

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт механики сплошных сред  
Уральского отделения Российской академии наук

*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

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук

Научный руководитель:  
д.ф.-м.н., профессор Т.П. Любимова

Пермь – 2016

**ОГЛАВЛЕНИЕ**

<b>ОГЛАВЛЕНИЕ</b> .....	2
<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	4
Актуальность избранной темы и степень ее разработанности.....	4
1.1 Методы кристаллизации.....	5
1.2 Управление процессами направленной кристаллизации.....	12
Цели и задачи диссертационной работы.....	13
Научная новизна результатов.....	14
Теоретическая и практическая значимость работы .....	16
Методология и методы диссертационного исследования.....	16
Положения, выносимые на защиту.....	17
Степень достоверности и апробация результатов.....	17
Личный вклад автора.....	18
Структура и объем диссертации .....	19
<b>ГЛАВА 1. ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕССЫ ТЕПЛОМАССОБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ВЕРТИКАЛЬНОЙ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ</b> .....	20
1.1 Вращающееся магнитное поле .....	24
1.2 Постановка задачи .....	29
1.3 Численный метод .....	35
1.4 Результаты численного моделирования .....	41
1.5 Лабораторный эксперимент .....	62
1.6 Выводы.....	73

**ГЛАВА 2. ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ  
НА ПРОЦЕССЫ ТЕПЛОМАССОБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ  
КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ОСЕВОГО ТЕПЛОПОТОКА НА ФРОНТЕ  
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ..... 74**

- 2.1 Постановка задачи ..... 77
- 2.2 Численный метод ..... 84
- 2.3 Результаты численного моделирования ..... 84
- 2.4 Выводы..... 102

**ГЛАВА 3. ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СЛОЖНЫХ  
СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В  
ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ СЕТОЧНЫМИ МЕТОДАМИ..... 103**

- 3.1 Описание программного пакета ..... 109
- 3.2 Входное задание для пакета..... 111
- 3.3 Решение систем алгебраических уравнений ..... 117
- 3.4 Процедура использования пакета..... 118
- 3.5 Оценка эффективности работы пакета ..... 120
- 3.6 Скорость работы численного кода..... 125
- 3.7 Объем потребляемой памяти ..... 126
- 3.8 Выводы..... 126

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ..... 128**

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ..... 130**

**ПРИЛОЖЕНИЕ 1. .... 146**

**ПРИЛОЖЕНИЕ 2 ..... 147**

## ВВЕДЕНИЕ

### **Актуальность избранной темы и степень ее разработанности**

Диссертация посвящена численному и экспериментальному исследованию влияния вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации. Современная полупроводниковая промышленность нуждается во всевозрастающих объемах полупроводниковых монокристаллов заданного 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 термогравитационный 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) [112] и осевого теплового потока на фронте кристаллизации (ОТФ) [1, 58].

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. 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.

## **1.1 Методы кристаллизации**

Существует множество методов для выращивания монокристаллов [3, 6, 7, 14, 19, 20, 22, 27, 50, 72, 88, 109], различающихся по эксплуатационным характеристикам, конфигурации и размеру получаемых кристаллов, составу и распределению примесей, плотности дефектов кристаллической решетки. Монокристалл - это однородный кристалл, характеризующийся непрерывностью кристаллической решетки. Исходным материалом для получения монокристалла служит поликристаллическая затравка. Основными

методами получения монокристаллов, нашедшими применение в промышленности, являются методы кристаллизации из расплавов, растворов и газовой фазы. Основными наиболее распространенными методами выращивания кристаллов являются метод химического осаждения из газовой фазы [132], метод эпитаксии [64], вытягивания из расплава (метод Чохральского) [30], метод плавающей зоны [38], методы направленной кристаллизации [3, 103]. В диссертационной работе рассматриваются вопросы выращивания полупроводниковых кристаллов из расплава методами направленной кристаллизации.

### **1.1.1 Методы направленной кристаллизации**

Суть метода направленной кристаллизации [7] заключается в формировании и поддержании таких температурных условий внутри рабочей камеры (ампулы) в течение всего периода роста, чтобы сначала затравка, а затем и выращенная часть монокристалла поддерживалась при температуре ниже температуры фазового перехода, а расплавленная часть выше нее. При этом возникает сформированная граница между твердой и жидкой фазой вещества (фронт кристаллизации), перемещающаяся с течением времени вглубь расплава. Одним из основных различий между различными вариациями метода направленной кристаллизации является способ формирования и изменения теплового поля внутри рабочей камеры.

Поскольку основная масса кристаллов до настоящего времени выращивается в земных условиях, по ориентации оси симметрии рабочей камеры и направления движения фронта кристаллизации относительно направления силы тяжести методы направленной кристаллизации можно разделить на горизонтальные [14, 35] и вертикальные: в первом случае фронт кристаллизации смещается перпендикулярно направлению силы тяжести, во втором - параллельно. В полупроводниковой промышленности наиболее широкое распространение получила вертикальная модификация метода.

### 1.1.2 Семейство методов Бриджмена

В первой реализации метода, предложенной И. В. Оберимовым и Л. В. Шубниковым [3], ампула жестко закреплялась внутри печи, а охлаждение кристалла осуществлялось струей сжатого воздуха. П. Бриджмен предложил свой вариант метода [3, 35, 104], в котором управление температурным полем осуществлялось постепенным выдвиганием ампулы из печи; охлаждение кристалла осуществлялось естественным путем, без принудительного обдува. При этом появилась возможность управления скоростью роста кристалла, которая практически равна скорости движения ампулы. Д. Стокбаргер [3, 14, 22] разделил кольцевой электронагреватель на две части (горячую и теплую) с изолирующей диафрагмой между ними для получения большего перепада температуры в зоне кристаллизации. Температура горячей зоны печи устанавливается выше температуры фазового перехода, а температура теплой зоны - ниже нее. Широкое внедрение электронной контрольно-измерительной и управляющей техники в промышленные и производственные процессы позволило усовершенствовать печь Бриджмена-Стокбаргера с переводом ее на компьютерное управление: в модификации, получившей название *Vertical Gradient Freeze* [43, 89, 98, 99, 119], механическая протяжка ампулы не производится; формирование динамического температурного поля внутри рабочей камеры осуществляется набором кольцевых электронагревателей с независимым компьютерным управлением.

Как правило, в методе направленной кристаллизации дно ампулы сделано коническим, что создает условия для конкурентного роста в самом начале процесса и облегчает получение монокристалла с заданной ориентацией, что подтверждается лабораторными экспериментами [40, 74, 79, 88]. Тем не менее, также проводятся численные и лабораторные эксперименты и с ампулами с плоским дном [70, 74, 105, 111], для которых характерна меньшая осевая неоднородность физико-химических свойств получаемых кристаллов. В работе рассматривается вариант плоскодонной ампулы.

В силу геометрии ампулы, применяющейся в методах направленной кристаллизации (цилиндр с отношением длины к диаметру, большем единицы), основным управляющим параметром для формирования температурного поля является условие нагрева боковой стенки ампулы. В лабораторных экспериментах функция распределения температуры выбирается, как правило, эмпирически, исходя из необходимости обеспечения малых осевых градиентов температуры на горячем и теплом конце ампулы и большого градиента осевого градиента температуры в области фазового перехода. В численных экспериментах наиболее часто используемыми аппроксимациями являются линейная/кусочно-линейная функция и функция на основе гиперболического тангенса [74].

В практически важных приложениях процесса выращивания кристаллов целью работы является получение кристалла с минимальной неоднородностью распределения легирующей примеси. Определяющим для распределения примеси в результирующем кристалле являются процессы конвективного и диффузионного массопереноса в расплаве, в особенности в области непосредственно над фронтом кристаллизации. В силу того, что для основной массы практически важных материалов характерные диффузионные времена для примеси много больше гидродинамических, учет конвективного массопереноса в расплаве является принципиально важным для адекватного описания процесса кристаллизации.

