

*На правах рукописи*



**Хлыбов Олег Анатольевич**

**ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ  
НА ТЕПЛОМАССОБМЕН ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ  
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДАМИ  
НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Пермь – 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель:

**Любимова Татьяна Петровна**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН «Институт механики сплошных сред Уральского отделения РАН», г. Пермь.

Официальные оппоненты:

**Бердников Владимир Степанович**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией свободно-конвективного теплообмена ФГБУН «Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН», г. Новосибирск.

**Полежаев Денис Александрович**, кандидат физико-математических наук, доцент, декан физического факультета ФГБОУ ВО «Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет», г. Пермь.

Ведущая организация

ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», г. Ижевск.

Защита состоится «06» октября 2016 г. в 11:00 часов на заседании диссертационного совета Д 004.012.01 в Федеральном бюджетном учреждении науки Институте механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук по адресу: 614013, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королева, 1; тел: (342) 2378314; факс: (342) 2378487; сайт: [www.icmm.ru](http://www.icmm.ru).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор физико-математических наук, доцент

 /А.Л. Зуев

### Актуальность работы

Диссертация посвящена численному и экспериментальному исследованию влияния вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации. Актуальность работы определяется потребностью современной полупроводниковой промышленности в больших объемах полупроводниковых монокристаллов определенного состава с низкой концентрацией дефектов. Получение кристаллов соответствующего качества, выращиваемых в промышленных объемах преимущественно методом вытягивания из расплава и методами направленной кристаллизации, невозможно без надлежащего исследования процессов кристаллизации и нахождения методов эффективного воздействия на них. Основной целью поиска оптимальных методов управления процессами кристаллизации является определение параметров воздействия, обеспечивающих уменьшение макро- и микронеоднородности легирующих примесей в выращиваемых кристаллах.

В процессах выращивания полупроводниковых кристаллов в земных условиях основным типом массопереноса, определяющим распределение примеси в расплаве и в выращенном кристалле, является конвективный массоперенос. Соответственно, управление конвективными течениями в расплаве является важнейшим фактором воздействия на характеристики и качество получаемых кристаллов.

Управление конвективными процессами в полупроводниковых расплавах осуществляется как посредством собственно управления распределением температуры - основного фактора, влияющего на термо-гравитационный механизм генерации течения и на форму и положение фронта кристаллизации, так и с помощью различных внешних полей, таких как вращение, вибрации, нестационарные магнитные поля. В задачах выращивания полупроводниковых кристаллов основными типами применяемых магнитных полей являются бегущее и вращающееся магнитные поля (ВМП). Настоящая работа посвящена изучению влияния вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методами вертикальной направленной кристаллизации ВНК (*Vertical Gradient Freeze, VGF*)<sup>1</sup> и осевого теплопотока на фронте кристаллизации ОТФ (*Axial Heat Processing, AHP*)<sup>2</sup>.

Лабораторный эксперимент по выращиванию полупроводниковых кристаллов – длительный и трудоемкий процесс; продолжительность полного цикла проведения эксперимента от планирования до анализа и интерпретации результатов может составлять месяц и более. Современный уровень развития вычислительной техники и вычислительных алгоритмов позволяет проводить численное моделирование процессов кристаллизации со значительно меньшими временными и материальными затратами. Таким образом, применение предварительного численного моделирования для поиска оптимальных параметров проведения лабораторных экспериментов, проводимых уже только на завершающей, подтверждающей стадии исследований, позволяет значительно повысить эффективность работы.

Таким образом, представленная работа о численном моделировании влияния вращающегося магнитного поля на процессы выращивания полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации представляется весьма актуальной.

---

<sup>1</sup> W.A. Gault, E.M. Monberg, J.E. Clemans. A novel application of the vertical gradient freeze method to the growth of high quality III–V crystals. *Journal of Crystal Growth*. - Vol. 74 - № 3, 1986. - p. 491-506.

<sup>2</sup> V. Golyshev et al. Single crystal growth with the axial heat processing (AHP) method. *Proc of the Conference and Exhibit on International Space Station Utilization*, 2001.

### **Цели исследования**

Целями диссертационной работы является исследование влияния вращающегося магнитного поля на течения и тепло- и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации и определение оптимальных параметров применения ВМП для управления указанными процессами.

### **Задачи исследования**

В рамках поставленных целей исследования были решены следующие задачи:

- Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на течение и тепло- и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ВНК.
- Экспериментальное исследование влияния вращающегося магнитного поля на течения и тепло- и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ВНК.
- Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на течения и тепло- и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ОТФ.

### **Научная новизна**

Впервые проведено численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля (ВМП) на течение и массообмен в расплаве и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ВНК с учетом искривления фронта кристаллизации. Получены данные о влиянии ВМП на структуру течения, распределение примеси в расплаве и форму фронта кристаллизации в процессе роста кристалла германия, легированного галлием. Показано, что ВМП приводит к понижению радиального градиента температуры вблизи фронта кристаллизации и уменьшению его прогиба с последующим переходом от вогнутого фронта к W-образному фронту с локальным поднятием на оси симметрии. Применение ВМП в исследованных конфигурациях позволяет уменьшить радиальную неоднородность примеси в кристалле. Продемонстрирован эффект потери устойчивости азимутального течения, генерируемого ВМП, при превышении азимутальной скоростью некоторого критического значения. Обнаружен экспериментально подтвержденный эффект понижения порога устойчивости азимутального течения в условиях искривленного фронта кристаллизации. Эффекты изменения формы фронта кристаллизации и потери устойчивости азимутального течения качественно подтверждены лабораторными экспериментами, проведенными в рамках диссертационной работы, а также численными и лабораторными исследованиями других авторов.

Проведен лабораторный эксперимент по выращиванию полупроводникового кристалла арсенида галлия, легированного кремнием, Si:GaAs, при воздействии вращающегося магнитного поля. Анализ полученных образцов показал, что участки кристаллов, соответствующие этапам роста при воздействии ВМП высокой интенсивности характеризуются наличием полосчатой неоднородности (т.н. *striations*), свидетельствующей о нестационарности течения и массообмена в расплаве; на участках, выращенных без ВМП, такие неоднородности отсутствовали. Исследование участков кристаллов, соответствующих моментам включения/выключения ВМП, позволило восстановить мгновенную форму фронта кристаллизации и зафиксировать переход от вогнутого фронта кристаллизации в случае без ВМП к W-образному при наличии ВМП.

