

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., Jānis Virbulis**

**Atskaite par periodu 01.01.2013. – 30.06.2013.**

## 1. Ievads

Projekta ietvaros tiek izveidoti nanomērogu, kinētiskie un mikroskopiskie modeļi, kas papildinās makroskopisko matemātisko modeļu un programmu sistēmu, kas tiek izmantota funkcionālo un pusvadītāju materiālu ražošanas tehnoloģiju matemātiskajā modelēšanā. Tas ļauj analizēt gan tehnoloģisko procesu makroskopiskos, gan nanomērogu, kinētiskos un mikroskopiskos procesus, gan to saistību.

Pārskata periodā tika strādāts pie sekojošām aktivitātēm:

2. Nanomērogu procesu modeļiem atbilstošo skaitlisko metožu izstrāde (2011.g. 4. kvartāls – 2013.g. 1. kvartāls);

3. Nanomērogu procesu modelēšanas rezultātu vidējošanas metodikas izstrāde, sagatavojot lokālas parametrizētus nepārtrauktas vides sakarības makroskopiskajiem modeļiem; atbilstošo skaitlisko metožu izstrāde (2012.g. 2. kvartāls – 2013.g. 2. kvartāls);

4. Nanomērogu modeļu un makroskopisko modeļu sasaiste, izmantojot hierarhisko daudzvērogu modelēšanas pieeju. Makroskopisko modeļu modifikācija, lai tie spētu integrēt nanomērogu modeļu rezultātus kā parametrizētas nepārtrauktās vides sakarības; atbilstošo skaitlisko metožu izstrāde. Aprēķinu piemēri (2012.g. 2. kvartāls – 2013.g. 3. kvartāls).

5. Nanomērogu procesu modeļu un skaitlisko metožu implementācija programmatūrā; nanomērogu procesu modelēšanas rezultātu vidējošanas metodikas implementācija programmatūrā; makroskopisko modeļu modifikācijas implementācija programmatūrā; programmatūras piemērošana daudzprocesoru sistēmām (2013.g. 2. kvartāls – 2013.g. 4. kvartāls).

6. Programmatūras servisa rīku izveide, tai skaitā pre- un postprocesēšanai. Modelēšanas uzdevumiem kopīgas datu bāzes izveide (materiālu īpašības, raksturīgie rūpniecisko procesu parametri) (2013.g. 2. kvartāls – 2013.g. 4. kvartāls).

Pārskata periodā tika galvenokārt strādāts pie aktivitātēm Nr. 3. un Nr. 4., tika uzsākts darbs pie aktivitātēm Nr. 5. un Nr. 6.

## 2. Galveno rezultātu kopsavilkums

Mikroskopisko aprēķinu ar molekulārās dinamikas metodi rezultātā tiek iegūtas silīcija fāzu robežas. Projektā izstrādātā metode molekulārās dinamikas rezultātu vidējošanai ļauj iegūt dotajai kristalogrāfiskajai orientācijai atbilstošo Vulfa konstrukciju. Savukārt izmantojot šos datus Heringa vienādojums tiek risināts ar grafisku metodi. Grafiskā risinājuma rezultāts ir Voronkova leņķiskā diagramma, kura tiek izmantota, lai mikroskopiska mēroga procesus sasaistītu ar makroskopiska mēroga procesiem.

Ir izveidoti 2D un 3D modeļi, kuri apraksta kristālu augšanas šķautņu formu veidošanos. Tā kā noteiktos gadījumos šķautņu veidošanās var iegūt makroskopiski nestabila procesa raksturu, modeļiem jāatspoguļo atomārā līmeņa procesu ietekme uz šādu nestabilitāšu rašanos. <100> kristāliem virsmu līdzsvara orientācija pie trīskāršā punkta šķautnes tuvumā, kur iespējams augt

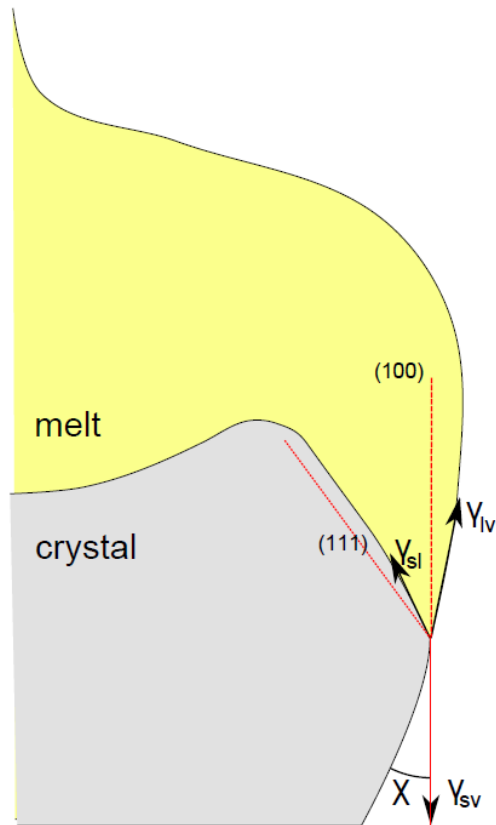
<111> fasetei, atšķiras no makroskopiski novērotās orientācijas par Voronkova leņķi  $\chi$ , kurš tiek izskaidrots ar vēlāku atomu pārvietošanos uz kristāla-tvaika robežas virsmas difūzijas ceļā, sk. Att. 1.