При направленной кристаллизации методом Бриджмена наиболее предпочтительным с точки зрения минимизации радиального распределения примеси является чисто диффузионный вариант массопереноса. В вертикальном варианте метода горячая зона с расплавом находится выше холодной зоны с кристаллом. Как известно, при нагреве сверху в поле тяжести жидкость находится в состоянии устойчивого механического равновесия [5]. Однако на практике достижение бесконвективного режима мало осуществимо по причине искривления фронта кристаллизации, приводящего к

возникновению радиального градиента температуры и развитию тепловой конвекции вблизи фронта.

Искривление фронта кристаллизации носит принципиальный характер и происходит по следующим причинам:

- Наличие скачка теплопроводности на границе твердой и жидкой фаз имеет место для всех материалов и приводит к искривлению фронта кристаллизации даже в отсутствие движения нагревателя.
- В процессе кристаллизации при движении нагревателя происходит высвобождение теплоты фазового перехода, также ненулевой для всех практически важных материалов, что сказывается на кривизне фронта кристаллизации.
- Наличие иных механизмов изменения формы фронта, таких как морфологическая неустойчивость фронта кристаллизации, вызванная зависимостью температуры фазового перехода от концентрации примесей в расплаве [12, 67, 127] и играющая важную роль для определенных типов материалов.

Суммарное действие вышеперечисленных механизмов зависит как от физико-химических свойств материала, так и от деталей реализации конкретного кристаллизационного процесса: геометрии системы (диаметр и высота расплава/кристалла), температурного поля в рабочей области, скорости протяжки и т.д. Оно может приводить к формированию как вогнутого, так и выпуклого фронта кристаллизации, а также более сложным конфигурациям типа W-образного фронта с локальным поднятием на оси симметрии [77, 98, 99] или возникновению прогрессирующего провала фронта на оси симметрии в случае развития морфологической неустойчивости фронта кристаллизации [16, 67, 70, 127]. Локальное искривление фронта кристаллизации влечет за собой появление радиального градиента температуры и, как следствие, возникновение тепловой конвекции; конвекция же является доминирующим механизмом

воздействия на массоперенос и распределение примеси в выращиваемом кристалле.

Другим механизмом, влияющим на пространственную однородность распределения примеси в кристалле, является сегрегация – процесс захвата примеси растущим кристаллом [3, 6, 14, 63, 124]. В зависимости от конкретного материала возможны варианты как преимущественного отторжения примеси кристаллом обратно в расплав, так и ее усиленного захвата; в первом случае средняя концентрация примеси в кристалле будет меньше таковой в областях расплава вблизи фронта кристаллизации, а во втором – наоборот. В отличие от конвективного массопереноса, сегрегация влияет преимущественно на осевое распределение примеси.

Принципиальным свойством процесса направленной кристаллизации методом Бриджмена является его нестационарность [74], которая есть следствие различных концевых эффектов в силу конечности высоты ампулы, а также по причине нестационарности процессов массопереноса, вызванных гидродинамической неустойчивостью течения в расплаве. Широко применяемый в численном моделировании процессов направленной кристаллизации квазистатический подход существенно облегчает решение задачи, но вносит далеко не всегда справедливое предположение о стационарности протекающих процессов. Квазистационарный подход позволяет получить основное представление о протекающих в системе процессах, однако эволюцию процессов тепло- и массообмена, сегрегации примеси на фронте кристаллизации и объемное распределение примеси в выращиваемом кристалле можно получить только с помощью полного нестационарного подхода. В представленном диссертационном исследовании рассматриваются вопросы нестационарного тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методом Бриджмена.

### 1.1.3 Семейство методов погруженного нагревателя

Современные методы направленной кристаллизации, такие как метод Бриджмена, метод плавающей зоны, метод Чохральского в целом не обеспечивают требуемого уровня однородности радиального распределения примеси в выращиваемом кристалле. Применяемый во всех данных методах боковой нагрев рабочей области вызывает искривление отклонение формы фронта кристаллизации от плоской и, как следствие, появление радиального градиента температуры и возникновение теплового конвективного движения, вызывающего радиальную неоднородность примеси.

Метод погруженного нагревателя (*Submerged Heater Method, SHM*) впервые был предложен [94, 95] А.Г. Острогорским в 1990 г. Он был разработан с целью получения осевого потока тепла, малого радиального градиента температуры и малой интенсивности течения расплава для повышения макро- и микрооднородности получаемых кристаллов, а также для получения постоянных тепловых условий в ходе роста кристалла. Осевой поток тепла достигается путем использования погруженного в расплав нагревателя одновременно с кольцевым нагревателем, расположенным за пределами тигля коаксиально погруженному нагревателю, и играющего роль охранного нагревателя [96]. Постоянство осевого градиента температуры достигается путем поддержания температуры погруженного в расплав нагревателя. Малые радиальные перепады температуры в расплаве достигаются путем управления кольцевым нагревателем. Преимуществом семейства методов погруженного нагревателя является возможность более точно управлять распределением температуры вблизи фронта кристаллизации, а также постоянство геометрии зоны роста, в частности, высоты расплава над границей раздела фаз, что способствует уменьшению аксиальной неоднородности получаемого кристалла.

Дальнейшим развитием метода погруженного нагревателя является метод осевого теплопотока на фронте кристаллизации ОТФ (*Axial Heat Processing, AHP*) [1, 58]. Согласно методу ОТФ, в ампулу с расплавом над фронтом

кристаллизации помещается дополнительный нагреватель таким образом, что между ним и внутренней стенкой ампулы остается зазор для обеспечения перетекания расплава из зоны над нагревателем в зону кристаллизации. В процессе роста кристалла погруженный нагреватель согласованно перемещается вместе с внешними нагревателями с целью обеспечения заданного расстояния между ним и фронтом кристаллизации. Основным отличием метода ОТФ от метода погруженного нагревателя является наличие в последнем нескольких зон нагрева с независимым управлением, позволяющих формировать неоднородное распределение температуры на нагревателе [1]. В настоящее время опубликованы экспериментальные и численные работы по выращиванию кристаллов методами погруженного нагревателя [26, 44, 58, 78, 85, 86, 94–96].

## **1.2 Управление процессами направленной кристаллизации**

Для управления процессами конвективного тепло- и массообмена в процессах направленной кристаллизации применяют различные методы: пониженный уровень гравитации [38], вращение, осевые и вращательные вибрации [128], стационарные и нестационарные магнитные поля [63]. В настоящем диссертационном исследовании проводится исследование влияния однородного вращающегося магнитного поля на процессы нестационарного тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методами Бриджмена и погруженного нагревателя.

### **1.2.1 Вращающееся магнитное поле**

Известно, что магнитное поле – эффективный способ управления течением электропроводящей жидкости [52, 56, 97, 119]. Для управления процессами тепло- и массообмена при выращивании кристаллов методами направленной кристаллизации применяются три основных типа магнитного поля – постоянное [60, 66, 68, 81, 114, 116, 125], бегущее [75, 84, 102, 108, 126], вращающееся [36, 37, 51, 52, 98, 99, 114, 118].