Впервые проведено численное моделирование влияния ВМП на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ОТФ с учетом искривления фронта кристаллизации. Получены данные о структуре течения и распределении примеси в расплаве и кристалле для различных тепловых условий на погруженном нагревателе и интенсивности ВМП и о взаимодействии течения, вызванного

тепловыми условиями на погруженном нагревателе, с течением, индуцированным ВМП. Обнаружен эффект смены направления меридионального течения вблизи фронта кристаллизации и соответствующей смены знака радиального градиента концентрации примеси в выращенном кристалле под действием ВМП. Определены тепловые условия на погруженном нагревателе, для которых при действии ВМП наблюдается существенное уменьшение радиальной неоднородности примеси в выращенном кристалле.

### **Практическая значимость работы**

Практическая значимость работы обусловлена необходимостью разработки метода управления распределением легирующей примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации. На распределение примеси в кристалле решающее влияние оказывает конвективный массоперенос в расплаве. Вращающееся магнитное поле является эффективным методом управления течениями в электропроводящих жидкостях. Разработанный и реализованный универсальный программный пакет для численного решения сеточных задач, определяемых в терминах систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, может быть использован для решения широкого круга проблем, в том числе задач механики жидкостей.

### **Методы исследования**

Для решения поставленных задач применялись численное и лабораторное моделирование. Численное решение задач осуществлялось с помощью разработанного автором пакета для решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами. Для дискретизации дифференциальных уравнений в пакете применяются методы конечных разностей и конечных объемов. Для решения полученных в результате дискретизации нелинейных систем алгебраических уравнений используется метод Ньютона. Решение соответствующих систем линейных алгебраических уравнений осуществляется матричными методами с использованием сторонних библиотек решения СЛАУ. Численные расчеты выполнялись с применением параллельных версий решателей СЛАУ, на высокопроизводительных вычислительных системах с распределенной памятью.

### **Положения, выносимые на защиту**

- Численные данные о влиянии однородного вращающегося магнитного поля на течения, тепломассообмен и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации.
- Данные о влиянии вращающегося магнитного поля на форму фронта кристаллизации и распределение примеси в кристалле, полученные в ходе лабораторных экспериментов по выращиванию полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации.
- Численные данные о влиянии однородного вращающегося магнитного поля на течения, тепломассообмен и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом осевого теплотока на фронте кристаллизации.
- Универсальный пакет для численного решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами.

### Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных результатов обеспечивается использованием апробированных численных методов, проведением численных расчетов с различным временным шагом, на сетках различного размера, сопоставлением с ранее опубликованными результатами в предельных случаях. В частности, эффект понижения порога устойчивости азимутального течения при искривлении фронта кристаллизации при выращивании полупроводникового кристалла методом ВНК, полученный в рамках диссертационной работы, был количественно подтвержден в лабораторном эксперименте<sup>3</sup>.

### Апробация работы

Результаты работы докладывались на следующих конференциях: 4th International Workshop on Modeling in Crystal Growth (Fukuoka, Japan, 2003); XIII (Пермь, 2003), XIV (Пермь, 2005), XVIII (Пермь, 2013) Зимние школы по механике сплошных сред; XVI сессия Международной Школы по моделям механики сплошной среды (Казань, 2003); 6th PAMIR International Conference on Fundamental and Applied MHD (Latvia, Riga, 2005); конференция молодых ученых “Неравновесные процессы в сплошных средах” (Пермь, 2011, 2012), Вторая Российская конференция по магнитной гидродинамике (Пермь, 2015).

### Публикации

Результаты диссертационного исследования опубликованы в 11 работах, из них 4 работы – в изданиях из перечня ВАК. Список работ приведен в конце автореферата.

### Структура и объем диссертации

Диссертация общим объемом 147 страниц состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы (146 наименований) и двух приложений. В тексте диссертации приведены 41 рисунок и 4 таблицы.

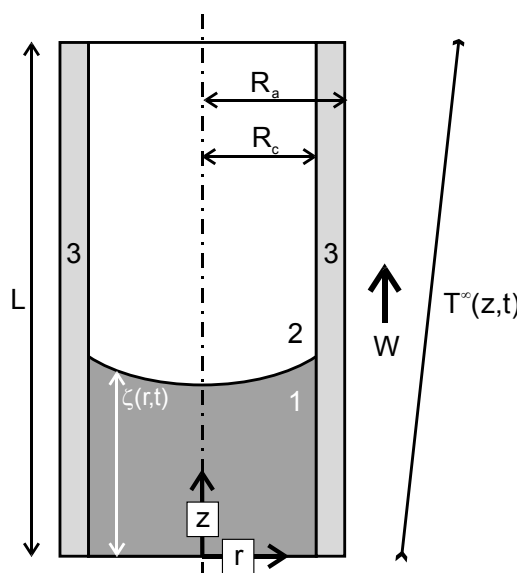


Рис. 1. Схематическое изображение процесса ВНК: 1) кристалл, 2) расплав, 3) ампула

### Содержание работы

Во введении обсуждается актуальность проблем, рассматриваемых в диссертации, формулируются цели и задачи работы; перечисляются полученные результаты и их практическая значимость; представляются выносимые на защиту положения; кратко излагается структура работы. Приводится описание методов направленной кристаллизации: вертикальной направленной кристаллизации и осевого теплотока на фронте кристаллизации, а также методов воздействия на течения в расплаве, применяемых совместно с методами направленной кристаллизации. Обсуждается действие вращающегося магнитного поля на течение электропроводящей жидкости в цилиндрической полости.

<sup>3</sup> Bridgman growth of germanium crystals in a rotating magnetic field / M.P. Volz [et al.] // Journal of Crystal Growth. – 2005. – Vol. 282. – № 3-4. – P. 305-312.

