniska leņķis α_{ETP} un mērķa funkcija $f_t(H_M, \alpha_{ETP})$ induktora optimizācijas laikā

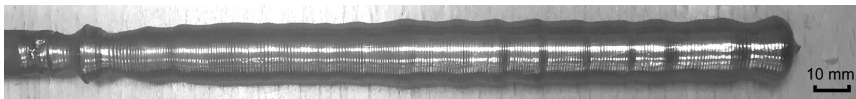


(b) Induktora šķēluma centra koordinātes r_{ind} un z_{ind}

Att. 3.21. Mērķa funkcijas komponentu un induktora parametru attīstība optimizācijas laikā ar $D_C = 100$ mm, $D_P = 200$ mm. Diverģējuši aprēķini apzīmēti ar \times .

3.5. Modeļa verifikācija

Eksperimenta dati. Sistēmas parametri, kas tika izmantoti modeļa verifikācijai, ir tādi paši, kā minēts Tab. 3.2., izņemot $f_{AF} = 2,64$ MHz. Audzēšanas iekārta tika izstrādāta, izmantojot vakuuma krāsni, kurā iepriekš KEPP EU uzņēmumā bija realizēts cits Si audzēšanas process: Čohralska procesa modifikācija, kurā karsēšana tika veikta, izmantojot elektronu staru kūli. Audzēšanas iekārta ir sīkāk aprakstīta [Dis5]. Tika izmantots ar elektronu staru metodi izgatavots pjedestāls ar diametru $D_P = 75$ mm. Diemžēl process nebija pietiekami stabils, lai iegūtu monokristālu, un tika izaudzēti tikai polikristāliski stieņi. Tipisks piemērs ir parādīts Attēlā 3.22., kur diametrs svārstās no 15 mm līdz 20 mm. Tika iegūti arī citi polikristāliski stieņi ar diametriem no 9 līdz 22 mm, bet diametra svārstību lielums stabilākajos gadījumos nepārsniedza 3 mm. Stieņa diametra svārstības var izskaidrot ar to, ka eksperimenta laikā AF induktora jaudas kontrolēšana nav optimāla.

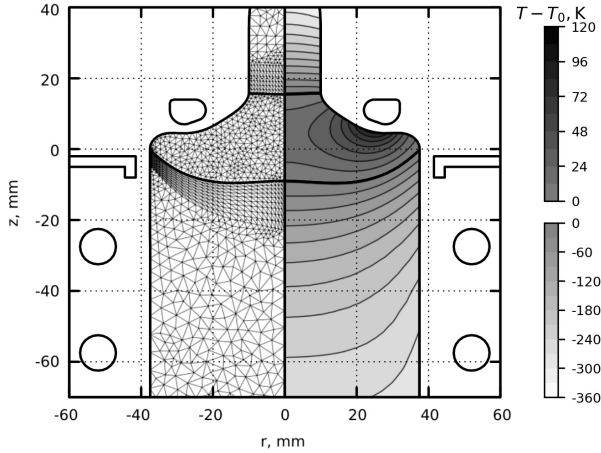


Att. 3.22. Polikristāliskais stienis ar mainīgu diametru, kas tika izaudzēts no pjedestāla ar diametru 75 mm.

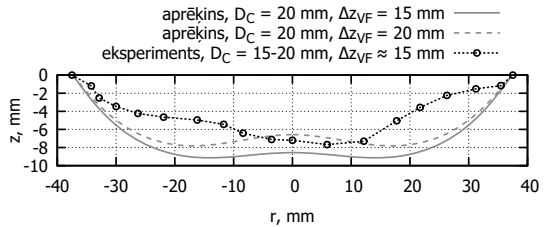
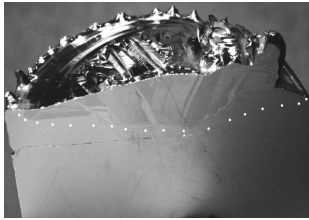
Aprēķinu rezultāti. Aprakstītās sistēmas skaitliskā modelēšana arī bija sarežģīta kausējuma centra sasalšanas dēļ. Saprātīga kausējuma forma tika iegūta ar $Q_{VF} = 1,6$ kW un $Q_{AF} = 2,2$ kW (sk. Att. 3.23., kur T_0 apzīmē silīcija kušanas temperatūru). Atbilstošo jaudu ieraksti no eksperimenta nav pieejami.

Pēc polikristāliskā stieņa, kas parādīts attēlā 3.22., audzēšanas atlikušuais pjedestāls tika sagriezts un kausēšanas frontes forma tika noteikta, izmantojot saišu kodināšanu (angl. *bond decoration etching*) ar kālija hidroksīdu, sk. Att. 3.24.(a). Šis eksperimentāli iegūtais profils ir salīdzināts ar aprēķinu rezultātu Attēlā 3.24.(b). Atbilstība eksperimentam nedaudz uzlabojās, ja palielina attālumu starp vidējās frekvences spoli un ekrānu Δz_{VF} . Šo neatbilstību varētu izskaidrot ar nesimetrisku eksperimentālo spoli – tā kā faktiskajā 3D formā caurule noliecas uz leju, tad aksiāli simetriskam modelim atbilstošā Δz_{VF} vērtība samazinās.

Literatūrā netika atrasti Si audzēšanas eksperimenti, kas atbilstu šajā darbā modelētajai sistēmai. Tomēr citā sistēmā [46], kurā augstfrekvences induktora vietā izmantots elektronu lielgabals, bet kristāls novietots asimetriski attiecībā pret pjedestālu, tika novērota līdzīga kušanas frontes forma: ar dubulto izliekumu, sk. Att. 3.25..



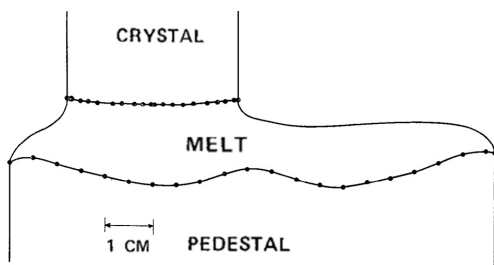
Att. 3.23. Galīgo elementu režģa piemērs (pa kreisi) un izrēķinātais temperatūras lauks (pa labi) sistēmā ar kristāla diametru $D_C = 20$ mm un pjedestāla diametru $D_P = 75$ mm.



(a) Eksperimentā izmantotā (b) Salīdzinājums starp aprēķināto un eksperimentāli pjedestāla vertikālais griezumā noteikto kušanas frontes formām

Att. 3.24. Eksperimentāli noteiktā (a) un skaitliski modelēta (b) kušanas fronte sistēmā ar kristāla diametru $D_C = 20$ mm un pjedestāla diametru $D_P = 75$ mm. Δz_{VF} ir attālums starp vidējās frekvences spoli un vara ekrānu.

Rezultātu analīze. Pat pēc spoles augstuma korekcijas aprēķinātā frontes forma tikai aptuveni atbilst eksperimentālajai, ar atšķirībām līdz 4 mm.



Att. 3.25. Eksperimentāli noteiktā kušanas un kristalizācijas frontes forma sistēmā ar elektronu lielgabalu un asimetriski novietotu kristālu. Attēls no [46].

Tas var notikt vairāku iemeslu dēļ: eksperimenta nestabilitāte, citas eksperimentālās iekārtas neprecizitātes, eksperimentālā induktora nesimetriskums barošanas ķēdes dēļ un kausējuma plūsmas trūkums modelī.

