Šis darbs izstrādāts Latvijas Universitātē ar Eiropas Reģionālās attīstības fonda atbalstu projektā Nr. 2013/0051/2DP/2.1.1.1.0/13/APIA/VIAA/009



IEGULDĪJUMS TAVĀ NĀKOTNĒ

#### Struktūru veidošanās silīcija kausēšanā ar AF EM lauku peldošās zonas procesā

Kristaps Bergfelds, Jānis Virbulis, Armands Krauze

Latvijas Universitātes 72. zinātniskā konference LU Fizikas un matemātikas fakultāte, Zeļļu iela 8, Rīga 30.02.2014.

# Modelētās problēmas apraksts



**Att. 1:** Peldošās zonas (PZ) procesa fotogrāfija, kurā redzama nestabilas formas polikristāla kušanas frontes virsma<sup>1</sup>.

1 – **Thierry Duffar**, editor. *Crystal Growth Processes Based on Capillarity: Czochralski, Floating Zone, Shaping and Crucible Techniques.* Wiley-Blackwell, 2010.

#### Modelētās problēmas apraksts



## **Att. 2:** Gredzenveida struktūras uz silīcija plāksnes, kas novietota zem AF induktora<sup>2</sup>.

2 – **Helge Riemann et al.** Silicon floating zone process: Numerical modeling of RF field, heat transfer, thermal stress, and experimental proof for 4 inch crystals. *Journal of The Electrochemical Society*, 142(3):1007–1014, 1995.

## Modelētās problēmas apraksts

- Stabila PZ procesa nodrošināšanai nepieciešams izprast procesus, kas nosaka kušanas frontes formu.
- Pastāv uzskats, ka frontes formu nosaka kausējuma plūsmas īpašības<sup>1</sup>.
- Turpretim šī darba ietvaros tiek izvirzīta hipotēze, ka nestabilitāšu veidošanās ir saistīta ar inducēto strāvu koncentrēšanos kausējuma apgabalos.
- Cēlonis ir elektrovadītspējas  $\sigma$  un skinslāņa biezuma  $\delta$  atšķirības cietā un šķidrā silīcijā.
  - cietam:  $\sigma = 5.0 \cdot 10^4 \,\text{S/m}$   $\delta = 1.30 \,\text{mm}$
  - šķidram:  $\sigma = 1,2 \cdot 10^6 \,\text{S/m}$   $\delta = 0,27 \,\text{mm}$

1 – **Thierry Duffar**, editor. *Crystal Growth Processes Based on Capillarity: Czochralski, Floating Zone, Shaping and Crucible Techniques.* Wiley-Blackwell, 2010.



Att. 3: Modelētā apgabala shēma un galvenie matemātiskā modeļa elementi.



**Att. 4:** Aprēķinu algoritms, kas realizēts ar programmu paketes *GNU Octave* palīdzību.

#### Matemātiskā modeļa izveide

• Fāžu lauka aprēķins<sup>3</sup>

$$f_{\rm c} = \begin{cases} 0 & \text{if } T > T_0 + \frac{\Delta T_{\rm s}}{2} \\ \frac{T_0 + \frac{\Delta T_{\rm s}}{2} - T}{\Delta T_{\rm s}} & \text{if } T \ge T_0 - \frac{\Delta T_{\rm s}}{2} \\ 1 & \text{if } T < T_0 - \frac{\Delta T_{\rm s}}{2} \end{cases} \text{ and } T \le T_0 + \frac{\Delta T_{\rm s}}{2} \end{cases}$$

Temperatūras lauka aprēķins

$$\left(\rho c_p - L \frac{\mathrm{d} f_c}{\mathrm{d} T}\right) \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + q_{\mathrm{EM}}$$
$$\frac{\varepsilon \sigma_{\mathrm{SB}} T^4}{\lambda} = \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=5\,\mathrm{mm}} \qquad 0 = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0\,\mathrm{mm}} \qquad 0 = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=5\,\mathrm{mm}}$$

3 – I. Steinbach et al. Numerical simulations for silicon crystallization processes — examples from ingot and ribbon casting. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 72(1–4):59–68, 2002.