В первой главе диссертации численно и экспериментально исследуется влияние однородного вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ВНК в земных условиях (Рис. 1). Приведен вывод и проведено обсуждение осредненной силы Лоренца  $\vec{F}_L$  для однородного вращающегося магнитного поля:

$$\vec{F}_L = \frac{1}{2c} \sigma B_0^2 \left( 1 - \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial z} \right) [\vec{\Omega} \times \vec{r}],$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial f}{\partial z} \right) - \frac{f}{r^2} = 0,$$

где  $\sigma$  - электропроводность расплава,  $B_0$  - индукция магнитного поля,  $\vec{\Omega}$  - скорость вращения поля,  $f$  - меридиональная часть скалярного потенциала электромагнитного поля. Для исследуемого случая неэлектропроводных границ области расплава на горизонтальных границах на  $f$  ставится граничное условие  $\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = r$ , на боковой границе -  $\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = 0$ , на оси симметрии -  $f = 0$ .

Рассматривается цилиндрическая плоскодонная ампула большой длины с боковой стенкой конечной толщины. Задача решается численно в осесимметричной нестационарной постановке. Целью работы является нахождение условий, при которых неоднородность распределения примеси в выращенном кристалле минимальна.

Течение и тепло- и массообмен в расплаве описываются системой уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = - \frac{1}{\rho_m} \nabla p + \nu \Delta \vec{V} - \vec{g} (\beta_T T - \beta_C C) + \frac{1}{\rho_m} \vec{F}_L,$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) C = D \Delta C,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) T = \chi \Delta T,$$

где  $\vec{V}$  - скорость течения,  $T$  - температура,  $C$  - концентрация примеси,  $p$  - давление,  $\rho_m$  - плотность расплава,  $\nu$  - кинематическая вязкость,  $\vec{g}$  - сила тяжести,  $\beta_T$  и  $\beta_C$  - коэффициенты теплового и концентрационного расширения,  $D$  - коэффициент диффузии примеси,  $\chi$  - температуропроводность.

Теплоперенос в ампуле и кристалле описывается уравнением теплопроводности  $\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_{a,c} \Delta T$ , где  $\chi_a$  и  $\chi_c$  - температуропроводности ампулы и кристалла.

Профиль температуры на боковом нагревателе принимается линейным:

$$T^\infty(z, t) = T_* + \nabla T (z - Z_*(t)),$$

где  $T_*$  - температура фазового перехода,  $\nabla T$  - заданный осевой градиент температуры,  $Z_*$  - высота точки профиля температуры  $T^\infty(z, t)$  относительно дна ампулы, на которой

температура  $T^\infty$  равна температуре фазового перехода  $T^\infty(Z_*) = T_*$ . Управление процессом кристаллизации осуществляется смещением точки  $Z_*$ .

Теплопередача через фронт кристаллизации моделируется с помощью граничного условия, учитывающего теплоту фазового перехода

$$\kappa_m \left. \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right|_m = \kappa_c \left. \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right|_c + \rho_c R \Delta H,$$

где  $\Delta H$  - теплота фазового перехода,  $\rho_c$  - плотность кристалла,  $\kappa_c$  и  $\kappa_m$  - коэффициенты теплопроводности кристалла и расплава,  $R = \frac{\partial \zeta}{\partial t} / \sqrt{1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial r} \right)^2}$  - выражение, учитывающее

движение и искривление фронта кристаллизации,  $\zeta(r, t)$  - форма фронта кристаллизации. На внешней поверхности ампулы ставится условие теплоотдачи

$$\kappa_a \left. \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right|_a = -h_a (T - T^\infty),$$

где  $\kappa_m$  - коэффициент теплопроводности ампулы,  $h_a$  - коэффициент теплоотдачи. На внутренних границах ампула-кристалл и ампула-расплав - условия непрерывности температуры и теплопотока. Температура на верхнем и нижнем торцах ампулы принимается равной  $T^\infty$ . На оси симметрии ставится условие отсутствия потока тепла.

Для концентрации примеси на фронте кристаллизации ставится условие захвата примеси кристаллом

$$D \left. \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} \right|_m = \frac{\rho_c}{\rho_m} RC(1 - K),$$

где  $K$  - равновесный коэффициент сегрегации. На остальных границах расплава ставится условие отсутствия потока массы.

Решение задачи осуществляется методом сеток. Используется составная вычислительная четырехугольная сетка с единичным пространственным шагом для областей расплава, кристалла и стенки ампулы. Отображение физической области с подвижным искривленным фронтом кристаллизации на вычислительные подсетки осуществляется с помощью аналитических преобразований координат

$$r = \Delta_R(r, z) \frac{Q}{A + (1 - A)Q}, \quad z = \Delta_Z(r, z) \left( 1 - \frac{B^{Y-y} - 1}{B^Y - 1} \right),$$

где  $Q = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{x}{X} - \frac{1}{2} \right) \delta \right) / \tanh \left( \frac{1}{2} \delta \right)$ ,  $X$  и  $Y$  - число узлов вычислительной сетки по

направлению  $x$  и  $y$  соответственно,  $\Delta_R$  и  $\Delta_Z$  - ширина и высота физической области в узле сетки  $(x, y)$ ,  $A$ ,  $B$  и  $\delta$  - управляющие параметры преобразования координат, обеспечивающих сгущение узлов сетки вблизи твердых стенок и фронта. Уравнение для скорости течения записывается в терминах функции тока, завихренности и азимутального момента скорости  $M = \rho_m r V_\phi$ , где  $V_\phi$  - азимутальная скорость. Дискретизация уравнений производится комбинированным методом: для уравнений переноса тепла и примеси используется метод конечных объемов, для скорости течения - метод конечных разностей. Для проведения численного моделирования применяется разработанный автором программный пакет [5], представленный в третьей главе диссертации. Решение дискретизованной системы



нелинейных алгебраических уравнений осуществляется методом Ньютона, решение соответствующих СЛАУ - матричным методом с применением пакета MUMPS.

