

Finansējuma saņēmēja nosaukums
Latvijas Universitāte

Īstenotā projekta nosaukums
„Jaunas matemātiskās modelēšanas instrumentu sistēmas izstrāde funkcionālo nano- un mikroelektronikas pusvadītāju materiālu ražošanas tehnoloģijām”

Īstenotā projekta Nr.
2011/0002/2DP/2.1.1.1.0/10/APIA/VIAA/085

Projekta LU reģistrācijas Nr.
ESS2011/121

Projekta zinātniskais vadītājs
Dr.-Phys., asoc. prof. Andris Muižnieks

Atskaite par periodu 01.10.2011. – 31.12.2011.

Projekta ietvaros plānots izveidot papildinājumu ar nanomērogu, kinētiskiem un mikroskopiskiem modeļiem matemātiskās modelēšanas un programmu bāzes sistēmai (MMPBS), kas tiek izmantota funkcionālo un pusvadītāju materiālu ražošanas tehnoloģiju matemātiskajā modelēšanā un kas ir izstrādāta un implementēta programmu kompleksa veidā uz Fizikas un matemātikas fakultātes daudzprocesoru klastera. Tas ļaus analizēt gan tehnoloģisko procesu makroskopiskos, gan nanomērogu, kinētiskos un mikroskopiskos procesus, gan to savstarpējo saistību.

1. Konferences un semināri

Pārskata periodā tika sagatavoti un nolasīti 5 referāti starptautiskā zinātniskā seminārā “*Multiphysical Modelling in OpenFOAM*”, kas notika Rīgā 2011. g. 20. un 21. oktobrī un ko organizēja LU Vides un tehnoloģisko procesu matemātiskās modelēšanas laboratorija sadarbībā ar Hannoveres universitātes Elektrotehnoloģiju institūtu (Vācija). Tika publicētas arī šo referātu tēzes (katram 1 lpp.) semināra materiālu krājumā. Referātu autori un nosaukumi ir sekojoši:

1. A. Sabanskis, A. Muižnieks, A. Krauze. *Modeling of Argon flow in FZ silicon single crystal growth system using OpenFOAM.*

2. A. Krauze, A. Muižnieks, N. Jekabsons. *Modeling of turbulent melt flow in CZ silicon single crystal growth system using OpenFOAM.*

3. K. Janiselis, A. Muižnieks, K. Lācis. *Modeling of melt flow in FZ silicon single crystal growth system using OpenFOAM.*

4. K. Bergfelds, A. Muižnieks, A. Krauze. *Silicon melting in cold crucible heated with electron beam; modeling using OpenFOAM.*

5. V. Geža, A. Jakovičs, R. Milenkovic, S. Dementjev, R. Kapulla. *PIV Validation of OpenFOAM turbulence models for LIMETS Project water test section.*

Pārskata periodā sagatavoti, iesniegti un pieņemti 6 referāti LU zinātniskās konferences fizikas sekcijai, kas notiks 2012.g. 1. – 3. februārī:

1. D. Bosņaks, S. Spitāns, A. Jakovičs. *Siltuma un vielas pārnese modelēšana tipiskiem izgulsnējumu gadījumiem indukcijas kanālkrāsnīs.*

2. K. Bergfelds, A. Krauze, M. Plāte, A. Muižnieks, G. Čikvaidze. *Silīcija pārkausēšanas ar elektronu kūli matemātiskā modelēšana.*

3. K. Janisels, K. Lācis, A. Muižnieks. *Silīcija kausējuma hidrodinamikas peldošās zonas procesā trīsdimensionāla matemātiskā modelēšana.*