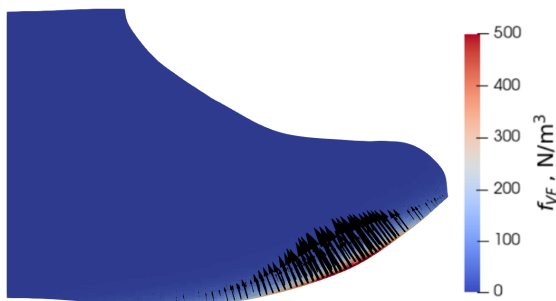
AF induktora nesimetrijas ietekme varētu izpausties kā zemāks inducētais siltums zem spraugas starp strāvas pievadiem, kas samazina kušanas frontes dziļumu. Tas varētu izskaidrot, kāpēc eksperimentālā fronte Att. 3.24.(b) ir seklāka labajā pusē ($r > 0$). Ja šo efektu novērtē, analizējot pētījumu, kurā FZ sistēmā mainīts galvenās spraugas platums [68], tad šis efekts, visticamāk, nepārsniegtu 1 mm. Tomēr, atšķirībā no PZ kristāla, aplūkotajā eksperimentā pjedestāls netika rotēts, tāpēc var sagaidīt lielākus nesimetriskus efektus. Eksperimentālo datu izkliedi ir grūti analizēt frontes nesimetrijas un ļoti maza mērījumu skaita (veikts tikai viens mērījums) dēļ.

Kausējuma plūsmas ietekme iepriekš tika izpētīta vienkāršotā sistēmā (sk. 3.2.2. apakšnodaļu vai [Dis4]), un tai drīzāk vajadzētu palielināt frontes izliekumu pie $r \sim 25$ mm AF EM spēka radītā virpuļa dēļ. Tomēr augstākminētajā pētījumā netika iekļauts VF EM spēks, kas darbojas virzienā prom no kušanas frontes. Tādējādi VF EM spēkam vajadzētu samazināt frontes dziļumu pjedestāla ārējā daļā un uzlabot atbilstību eksperimentam. Iepriekšējos PZ sistēmas pētījumos tika prognozēts, ka kausējuma plūsmas ietekme uz kušanas fronti ar līdzīgām proporcijām ($D_C = 100$ mm) var būt vairākus milimetrus liela [69].

Kausējuma plūsmas aprēķini. Vidējās frekvences EM lauka simulācijas, kas aprakstītas 2.2. apakšnodaļā, ļāva iegūt laika vidējo Lorenca spēka blīvumu kausējumā:

$$f_{VF} = 0.5\vec{j} \times \vec{B},$$

kur \vec{j} ir inducētās strāvas blīvuma amplitūda un \vec{B} ir magnētiskā lauka amplitūda. Iegūtais spēka blīvuma sadalījums parādīts Att. 3.26.. Spēks patiešām ir vērstis prom no kušanas frontes, ar maksimumu pie vidēji liela r . Tomēr kausējuma plūsmas aprēķini ar *OpenFOAM*, kuru modelis aprakstīts 2.4. apakšnodaļā, rāda, ka VF tilpuma spēka ietekme ir ļoti maza salīdzinājumā ar AF induktora izraisīto virsmas spēku. Kausējuma plūsmas divu virpuļu struktūra, kas parādīta Attēlā 3.27., paliek nemainīga, un karstais silīcijs no brīvās virsmas virzās uz kušanas fronti. Attēlā parādīts pilnais ātrums, un tā azimutālā komponente ir vienāda ar nulli, tāpēc ka kristāls un pjeDESTāls netika rotēti.



Att. 3.26. Laikā vidējais Lorenca spēka tilpuma blīvums f_{VF} , inducēts kausējumā ar vidējās frekvences spoli, sistēmā ar kristāla diametru $D_C = 20$ mm un pjeDESTāla diametru $D_P = 75$ mm.

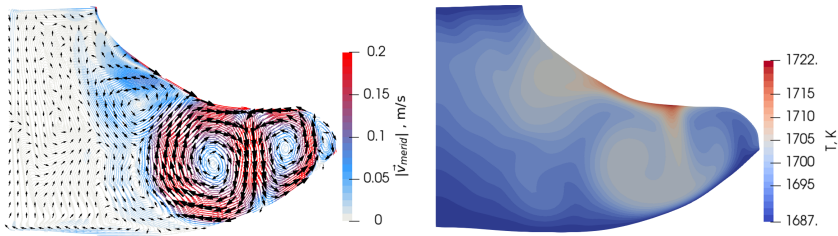
Lai novērtētu kausējuma plūsmas ietekmi uz kušanas frontes formu, tika ieviesta siltuma plūsmas korekcija. Tā ir definēta kā starpība starp siltuma plūsmām, kas aprēķinātas ar kausējuma plūsmu un bez tās: $q_{\text{kor}} = q_{\text{ar plūsmu}} - q_{\text{bez plūsmas}}$. Izmantojot šo definīciju, q_{kor} pozitīvas vērtības nozīmētu papildu kristalizāciju (t. i., kušanas fronte pārvietojas uz augšu), negatīvas vērtības – kušanu (fronte pārvietojas uz leju). Visos aplūkotos gadījumos q_{kor} lielākoties ir negatīvs, sk. Att. 3.28.. Tas nozīmē, ka modelēto frontes formu nevar pietuvināt eksperimentālajai formai, izmantojot f_{VF} . Tas pats secinājums attiecas uz 2.3 reizes smalkāku režģi, un pat tad, kad f_{VF} tika palielināts divas reizes, tas joprojām bija praktiski neievērojams salīdzinājumā ar AF inducēto spēku.

Izstrādātā modeļa ierobežojumi. Viens no galveniem skaitliskā modeļa ierobežojumiem ir tas, ka tajā lietots aksiāli simetriskais tuvinājums. Savukārt eksperimentālajā sistēmā AF induktors ir izteikti nesimetrisks: tas sastāv no viena vijuma un starp tā pievadiem ir sprauga. Lielākā da-

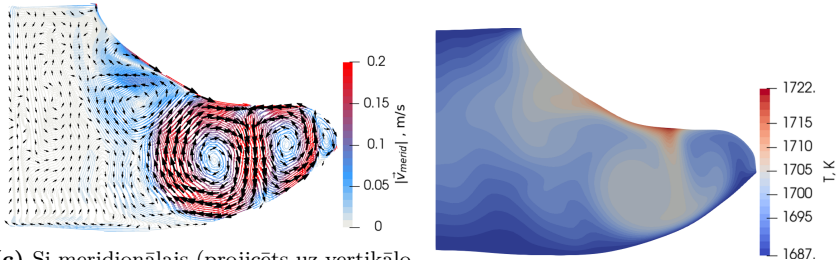
Ja no kausējuma plūsmas aprēķiniem tika arī veikti aksiāli simetriskajā tuvinājumā.

Otrs svarīgs pieņēmums – modelis ir kvazistacionārs. Tas apraksta fāzu robežas un kausējuma plūsmu līdzsvara stāvoklī, kas ir izveidojies pie dotajiem robežnosacījumiem. Tāpēc, ja eksperimenti veikti kādā nelīdzsvarotā stāvoklī (piemēram, ja kušanas fronte mainījās eksperimenta laikā), tos ir grūtāk izmantot modeļa verifikācijai. Vēl viens ierobežojums ir tikai laminārās plūsmas aplūkošana. Tomēr iegūtā virpuļu struktūra ir diezgan stabila un izteikta, tāpēc kausējuma plūsmas ietekme uz siltuma pānesi būtiski nemainītos, ja tiktu izmantots turbulences modelis.

Neraugoties uz atšķirībām starp eksperimenta un aprēķinu rezultātiem, skaitliskie pētījumi par kristāla diametra palielināšanu un optimālo induktora formu joprojām ir noderīgi, lai iegūtu optimālo induktora parametru aptuvenas vērtības un to atkarību no kristāla diametra.

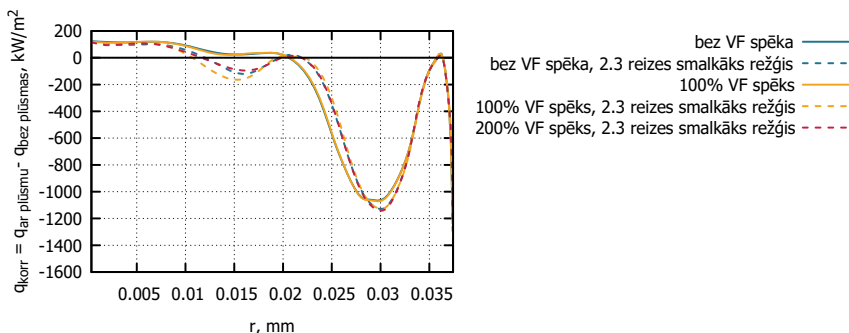


(a) Si meridionālais (projicēts uz vertikālo plakni) ātrums gadījumā bez VF spēka. (b) Si temperatūra gadījumā bez VF spēka.