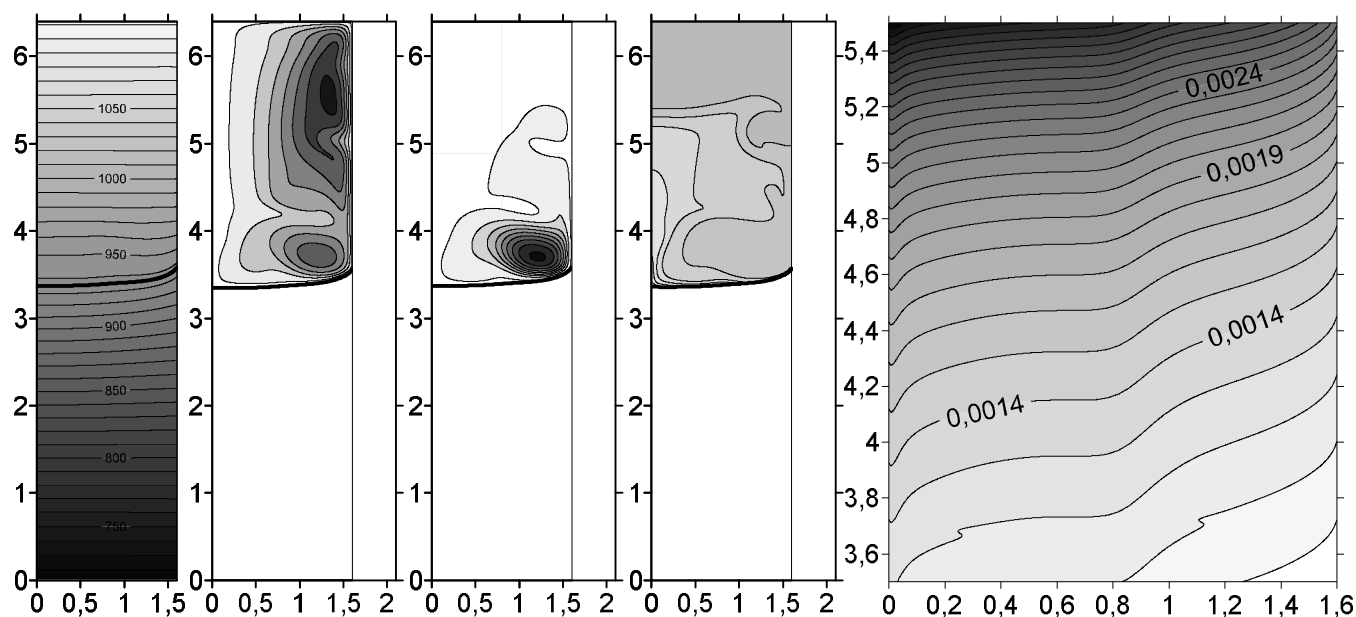


Рис. 2. (слева направо) изолинии температуры, азимутального момента скорости, функции тока и концентрации примеси в расплаве в момент времени 1000 сек. от начала процесса выращивания кристалла Ga:Ge методом ВНК для ВМП с  $B_0=0.3$  мТл, и распределение примеси в выращенном кристалле

В реальных ситуациях фронт кристаллизации является искривленным вследствие различия теплопроводностей твердой и жидкой фаз и наличия теплоты фазового перехода. В методе ВНК создается устойчивая температурная стратификация с градиентом температуры, направленным вверх. Однако искривление фронта кристаллизации вызывает появление радиальной компоненты градиента температуры вблизи фронта, что, при наличии тяжести, приводит к появлению меридионального конвективного течения. Это течение, направленное вблизи фронта кристаллизации от стенки ампулы к оси симметрии, приводит к формированию радиальной неоднородности концентрации примеси в кристалле.

Проведенное численное моделирование выращивания кристалла германия, легированного галлием, Ga:Ge диаметром 3.2 см. в ампуле с линейным профилем температуры нагревателя в земных условиях, показало, что в отсутствие вращающегося магнитного поля фронт кристаллизации оказывается вогнутым в кристалл, а меридиональное течение имеет одновихревую структуру с центром вихря, прижатым к фронту кристаллизации и стенке ампулы. С увеличением скорости роста прогиб фронта кристаллизации, интенсивность течения вблизи фронта и неоднородность распределения примеси в кристалле увеличиваются.

Известно, что результатом действия вращающегося магнитного поля на электропроводную жидкость в цилиндре с непроводящими стенками является рециркуляционное азимутальное течение (Рис. 2). Взаимодействие этого течения с твердыми торцами цилиндра приводит к формированию симметричного двухвихревого меридионального течения в объеме жидкости<sup>4</sup>. Проведенное в рамках диссертационной

<sup>4</sup> On the Stability of Rotating MHD Flows / P. Marty [et al.] // Transfer Phenomena in Magnetohydrodynamic and Electroconducting Flows. – Dordrecht: Springer Netherlands, 1999. – Vol. 51. – P. 327-343.

работы численное моделирование показало, что ВМП оказывает существенное влияние на интенсивность течения в расплаве в процессе кристаллизации. В исследованных случаях направление вращения меридионального вихря, индуцированного ВМП, совпадает с направлением вращения вихря, порожденного термогравитационным механизмом, что приводит к увеличению общей интенсивности течения вблизи фронта кристаллизации с соответствующим усилением массопереноса вдоль фронта. Применение ВМП с индукцией  $B_0=0.3$  мТл в рассмотренной конфигурации позволило уменьшить радиальную неоднородность распределения примеси в кристалле

$$\Delta_C = \max[C(r, \tilde{z})] - \min[C(r, \tilde{z})],$$

оцениваемую как разброс значений концентрации примеси на заданной высоте кристалла  $\tilde{z}$ , на 25% (Рис. 3).