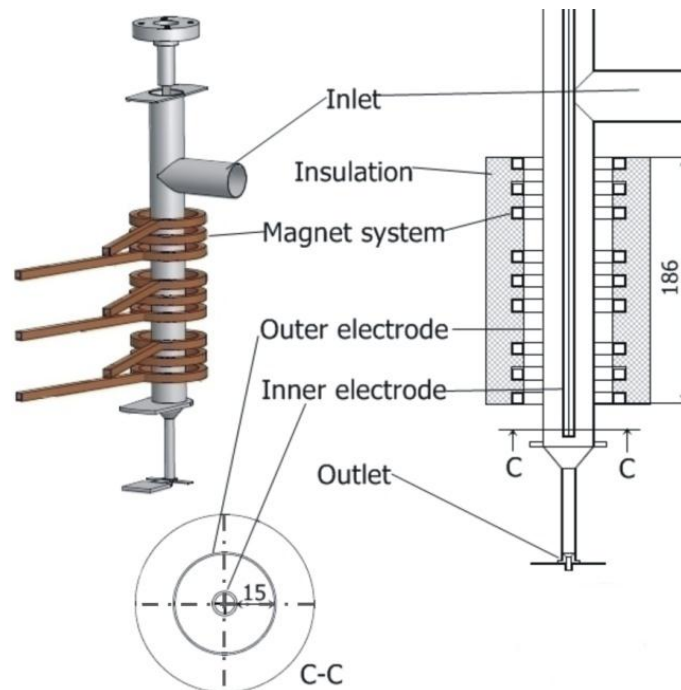
4. T. Dzenis, S. Gendelis, A. Jakovičs. *Telpu mikroklimate un norobežojošo konstrukciju multifizikāla modeļa izveide.*

5. A. Sabanskis, A. Krauze, A. Muižnieks. *Argona atmosfēras plūsmas matemātiskā modelēšana peldošās zonas iekārtām.*

6. V. Suškovs, M. Plāte, A. Muižnieks. *Kristalizācijas frontes ieliekuma silīcija monokristālu audzēšanas procesā atkarības no procesa parametriem matemātiskā modelēšana.*

2. Matemātiskie modeļi stiklveida materiālu elektromagnētiskās homogenizācijas tehnoloģijām

Stiklveida materiāliem lietojumiem modernajās tehnoloģijās izšķiroša loma ir to sastāva viendabīgumam. Mehānisko maisītāju lietojumi nav ilgtspējīgi un tie produktu var piesārņot, tādēļ tiek izstrādātas dažādas elektromagnētiskās maisīšanas tehnoloģijas – viens šādas iekārtas piemērs parādīts 1. attēlā.