Рассматриваемые в настоящем диссертационном исследовании методы направленной кристаллизации: метод Бриджмена и метод погруженного нагревателя имеют цилиндрическую симметрию, поэтому большой интерес представляет общий вопрос о возникновении течения электропроводящей жидкости в цилиндрической полости под действием вращающегося магнитного поля. На настоящий момент существует значительное число опубликованных численных и экспериментальных работ по данной теме [9, 56, 57, 80, 83, 91, 117, 123]. Действие ВМП в данной конфигурации заключается в генерации рециркуляционного азимутального течения, которое, в свою очередь, порождает меридиональное течение в виде двух симметричных вихрей, вращающихся в противоположные стороны, вблизи боковых стенок цилиндра [52, 80]. Течение, индуцированное ВМП, накладывается на течения, генерируемые другими механизмами, ослабляя либо усиливая их. Экспериментальные и численные исследования продемонстрировали стабилизирующий эффект ВМП на нестационарное меридиональное течение [80, 123]. С другой стороны, азимутальное течение, генерируемое ВМП, само теряет устойчивость при превышении азимутальной скоростью некоторого порога (неустойчивость Тейлора-Куэтта) [52, 56, 117]. Как уже было отмечено, гидродинамическая неустойчивость течения в расплаве негативным образом сказывается на качестве получаемых кристаллов. Поэтому задачей управления процессами кристаллизации с помощью ВМП является нахождение диапазона интенсивностей ВМП, в котором интенсивность индуцированного меридионального течения становится сравнимой по величине с интенсивностью течений, генерируемых иными механизмами, при этом само азимутальное течение остается в устойчивой зоне.

### **Цели и задачи диссертационной работы**

Целью диссертационной работы являлось исследование влияния вращающегося магнитного поля на течения и тепло- и массоперенос при

выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации и определение оптимальных параметров применения вращающегося магнитного поля для управления указанными процессами.

Для достижения поставленных целей, в диссертации 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 течение и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ВНК.
- Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на течение и тепло- и массообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ОТФ.

### **Научная новизна результатов**

В настоящей диссертации:

- Впервые проведено численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля (ВМП) на течение и массоперенос в расплаве и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации (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 [115] 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 выполнено численное моделирование влияния ВМП на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методом осевого теплотока на фронте кристаллизации (ОТФ). 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.

### **Теоретическая и 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.

### **Методология и методы диссертационного исследования**

Вычислительная часть работы была проведена с применением современных вычислительных методов. Дискретизация дифференциальных уравнений проводилась методами конечных разностей и конечных объемов. Отображение физических областей на прямоугольную вычислительную сетку осуществлялось с помощью алгебраического преобразования координат. Структура течения определялась в терминах завихренности, функции тока и азимутального момента скорости. Дискретизованные системы уравнений решались численно по полностью неявной схеме с применением разработанного автором прикладного пакета [29, 134]. Нелинейные системы

алгебраических уравнений решались методом Ньютона (методом касательных), системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) решались с применением сторонних пакетов в последовательном и параллельном режимах. Лабораторный эксперимент выполнялся на 2-дюймовой установке ВНК в конструктиве *VGF*.

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

Автор защищает:

- Результаты численного моделирования влияния однородного вращающегося магнитного поля на течения, тепло- и массообмен и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации в земных условиях.
- Данные по влиянию вращающегося магнитного поля на форму фронта кристаллизации и распределение примеси, полученные в ходе лабораторных экспериментов по выращиванию полупроводниковых кристаллов вертикальной направленной кристаллизации.
- Результаты численного моделирования влияния однородного вращающегося магнитного поля на течения, тепло- и массообмен и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом осевого теплотока на фронте кристаллизации в земных условиях.
- Концепцию и реализацию универсального пакета для численного решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением апробированных теоретических подходов и численных методов; согласием

результатов в предельных случаях с имеющимися в литературе; тестированием, применяемых алгоритмов и программ путем сопоставления с известными результатами; исследованием сходимости конечно-разностных схем при уменьшении пространственного шага сетки.

Материалы диссертации докладывались на ряде конференций, научных школ, конгрессов и семинаров:

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

Результаты диссертационного исследования опубликованы в 11 работах, из них 4 работы [15, 18, 65, 77] – в изданиях из перечня ВАК.

### **Личный вклад автора**

Автором разработан [29] и реализован [134] универсальный программный пакет для численного решения систем дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами, применявшийся для решения задач, описанных в настоящей диссертации [18, 65, 77], а также для других гидродинамических задач [15]. Написание программного кода, проведение численных расчетов и обработка результатов для всех задач выполнены

автором лично. Постановка задач и анализ результатов проведены автором совместно с научным руководителем и соавторами опубликованных работ.

Лабораторный эксперимент выполнен в составе рабочей группы соавторов опубликованных работ [11]. Калибровка тепловых параметров печи ВНК и контроль проведения экспериментов по выращиванию кристаллов проведены автором лично.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, основной части, заключения и списка литературы. Во введении к диссертации определены актуальность избранной темы, степень ее разработанности, цели и задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, методология и методы диссертационного исследования, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробация результатов, личный вклад автора. Первая и вторая отражают содержание научных исследований, проведенных в рамках диссертационной работы. В третьей главе приведено описание разработанного программного пакета, примененного для решения численных задач диссертации. В заключение изложены основные результаты диссертации и определяются перспективы дальнейшей разработки темы исследований. Общий объем диссертации 147 страниц. Работа содержит 41 рисунок, 4 таблицы и 2 приложения. Список литературы насчитывает 146 наименований.

# ГЛАВА 1. ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕССЫ ТЕПЛОМАССООБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ВЕРТИКАЛЬНОЙ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Настоящая глава посвящена численному и экспериментальному исследованию влияния вращающегося магнитного поля (ВМП) на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации (ВНК).

Семейство методов вертикальной направленной кристаллизации, имеющих в основе печь Бриджмена-Стокбаргера (*VB*, *LEVB*, *VGF* и др.), применяется для получения относительно небольших, диаметром 2-4 дюйма [34, 62, 110], кристаллов с высокой однородностью распределения примеси и малой плотностью дислокаций. Тем не менее, в литературе имеются сведения и о получении кристаллов большего диаметра [112]. Выращенные кристаллы применяются для производства полупроводниковых лазеров и в качестве исходного материала для дальнейшей обработки эпитаксиальными методами. Достоинством данного семейства методов является отсутствие свободных поверхностей, что исключает появление термокапиллярной конвекции, а также возможность более точного контроля температурного поля и, как следствие, управления формой фронта кристаллизации и термическими напряжениями в кристалле. Кроме этого, печи Бриджмена отличаются пониженным энергопотреблением, что имеет немаловажное значение для промышленного применения.

Одним из основных различий модификаций метода Бриджмена является способ получения температурного поля, изменяющегося со временем. Исторически первым способом был вариант “движущаяся ампула + неподвижный нагреватель”, при котором управление процессом роста осуществлялось движением ампулы внутри печи, в которой поддерживался

постоянный продольный градиент температуры. Такой способ наиболее характерен для горизонтального метода Бриджмена. Обратным к нему является метод “неподвижная ампула + движущийся нагреватель”, при котором движущимся элементом является нагреватель.

В связи с прогрессом вычислительной техники появилась возможность для появления печи конструктива *Vertical Gradient Freeze (VGF)*, в которой движущиеся части отсутствуют, а требуемый режим создается и поддерживается с помощью нескольких нагревателей с независимым управлением. Преимуществами такого подхода является значительное упрощение механической части печи, улучшение теплоизоляции, возможность варьирования режима роста в более широких пределах, и улучшение автоматизации процесса в целом.