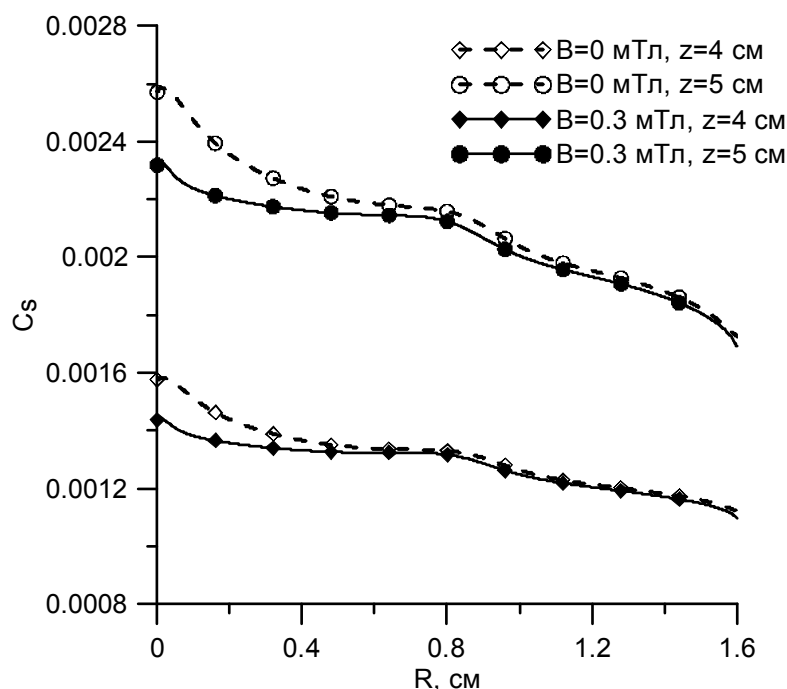


Рис. 3. Радиальное распределение примеси в кристалле на высоте  $z$ , выращенном методом ВНК в отсутствие магнитного поля (штриховая линия) и при наличии ВМП (сплошная линия)

Интенсификация течения вызывает уменьшение прогиба фронта кристаллизации с последующим переходом формы фронта от вогнутой к W-образной с локальным поднятием на оси симметрии<sup>5</sup>. Данный эффект был получен в проведенных в рамках диссертационной работы численных [1] и лабораторных экспериментах [8], а также в работах других авторов.

Известно, что при повышении интенсивности ВМП выше критического значения азимутальное течение теряет устойчивость. Нестационарность течения в расплаве, вызванная применением ВМП закритических интенсивностей, приводит к возникновению полосчатой неоднородности (т.н. *striations*) в выращенном кристалле [1]. В работе показано, что искривление фронта кристаллизации приводит к значительному понижению порога

<sup>5</sup> Vertical gradient freeze growth of GaAs with a rotating magnetic field / O. Pätzold [et al.] // Journal of Crystal Growth. – 2002. – Vol. 245. – № 3-4. – P. 237-246.

устойчивости течения, что впоследствии было подтверждено экспериментальными исследованиями других авторов<sup>6</sup>.

В экспериментальной части главы приведены результаты исследования влияния вращающегося магнитного поля на рост полупроводниковых кристаллов арсенида галлия, легированных кремнием Si:GaAs, диаметром 2 дюйма в тигле малой длины с коническим дном под слоем жидкого изолятора (*liquid encapsulated technique*) [7] с использованием печи VGF в присутствии ВМП (Рис. 4).

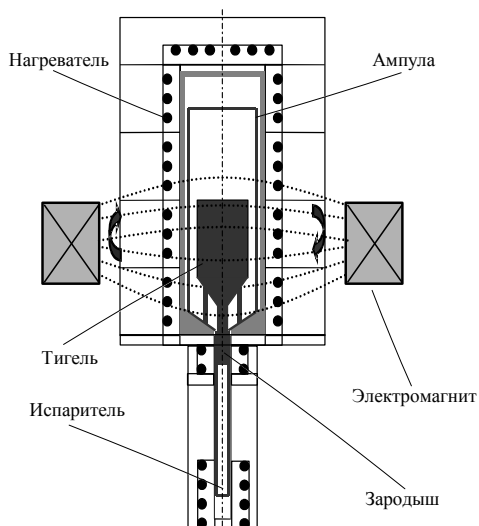


Рис. 4. Схематическое изображение печи VGF с вращающимся магнитным полем

выключения поля, что дало возможность наглядно увидеть влияние ВМП на распределение примеси.

Анализ микрофотографий срезов полученных кристаллов показал, что в отсутствие ВМП течение в расплаве носило стационарный характер, радиальное распределение примеси в полученных кристаллах в области выше конического дна позволяло говорить о вогнутом фронте кристаллизации. При действии ВМП указанной выше интенсивности течение приобретало нестационарный характер, что проявилось в существенном изменении микросегрегации примеси с появлением полосчатой неоднородности в областях, кристаллизация которых происходила в условиях действия ВМП.

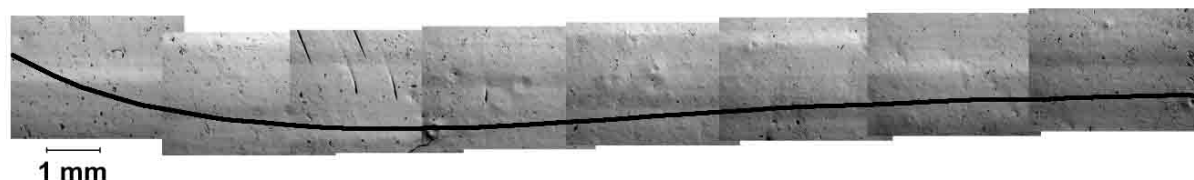


Рис. 5. Микрофотография вертикального среза (показана левая половина кристалла до оси симметрии) выращенного кристалла Si:GaAs в присутствии ВМП. Сплошной линией показано положение фронта кристаллизации

Интенсивность магнитного поля менялась со временем по закону  $t^{-2}$  для компенсации изменения соотношения высота/диаметр расплава  $H/R$  с тем, чтобы магнитное число Тейлора  $Ta_m = \frac{\sigma \omega R^2 B_0^4}{2\rho \nu^2}$  оставалось постоянным и равным  $2.5 \cdot 10^5$ , соответствующим индукции поля 6.8 мТл ( $\sigma$  - электропроводность,  $\omega$  - частота вращения ВМП,  $R$  - внутренний радиус ампулы,  $B_0$  - индукция магнитного поля,  $\rho$  - плотность расплава,  $\nu$  - кинематическая вязкость расплава).

Для исследования влияния ВМП на процесс кристаллизации применялась дискретная схема включения /

<sup>6</sup> Bridgman growth of germanium crystals in a rotating magnetic field / M.P. Volz [et al.] // Journal of Crystal Growth. – 2005. – Vol. 282. – № 3-4. – P. 305-312.