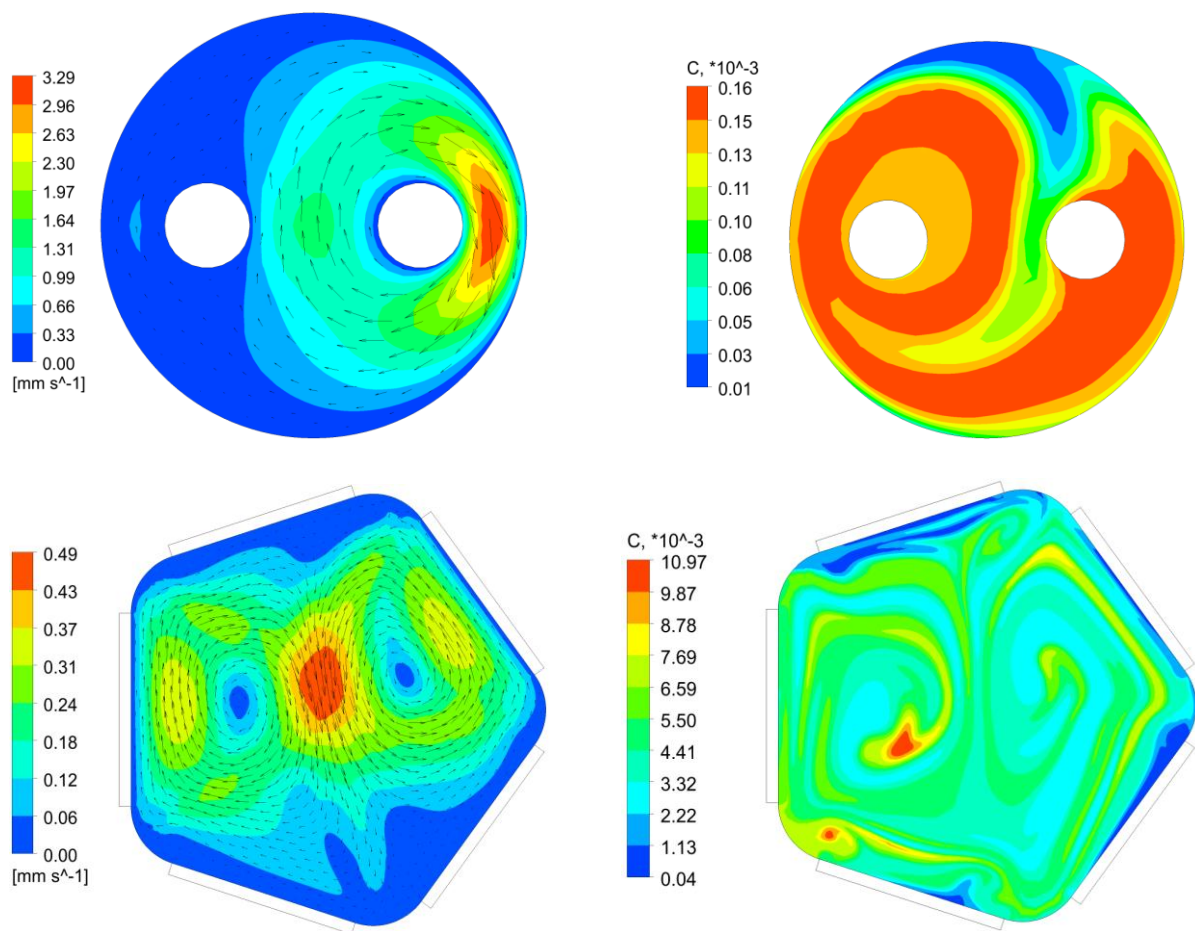


Att. 1. Stiklveida materiāla izvades iekārta no kausēšanas krāsns ar elektromagnētiskās maisīšanas sistēmu.

Tā kā stiklveida materiālu viskozitāte, elektrovadītspēja un siltuma vadītspēja ir būtiski atkarīgas no temperatūras, tad šādu homogenizācijas procesu aporakstam ir izveidots nestacionārs 3D multifizikāls modelis, kas iekļauj EM, termisko, hidrodinamisko un vielas pārnese procesu matemātisko aprakstu. Šis matemātiskais modelis tiek implementēts

komerciālās modelēšanas programmā ANSYS un dažādo fizikālo procesu mijiedarbības nodrošināšanai ir izveidoti veidoti papildus programmu bloki. Būtisks darbs veikts modeļa un izmantoto apakšmodeļu kvalitātes pārbaudei un skaitlisko efektu (režģi, aproksimācija u.c. faktori) ietekmes minimizēšanai.

Izmantojot izstrādāto modeli un salīdzinot skaitļošanas rezultātus ar eksperimentālajiem datiem verificēto aprēķinu metodiuku var veikt dažādu tehnoloģisko risinājumu izstrādi un to efektivitātes novērtējumu stiklveida materiālu homogenizācijai, līdz minimumam samazinot nepieciešamo eksperimentālo darbu apjomu un izmaksas. Izstrādne (modelis un metodika) potenciāli komercializējama arī citu materiālu tehnoloģiju pētījumiem, kur būtiska materiāla fizikālo īpašību atkarība no temperatūras, piem., dažādos oksīdu materiālos. Potenciālie interesenti, par inženierfizikālajiem rezultātiem, ko var iegūt izmantojot šo izstrādni, ir Ilmenau tehniskās universitātes un Leibniza Hannoveres universitātes materiālu un inženierzinātņu speciālisti.

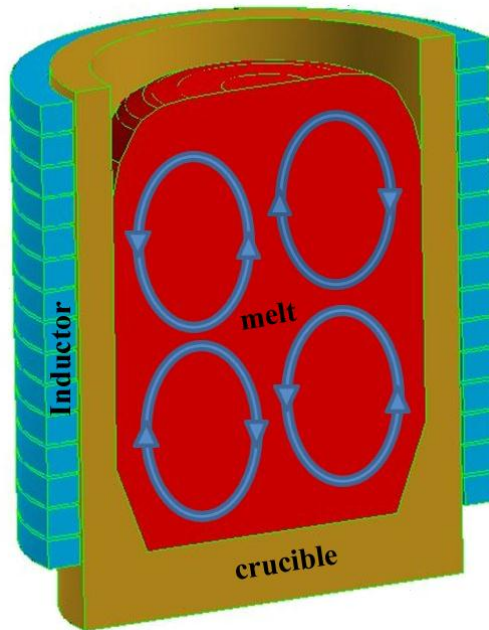


Att. 2. Ātrumu un koncentrācijas sadalījumu piemēri izvadkanāla šķērs griezumā divām dažādām kausējuma EM maisīšanas metodēm.