Šī informācija ļauj izveidot modeli šķautņu augstuma un platumā atkarībai no fizikālajiem parametriem trīskāršā punkta tuvumā. Pieņemot, ka termiskā situācija un audzēšanas ātrums ir tādi, ka kristāls ārpus šķautnēm aug vertikāli, augšanu uz šķautnes modeli apraksta trīskāršā punkta pārvietošanās vienādojumi, kuros  $r$  un  $z$  koordināta atkarīgas no vilkšanas ātruma, augšanas leņķa un pārdzesētības. Augšanas leņķis savukārt ir atkarīgs no brīvās virsmas leņķa un Voronkova leņķa. Pārdzesētība ir atkarīga no temperatūras gradienta un augšanas veida – 2D nukleācija uz <111> fasetes vai raupja augšana. Ņemot vērā aprakstītos efektus, šķautnes augstums tiek rēķināts skaitliski, sākot aprēķinu ar nulles augstuma šķautni. Tipisks 2D aprēķina rezultāts FZ kristālam, kur rezultējošais šķautnes augstums ir vairāk kā 4 mm, parādīts Att. 2.

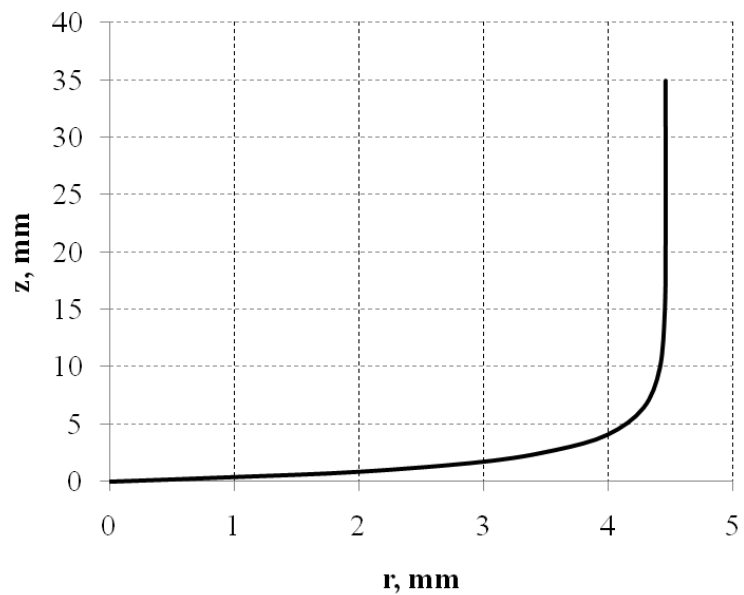
Novērojumi kristālu audzēšanas eksperimentos rāda, ka tipisks šķautnes augstums ir vairākkārt mazāks par 4 mm. Izveidojot šķautņu augšanas 3D modeli tika ņemta vērā šķautnes forma, tādejādi rezultātā iegūstot arī informāciju par šķautnes platumu, sk. Att. 3. 3D modelis ņem vērā no šķautnes platumā un augstuma atkarīgu brīvās virsmas perturbācijas leņķi, kurš ir atšķirīgs no 2D modeļa leņķa. Trešā dimensija ievērota izmantojot analītisku atrisinājumu brīvās virsmas perturbācijai, skaitliski modelis tiek risināts kā 2D modelis, tādēļ šāds algoritms ir ļoti efektīvs. Ar 3D modeli aprēķinātais šķautnes augstums ir 1.65 mm (Att. 4), bet šķautnes platumā ir 5.1 mm; šie skaitļi rāda daudz labāku sakritību ar eksperimentu, nekā ar 2D modeli iegūtie.

Pārskata periodā tika veidota programmatūra 2D un 3D šķautņu augšanas modeļiem, kā arī tika ieviestas izmaiņas bāzes sistēmas moduļos, lai varētu izvadīt šķautņu augšanas modelim nepieciešamo informāciju. Tādejādi tiek izveidota divpusēja sasaiste starp makroskopiskajiem modeļiem un modeļiem, kuri izmanto mikroskopiskās kristāla augšanas īpašības.