При действии ВМП на срезах кристаллов наблюдались полосчатая неоднородность примеси на участках, кристаллизация которых проходила в моменты действия магнитного поля и отсутствие неоднородности в моменты, соответствующие выключенному полю, что свидетельствует о нестационарности течения и массопереноса в расплаве в присутствии ВМП, что согласуется с результатами численного анализа устойчивости течения при действии ВМП. Маркировка кристаллов импульсным ВМП позволила получить данные об изменении формы фронта кристаллизации с вогнутой на W-образную в период действия ВМП (Рис. 5), что также подтверждается численным моделированием.

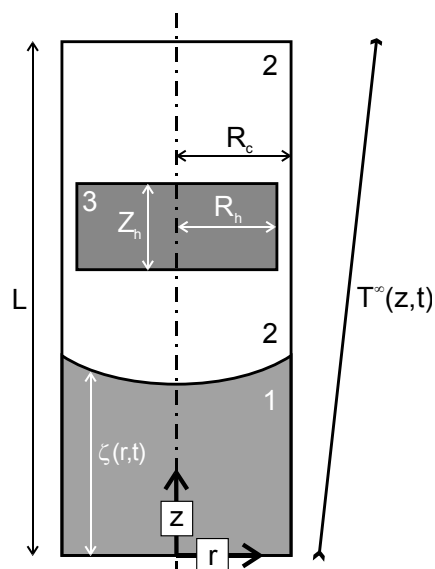


Рис. 6. Схематическое изображение процесса ОТФ. 1) кристалл, 2) расплав, 3) погруженный нагреватель

Во второй главе диссертации численно исследуется влияние однородного вращающегося магнитного поля на течения и тепло- и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ОТФ (Рис. 6). Рассматривается плоскодонная ампула большой длины. На боковой поверхности задается линейный профиль распределения температуры. На нижней поверхности погруженного нагревателя ставится линейное распределение температуры  $T(r) = T_h^1 + r(T_h^2 - T_h^1)/R_h$ , где  $R_h$  — радиус погруженного нагревателя,  $T_h^1$  — температура нижней поверхности погруженного нагревателя на оси симметрии,  $T_h^2$  — температура нижней поверхности погруженного нагревателя на расстоянии  $R_h$ .

Задача решается в осесимметричной нестационарной постановке. Целью работы является определение условий, при которых неоднородность распределения примеси в выращенном кристалле будет минимальна. Численный метод решения задачи аналогичен примененному в задаче ВНК.

Проведенное в работе численное моделирование для германия, легированного галлием Ga:Ge, в ампуле диаметром 3.2 см для нескольких значений осевого градиента температуры  $\nabla T$  и условий на погруженном нагревателе  $T_h^{1,2}$  показало, что в отсутствие ВМП определяющим фактором, влияющим на структуру течения, массоперенос примеси в расплаве и неоднородность распределения примеси в кристалле являются тепловые условия на погруженном нагревателе. В рассмотренных случаях течение между погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации имеет двухвихревую структуру с вихрями различной интенсивности, расположенными горизонтально либо вертикально в зависимости от направления градиента температуры на погруженном нагревателе.

Форма фронта кристаллизации, расстояние от фронта до нагревателя и радиальное распределение примеси в кристалле также зависели от внешних тепловых условий, в частности, от заданного осевого градиента температуры. Расчеты показали, что применение ВМП в методе ОТФ порождает двухвихревое меридиональное течение с вертикальным расположением вихрей в области между погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации, которое, при применении поля достаточной интенсивности, кардинально

меняет структуру течения в расплаве: в частности, были обнаружены эффекты смены расположения вихрей с горизонтального на вертикальное, установления многоточечной структуры течения (Рис. 7), смены направления градиента концентрации на фронте кристаллизации. Найдено, что применение ВМП докритической интенсивности в исследованных конфигурациях позволяет уменьшить радиальную неоднородность распределения примеси  $\Delta_C$  на 54% (Рис. 8).