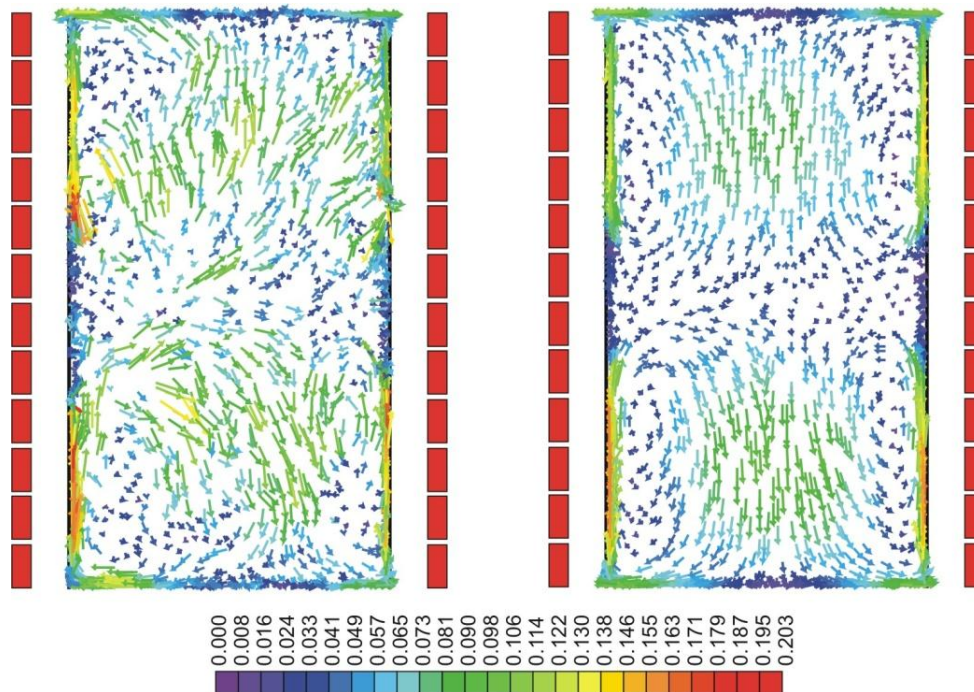
3. Matemātisko modeļi un OpenFOAM programmkomponentes nevadošu daļiņu dinamikas izpētei elektroavdošu šķidrums turbulentās plūsmās EM laukā

Kvalitatīvu metāla sakausējumu ar noteiktām mehāniskām īpašībām ražošanai būtiska ir to sastāva atbilstība markai un to viendabīgums. Galvenie to noteicošie faktori ir leģējošās piedevas, no ārpuses ienestie nevēlamie piemaisījumi, no iekārtas erodētais

materiāls un to sadalījums kausējuma tilpumā. Tādējādi elektromagnētiskās bezkontakta iedarbības metodes cieto daļiņu dinamikas izpētei un to sadalījuma vadībai ir efektīvi izmantojamas metālu kausēšanas tehnoloģisko iekārtu pilnveidošanai, t.sk. arī indukcijas tīģelkrāsnīs ar turbulentu recirkulatīvu kausējuma plūsmu (3. attēls).



Att. 3. Indukcijas tīģelkrāsns ar vidējotās kausējuma plūsmas līnijām shematisks attēlojums.



Att. 4. Momentānās un vidējotās turbulētās plūsmas ātrumu piemērs tīģelkrāsnīs vertikālā šķēlumā.