Для управления конвективными процессами в расплаве находят широкое применение различные механизмы воздействия, такие как вибрации и магнитные поля. Магнитное поле является эффективным средством воздействия на течение электропроводящей жидкости, позволяющее как подавлять, так и усиливать естественную конвекцию. Исторически первым типом поля, нашедшим применение в выращивании кристаллов, было статическое магнитное поле. Основным его действием является подавление течения, что помогает уменьшить флуктуации температуры и повысить однородность распределения примеси в случае, когда основное течение нестационарно. В то же время, для достижения существенного эффекта требуются поля значительной, до  $10^2$  мТл, интенсивности, что серьезно ограничивает применимость этого метода. Более перспективным является применение переменных магнитных полей – бегущего и вращающегося. Вращающееся магнитное поле (ВМП) действует на расплав путем генерации азимутального течения, индуцирующего, в свою очередь, экмановское течение в меридиональной плоскости [2, 56, 117]. Последнее, взаимодействуя с конвективным течением, способно как ослабить, так и усилить его, что делает

возможным управление конвекцией в достаточно широких пределах. Для достижения эффекта достаточно полей порядка 1 мТл (для кристаллов диаметром 2-3 дюйма), что делает вращающегося магнитного поля привлекательным для промышленного применения.

В работе [52] рассмотрено действие различных видов магнитных полей на процессы тепло- и массообмена при выращивании кристаллов методами направленной кристаллизации. Приведены экспериментальные данные о положительном влиянии вращающегося магнитного поля на устойчивость термоконцентрационного течения.

В работе [98] приводятся результаты лабораторного эксперимента по исследованию влияния вращающегося магнитного поля на форму фронта кристаллизации и качество 2-дюймового кристалла Si:GaAs, полученного методом ВНК, а также результаты глобального численного моделирования данного процесса. Показано, что вращающееся магнитное поле способно значительно уменьшить прогиб фронта кристаллизации и улучшить однородность кристалла уже при умеренных интенсивностях ( $\sim 1$  мТл). Также экспериментально показано возникновение выпукло-вогнутого W-образного фронта кристаллизации при достаточно больших интенсивностях поля. Вопрос о влиянии вращающегося магнитного поля на процесс массопереноса в процессе кристаллизации в данной работе не исследовался.

Следует отметить, что работ по численному моделированию влияния ВМП на структуру течения, форму фронта кристаллизации и процессы нестационарного конвективного теплообмена и массопереноса в расплаве при выращивании полупроводниковых кристаллов методом Бриджмена к моменту выполнения автором работы [77] опубликовано не было.

В более поздней работе [108] на основе численного моделирования с использованием двумерной модели приводится сравнительный анализ влияния вращающегося и бегущего магнитного полей на процесс выращивания 2- и 3-дюймовых кристаллов GaAs и InP в плоскодонных ампулах, в частности,

оцениваются форма фронта кристаллизации и термические напряжения в получившемся кристалле. Продемонстрирован эффект [4, 77, 98] перехода фронта кристаллизации от вогнутого к вогнуто-выпуклому с поднятием на оси симметрии. Показано, что бегущее поле более перспективно для малых диаметров кристалла и InP, тогда как ВМП для больших кристаллов и повышенных скоростей роста.

В [36] приведены результаты лабораторного эксперимента по выращиванию кристалла Ga:Ge методом ВНК в присутствии вращающегося магнитного поля, дополненные численным моделированием проблемы. Установка, использовавшаяся в эксперименте, была аналогична [100], но верхний конец зоны закрыт подпружиненным графитовым колпачком для предотвращения появления свободной поверхности и связанной с ней термокапиллярной конвекцией. Эксперименты показали, что приложенное магнитное поле значительно интенсифицирует процесс перемешивания расплава и, соответственно, уменьшает осевую неоднородность распределения примеси.

В недавно вышедшей работе [99] проведен сравнительный анализ численного моделирования влияния вращающегося и бегущего магнитных полей на процессы кристаллизации Ga:Ge методом ВНК. Представленные в работе результаты демонстрируют стабилизирующий эффект ВМП на нестационарное термоконвективное течение в расплаве и, с другой стороны, потерю устойчивости течения с появлением характерной полосчатой неоднородности распределения примеси в кристалле при превышении интенсивностью воздействия ВМП критического порога. Также продемонстрировано положительное влияние ВМП малой интенсивности на радиальную неоднородность примеси в кристалле.

На момент выполнения экспериментальной части [11] диссертационной работы были доступны результаты экспериментальных исследований влияния ВМП на поведение проводящей жидкости в замкнутых цилиндрических

полостях с различным отношением высоты к ширине [57], влияния ВМП на процессы кристаллизации методом жидкой зоны [51, 52], методом Чохральского. Также были доступны результаты численного моделирования влияния ВМП на процессы кристаллизации методом ВНК. Тем не менее, результатов экспериментов по влиянию вращающегося магнитного поля на процессы кристаллизации при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ВНК опубликовано не было.

В настоящей главе приведены результаты численного исследования влияния однородного вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводникового кристалла Ga:Ge методом ВНК, а также лабораторных экспериментов по выращиванию полупроводникового кристалла Si:GaAs методом ВНК в присутствии ВМП.

### 1.1 Вращающееся магнитное поле

Рассмотрим вид силы Лоренца для пространственно однородного магнитного поля, вращающегося с постоянной скоростью  $\vec{\Omega} = \Omega \vec{e}_z$  [80, 83, 87].

Система уравнений Максвелла в вакууме имеет вид

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \left( 4\pi \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \right), \quad (1.2)$$

$$\nabla \vec{D} = 4\pi \rho, \quad (1.3)$$

$$\nabla \vec{B} = 0. \quad (1.4)$$

В случае, когда среда не является ферромагнетиком и диэлектриком, принимается  $\vec{D} = \vec{E}$ ,  $\vec{B} = \vec{H}$ .

Общее выражение для плотности тока имеет вид

$$\vec{j} = \sigma \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right) + \alpha \nabla T + \dots, \quad (1.5)$$

где  $\sigma$  - электропроводность,  $v$  - скорость движения проводящей среды,  $\alpha$  - коэффициент термо-э.д.с.

Уравнение индукции для магнитного поля (1.2) с учетом (1.5) в пренебрежении термо-э.д.с. можно переписать в виде

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \frac{c^2}{4\pi\sigma} \Delta \vec{B} + \nabla \times [\vec{v} \times \vec{B}], \quad (1.6)$$

После обезразмеривания (1.6) примет вид

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \frac{1}{\text{Re}_m} \Delta \vec{B} + \nabla \times [\vec{v} \times \vec{B}], \quad (1.7)$$

где  $\text{Re}_m = 4\pi\sigma c^{-2} \tilde{L} \tilde{v}$  - магнитное число Рейнольдса,  $\tilde{L}$  - характерный размер,  $\tilde{v}$  - характерная скорость движения среды.

Оценим характерную величину магнитного числа Рейнольдса в рассматриваемых задачах. Предположим, что  $\tilde{v} = 1$  см/с,  $\tilde{L} = 10$  см,  $\sigma \approx 2 \cdot 10^{16}$  см<sup>-1</sup> (жидкий германий). Тогда  $\text{Re}_m \sim 2 \cdot 10^{-3} \ll 1$ . Иными словами, в интересующих нас конфигурациях в силу малости магнитного числа Рейнольдса можно пренебречь возмущением магнитного поля движением проводящей среды и упростить соотношение (1.7) до

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \frac{c^2}{4\pi\sigma} \Delta \vec{B}. \quad (1.8)$$

Оценим характерную величину числа Гартмана  $Ha = \frac{1}{c} \tilde{B} \tilde{L} \sqrt{\frac{\sigma}{\mu}}$ , где  $B$  - индукция магнитного поля,  $\mu$  - динамическая вязкость. Приняв  $B = 1$  мТл (10 Гс),  $\mu = 7.15e-3$  (жидкий германий) получим оценку  $Ha \sim 0.5$ , что позволяет упростить выражение для плотности тока до закона Ома  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ .

Оценим однородность магнитного поля. Для случая однородного вращения справедливо соотношение  $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{\Omega} \times \vec{B}$ , из которого следует

$\vec{\Omega} \times \vec{B} = \frac{c^2}{4\pi\sigma} \Delta \vec{B}$ . В случае, когда ось вращения поля перпендикулярна вектору

напряженности магнитного поля,  $\tilde{\Omega} \tilde{B} \sim \frac{c^2}{4\pi\sigma} \frac{\tilde{B}}{\delta^2}$  или  $\delta \sim \sqrt{\frac{c^2}{4\pi\sigma \tilde{\Omega}}}$  где

$\delta$  - толщина скин-слоя - характерное расстояние, на котором начинает проявляться пространственная неоднородность магнитного поля. Для случая промышленной частоты вращения поля  $\tilde{\Omega} = 50$  Гц получим оценку  $\delta \approx 8$  см, что доказывает справедливость предположения о радиальной однородности магнитного поля внутри используемой в работе 2” (радиус  $\tilde{R} = 2.54$  см) ампулы  $\tilde{R} < \delta$ .

В предположении пространственно однородного магнитного поля, вращающегося с постоянной скоростью  $\vec{\Omega} = \Omega \vec{e}_z$ , выражение для временного изменения индукции магнитного поля имеет вид:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{\Omega} \times \vec{B}. \quad (1.9)$$

Электрическое  $\vec{E}$  и магнитное  $\vec{B}$  поля могут быть представлены в виде двух потенциалов – скалярного  $\Phi$  и векторного  $\vec{A}$ :

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad (1.10)$$

$$\vec{E} = -\left( \nabla \Phi + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right). \quad (1.11)$$

Из определения векторного потенциала (1.10) получим

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}). \quad (1.12)$$

Соответственно, временная эволюция векторного потенциала

$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{1}{2} \left[ (\vec{\Omega} \cdot \vec{r}) \vec{B} - (\vec{B} \cdot \vec{r}) \vec{\Omega} \right]. \quad (1.13)$$

Скалярный потенциал  $\Phi$  находится из уравнения Лапласа

$$\Delta\Phi = 0 \quad (1.14)$$

и ищется в виде  $\Phi = \Omega B f(r, z) \cos(\phi - \omega t)$ , где  $f$  - меридиональная компонента скалярного магнитного потенциала, - функция, описывающая геометрию задачи.

Уравнение для функции  $f$  в цилиндрических координатах имеет вид:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial f}{\partial z} \right) - \frac{f}{r^2} = 0 \quad (1.15)$$

Предположим, что скорость вращения магнитного поля много больше характерной скорости течения расплава. Действительно,  $\tilde{V}_{RMF} = 2\pi\Omega\tilde{R}$  - максимальная линейная скорость движения поля,  $\tilde{R}$  - внутренний радиус. Принимая характерный радиус ампул, применяющихся в методах направленной кристаллизации  $\tilde{R} \sim 10^{-2}$  м, для исследуемой конфигурации получим  $\tilde{V}_{RMF} \sim 5$  м/с и  $\tilde{V}_{RMF} \gg \tilde{V}$ . В этом случае можно провести осреднение силы Лоренца по времени

$$\bar{\vec{F}}_L = \frac{1}{c} \overline{[\vec{j} \times \vec{B}]} = \frac{\sigma}{c} \left\{ \overline{[(\vec{B} \cdot \vec{r}) \vec{\Omega} \times \vec{B}]} - [\nabla\Phi \times \vec{B}] \right\}, \quad (1.16)$$

которое дает окончательный вид силы Лоренца:

$$\bar{\vec{F}}_L = \frac{1}{2c} \sigma B^2 \left( 1 - \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial z} \right) [\vec{\Omega} \times \vec{r}]. \quad (1.17)$$

В силу пространственной однородности магнитного поля внутри исследуемого объема и вне его, граничными условиями для уравнения (1.17) будут условия на плотность электрического тока. Как известно, расплавы полупроводников имеют электропроводность, близкую к электропроводности металлов,  $\sigma_m \sim 10^6$  (Ом·м)<sup>-1</sup>. Электропроводность же кристаллической фазы полупроводников имеет сильную зависимость от содержания примесей и температуры с увеличением проводимости с ростом концентрации и

температуры. Тем не менее, для типичного содержания примесей и температур кристаллизации порядка  $10^3$  К, электропроводность кристалла не превышает значений  $\sigma_c \sim 10^2 \text{ (Ом}\cdot\text{м)}^{-1}$ , что значительно меньше электропроводности жидкой фазы. Помимо кристалла, расплав полупроводника в исследуемых задачах находится в контакте со стенками ампулы и погруженным нагревателем, которые в большинстве случаев выполнены из материалов (графит, кварц, пиролитический нитрид бора), электропроводности которых, даже в случае с графитом, как наиболее электропроводным материалом  $\sigma \sim 10^5 \text{ (Ом}\cdot\text{м)}^{-1}$ , по крайней мере, на порядок ниже типичной электропроводности расплава. Таким образом, будет естественно предположить, что в исследуемых конфигурациях задачи расплав со всех сторон окружен неэлектропроводными границами. В этом случае граничными условиями будет отсутствие нормальной компоненты электрического тока на границе:

$$\sigma(\vec{E} \cdot \vec{n})\Big|_{\Gamma} = 0. \quad (1.18)$$

Граничное условие (1.18), переписанное в терминах функции  $f$ , имеет вид:  
на боковой границе расплава

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (1.19)$$

на верхнем торце ампулы и фронте кристаллизации

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = r. \quad (1.20)$$

## 1.2 Постановка задачи

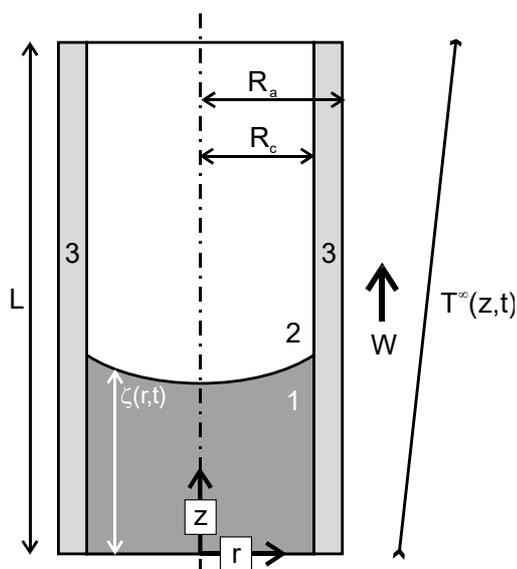


Рис. 1.1 Схематическое изображение модели процесса ВНК

Рассмотрим модель процесса ВНК (Рис. 1.1), представляющую собой цилиндрическую ампулу с боковой стенкой конечной толщины (3), заполненную материалом, находящимся в твердой (кристалл) (1) и жидкой (расплав) (2) фазах. Высота ампулы -  $L$ , внутренний радиус -  $R_c$  внешний радиус -  $R_a$ . Граница раздела фаз  $\zeta = z(r, t)$  (фронт кристаллизации) в общем случае искривлена; ее форма и положение зависят от времени. Толщина границы раздела фаз предполагается равной нулю, а ее положение соответствует изотерме со значением температуры фазового перехода расплав/кристалл  $T_*$ . Ампула и кристалл считаются покоящимися в лабораторной системе отсчета; управление процессом кристаллизации осуществляется продвижением бокового нагревателя вверх вдоль ампулы с постоянной скоростью  $W$ , моделируемым зависящим от времени распределением температуры  $T^\infty(z, t)$ . Температуры нижнего и верхнего концов ампулы принимаются равными  $T^\infty(0, t)$  и  $T^\infty(L, t)$ , соответственно. Расплав считается вязкой несжимаемой ньютоновской жидкостью.