(c) Si meridionālais (projicēts uz vertikālo plakni) ātrums gadījumā ar VF spēku. (d) Si temperatūra gadījumā ar VF spēku.

Att. 3.27. Kausējuma plūsmas aprēķinu rezultāti bez (augšā) un ar (apakšā) spēku, kas inducēti ar vidējās frekvences induktoru, $D_C = 20$ mm, $D_P = 75$ mm.



Att. 3.28. Siltuma plūsmas korekcijas q_{korr} uz kušanas frontes, izrēķinātas ka starpības starp siltuma plūsmām aprēķinos ar kausējuma plūsmu un bez tās.

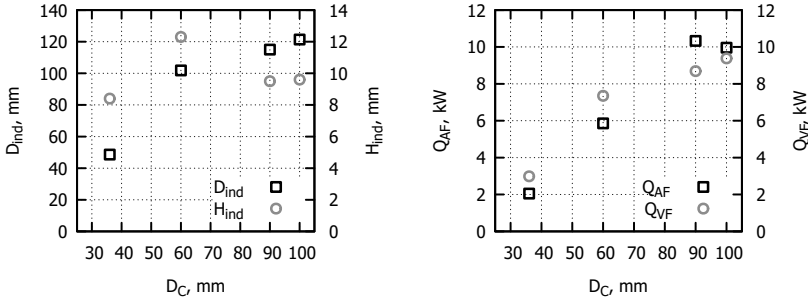
3.6. Izaicinājumi liela diametra kristālu audzēšanā

3.6.1. Optimālas augstfrekvences induktora formas

Optimālo induktora parametru kopsavilkums dažādiem kristāla un pjedestāla diametriem ir parādīts Tab. 3.3.. Vidējās frekvences induktora jauda Q_{VF} šajā pētījumā netika optimizēta: Q_{VF} katram pjedestālam tika izvēlēta manuāli, lai nodrošinātu aprēķinu konverģenci ar sākotnējo AF induktora ģeometriju, un visu iterāciju laikā tika uzturēta nemainīga. Dažu parametru izslēgšanai no optimizācijas algoritma ir diezgan maza ietekme uz rezultātiem: 1–3 mm atšķirība starp H_M vērtībām nav izšķiroša kausējuma centra sasaldēšanas novēršanai, un tā ir neliela arī aprēķinu verifikācijas kontekstā. Turklāt nepieciešamās AF un VF jaudas vērtības ir praktiski vienādas neatkarīgi no induktora formas. Šie rezultāti parāda, ka atlikušās induktora formas brīvības pakāpes nākotnē var izmantot, lai uzlabotu citus procesa aspektus, kas vēl nav optimizēti (piemēram, kausējuma plūsmas intensitāte vai AF induktora spriegums).

Attēlā 3.29. ir vizuāli parādītas dažas kolonnas no Tab. 3.3.. Kā izriet no pjedestāla metodes principiem, induktora iekšējais diametrs D_{ind} palielinās, palielinoties D_C . Tomēr šis palielinājums nav lineārs, un starpība starp D_{ind} un D_C ir vislielākā, ja $D_C = 60$ mm: gandrīz 40 mm jeb divas trešdaļas no kristāla diametra. Pagaidām nav skaidrs, vai šādu uzvedību var izskaidrot ar sākotnējo induktora parametru izvēli (un procesā ar 100 mm kristālu induktora forma ir tālu no optimālās), vai arī to var uzskatīt par pašas pjedestāla metodes iezīmi. Att. 3.29.(a) ir redzams, ka optimālais attālums H_{ind} starp induktoru un ETP ir apmēram 10 mm

neatkarīgi no kristāla diametra.



(a) Induktora iekšējais diametrs D_{ind} un (b) Nepieciešamās augstfrekvences EM un vidējās frekvences EM inducētās jaudas

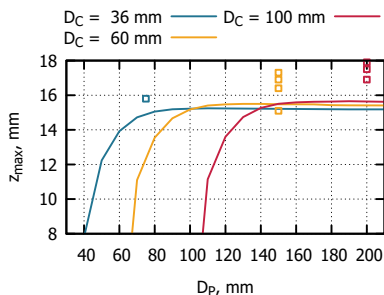
Att. 3.29. Induktora optimizācijas rezultātu apkopojums: iegūtie induktora parametri un sildīšanas jaudas atkarībā no kristāla diametra D_C .

Nepieciešamā inducētā AF induktora jauda ir lielāka nekā VF induktora jauda (pjedestāla sānu sildīšana) gadījumos ar lielu D_C , skat. 3.29.(b). Tas iezīmē problēmu, kas saistīta ar kristāla diametra palielināšanos: lielāka AF induktora strāva palielina loka izlādes risku un pastiprina kausējuma konvekciju, tādējādi destabilizējot brīvo virsmu un kušanas fronti. Visbeidzot, svarīga problēma varētu būt arī procesa stabilitāte: ja salīdzina Att. 3.19. un 3.15., tad gadījumā ar lielāku D_C iespējamo induktora formu diapazons ir daudz mazāks. Tas prasa augsto induktora izgatavošanas un audzēšanas procesa kontroles precizitāti. Iespējams, ka VF induktora parametru (strāva, frekvence, attālums starp vijumiem) iekļaušana optimizācijas algoritmā ļautu uzlabot izkusušās zonas stabilitāti un samazināt nepieciešamo AF induktora jaudu.

Attēlā 3.30. parādīts, ka gandrīz visos induktora optimizācijas aprēķinos brīvās virsmas augstums z_{max} (definēts kā vertikālais attālums starp ETP un ITP) ir par 1–2 mm lielāks nekā tas, kas aprēķināts, izmantojot Laplasa-Janga vienādojumu, kas aprakstīts 3.1. apakšnodaļā. Tas pierāda EM spiediena stabilizējošo efektu, kā aprakstīts [66].

Tab. 3.3. Rezultātu apkopojums: kristāla un pjestāla diametri D_C un D_P , induktora optimizācijas rezultāti un izmantotās EM jaudas. Atslēgvārds “bez” apzīmē, kādi augstfrekvences induktora parametri bija izslēgti no optimizācijas algoritma. R_{ind} ir augstfrekvences induktora iekšējais rādiuss, H_{ind} – induktora augstums virs pjestāla malas, H_M – kausējuma augstums, z_{max} – vertikālais attālums starp iekšējo un ārējo triskāršajiem punktiem, Q_{AF} un Q_{VF} – augstfrekvences un vidējās frekvences induktoru integrālās jaudas. Mērķa funkcija ir apzīmēta ar f_t .

$D_C; D_P$, mm	aprēķina apraksts	R_{ind} , mm	H_{ind} , mm	H_M , mm	z_{max} , mm	Q_{AF} , kW	Q_{VF} , kW
36; 75	“plata” sākotnēja forma	24	8.4	24	15.8	2.1	3.0
	“šaura” sākotnēja forma	26	9.1	22	16.2	2.1	3.0
60; 150	–	51	12.3	45	17.3	5.9	7.3
	bez α_{ind}	50	12.1	46	16.9	5.9	7.3
	bez $c_{\text{ind}}, k_{\text{ind}}, \alpha_{\text{ind}}$	49	9.7	45	15.1	5.8	7.3
	modificēta $f_t(H_M, \alpha_{\text{ETP}})$	51	11.8	43	16.4	5.8	7.3
90; 200	–	58	9.5	46	17.9	10.3	8.7
	bez $c_{\text{ind}}, k_{\text{ind}}, \alpha_{\text{ind}}$	56	9.5	45	17.6	10.2	8.7
100; 200	–	61	9.6	30	17.9	10.0	9.4
	bez $c_{\text{ind}}, k_{\text{ind}}, \alpha_{\text{ind}}$	60	9.5	27	17.5	9.9	9.4
	modificēta $f_t(H_M, \alpha_{\text{ETP}})$	61	9.2	21	16.9	9.8	9.5