#### Matemātiskā modeļa izveide

Magnētiskā lauka vektorpotenciāls

$$\Delta \vec{A} - i\omega \sigma \mu \vec{A} = 0 \qquad 0 = A_z \big|_{y=0\,\mathrm{mm}} \qquad k_I = A_z \big|_{y=10\,\mathrm{mm}}$$

• Strāvas blīvums, siltuma avoti, magnētiskais lauks

$$j_z = -i\sigma\omega A_z$$
  $q = \frac{|j_z|^2}{\sigma}$   $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z) = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y}, -\frac{\partial A_z}{\partial x}, 0\right)$ 

Lorenca spēku blīvums

$$\overline{f_x} = -\frac{1}{2}\Re(j_z)\Re(B_y) - \frac{1}{2}\Im(j_z)\Im(B_y)$$
$$\overline{f_y} = \frac{1}{2}\Re(j_z)\Re(B_x) + \frac{1}{2}\Im(j_z)\Im(B_x)$$





**Att. 5:** Sākuma un robežu nosacījumu shēma aprēķiniem bez sākotnējas temperatūras lauka perturbācijas.

#### Aprēķinu rezultāti ar vienmērīgu sākotnējo temperatūras lauka sadalījumu



**Att. 6:** Dažādos laika brīžos aprēķinātie temperatūras lauki. Ar melnu līniju iezīmēta fāžu robeža starp cieto un šķidro silīciju.







Att. 7: Sākuma un robežu nosacījumu shēma aprēķiniem ar sākotnējas temperatūras lauka perturbācijas.

# Aprēķinu rezultāti ar sākotnējā temperatūras lauka perturbāciju



Att. 8: Dažādos laika brīžos aprēķinātie temperatūras lauki. Ar biezu melnu līniju iezīmēta fāžu robeža starp cieto un šķidro silīciju, bet ar šaurām melnām līnijām magnētiskā lauka vektorpotenciāla izolīnijas.

## Aprēķinu rezultāti ar abpusēju apgabala siltumstarojumu



**Att. 9:** Sākuma un robežu nosacījumu shēma aprēķiniem ar abpusēju apgabala siltumstarojumu.

# Aprēķinu rezultāti ar abpusēju apgabala siltumstarojumu



Att. 10: Dažādos laika brīžos aprēķinātie temperatūras lauki. Ar biezu melnu līniju iezīmēta fāžu robeža starp cieto un šķidro silīciju, bet ar šaurām melnām līnijām magnētiskā lauka vektorpotenciāla izolīnijas.

# Lorenca spēka ietekme uz kausējuma pilienu formu



**Att. 11:** Siltuma avotu un Lorencu spēka sadalījums modelētajā apgabalā aprēķiniem ar vienpusēju siltumstarojumu. Lielākā vektora garums ir  $|\vec{f}_{\rm max}| = 7,5 \cdot 10^5 \,\mathrm{N/m^3}$ . Krāsas atspoguļo siltuma avotus ar  $q_{\rm max} = 9,8 \cdot 10^9 \,\mathrm{W/m^3}$ . Parādītas arī fāžu robežas un vektorpotenciāla izolīnijas.

# Lorenca spēka ietekme uz kausējuma pilienu formu

• Lineāra Lorenca spēka blīvuma aprēķins

$$f_{\text{lin}} = \int_{L} \vec{f} \cdot \vec{dl} = \int_{y_1}^{y_2} f_y \cdot dy$$

• Nepieciešamais virsmas liekums

$$f_{\text{lin}} = k \cdot \gamma \qquad \Rightarrow \qquad k = \frac{f_{\text{lin}}}{\gamma} = \frac{110 \text{ N/m}^2}{0.88 \text{ N/m}} = 125 \text{ 1/m}$$
$$\frac{1}{k} = \frac{1}{125 \text{ 1/m}} = 8.0 \text{ mm}$$

Lorenca spēka ietekme uz kausējuma pilienu formu

 Lineārais Lorenca spēka sadalījums var tikt izmantots kausējuma brīvās virsmas formas aprēķiniem.



Att. 12: Lineārā Lorenca spēka sadalījums gar modelētā silīcija apgabala virsmu.

# Secinājumi

- Kristāla kušanas frontes formas nestabilitātes cēlonis ir EM lauka mijiedarbība ar divfāzu vidi.
- Kausējuma plūsma nav nepieciešama parādība šīs nestabilitātes novērošanai.
- Lorenca spēkiem kausējuma pilienos ir būtiska nozīme to formas veidošanā.
- Atrasti divi iespējami procesa režīmi stacionāru un nestacionāru struktūru veidošanās.

# Tālāka pētījumu norise

- Skaitlisko parametru ietekme uz aprēķinu rezultātu.
- Kausējuma pilienu brīvās virsmas formas aprēķins, aplūkojot kapilāro un Lorenca spēku līdzsvaru.
- Kausējuma aizplūšanas un kvazistacionāra kušanas procesa modelēšana
- Trīsdimensionāli aplūkotās problēmas modeļi. Tie iespējams aprakstītu papildus inducēto strāvu koncentrēšanos kausējuma apgabalu galos.