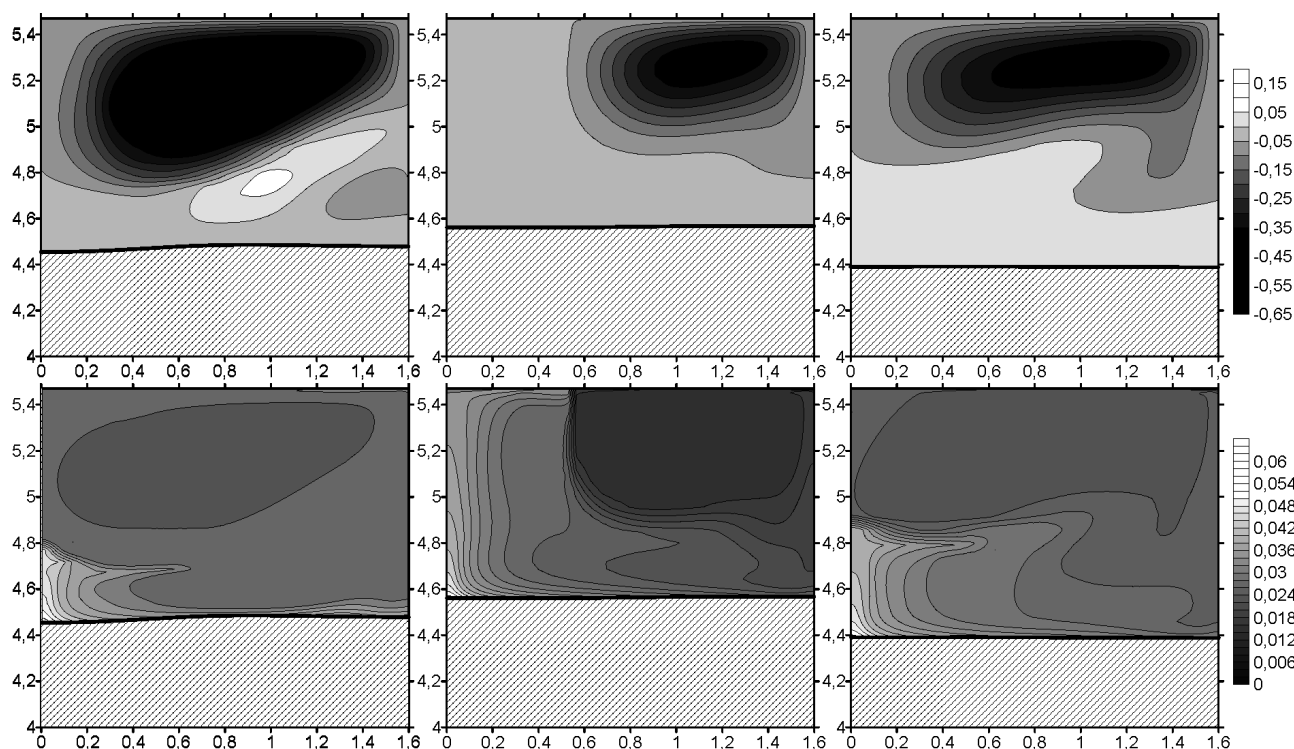


Рис. 7. Изолинии функции тока (верхний ряд) и концентрации примеси в расплаве (нижний ряд) для случая отсутствия ВМП (слева) и наличия ВМП (справа) с  $V_0=0.4$  мТл для  $\nabla T=20$  К/см на момент времени 1000 сек. от начала процесса выращивания кристалла методом ОТФ для случаев (слева направо)  $T_h^{1,2} = 942,945$  °C,  $T_h^{1,2} = 945,942$  °C,  $T_h^{1,2} = 945$  °C

В третьей главе диссертации представлен пакет прикладных программ<sup>7</sup> для численного решения систем дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами, разработанный в рамках диссертационного исследования. Пакет применялся в численных экспериментах, представленных в первой и второй главах диссертации [2-3], а также для решения других гидродинамических задач [4]. Он позволяет решать стационарные и нестационарные задачи в действительной и комплексной арифметике на одно-, двух- и трехмерных регулярных сетках с дискретизацией дифференциальных операторов методами конечных разностей и конечных объемов. Ближайшими аналогами пакета являются системы численного моделирования FreeFEM++ и FlexPDE. Отличительной особенностью пакета является объединение в себе трех концепций: символьных вычислений, метапрограммирования и проблемно-ориентированного подхода к постановке задачи с использованием проблемно-ориентированного языка (*domain-specific language, DSL*).

<sup>7</sup> <http://finita.sourceforge.net>

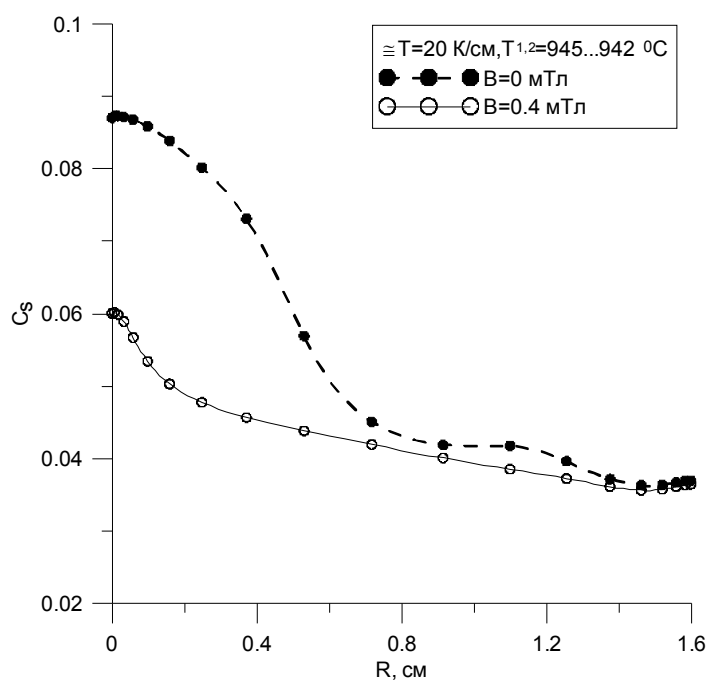


Рис. 8. Распределение примеси на фронте кристаллизации, выращенном методом ОТФ в отсутствие магнитного поля (штриховая линия) и при наличии ВМП (сплошная линия) в момент времени 1000 сек от начала процесса роста

В соответствии с концепцией проблемно-ориентированного подхода, язык реализации пакета (язык Руби) является также языком постановки задачи. Это позволяет, с одной стороны, успешно применять пакет пользователями, не являющимися профессиональными программистами, а с другой - исключить сопутствующие сложности применения для этих целей специально разработанного языка программирования, что характерно для традиционного подхода.

Элементы символьных вычислений используются в пакете для обработки задаваемых пользователем дифференциально-алгебраических выражений: замены дифференциальных операторов дискретными аналогами, аналитического дифференцирования и интегрирования, упрощения аналитических выражений, приведения алгебраических выражений к специальному виду. В частности, дифференцирование позволяет получать аналитическое выражения для якобиана при решении нелинейных систем алгебраических уравнений методом Ньютона; аналитическое интегрирование используется при дискретизации уравнений методом конечных объемов. Результатом работы символьного блока является система линейных либо нелинейных алгебраических уравнений, эквивалентная заданной на входе, также представленная в символьном виде.

Концепция метапрограммирования предполагает написание программ, порождающих код других программ. Ее применение нацелено на решение двух проблем, возникающих при написании программного кода: уменьшения объема ручного кодирования и устранения избыточности информации во входном задании. В первом случае эффект заключается в генерировании сложных и громоздких, однако хорошо формализуемых, блоков кода по компактному шаблону. Практика применения пакета продемонстрировала возможность уменьшения объема ручного кодирования задач вычислительной гидродинамики в 15-35 раз. Во втором случае одна и та же информация используется для генерации нескольких блоков кода по единому шаблону, что помогает избегать типичных ошибок рассинхронизации кода при использовании операций копирования/вставки текста, характерных для ручного кодирования.

В контексте рассматриваемого пакета, результатом работы последнего является программный код на языке Си, реализующий численный алгоритм решения поставленной задачи. Получаемый код является хорошо переносимым и в значительной мере самодостаточным, имеющим минимальное количество зависимостей от сторонних библиотек, что позволяет компилировать и запускать его в программном окружении, не контролируемым пользователем – например, удаленно на высокопроизводительных вычислительных системах.