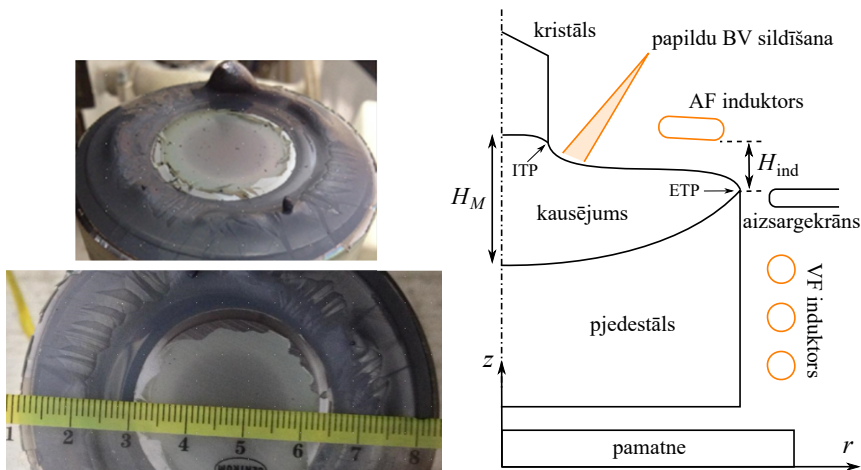
Att. 3.30. Maksimālais zonas augstums pie dažādiem kristāla diametriem D_C un pjedestāla diametriem D_P , iegūts ar Laplasa-Janga vienādojumu (nepārtrauktas līnijas) un induktora optimizācijas aprēķinos (kvadrāti).

3.6.2. Brīvās virsmas papildus sildīšana konusa fāzes laikā

Iepriekšējā apakšnodaļā tika prezentēti induktora formas optimizācijas rezultāti dažādiem kristālu diametriem. Tomēr jāņem vērā, ka audzēšanas procesa laikā nav iespējams nomainīt induktoru. Tas nozīmē, ka sākotnējā pjedestāla kušana, kristāla aizmetņa pielikšana un sākuma konusa fāze (t.i., pakāpeniska D_C palielināšana) ir jāveic ar vienu un to pašu AF induktoru. Šim induktoram ir liels iekšējais diametrs, ja tas tika optimizēts lieliem D_C , un tas ir acīmredzami nepiemērots mazu kristālu audzēšanai, tāpēc ka tas neinducē pjedestāla centrā pietiekami daudz siltuma, lai kompensētu lielus siltuma zudumus no centrālās daļas. Šis efekts tika parādīts arī eksperimentos, pat ar salīdzinoši mazu pjedestālu, kura $D_P = 75$ mm, sk. Att. 3.31.(a). Šo problēmu var novērst ar trešā siltuma avota izmantošanu, kas palīdz uzturēt lielu temperatūru pjedestāla centrā, piemēram ar infrasarkanās gaismas lampām, kas shematiski parādītas Att. 3.31.(b).

Fāzu robežu aprēķini. Šajā apakšnodaļā aprakstīti fāzu robežu aprēķini ar $D_P = 200$ mm un dažādiem kristālu diametriem (no 10 līdz 100 mm), kas veikti, lai noteiktu atbilstošas AF, VF un papildu brīvās virsmas (BV) sildīšanas jaudu lielumus konusa augšanas laikā. Pārējie sistēmas parametri atbilst Tab. 3.2..

Pētījuma laikā induktora forma palika nemainīga, un induktora strāva tika regulēta, izmantojot PID algoritmu, lai uzturētu nemainīgu vertikālo attālumu līdz ETP: $H_{ind} = 9$ mm (sk. Att. 3.31.(b)) visiem aplūkotojiem gadījumiem. Tādā veidā katram aprēķinam iegūts kopējais inducētais

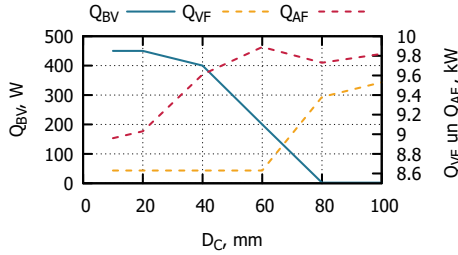


(a) Pjedestāla virsmas fotogrāfijas pēc ne- (b) Sistēmas shēma, kur siltuma avoti paveiksmīgiem mēģinājumiem to izkausēt bez rādīti ar oranžu krāsu, ieskaitot papildus papildus siltuma avota uz brīvās virsmas brīvās virsmas (BV) sildīšanu

Att. 3.31. Pjedestāla ($D_P = 75$ mm) augšējās virsmas fotogrāfijas un modelētās sistēmas shēma.

AF siltums Q_{AF} . Citas integrālās siltuma plūsmas bija lietotāja iestatītas. Brīvās virsmas sildīšanas jauda Q_{BV} tika uzdots tieši, Q_{VF} netieši – definējot strāvu VF induktorā. Tika izmēģinātas vairākas Q_{VF} un Q_{BV} vērtības, un tikai daži no aprēķiniem konverģēja. Piemēram, ja Q_{VF} bija iestatīts pārāk zems, kausējuma centrs sasala; bet ja Q_{BV} bija iestatīts pārāk zems, daļa no brīvās virsmas kristalizējās iekšējā trīskāršā punkta (ITP) tuvumā. Šeit ir apkopoti aprēķini ar iespējami zemākajām siltuma plūsmu Q_{BV} un Q_{VF} vērtībām, jo tās ir izdevīgas izmaksu efektivitātes un iekārtu projektēšanas ziņā.

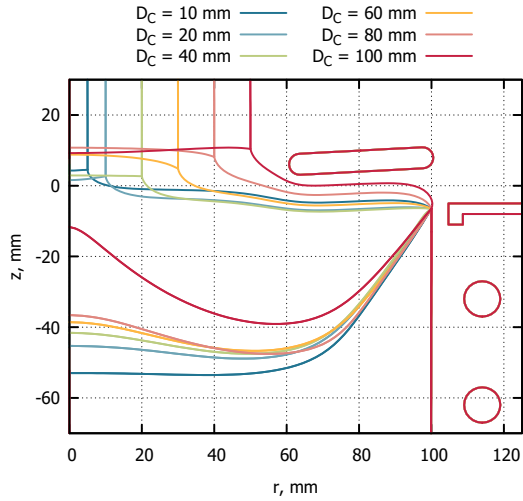
Optimālās integrālās siltuma plūsmas konusa fāzē ir parādītas Att. 3.32.. Var secināt, ka brīvās virsmas sildīšanas jauda pakāpeniski jāsamazina un pie $D_C > 60$ mm jāsāc palielināt VF sildīšanas jaudu. Atbilstošās fāzu robežas un silīcija temperatūras sadalījumi ir parādīti Att. 3.33.. Gan H_M vērtība, gan brīvās virsmas meniska leņķis ir apmierinoši, t.i., neapdraud stabilu audzēšanas procesu, visiem kristālu diametriem. Tomēr sistēmā ar $D_C = 100$ mm H_M ir tikai 21 mm, kas nozīmē, ka turpmāka D_C palielināšana, visdrīzāk, nebūs realizējama ar pašreizējo pjedestāla diametru $D_P = 200$ mm.



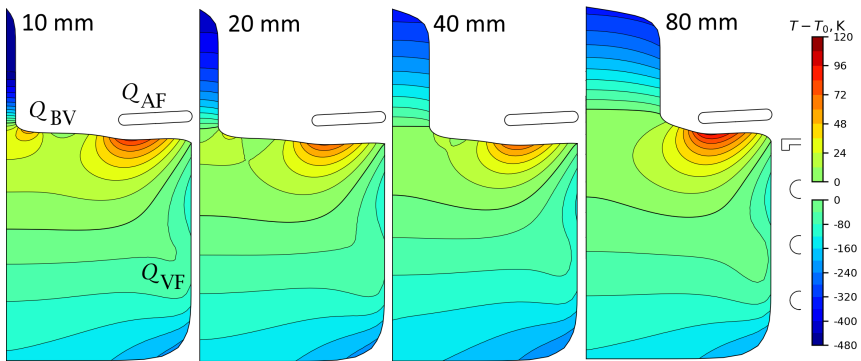
Att. 3.32. Optimālās sildīšanas jaudu vērtībās konusa fāzes laikā (kvazistacionāros aprēķinos ar kristāla diametriem D_C): brīvās virsmas sildīšana Q_{BV} , vidējās frekvences induktora jauda Q_{VF} un augstfrekvences induktora jauda Q_{AF} .