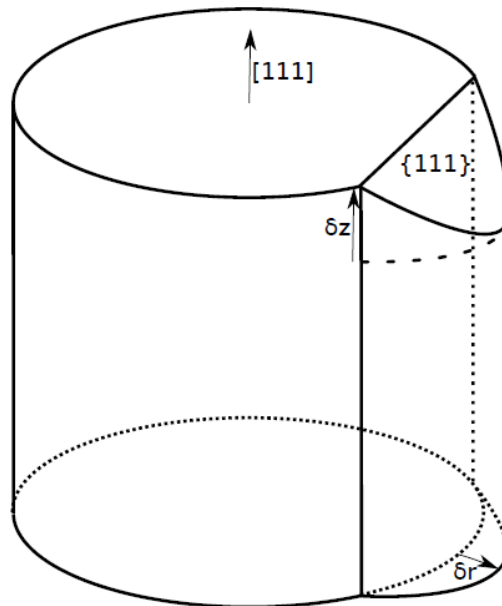
Tika turpināts darbs pie kristalizācijas procesu modelēšanas makroskopiskā līmenī, ieskaitot makroskopiskus nestacionārus kristāla augšanas aprēķinus gan Čohraļska, gan peldošās zonas metodei. Šī darba mērķis ir iegūt tipiskos augšanas apstākļus un temperatūras gradientus trīskāršā punkta apkārtnē, lai varētu sarēķināt šķautņu augstumus un platumus kristālu audzēšanas procesiem plašā parametru diapazonā.



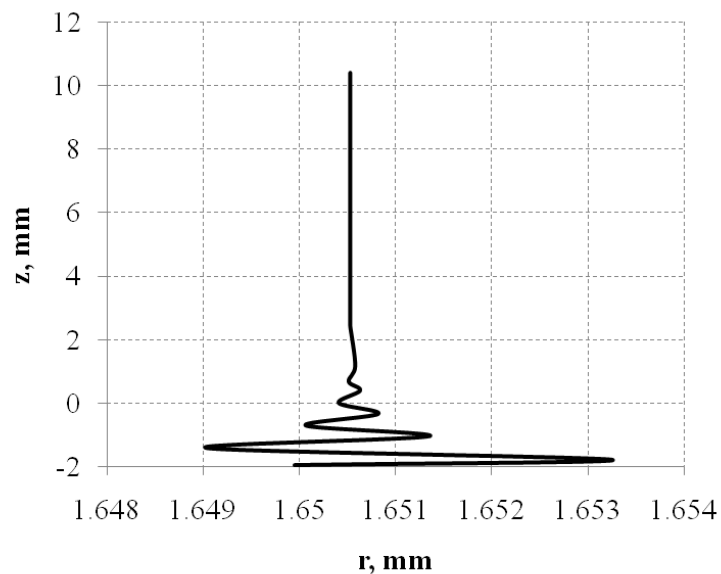
Att. 1. Fāzu robežu līdzsvara orientācija trīskāršā punkta apkārtnē, ko nosaka virsmu enerģijas un to anizotropija.



Att. 2. Šķautnes augstums tipiskam FZ kristālam aprēķināts ar 2D modeli



Att. 3. Shēma kristāla šķautnes platumā un augstuma noteikšanai 3D modelim.



Att. 4. Šķautnes augstums tipiskam FZ kristālam aprēķināts ar 3D modeli

### 3. Dalība konferencēs

**Konference "International Conference on Heating by Electromagnetic Sources,, Padua 21-24 May 2013, ar referātiem :**

A.Tucs, S.Spitan., A.Jakovics., E.Baake and B.Nacke

„Implementation and verification of numerical model for gas bubble dynamics in electroconductive fluid”

S. Pavlovs, A. Jakovics, D. Bosnyaks, B. Nacke, E. Baake

„Anomalies of joule heat, thermal and turbulent flow fields in clogged industrial channel induction furnaces “

**LU 71. zinātniskā konference, Rīga, Latvija, 2013. g. 31. Janvāris, Latvijas  
Universitāte, ar referātiem:**

K. Bergfelds, A. Muižnieks

Nestacionāra kristāla audzēšanas procesa ar Czochralski metodi matemātiskā modelēšana

A. Sabanskis, A. Muižnieks

Argona plūsmas modelēšana silīcija monokristālu audzēšanas iekārtā ar peldošās zonas metodi

M. Plāte, A. Muižnieks

Nesimetriskas izkusušās zonas modelēšana audzēšanas iekārtā ar peldošās zonas metodi

K. Surovovs, A. Muižnieks: Īpatnējās pretestības sadalījuma aprēķins kristālā monokristālu audzēšanas iekārtā ar peldošās zonas metodi

Projekta zinātniskais vadītājs

Dr.phys. Jānis Virbulis