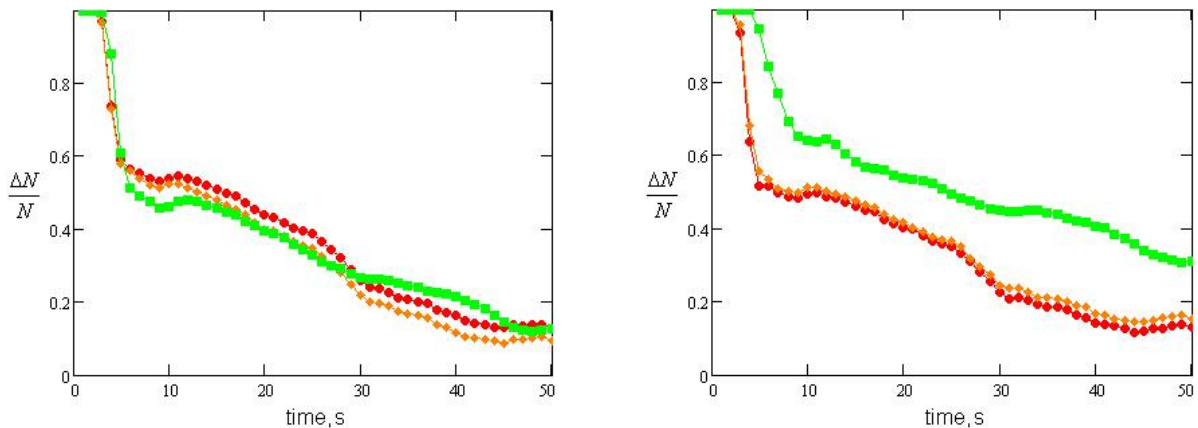
Izstrādāts multifizikāls matemātiskais modelis EM spēku izraisītās turbulentās plūsmas un cieto daļiņu pārnesei aprēķinam šāda veida iekārtās, izmantojot lielo virpuļu metodes pieeju (LES) plūsmas (4. attēls) un Lagranža pieeju

$$\frac{1}{m} \mathbf{F} = \frac{1}{2} \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{d(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}{dt} + \frac{d\mathbf{u}_f}{dt} + \frac{18\nu}{d^2} \frac{\rho_f}{\rho_p} \cdot (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p) + \frac{9}{d} \cdot \left(\frac{\nu}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\rho_p} \cdot \int_0^t \frac{d(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}{d\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}$$

daļiņu kustības aprakstam. Modeļa skaitliskai realizācijai paralelizējot aprēķinus uz datoru klastera adaptētas gan esošās OpenFOAM programmu komponentes, gan izveidoti vairāki jauni programmu moduļi.

Pabeigts darbs pie sfēriskās elektronevadošu daļiņu kustības modeļa EM ierosinātā turbulentā šķidro metālu plūsmā. Lagranža pieejas ietvaros tika statistiski pamatota EM, bīdes (jeb pretestības), cēlāj- (jeb Arhimeda), nobīdes (jeb Bernulli), paātrinājumu un pievienotās masas spēku nozīmība. Veikta spēku un to koeficientu dažādu aproksimāciju statistiskā analīze cilindriskās tīģelkrāsns plūsmā. Veikti izveidotā nelineārā Lagranža vienādojuma atrisinājuma konverģences skaitliskie pētījumi. Attiecīgais algoritms tika programmēts izmantojot un papildinot atvērtā koda OpenFOAM programmu bibliotēku. Veicot aprēķinus un salīdzinot iegūtos daļiņu un plūsmas ātrumu spektrus tika secināts, ka daļiņu daudzuma svārstību spektrs viduszonā liela mēra sakrīt ar plūsmas ātrumu spektru. Šī sakritība vidējās frekvencēs netieši verificē daļiņu pārnesei modeli.

Teorētiski tika izveidoti un pētīti turbulento sadursmju izraisītās un ar difūziju limitētas daļiņu augšanas modeļi, kā arī veikti aprakstīto procesu lomas novērtējumi industriālajās kanālkrāsnīs un uzsākta atbilstoša programmu koda izveide.