Течение и тепломассоперенос в расплаве полупроводника будем описывать системой уравнений термоконцентрационной конвекции в приближении Буссинеска [13]. В лабораторной системе отсчета, в которой ампула и кристалл покоятся, эти уравнения имеют вид:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho_m} \nabla p + \nu \Delta \vec{V} - \vec{g}(\beta_T T - \beta_C C) + \frac{1}{\rho_m} \vec{F}_L, \quad (1.21)$$

$$\nabla \vec{V} = 0, \quad (1.22)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) C = D \Delta C, \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) T = \chi_m \Delta T. \quad (1.24)$$

Вклад вращающегося магнитного поля представлен добавочным слагаемым  $\vec{F}_L$  (силой Лоренца) в уравнении движения,  $\vec{V}$  – скорость течения в расплаве,  $T$  – температура,  $C$  – концентрация примеси,  $\rho_m$  – плотность расплава,  $p$  – давление,  $\nu$  – кинематическая вязкость,  $\chi_i$  – температуропроводность материала  $i$ ,  $D$  – коэффициент диффузии примеси в расплаве,  $\beta_T$  – коэффициент теплового расширения расплава,  $\beta_C$  – коэффициент концентрационного расширения расплава,  $\vec{g}$  – сила тяжести; индекс  $i$  принимает значения  $m$ ,  $c$  и  $a$  для расплава, кристалла и ампулы, соответственно.

Уравнения (1.21)-(1.24) записаны для области, занятой расплавом. Для области, занятой кристаллом, и стенок ампулы записывается уравнение переноса тепла в неподвижной среде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_{c,a} \Delta T. \quad (1.25)$$

Уравнения (1.21)-(1.25) дополняются уравнением для магнитного поля (1.15).

### 1.2.1 Граничные условия для скорости течения

Примем следующие направления нормального  $\vec{n}$  и тангенциального  $\vec{\tau}$  векторов на фронте кристаллизации:  $\vec{n} \cdot \vec{e}_z > 0$  и  $\vec{\tau} \cdot \vec{e}_r > 0$ . В этих условиях на искривленном фронте кристаллизации  $\zeta(r)$  они будут иметь вид:

$$\vec{n} = \frac{\vec{e}_z - \zeta' \vec{e}_r}{\sqrt{1 + (\zeta')^2}}, \quad \vec{\tau} = \frac{\vec{e}_r + \zeta' \vec{e}_z}{\sqrt{1 + (\zeta')^2}}, \quad (1.26)$$

где  $\vec{e}_r$  и  $\vec{e}_z$  - орты системы координат,  $\zeta' = \frac{\partial \zeta}{\partial r}$ .

Поскольку тангенциальные компоненты скорости расплава и кристалла одинаковы, касательная компонента скорости расплава, в силу условия прилипания, равна нулю:

$$V_\tau = 0. \quad (1.27)$$

Нормальная компонента вычисляется следующим образом. Предположим, что фронт кристаллизации движется со скоростью  $\vec{U} = U \cdot \vec{e}_z$ . Тогда нормальная и тангенциальная компоненты скорости движения фронта  $\vec{U}$  будут иметь вид:

$$U_n = \vec{U} \cdot \vec{n} = \frac{U}{\sqrt{1 + (\zeta')^2}}, \quad U_\tau = \vec{U} \cdot \vec{\tau} = \frac{U \zeta'}{\sqrt{1 + (\zeta')^2}}. \quad (1.28)$$

Для определения нормальной компоненты скорости расплава на фронте кристаллизации рассмотрим малый элемент поверхности фронта кристаллизации. Перейдем в систему отсчета, связанную с движущимся фронтом, и рассмотрим потоки массы  $\vec{j}_{c,m}$ , проходящие через малый элемент поверхности фронта со стороны кристалла  $\vec{j}_c = -\vec{U} \rho_c$  и со стороны расплава  $\vec{j}_m = (\vec{V} - \vec{U}) \rho_m$ . Закон сохранения массы диктует условие равенства потоков массы через границу:

$$\rho_m (\vec{V} - \vec{U}) \cdot \vec{n} = -\rho_c \vec{U} \cdot \vec{n}. \quad (1.29)$$

С учетом (1.28) получаем условие для нормальной скорости жидкости на фронте кристаллизации:

$$V_n = \frac{\rho_c - \rho_m}{\rho_m} \frac{U}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2}}. \quad (1.30)$$

Боковая стенка ампулы и верхняя крышка покоятся относительно лабораторной системы отсчета; в силу условия прилипания скорость жидкости на этих границах равна нулю:

$$\vec{V} = V_r = V_z = 0. \quad (1.31)$$

На оси симметрии ставятся следующие условия:

$$V_r = \frac{\partial V_z}{\partial r} = 0. \quad (1.32)$$

### 1.2.2 Граничные условия для температуры

На внешней границе ампулы считается выполненным линейный закон теплоотдачи Ньютона-Рихмана:

$$\kappa_a \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_a = -h_a (T - T^\infty), \quad (1.33)$$

где  $\kappa_a$  - теплопроводность материала ампулы,  $h_a$  - коэффициент теплоотдачи пары ампула-окружение,  $T^\infty$  - температура окружающей среды, определяющая условия нагрева.

В рассматриваемой задаче используется линейный профиль распределения температуры  $T^\infty = T(z, t)$ :

$$T^\infty(z, t) = T_* + \Delta T \frac{z - Z_*(t)}{L}, \quad (1.34)$$

где  $T_*$  - температура фазового перехода расплав/кристалл,  $L$  - полная высота ампулы,  $\Delta T$  - полный осевой перепад температуры (разница между

температурами «горячего» и «холодного» концов ампулы),  $Z_*$  - высота точки профиля температуры  $T^\infty(z, t)$  относительно дна ампулы, на которой температура  $T^\infty$  равна температуре фазового перехода,  $T^\infty(Z_*) = T_*$ . Поскольку в работе предполагается постоянство скорости смещения нагревателя  $W$ , положение точки  $Z_*$  в момент времени  $t$  есть

$$Z_*(t) = Z_*(0) + Wt. \quad (1.35)$$

На внутренних границах кристалл-ампула и расплав-ампула ставятся условия непрерывности температуры и теплового потока

$$\kappa_i \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_i = \kappa_j \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_j, T \Big|_i = T \Big|_j \quad (1.36)$$

для пар  $\{i, j\} = \{c, a\}$  и  $\{i, j\} = \{m, a\}$ , соответственно.

На фронте кристаллизации ставится условие непрерывности температуры и теплового потока с учетом высвобождения теплоты фазового перехода

$$\kappa_m \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_m = \kappa_c \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_c + \rho_c \Delta H \frac{\frac{\partial \zeta}{\partial t}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2}}, \quad (1.37)$$

где  $\Delta H$  - удельная теплота фазового перехода,  $\zeta = \zeta(r, t)$  - зависящее от времени положение фронта кристаллизации.

Температура на верхнем и нижнем торцах ампулы задается распределением температуры  $T^\infty$ :

$$T \Big|_{z=0} = T^\infty(0, t), T \Big|_{z=L} = T^\infty(L, t). \quad (1.38)$$

На оси симметрии ставится условие

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0. \quad (1.39)$$

### 1.2.3 Граничные условия для концентрации примеси

На фронте кристаллизации ставится условие баланса массы для примеси [24, 73, 111, 131]:

$$D \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} \Big|_m = C(1-K) \frac{\rho_c}{\rho_m} \frac{\frac{\partial \zeta}{\partial t}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2}}, \quad (1.40)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии примеси в расплаве,  $K$  - коэффициент сегрегации примеси.