Численное решение полученных систем алгебраических уравнений в пакете может осуществляться как явным, так и неявным методом. В последнем случае используется матричный метод решения систем линейных алгебраических уравнений для линейных задач и метод Ньютона для нелинейных с применением сторонних библиотек (*MUMPS*, *PETSc*, *LIS*, *SuperLU*, *ViennaCL*, *Paralution* и др.). Генерируемый пакетом численный код позволяет задействовать тип параллелизма используемой библиотеки, что дает возможность выполнения как на системах с общей памятью (многоядерные и многопроцессорные системы, вычисления на графических процессорах), так и в распределенных средах (кластеры). При этом пользователю пакета предоставляется унифицированный интерфейс взаимодействия со сгенерированным кодом, скрывающий детали и особенности реализации алгоритма решения. Практика использования пакета показала высокую эффективность работы генерируемого параллельного кода в реальных гидродинамических задачах.

### **Основные результаты**

Численно и экспериментально исследовано влияние однородного вращающегося магнитного поля (ВМП) на процессы выращивания полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации: вертикальная направленная кристаллизация (ВНК) и осевой теплопоток на фронте кристаллизации (ОТФ).

- Для процессов ВНК и ОТФ показано, что индуцируемое ВМП течение, приводит к модификации течения, вызванного термогравитационным и концентрационно-гравитационным механизмами. В результате течение в расплаве принимает вид двух тороидальных вихрей, расположенных один над другим. Форма и интенсивность нижнего вихря, возникающего благодаря действию ВМП и расположенного непосредственно над фронтом кристаллизации, оказывает принципиальное влияние на форму фронта и распределение примеси в получаемом кристалле. Численно и экспериментально продемонстрировано изменение формы фронта кристаллизации с вогнутой на W-образную под действием ВМП.
- Для процесса ВНК численно и экспериментально подтверждено существование неустойчивости азимутального течения, индуцированного ВМП, приводящей к неустойчивости меридионального течения и появлению нежелательной неоднородности распределения примеси в получаемом кристалле.
- Численно показано, что увеличение (в случае вогнутого фронта кристаллизации) интенсивности вихря, примыкающего к фронту кристаллизации, являющееся следствием искривления фронта и наличия меридионального течения, приводит к значительному понижению порога устойчивости азимутального течения по сравнению с случаем индуцированного ВМП азимутального течения в цилиндрической полости с плоскими торцами, что было впоследствии подтверждено лабораторными экспериментами, выполненными другими авторами.
- Найдено, что применение ВМП докритической интенсивности в процессах направленной кристаллизации ВНК и ОТФ при определенных условиях приводит к

уменьшению радиальной сегрегации примеси в полученном кристалле, причем в случае ОТФ положительное воздействие ВМП является более существенным.

- Разработанный в рамках выполнения диссертационной работы универсальный пакет для численного решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами успешно применен для решения задач, включенных в диссертационное исследование. Применение пакета позволило радикально уменьшить трудозатраты на написание и отладку численного кода, а также сократить время, затраченное на проведение численного моделирования за счет применения высокопроизводительных параллельных вычислений.

### Основные публикации

1. Lyubimova T.P., Dold P., Croell A., **Khlybov O.A.**, Fayzrakhmanova I.S. Time-Dependent Magnetic Field Influence on GaAs Crystal Growth by Vertical Bridgman Method // Journal of Crystal Growth, 2004. - V. 266. - P. 404-410.
2. Lyubimova T.P., **Khlybov O.A.** Effect of rotating magnetic field on mass transfer during directional solidification of semiconductors // Magnetohydrodynamics, 2016. - V. 52. - № 1. - P. 61-69.
3. Любимова Т.П., **Хлыбов О.А.** Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на процесс выращивания полупроводникового кристалла методом АНР // Вычислительная Механика Сплошных Сред, 2013. - Т.6. - № 2. - С. 168-175.
4. Любимов Д.В., Любимова Т.П., Пономарева К.В., **Хлыбов О.А.** Численное моделирование нестационарного поведения стратифицированной жидкости с помещенным в нее твердым телом в высокочастотном вибрационном поле // Вычислительная Механика Сплошных Сред, 2013. - Т.6. - № 3. - С. 269-276.
5. **Хлыбов О.А.** Комбинирование символьной алгебры и генерации кода для решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений // Вычислительная Механика Сплошных Сред, 2008. - Т.1. - № 2. - С. 90-99.
6. Любимова Т.П., **Хлыбов О.А.** Численное моделирование процесса выращивания кристалла Ga:Ge по вертикальному методу Бриджмена в присутствии вращающегося магнитного поля // Конвективные течения, 2003. - № 1. - С. 140-152.
7. Любимова Т.П., **Хлыбов О.А.** Численное моделирование процесса выращивания полупроводникового кристалла методом АНР // Вестник Пермского университета, 2012. - Т.4. - № 22. - С. 130-134.
8. Кролл А., Любимова Т.П., Петцолд О., **Хлыбов О.А.** Рост кристалла GaAs по методу VGF в присутствии вращающегося магнитного поля // Гидродинамика, 2004. - № 14. - С. 40-50.
9. Любимова Т.П., **Хлыбов О.А.** Численное моделирование процесса выращивания кристалла Ga:Ge по методу Axial Heating Process в присутствии вращающегося магнитного поля // Гидродинамика, 2005. - № 14. - С. 21-32.
10. Lyubimova T.P., Dold P., Croell A., **Khlybov O.A.**, Fayzrakhmanova I.S. Numerical Investigation of Dynamic Magnetic Field Influence on Vertical Bridgman Crystal Growth // Proceedings of international conference "Advanced Problems in Thermal Convection"; Perm, 2004. - P. 343-349.
11. Lyubimova T.P., Croell A., Dold P., **Khlybov O.A.**, Fayzrakhmanova I.S. Numerical and experimental study of alternating magnetic field influence on vertical Bridgman crystal growth of semiconductors // Abstracts of 4<sup>th</sup> international workshop on modeling in crystal growth; Fukuoka, Japan, 2003. - P. 16.