Attēlā 3.34. ir parādīta pjedestāla diametra palielināšanās ietekme uz fāžu robežām. Tas stabilizē procesu, palielinot H_M un samazinot α_{ETP} , tomēr tam ir arī trūkumi: sarežģītāka pjedestāla izgatavošana un lielāki siltuma zudumi, kā rezultātā gandrīz par 50% palielinās nepieciešamā AF induktora jauda. Nepieciešamās AF jaudas palielināšanās izvirza arī papildu prasības EM ģeneratoram.

Attēls 3.35. parāda Q_{BV} ietekmi uz fāžu robežām, kamēr $D_C = 10$ mm un citi parametri ir nemainīgi. Iekļautajā grafikā parādīts arī brīvās virsmas augstums z_{max} . Intensīvāka brīvās virsmas sildīšana palielina brīvās virsmas augstumu, un arī kausējuma augstumu H_M , jo kausējuma temperatūrai jāsamazinās, lai notiktu kristalizācija, un palielinātā Q_{BV} gadījumā tas notiek pie lielākas z koordinātes.

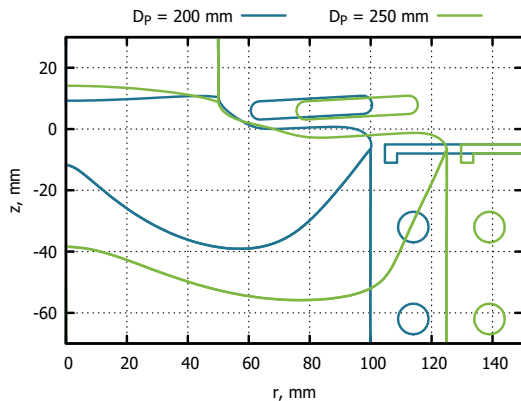


(a) Fāzu robežas

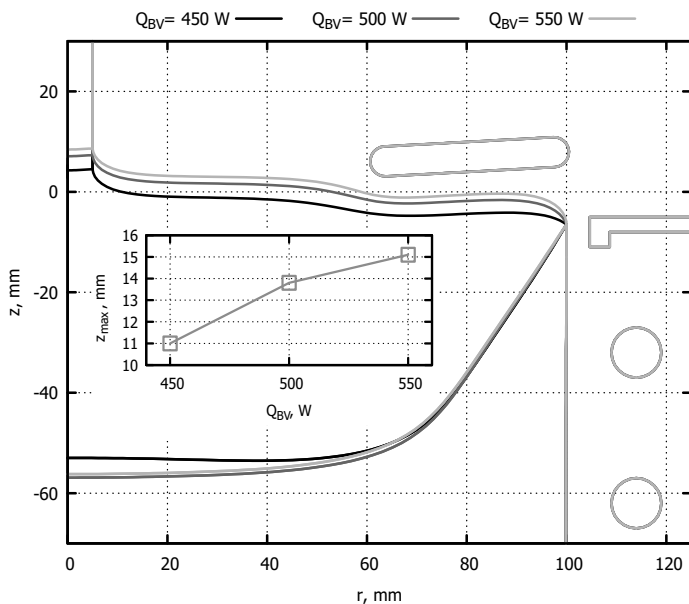


(b) Si temperatūras sadalījumi, ar sildīšanas reģionu Q apzīmējumiem kreisajā attēlā

Att. 3.33. Fāzu robežas un Si temperatūra aprēķinos ar dažādiem D_C .



Att. 3.34. Fāzu robežu forma ar kristāla diametru $D_C = 100$ mm un dažādiem pjeDESTĀLA diametriem D_P .



Att. 3.35. Fāzu robežu forma un brīvās virsmas augstums z_{max} ar kristāla diametru $D_C = 10$ mm un dažādām brīvās virsmas sildīšanas jaudas vērtībām Q_{BV} .

Siltuma starojuma analītiskais novērtējums. Ja kristāls ir pietiekami garš un tievs, radiālo temperatūras gradientu var neievērot, un temperatūru kristālā var aprakstīt vienā dimensijā kā $T(z)$, sk. Att. 3.36.(a). Tā kā kristāla sānu virsma atrodas tālu no induktora, var pieņemt, ka vienīgais temperatūras izmaiņu avots ir siltuma starojums. Tad bezdimensionāls siltuma pārnese vienādojums izskatās šādi [69]:

$$\frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \tilde{z}^2} = \tilde{q}_{\text{rad}} = \text{Bi} \tilde{T}^4, \quad \text{Bi} = \frac{\varepsilon_s \sigma_{\text{SB}} T_0^3 R_C}{\lambda}, \quad (3.7)$$

kur T_0 ir kušanas temperatūra, $\tilde{T} = T/T_0$ ir bezdimensionāla temperatūra, $\tilde{z} = z/R_C$ ir bezdimensionāla vertikālā koordināte, \tilde{q}_{rad} ir bezdimensionāla siltuma plūsma caur kristāla sānu virsmu, Bi ir Biota skaitlis, $\varepsilon_s = 0.46$ ir cietā silīcija emisivitāte, $\sigma_{\text{SB}} = 5.67 \text{ W/m}^2\text{K}^4$ ir Stefana-Boltzmana konstante, un R_C ir kristāla rādiuss. Šā uzdevuma robežnosacījumi ir $\tilde{T}|_{z=0} = 1$ uz kristalizācijas frontes un $\left. \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \right|_{z=\infty} = 0$ tālu no frontes. Tādā gadījumā atrisinājums ir

$$\tilde{T}(\tilde{z}) = \left(1 + \tilde{z} \sqrt{\frac{9}{5} \text{Bi}} \right)^{-\frac{2}{3}}, \quad (3.8)$$

no kura seko bezdimensionāla siltuma plūsma uz kristalizācijas frontes $\tilde{q}_{\text{kris}} = \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tilde{z}} = \sqrt{\frac{4}{5} \text{Bi}}$.

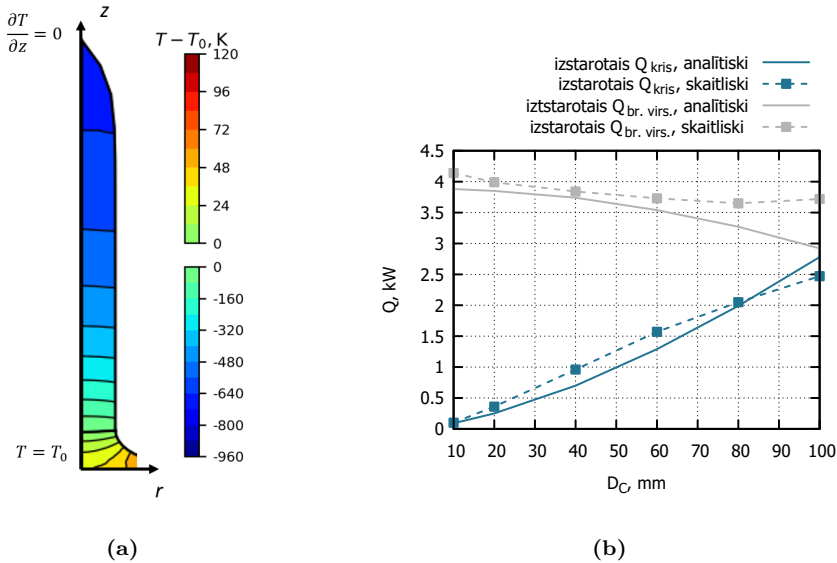
Tātad, dimensionāla integrālā siltuma plūsma ir

$$Q_{\text{kris}} = \tilde{q}_{\text{kris}} \cdot \frac{\pi R_C^2 \lambda T_0}{R_C} = \sqrt{\frac{4}{5} \text{Bi}} \cdot \pi R_C \lambda T_0. \quad (3.9)$$

Analītiski iegūtais Q_{kris} ir attēlots Att. 3.36.(b) ar zilo nepārtrauktu līniju. Tas daļēji atbilst skaitlisko aprēķinu rezultātiem, kas parādīti ar zilo raustīto līniju. Atšķirības, iespējams, rodas kristāla rādiusa palielināšanās dēļ, kas 1D aproksimāciju padara mazāk precīzu, jo kristāla garums šajos aprēķinos netiek mainīts. Vēl viens iespējams atšķirību skaidrojums ir emisivitātes izmaiņas atkarībā no temperatūras.