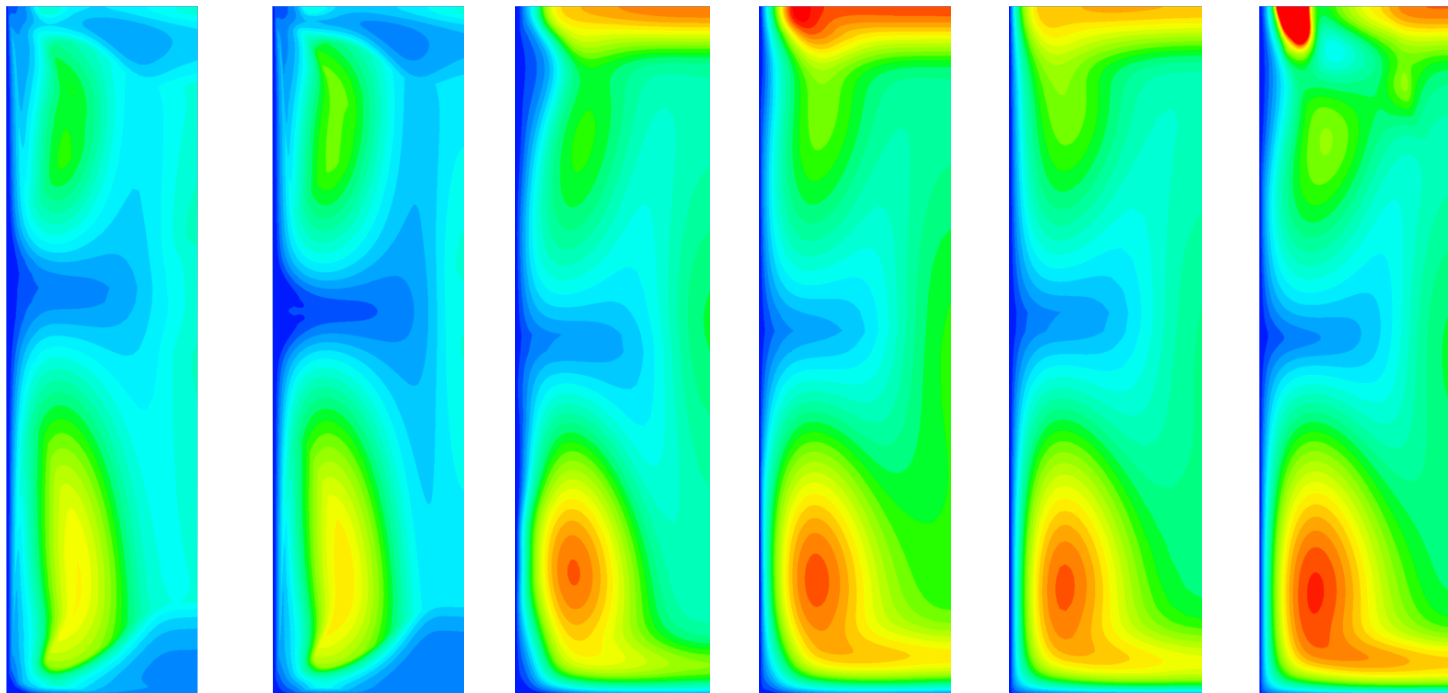


Att. 5. Piemaisījumu koncentrāciju relatīvā disbalansa izmaiņas tīģeļa augšējā un apakšējā zonā laikā atšķirīgām daļiņu un kausējuma blīvuma attiecībām pie dažādiem daļiņu izmēriem.

Izveidotie modeļi, aprēķinu metodika un programmatūra OpenFOAM vidē rada priekšnosacījumus detalizētām inženierfizikālām kausējuma sastāva un tā izmaiņu dinamikas studijām (piem., 5. attēls), kuru potenciālais pasūtītājs ir uzņēmums ABP (Dortmunde, Vācija).