На остальных границах – внутренней стенке ампулы, верхнем торце ампулы и оси симметрии ставится условие отсутствия потока примеси:

$$\frac{\partial C}{\partial \vec{n}} \Big|_{\Gamma} = 0. \quad (1.41)$$

### 1.2.4 Граничные условия для магнитного поля

Граничные условия для магнитного поля ставятся на скалярный магнитный потенциал  $f$ . На боковой границе ампулы

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} \Big|_m = 0, \quad (1.42)$$

на фронте кристаллизации и верхней крышке ампулы

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} \Big|_m = r, \quad (1.43)$$

на оси симметрии

$$f \Big|_{r=0} = 0. \quad (1.44)$$

При выводе граничных условий использовано условие обращения в нуль нормальной компоненты плотности электрического тока  $\vec{j}$  на границе

$(\vec{j} \cdot \vec{n})|_{\Gamma} = 0$ , что соответствует случаю диэлектрических массивов, окружающих расплав.

## 1.3 Численный метод

### 1.3.1 Преобразование уравнений

В силу геометрии задачи (Рис. 1.1) решение системы уравнений (1.21)-(1.24) и (1.15) будем искать в цилиндрической системе координат  $\{r, z, \phi\}$ . Ограничимся рассмотрением осесимметричного случая, когда

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = 0. \quad (1.45)$$

Рассмотрим уравнения конвекции несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска (1.21)-(1.22). Выделим вынуждающую силу  $\vec{F}$  из (1.21):

$$\vec{F} = -\vec{g}(\beta_T T - \beta_C C) + \frac{1}{\rho_m} \vec{F}_L. \quad (1.46)$$

Определим завихренность  $\vec{\Phi}$  как ротор скорости  $\vec{V}$ :

$$\vec{\Phi} = \nabla \times \vec{V}. \quad (1.47)$$

Применим операцию взятия ротора  $\nabla \times$  к уравнению Навье-Стокса (1.21). С учетом известных правил векторного анализа  $\nabla \times (\vec{A} \nabla) \vec{A} = \frac{1}{2} \nabla A^2 - \vec{A} \times (\nabla \times \vec{A})$  и  $\nabla \times \nabla f = 0$  получим

$$\nabla \times (\vec{V} \nabla) \vec{V} = \nabla \times \vec{\Phi} \times \vec{V}$$

и окончательно

$$\frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial t} + \nabla \times \vec{\Phi} \times \vec{V} = \nu \Delta \vec{\Phi} + \nabla \times \vec{F}. \quad (1.48)$$

Обозначим скалярную завихренность  $\varphi$  как азимутальную компоненту векторной завихренности  $\vec{\Phi}$  (1.47)

$$\varphi = \Phi_\phi = \frac{\partial V_r}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial r}, \quad (1.49)$$

функцию тока  $\psi$

$$V_r = -\frac{1}{\rho_m r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad V_z = \frac{1}{\rho_m r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (1.50)$$

и азимутальный момент  $M$

$$M = \rho_m r V_\phi. \quad (1.51)$$

Окончательный вид уравнения для  $\varphi$  получается из (1.48) с использованием (1.49)-(1.51) взятием азимутальной компоненты:

$$\begin{aligned} & \rho_m \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{M^2}{\rho_m} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \\ & - \rho_m v \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\varphi) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r\varphi) \right) \right] - \rho_m (\nabla \times \vec{F})_\alpha = 0 \end{aligned} \quad (1.52)$$

Осесимметричность задачи (1.45) позволяет получить уравнение для азимутального момента  $M$  из (1.21):

$$\begin{aligned} & \rho_m r \frac{\partial M}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( M \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left( M \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + 2 \frac{M}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} - \\ & - \rho_m r^2 v \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial M}{\partial z} \right) \right] - \rho_m r^2 F_\alpha = 0 \end{aligned} \quad (1.53)$$

Уравнение для функции тока  $\psi$  получается из определения завихренности (1.47) с использованием (1.45), (1.49) и (1.50):

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \rho_m \varphi = 0. \quad (1.54)$$

Обобщенное уравнение переноса скалярной функции  $S$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + (\vec{V}\nabla)S = \gamma\Delta S \quad (1.55)$$

в используемой цилиндрической системе координат с учетом (1.45) и (1.50) имеет вид:

$$\rho_m r \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( S \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left( S \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \rho_m \gamma \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial S}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( r \frac{\partial S}{\partial z} \right) \right] = 0. \quad (1.56)$$

Уравнение вида (1.56) используется для решения задач переноса тепла (1.24)-(1.25) и переноса примеси (1.23).

### 1.3.2 Построение расчетной сетки

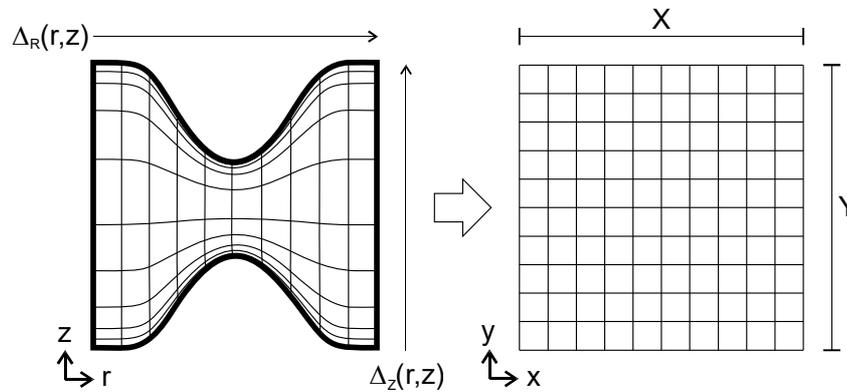


Рис. 1.2 Отображение физической области на вычислительную сетку

Для решения задачи с искривленным фронтом кристаллизации осуществлялось отображение (Рис. 1.2) физической области задачи  $\{r, z\}$  на прямоугольную однородную вычислительную сетку  $\{x, y\}$  с единичным пространственным шагом с помощью аналитического преобразования координат [74]:

$$r = \Delta_R(r, z) \frac{Q}{A + (1 - A)Q}; \quad z = \Delta_Z(r, z) \left( 1 - \frac{B^{Y-y} - 1}{B^Y - 1} \right), \quad (1.57)$$

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, обеспечивающие сгущение сетки вблизи границ области,  $\tanh$  – функция гиперболического тангенса. Преобразование (1.57) задает симметричное сгущение сетки по горизонтали вблизи границ  $r=0$  и  $r=\Delta_R$  и одностороннее сгущение сетки по вертикали вблизи границы  $z=\Delta_Z$ .

Прямоугольная вычислительная сетка разбивалась на четыре области A, B, C, D (Рис. 1.3), где A – область кристалла, B – область расплава, C и D – области, занимаемые ампулой. Фронт кристаллизации расположен на границе областей A и B. Для каждой из этих областей задается собственное распределение координат вида (1.57), характеризующееся набором параметров  $\{X, Y, \Delta_{R,Z}, A, B, \delta\}$ .