Var mēģināt arī analītiski novērtēt siltuma zudumus no brīvās virsmas kā $Q_{\text{br. virs.}} \sim \varepsilon_l \sigma_{\text{SB}} \cdot T_0^4 \cdot \pi (R_P^2 - R_C^2)$ (viendabīgs starojums no laukuma, kas vienāds ar starpību starp pjedestāla un kristāla šķērsriezuma laukumiem, kur šķidrā silīcija emisivitātes koeficients $\varepsilon_l = 0,27$). Tomēr šis

vienkāršojums neņem vērā ne AF induktora klātbūtni, ne kausējuma virsmas formu, tāpēc tas nav lietderīgs sistēmām ar lielu D_C , kā parādīts Att. 3.36.(b) ar pelēkām līnijām. Tas nozīmē, ka analītiskie novērtējumi nav pietiekami precīzi, lai prognozētu sistēmas uzvedību, palielinoties D_C , un eksperimentu plānošanai un realizācijai ir svarīgi izmantot skaitlisko modelēšanu.



Att. 3.36. Temperatūras lauks kristālā ar diametru $D_C = 10$ mm (a), kas pamato 1D tuvinājumu $T(z)$, un salīdzinājums starp analītiski novērtēto un skaitliski modeļoto integrālo izstaroto jaudu Q (b) no kristāla sānu malas Q_{kris} un no kausējuma brīvās virsmas $Q_{br. virs.}$.

4 Secinājumi

Šajā darbā pirmo reizi ir skaitliski modelētas fāžu robežas un kausējuma plūsma silīcija kristālu audzēšanai ar pjestāla metodi. Zemāk ir izklāstīti darba secinājumi, kas sakārtoti atbilstoši darba uzdevumiem un darba mērķim no 1.5. apakšnodaļas.

Darba uzdevumi ir izpildīti:

1. Pjestāla metodes modelēšanas programmatūra tika izstrādāta, balstoties uz peldošās zonas metodes modelēšanas programmatūru. Galvenā programma ietver elektromagnētiskā lauka un fāžu robežu formas modelēšanu, bet atsevišķiem gadījumiem veikti arī kausējuma plūsmas aprēķini.
2. Saskaņā ar eksperimentālās iekārtas attīstību *KEPP EU* uzņēmumā, uzlabota arī modelēšanas programma: sākumā pievienojot pjestālu sānu sildīšanu vienkāršotajā veidā (kā homogēnu siltuma plūsmu uz virsmas), pēc tam izveidojot precīzāku vidējās frekvences lauka modeli.
3. Veikta programmas verifikācija, salīdzinot ar pieejamiem eksperimenta datiem. Šis darba uzdevums ir izpildīts tikai daļēji, jo eksperimentālie dati bija pieejami tikai no viena audzēšanas procesa. Tas traucē izdarīt secinājumu par to, vai atšķirības līdz 4 mm starp eksperimentāli noteikto un skaitliski modelēto kušanas frontes formu ir nozīmīgas, salīdzinot ar eksperimentālo datu izkliedi.
4. Tika izstrādāts un izmantots optimizācijas algoritms, kas pielāgo augstfrekvences induktora formu, izmantojot gradienta metodi, un ļauj uzlabot kausējuma augstumu dažādiem kristālu diametriem. Modelēšanas rezultātā iegūti optimālie induktora parametri kristāliem ar diametriem 36, 60, 90 un 100 mm.

Darba mērķis ir sasniegts: skaitliskie modeļi parādīja, ka ir iespējama silīcija kristālu ar diametru 100 mm audzēšana ar pjestāla metodi. Tas ir iespējams, ja tiek izmantota pjestāla sānu sildīšana un papildu brīvās virsmas sildīšana. ERAF projektu ietvaros rūpnieciskie partneri *KEPP EU* regulāri aplūkoja modelēšanas rezultātus un izmantoja tos eksperimentu plānošanā. Projektu laikā rūpniecisko partneru audzēto kristālu diametrs sasniedza 35 mm, kas tuvojas literatūrā atrodamajām robežām.

Tēze: modelēšanas rezultāti apstiprina, ka ir iespējams izaudzēt lielus (100 mm diametrā) silīcija kristālus, ja tiek veikti uzlabojumi pjedestāla procesā. Galvenās problēmas ir kausējuma centra sasaldšana un kausējuma izlīšana, brīvajai virsmai pārkaroties pāri pjedestāla malai. Nepieciešamie uzlabojumi ir pjedestāla sānu sildīšana ar vidējās frekvences induktoru un papildu brīvās virsmas sildīšana konusa fāzes sākumā. Šo apgalvojumu apstiprina vairākas aprēķinu sērijas. Augstfrekvences induktora optimizācijas algoritms, kas ņem vērā gan kausējuma augstumu, gan kausējuma meniska leņķi, ļāva iegūt stabilu izkausēto zonu 100 mm kristālu audzēšanai no 200 mm pjedestāla. Lai vēl vairāk uzlabotu zonas stabilitāti, ir jāpalielina pjedestāla diametrs, piemēram, līdz 250 mm.

Analizējot darba rezultātus, tika iegūtas arī citas atziņas:

- Aprēķini parādīja, ka eksperimentiem labvēlīgākas ir augstas frekvences, jo pie tām induktora strāva ir mazāka un kausējuma kustība – mazāk intensīva.
- Kausējuma plūsmas aprēķini ar šķidrums tilpuma (*volume of fluid*) metodi liecināja, ka, ņemot vērā kausējuma konvekciju, tiek iegūta ievērojami dziļāka kušanas fronte.
- Induktora optimizācijas aprēķini paredz, ka induktoram jābūt horizontālam vai ar nelielu slīpumu “uz iekšu”, novietotam aptuveni 10 mm virs ETP, bet pārējie tā parametri ir apkopotī Tab. 3.3.. Ja daži induktora parametri bija turēti nemainīgi, tas būtiski neietekmēja optimizācijas rezultātus.
- Lai uzlabotu procesa stabilitāti un padarītu 100 mm kristālu audzēšanu iespējamu, ir nepieciešama pjedestāla sānu sildīšana. Tomēr pat sānu sildīšana nav pietiekama pašā procesa sākumā un konusa fāzē ar maziem kristālu diametriem. Tāpēc konusa fāzes daļā, kurā kristāla diametrs ir mazāks par 60 mm, ir nepieciešama papildu brīvās virsmas sildīšana (piemēram, ar infrasarkanajām lampām), un tās maksimālā vērtība ir aptuveni 500 W.

5 Atsauces

Darba autora publikācijas, piemēram [Dis2], ir apkopotas 1.7. apakšnodaļā.