4. Matemātiskie modeļi un skaitliskās metodikas siltuma apmaiņas intensifikācijas izpētei indukcijas kausēšanas krāsnīs

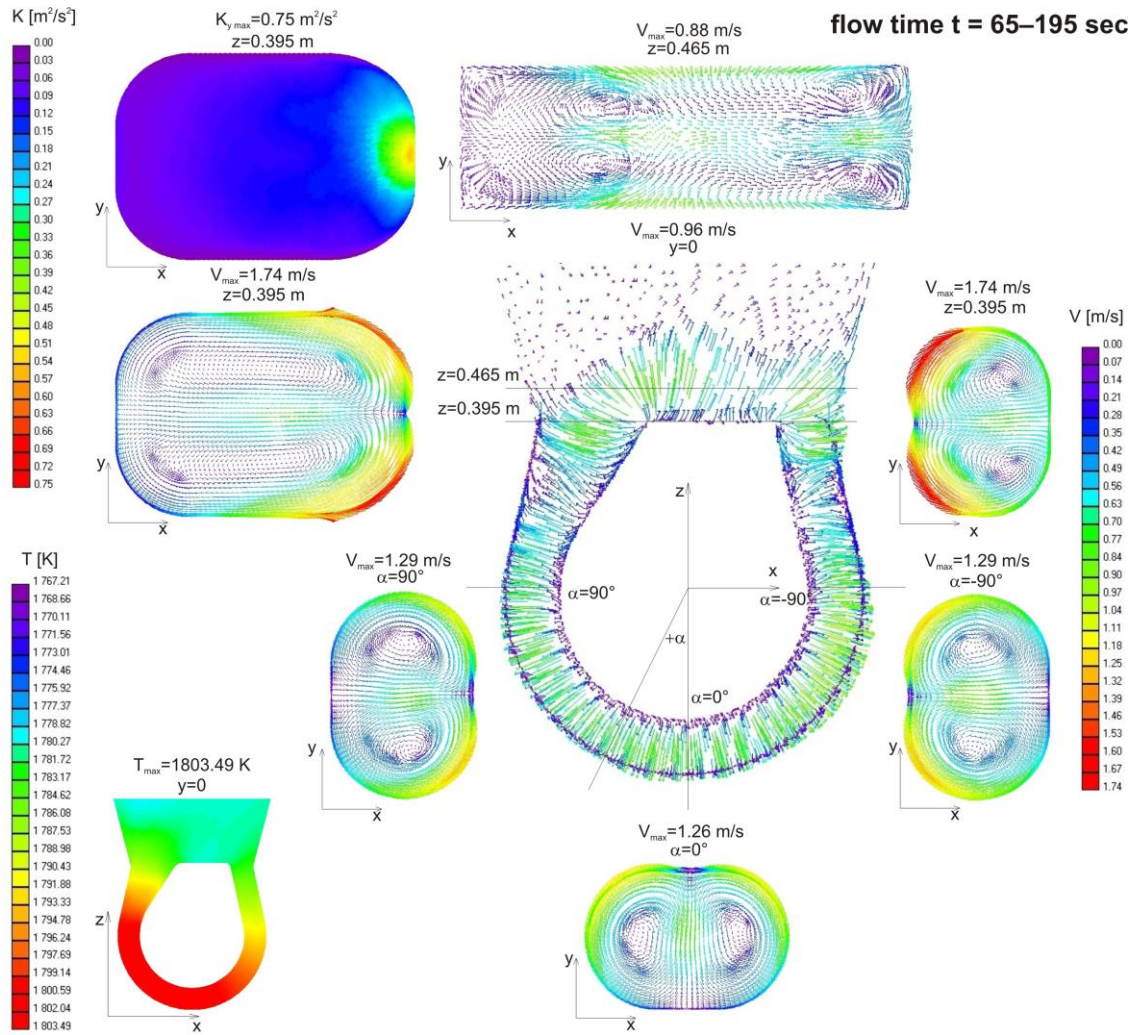
Siltuma un vielas apmaiņas procesu izpētes metalurģiskajās kausēšanas krāsnīs inženierlietojumos izšķiroša loma ir turbulences procesu adekvātam aprakstam. Tradicionāli pagājušajā desmitgadē lietotie divparametru turbulences RANS un URANS modeļi nevar korekti atspoguļot turbulentos pārnese procesus (it īpaši zonās starp vidējotās plūsmas virpuļiem), bez tam klasiskie $k-\epsilon$ modeļi ir jūtīgi pret izvēlēto apgabala diskretizāciju. To ilustrē piemēri (6. attēls) turbulences kinētiskās enerģijas sadalījumam, kas iegūti ar $k-\epsilon$ un $k-\omega$ SST modeļiem ar dažādu režģa izšķirtspēju.



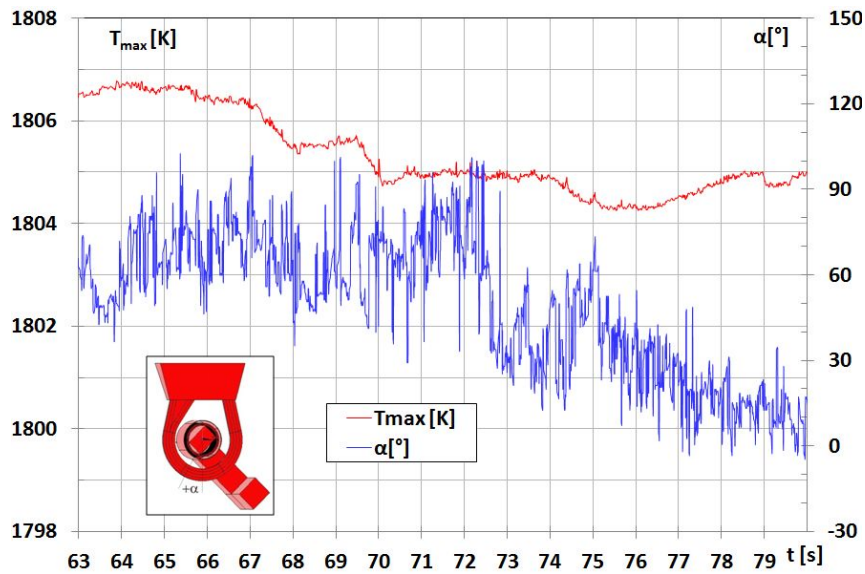
Att. 6. Turbulences kinētiskās enerģijas sadalījumi, kas iegūti ar $k-\omega$ SST (2 att. kreisajā pusē) un ar $k-\epsilon$ (4 att. labajā pusē) modeļiem pie dažādasplūsmas apgabala cilindriskā indukcijas krāsnī diskretizācijas.

