

Finansējuma saņēmēja nosaukums
Latvijas Universitāte

Īstenotā projekta nosaukums

**„Būtiski nestacionāru matemātisko modeļu sistēmas attīstīšana
pusvadītāju monokristālu audzēšanas rūpnieciskajiem procesiem”**

Īstenotā projekta Nr.

2013/0051/2DP/2.1.1.1.0/13/APIA/VIAA/009

Projekta LU reģistrācijas Nr.

ESS2013/146

Projekta zinātniskais vadītājs

Dr.-Phys., Jānis Virbulis

Atskaite par periodu 01.09.2014. – 31.12.2014.

Trešajā atskaites periodā tika pabeigta 1. aktivitāte, tika turpināts darbs pie 2. aktivitātes, kā arī uzsāktas 3. un 5. aktivitātes.

Atskaites periodā 1. aktivitātes ietvaros tika pabeigts izstrādāt modeļu konceptus būtiski nestacionāriem modeļiem. Sajūgtā fāzu lauka, elektromagnētiskā lauka un temperatūras lauka lokālā mēroga FZ kušanas frontes modelim tika pievienotas iespējas nestacionāru temperatūras un EM lauku uzdošanai. FZ 3D nestacionārajam kušanas frontes modelim, kurš ļaus aprakstīt laikā mainīgu un nesimetrisku polikristāla nokušanu, tika uzlabota plānās kārtiņas nokušanas un kausējuma transporta modelis. FZ 3D hidrodinamikas aprēķina modelis tika papildināts ar Lagranža piemaisījuma pārnese aprēķina metodi, kam ir vairākas priekšrocības salīdzinājumā ar Eilera koncentrācijas aprēķinu. Lokālā kristāla augšanas stabilitātes modelim, kurš pēta kristāla augšanas stabilitāti un dislokāciju veidošanos, arī tika pievienota iespēja laikā mainīga EM lauka uzdošanai, kā arī nehomogēna EM lauka uzdošanai uz apgabala robežām. Tika ieviesta iespēja rēķināt kristalizācijas procesa stabilitāti gan kristāla, gan laboratorijas atskaites sistēmā. Tika tālāk attīstīts modelis īpaši precīzai nestacionāra kristalizācijas procesa kontrolei, tika izveidotas bibliotēkas iekļaušanai FZoneT aprēķinu programmā, testēta algoritmu darbība. Tika izveidots 3D modelis mehānisko spriegumu aprēķinam Si kristālos atkarībā no kristalogrāfiskās orientācijas.

Darbs pie izstrādāto modeļu skaitliskajām metodēm tika turpināts 2. aktivitātes ietvaros, veicot skaitlisko metožu uzlabošanu esošajiem modeļiem un izveidošanu jaunajiem modeļiem vai jaunajām modeļu daļām. Tika turpināta skaitlisko metožu uzlabošana nestacionāro globālo aprēķina programmu FZ un CZ kristālu audzēšanas procesiem. Tika turpināts attīstīt skaitliskās metodes 3D nestacionārā kušanas frontes

modelim, uzlabojot plānās kausējuma filmas aprēķina stabilitāti un novēršot nestabilitātes, kas saistītas ar EM lauka, virsmas spraiguma un slānīša biezuma savstarpējo mijiedarbību. Tika turpināts uzlabot skaitliskās metodes sajūgtā fāzu lauka, elektromagnētiskā lauka un temperatūras lauka lokālā mēroga FZ kušanas frontes modelim, īpašu uzmanību pievēršot režģa ietekmei kristalizācijas frontes tuvumā, kur mainās visas materiālu īpašības, kā arī pētīta pārejas zonas biezuma un režģa izmēra savstarpējā mijiedarbība. Tika pētīta skaitliskā galīgo elementu režģa izmēra ietekme uz termiskajiem spriegumiem 3D aprēķinos ar dažādām kristāla orientācijām.

Kaut gan veicot modeļu un skaitlisko metožu attīstību, tiek regulāri veikti testa aprēķini, šajā atskaites periodā tika pievērsta īpaša uzmanība, kas atspoguļojas 3. aktivitātes „Modeļu verificācija un aprēķinu efektivitātes optimizācija” uzsākšanā. Veicot 3D nestacionāra polikristāla kušanas testa aprēķinus, kas pēc parametriem atbilst reālai kristālu audzēšanas iekārtai, modelis parādīja praksē novēroto kušanas frontes azimutālās nesimetrijas lielumu un labu kvalitatīvu atbilstību ar praksi visām modelī izmantotajām procesa parametru izmaiņām. Tika veikti salīdzinājumi ar eksperimentiem CZ audzēšanas procesa cilindriskajā daļā procesam ar sildītāja jaudas lēcieniem. Aprēķini parādīja ļoti labu sakritību ar eksperimentiem nelielā laika mērogā, taču ilglaicīgi vērojamā jaudas neatbilstības iemesli vēl jāturpina pētīt. CZ aprēķinu programmai tika paaugstināta efektivitāte paralelizējot starojuma siltuma pārneses aprēķinus.

Šajā atskaites periodā notika arī 5. aktivitātes darbu uzsākšanas plānošana.

3. atskaites periodā projekta rezultāti tika prezentēti konferencē MEP 2014, par jaunumiem attīstībā tika informēti esošie klienti. Divi referāti tika publicēti konferences rakstu krājumā. Par divu referātu tēmu tika izteikts aicinājums iesniegt rakstu žurnālā *Magnetohydrodynamics*.

Projekta zinātniskais vadītājs

Jānis Virbulis
Dr.phys., vad.pētnieks