- [1] P. Müller, “Press information from 03/09/2020,” tech. rep., Siltronic AG, 2020.
- [2] N. V. Abrosimov, A. Lüdge, H. Riemann, and W. Schröder, “Lateral Photovoltage Scanning (LPS) Method for the Visualization of the Solid-Liquid Interface of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Single Crystals,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 237, no. 1, pp. 356–360, 2002.
- [3] A. Lüdge, H. Riemann, B. Hallmann-Seiffert, A. Muiznieks, and F. Schulze, “Rotationless floating zone crystal growth,” in *ECS Transactions*, ECS, 2006.
- [4] G. Dhanaraj and K. Byrappa, “Crystal Growth Techniques and Characterization: An Overview,” in *Springer Handbook of Crystal Growth* (G. Dhanaraj, K. Byrappa, V. V. Prasad, and M. Dudley, eds.), ch. 1, pp. 3–15, Springer-Verlag, 2010.
- [5] I. Milisavljevic and Y. Wu, “Current Status of Solid-state Single Crystal Growth,” *BMC Materials*, vol. 2, no. 2, 2018.
- [6] T. Teubner, T. Boeck, and K. Schmidt, “Modelling of Solution Growth of Silicon from Small Indium Droplets – Homogeneous Nucleation,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 198, no. 1, pp. 425–429, 1999.
- [7] M. E. Jones and D. W. Shaw, “Growth from the vapor,” in *Changes of State* (N. B. Hannay, ed.), pp. 283–323, Springer US, 1975.
- [8] Chemistry LibreTexts, “7.10: Semiconductor Grade Silicon.” <https://chem.libretexts.org/@go/page/212899>, retrieved December 23, 2021.
- [9] A. Franzosi, L. Giarda, and L. Pelosini, “Process of Deposition of Single Crystal Silicon Directly from the Vapour Phase,” tech. rep., Commission of the European Communities, 2019.
- [10] National Center for Biotechnology Information, “PubChem Compound Summary for CID 23953, Silane.” <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Silane>, retrieved October 6, 2021.
- [11] A. Daw, D. Pal, and M. Kowar, “Modelling of Epitaxial Growth Rate of Silicon by Vapour Phase Epitaxy,” *Microelectronics Journal*, vol. 21, no. 5, pp. 29–39, 1990.

- [12] National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce, “NIST Chemistry WebBook, SRD 69, Silicon.” <https://webbook.nist.gov/cgi/inchi?ID=C7440213>, retrieved October 15, 2021.
- [13] H. J. Scheel, *Crystal Growth Technology*. John Wiley & Sons Ltd., 2003.
- [14] M. Arzakantsyan, N. Ananyan, V. Gevorgyan, and J.-C. Chanteloup, “Growth of Large 90 mm Diameter Yb:YAG Single Crystals with Bagdasarov Method,” *Opt. Mater. Express*, vol. 2, no. 9, pp. 1219–1225, 2012.
- [15] P. S. Dutta, “Bulk Crystal Growth of Ternary III–V Semiconductors,” in *Springer Handbook of Crystal Growth* (G. Dhanaraj, K. Byrappa, V. V. Prasad, and M. Dudley, eds.), ch. 10, pp. 281–321, Springer-Verlag, 2010.
- [16] K. Kakimoto, “Czochralski Silicon Single Crystals for Semiconductor and Solar Cell Applications,” in *Springer Handbook of Crystal Growth* (G. Dhanaraj, K. Byrappa, V. V. Prasad, and M. Dudley, eds.), ch. 8, pp. 231–241, Springer-Verlag, 2010.
- [17] S. Meroli, “Czochralski Process vs Float Zone: Two Growth Techniques for Mono-crystalline Silicon.” https://meroli.web.cern.ch/lecture_silicon_floatzone_czochralski.html, retrieved December 23, 2021.
- [18] H. Riemann, N. V. Abrosimov, J. Fischer, and M. Renner, “Method and apparatus for producing single crystals composed of semiconductor material,” in *European Patent Office*, 2011. <https://patents.google.com/patent/EP2504470A1/en>.
- [19] K. Dadzis, R. Menzel, U. Juda, K. Irmscher, C. Kranert, M. Müller, M. Ehrl, R. Weingärtner, C. Reimann, N. Abrosimov, and H. Riemann, “Characterization of Silicon Crystals Grown from Melt in a Granulate Crucible,” *Journal of Electronic Materials*, vol. 49, pp. 5120–5132, 2020.
- [20] H. A. Dabkowska and A. B. Dabkowski, “Crystal Growth of Oxides by Optical Floating Zone Technique,” in *Springer Handbook of Crystal Growth* (G. Dhanaraj, K. Byrappa, V. V. Prasad, and M. Dudley, eds.), ch. 12, pp. 367–386, Springer-Verlag, 2010.
- [21] P. H. Keck and M. J. E. Golay, “Crystallization of Silicon from a Floating Liquid Zone,” *Physical Review*, vol. 89, pp. 1297–1297, 1953.
- [22] L. Altmannshofer, M. Grundner, J. Virbulis, and J. Hage, “A Material Innovation for the Electronic Industry: Float Zone Single Crystal Silicon With 200 mm Diameter,” in *ISPSD’03. IEEE 15th International Symposium on Power Semiconductor Devices and ICs*, pp. 325–328, IEEE, 2003.
- [23] W. C. Dash, “Silicon Crystals Free of Dislocations,” *Journal of Applied Physics*, vol. 29, p. 736, 1958.
- [24] A. Borghesi, M. Geddo, and G. Guizzetti, “Characterization of Impurities in Silicon by IR Spectroscopy,” *Helvetica Physica Acta*, vol. 62, pp. 6–7, 1989.

- [25] M. Wünscher, A. Ludge, and H. Riemann, “Crucible-free Crystal Growth of Silicon and Germanium – Numerical Simulation and Check by Experiments,” in *Modelling for Electromagnetic Processing*, pp. 97–102, 2008.
- [26] J. Bernreuter, “Solar-Grade Silicon: Expensive and in Short Supply,” *Sun & Wind Energy*, vol. 1, pp. 76–83, 2005.
- [27] T. Sudo, T. Yosijoka, K. Suzuki, and S. Yamazaki, “Method of Manufacturing Granulated Silica Powder, Method of Manufacturing Vitreous Silica Crucible,” in *European Patent Office*, 2012.
- [28] M. Wünscher, A. Lüdge, and H. Riemann, “Growth Angle and Melt Meniscus of the RF-heated Floating Zone in Silicon Crystal Growth,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 314, pp. 43–47, 2011.
- [29] H. Herzer, W. Hensel, and G. Matuszak, “Method for the Manufacture of Dislocation-free Monocrystalline Silicon Rods,” in *Google Patents*, 1988. <https://patents.google.com/patent/US4722764A/en>.
- [30] A. Kravtsov, “Development of Silicon Growth Techniques from Melt with Surface Heating,” *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 355, no. 1, 2018.
- [31] A. Kravtsov, “The Method of Growing Silicon Crystals and Device for its Implementation,” in *Google Patents*, 2018. <https://patents.google.com/patent/LV15452A/en>.
- [32] A. Kravtsov, K. Surovovs, and J. Virbulis, “Float Zone Single Crystals for Testing Rods, Pulled under Electron Beam Heating,” in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 503, 2019.
- [33] H. Riemann, N. Abrosimov, and N. Noetzel, “Doping of Silicon Crystals with Bi and other Volatile Elements by the Pedestal Growth Technique,” *ECS Transactions of the Electrochemical Society*, vol. 3, no. 4, pp. 53–59, 2006.
- [34] Silicon metallurgy company, “KEPP EU.” <http://keppeu.lv/en/>.
- [35] A. Kravtsov and G. Chikvaidze, “Experimental Verification of the Contamination Reduction of Silicon During Electron Beam Melting due to the Use of a Gas-dynamic Window,” *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, vol. 1100, no. 1, p. 012037, 2021.
- [36] A. Kravtsov, A. Shagun, and A. Kravtsov, “New Feedstock for C-Si Photovoltaics,” in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 77, 2015.
- [37] C.-W. Lan, C.-K. Hsieh, and W.-C. Hsu, *Czochralski Silicon Crystal Growth for Photovoltaic Applications*, pp. 25–39. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009.