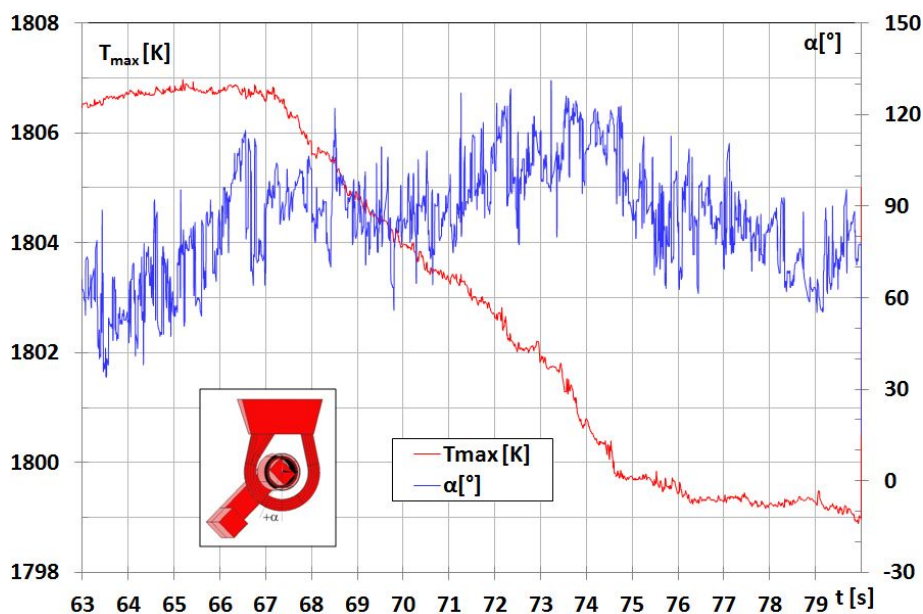
Esošās problēmas risinājumam indukcijas kanālkrāsnīs tika izveidots multifizikāls modelis savstarpēji saistīto EM, termisko un hidrodinamisko procesu izpētei, kas balstīts uz lielo virpuļu metodes (LES) izmantošanu turbulences procesu aprakstam. Modelis tika implementēts ANSYS Emag un Fluent programmu vidē, izstrādājot nepeiciešmās papildus programmas komponentes datu apmaiņai un iegūto rezultātu pēcapstrādei. Aprēķinu metodika tika verificēta izmantojot eksperimentālos datus un atšķirībā no iepriekš lietotajiem divparametru modeļiem parādīja labu atbilstību prakses datiem.

Izveidotā metodika veido bāzes platformu turbulento plūsmu, siltuma apmaiņas un vielas pārnese procesu inženierfizikāliem pētījumiem indukcijas krāsnīs (att. 7) un šo iekārtu darbības optimizēšanai – maksimālā pārkarsuma samazināšanai, energoefektivitātes paaugstināšanai un kanāla ilgtspējas palielināšanai. 8. Attēlā, piem., parādīts, ka mainot tikai magnētvara novietojumu (leņķi) attiecībā pret vertikāli ir iespējams samazināt nevēlamo kausējuma pārkarsuma līmeni krāsnī kanālā. Potenciāli ieinteresēti šādu pētījumu veikšanai uz izveidotās metodikas bāzes ir ABP AG un Leibniz Hannoveres universitātes inženierzinātnieki.



Att. 7. Vidējoto turbulento plūsmu, temperatūras un turbulentās kinētiskās enerģijas sadalījumu attēlojums dažādos industriālas indukcijas kanālkrāsns šķēļumos.





Att. 8. Kausējuma pārkarsuma samazinājuma kanālā piemērs, mainot tikai magnētiskā ekrāna novietojuma pozīciju (lenķi).