- [38] A. Krauze, J. Virbulis, and A. Kravtsov, "Modeling Electron Beam Parameters and Plasma Interface Position in an Anode Plasma Electron Gun With Hydrogen Atmosphere," *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 355, no. 1, 2018.
- [39] W. C. Dash, "Growth of Silicon Crystals Free from Dislocations," *Journal of Applied Physics*, vol. 30, pp. 459–474, 1959.
- [40] W. C. Dash, "Improvements on the Pedestal Method of Growing Silicon and Germanium Crystals," *Journal of Applied Physics*, vol. 31, no. 4, pp. 736–737, 1960.
- [41] K. Kim, "Microdefects in Small-diameter Silicon Crystals Grown by the Pedestal Technique," *Journal of Applied Physics*, vol. 50, no. 1, p. 1135, 1979.
- [42] R. Gereth, "Growth of Silicon Bicrystals by the Dash Pedestal-Method," *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 109, no. 11, p. 1068, 1962.
- [43] W. Zulehner, "Historical Overview of Silicon Crystal Pulling Development," *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*, vol. 73, no. 1, pp. 7–15, 2000.
- [44] T. Ciszek and T. Wang, "Growth and Properties of Silicon Filaments for Photovoltaic Applications," in *Conference Record of the Twenty Sixth IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 1997.
- [45] W. von Ammon, Y. Gelfgat, L. Gorbunov, A. Mühlbauer, A. Muižnieks, Y. Makarov, J. Virbulis, and G. Müller, "Application of Magnetic Fields in Industrial Growth of Silicon Single Crystals," in *Proceedings of the 6th PAMIR Conference on Fundamental and Applied MHD*, vol. 42, pp. 427–444, 2006.
- [46] T. Ciszek, "Growth Of 40 mm Diameter Silicon Crystals By a Pedestal Technique Using Electron Beam Heating," *Journal of Crystal Growth*, vol. 12, pp. 281–287, 1972.
- [47] W. Zulehner and D. Huber, "Czochralski-Grown Silicon," in *Crystals* (H. C. Freyhardt, ed.), ch. 2, p. 3, Springer-Verlag, 1982.
- [48] S. Coriell and M. Cordes, "Theory of Molten Zone Shape and Stability," *Journal of Crystal Growth*, vol. 42, pp. 466–472, 1977.
- [49] C. E. Chang, "Computer Simulation of Convection in Floating Zone Melting: I. Pure Rotation Driven Flows," *Journal of Crystal Growth*, vol. 44, no. 2, pp. 168–177, 1978.
- [50] N. Kobayashi, "Computer Simulation of the Steady Flow in a Cylindrical Floating Zone Under Low Gravity," *Journal of Crystal Growth*, vol. 66, no. 1, pp. 63–72, 1984.

- [51] A. Mühlbauer, W. Erdmann, and W. Keller, “Electrodynamic Convection in Silicon Floating Zones,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 64, no. 3, pp. 529–545, 1983.
- [52] A. Mühlbauer, A. Muiznieks, J. Virbulis, A. Lüdge, and H. Riemann, “Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystals with the needle-eye technique,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 151, no. 1, pp. 66–79, 1995.
- [53] A. Mühlbauer, A. Muiznieks, and H.-J. Lessmann, “The Calculation of 3D High-Frequency Electromagnetic Fields During Induction Heating Using the BEM,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 29, no. 2, pp. 1566–1569, 1993.
- [54] G. Ratnieks, A. Muiznieks, L. Buligins, G. Raming, A. Mühlbauer, A. Lüdge, and H. Riemann, “Influence of the Three Dimensionality of the HF Electromagnetic Field on Resistivity Variations in Si Single Crystals During FZ Growth,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 216, no. 1, pp. 204–219, 2000.
- [55] R. Menzel, H. Riemann, and N. Abrosimov, “Numerical Model for Si Single Crystal Growth From Melt in a Si Granular Bed,” in *Modelling for Electro-magnetic Processing*, pp. 465–469, 2014.
- [56] K. Dadzis, R. Menzel, M. Ziem, T. Turschner, H. Riemann, and N. Abrosimov, “High-frequency Heat Induction Modeling for a Novel Silicon Crystal Growth Method,” in *Modelling for Materials Processing*, pp. 31–36, 2017.
- [57] K. Dadzis, R. Menzel, H. Riemann, and N. Abrosimov, “Development of the Granulate Crucible Method for Growth of Large Silicon Crystals,” in *Proceedings of CSSC-10*, 2018.
- [58] M. Lorenz-Meyer, R. Menzel, K. Dadzis, A. Nikiforova, and H. Riemann, “Lumped Parameter Model for Silicon Crystal Growth from Granulate Crucible,” *Crystal Research and Technology*, vol. 55, p. 2000044, 2020.
- [59] FEMAG S.A., Belgium, “FEMAG/FZ software.” <https://www.femagsoft.com/products/femag-fz.html>, retrieved January 30, 2022.
- [60] M. Andreetta and A. Hernandez, “Laser-Heated Pedestal Growth of Oxide Fibers,” in *Springer Handbook of Crystal Growth* (G. Dhanaraj, K. Byrappa, V. V. Prasad, and M. Dudley, eds.), ch. 13, pp. 393–419, Springer-Verlag, 2010.
- [61] M. Wunscher, A. Lüdge, and H. Riemann, “Crucible-free Pulling of Germanium Crystals,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 318, pp. 1039–1042, 2011.
- [62] G. Ratnieks, A. Muiznieks, and A. Mühlbauer, “Modelling of Phase Boundaries for Large Industrial FZ Silicon Crystal Growth with the Needle-eye Technique,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 255, pp. 227–240, 2003.
- [63] K. Lācis, *3D Mathematical Modeling of Influence of Magnetic Fields on Melt Flow in Floating Zone Crystal Growth Process*. PhD thesis, University of Latvia, Riga, Latvia, 2010.

- [64] P. Dular and C. Geuzaine, “A general environment for the treatment of discrete problems.” <http://getdp.info/>.
- [65] S. Fan, G. Plascencia, and T. Utigard, “High Temperature Electric Conductivity of Pure Silicon,” *Canadian Metallurgical Quarterly*, vol. 47, no. 4, pp. 509–512, 2008.
- [66] W. Keller and A. Mühlbauer, *Floating-Zone Silicon*. Marcel Dekker, Inc., 1981.
- [67] D. Meeker, “MathFEMM – The Mathematica Interface to FEMM 4.2.” <https://www.femm.info/Archives/doc/mathfemm.pdf>.
- [68] G. Ratnieks, A. Muižnieks, A. Mühlbauer, and G. Raming, “Numerical 3D Study of FZ Growth: Dependence on Growth Parameters and Melt Instability,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 230, pp. 48–56, 2001.
- [69] J. Virbulis, *Numerische Simulation der Phasengrenzen und Schmelzenströmung bei der Züchtung von Siliziumeinkristallen mit dem Floating-Zone Verfahren*. PhD thesis, University of Latvia, Riga, Latvia, 1997.

Pateicības

Vislielāko pateicību izsaku savam promocijas darba vadītājām Jānim Virbulim, kas vadīja un palīdzēja visos šā darba tapšanas posmos. Esmu pateicīgs par iespējām strādāt ERAF un citos projektos, par programmatūras attīstības koordinēšanu, par iespējām publicēties, par vērtīgiem piedāvājumiem un labojumiem. Vairāki izmantoti analītiskie novērtējumi ir bāzēti uz viņa pieredzi un iepriekšējo darbu. Šis promocijas darbs nebūtu iespējams bez viņa palīdzības un vadības.

Es gribu pateikties arī Andrejam Sabanskim, Armandam Krauzem un Matīsam Plātem. Viņi papildināja galveno aprēķinu programmu, kas bija sākotnēji paredzēta PZ metodes modelēšanai, ar kodu, kas nepieciešams pjedestāla metodes modelēšanai. Esmu pateicīgs Andrejam un Matīsam par atbildēm uz jautājumiem un par citu palīdzību darba rakstīšanā. Paldies visiem kolēģiem no Skaitliskās Modelēšanas Institūta Pusvadītāju Tehnoloģiju Laboratorijas: Daģim Danielam Vidulejam, Maksimam Surovovam, Valtam Liepiņam, Krišjānim Kalmem, Kristeram Kokaram. Izsaku pateicību Anatolijam Kravcovam no kompānijas *KEPP EU* par kristālu audzēšanas eksperimentu veikšanu, par sadarbību ERAF projektos, par palīdzību publikāciju rakstīšanā.

Par finansiālo atbalstu esmu pateicīgs projektam "LU doktorantūras kapacitātes stiprināšana jaunā doktorantūras modeļa ietvarā" – Latvijas Universitāte, Līguma Nr. 8.2.2.0/20/I/006.

Esmu dziļi pateicīgs Vikai par mīlestību un atbalstu.