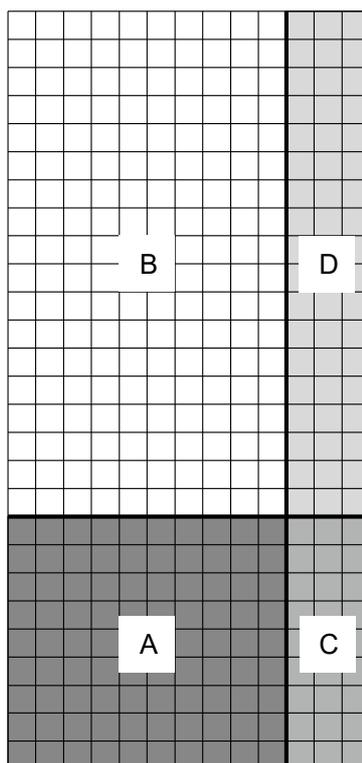


Рис. 1.3 Вычислительная сетка

Преобразование первых пространственных производных на обобщенной криволинейной неортогональной сетке происходит следующим образом:

$$\partial_r = \partial_r x \cdot \partial_x + \partial_r y \cdot \partial_y, \quad (1.58)$$

$$\partial_z = \partial_z x \cdot \partial_x + \partial_z y \cdot \partial_y. \quad (1.59)$$

Вторые пространственные производные преобразуются соответственно:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r^2} = & \left[ \partial_r y \cdot \partial_y (\partial_r x) + \partial_r x \cdot \partial_x (\partial_r x) \right] \cdot \partial_x + (\partial_r x)^2 \cdot \partial_x^2 + \\ & + \left[ \partial_r x \cdot \partial_x (\partial_r y) + \partial_r y \cdot \partial_y (\partial_r y) \right] \cdot \partial_y + (\partial_r y)^2 \cdot \partial_y^2 + \\ & + 2[\partial_r x \cdot \partial_r y] \cdot \partial_{xy}^2 \end{aligned} \quad (1.60)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} = & \left[ \partial_z y \cdot \partial_y (\partial_z x) + \partial_z x \cdot \partial_x (\partial_z x) \right] \cdot \partial_x + (\partial_z x)^2 \cdot \partial_x^2 + \\ & + \left[ \partial_z x \cdot \partial_x (\partial_z y) + \partial_z y \cdot \partial_y (\partial_z y) \right] \cdot \partial_y + (\partial_z y)^2 \cdot \partial_y^2 + \\ & + 2[\partial_z x \cdot \partial_z y] \cdot \partial_{xy}^2 \end{aligned} \quad (1.61)$$

Значения коэффициентов  $\frac{\partial\{r, z\}}{\partial\{x, y\}}$  в каждом узле сетки  $(x, y)$  находятся численно методом конечных разностей по полям  $r(x, y)$  и  $z(x, y)$ , вычисленным по формулам (1.57). Необходимые для производных в (1.58)-(1.61) обратные коэффициенты  $\frac{\partial\{x, y\}}{\partial\{r, z\}}$  находятся численно обращением матрицы

$$\left| \frac{\partial\{x, y\}}{\partial\{r, z\}} \right| = \left| \frac{\partial\{r, z\}}{\partial\{x, y\}} \right|^{-1}. \quad (1.62)$$

### 1.3.3 Дискретизация уравнений

Разностные аналоги уравнений для завихренности  $\varphi$  (1.52), функции тока  $\psi$  (1.54) и азимутального момента  $M$  (1.53) строились методом конечных разностей с использованием центральных разностей второго порядка точности для сетки с единичным пространственным шагом [21, 23] вида:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{1}{2}(f_{i+1} - f_{i-1}), \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}. \quad (1.63)$$

Разностные аналоги уравнений переноса вида (1.56) для температуры  $T$  и концентрации примеси  $C$  строились методом конечных объемов [71, 73, 113]. Консервативная форма данного уравнения в преобразованных координатах имеет вид:

$$\begin{aligned}
 & a \cdot \partial_t S + \partial_x (b \cdot \partial_y \psi \cdot S) - \partial_y (b \cdot \partial_x \psi \cdot S) + \\
 & + \partial_x \left[ \frac{c}{J} \{g_{22} \cdot \partial_x (d \cdot S) - g_{12} \cdot \partial_y (d \cdot S)\} \right] + \\
 & + \partial_y \left[ \frac{c}{J} \{g_{11} \cdot \partial_y (d \cdot S) - g_{12} \cdot \partial_x (d \cdot S)\} \right] + \\
 & + J \cdot e = 0
 \end{aligned} \tag{1.64}$$

где  $J = \partial_r x \cdot \partial_z y - \partial_z x \cdot \partial_r y$ ,  $g_{11} = (\partial_r x)^2 + (\partial_r y)^2$ ,  $g_{22} = (\partial_z x)^2 + (\partial_z y)^2$ ,  
 $g_{12} = \partial_r x \cdot \partial_z x + \partial_r y \cdot \partial_z y$

- коэффициенты преобразования, вычисляемые аналогично методу конечных разностей,  $S$  и  $a-e$  – параметры уравнений из Таблицы 1.

Таблица 1. Параметры уравнений переноса тепла и примеси

$s$	$a$	$b$	$c$	$d$	$e$
$C$	$\rho_m r$	1	$\rho_m D$	1	0
$T$	$\rho_m r$	1	$\rho_m \chi$	1	0

Временные производные дискретизовались направленной разностью первого порядка точности.

### 1.3.4 Решение уравнений

Полученная таким образом нелинейная система алгебраических уравнений  $\{\varphi, \psi, M, T, C\}$ , решалась совместно матричным методом Ньютона с привлечением разработанного автором пакета [29, 134]. Для численного решения СЛАУ использовался пакет MUMPS [135]. Расчеты производились на основной сетке  $50 \times 100$  с уточнением результатов на сетке  $75 \times 150$  узлов.

Подробнее метод численного решения нелинейной алгебраической системы уравнений  $\{\varphi, \psi, M, T, C\}$  обсуждается в главе 3 настоящей диссертации.

#### 1.4 Результаты численного моделирования

Численное моделирование производилось для германия, легированного галлием Ga:Ge [73]; основные параметры задачи приведены в Таблице 2. Значения параметров предполагались постоянными, не зависящими от температуры и концентрации примеси. В качестве материала ампулы рассматривался графит, как один из наиболее применяемых материалов в лабораторных экспериментах. Вследствие слоистой структуры кристаллической решетки монокристаллический графит обладает высокой анизотропией теплофизических характеристик. Анизотропией также обладает и поликристаллическая форма графита, но уже в намного меньшей степени. В проведенных расчетах анизотропия свойств материала ампулы не учитывалась.

Во всех численных экспериментах принимались следующие начальные условия. При  $t=0$  температура расплава, кристалла и ампулы предполагалась установившейся и принималась равной  $T^\infty(z,0)$  в соответствии с задаваемым профилем нагрева (1.34). Фронт кристаллизации предполагался покоящимся, плоским; его положение по высоте относительно дна ампулы принималось равным  $Z_*(0)$  (1.35). Скорость течения  $\vec{V}$  в начальный момент времени принималась равной нулю. Концентрация примеси в кристалле и расплаве предполагалась однородной и равной  $C_0$ .

Таблица 2. Параметры задачи

Печь ВНК			
Высота ампулы	$L$	6.4	см
Внутренний радиус ампулы	$R_c$	1.6	см

Внешний радиус ампулы	$R_a$	2.1	см
Начальное положение нагревателя	$Z_*(0)$	3.2	см
Скорость смещения нагревателя	$W$	$4 \cdot 10^{-4}$	$\frac{\text{см}}{\text{с}}$
Исходная концентрация примеси	$C_0$	$10^{-2}$	% <sub>вес</sub>
Осовой перепад температуры	$\Delta T$	300	С
<b>Германий, легированный галлием Ga:Ge</b>			
Плотность кристалла, расплава	$\rho_{c,m}$	5.5	$\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$
Температура фазового перехода	$T_*$	937.4	$^{\circ}\text{C}$
Теплопроводность кристалла	$\kappa_c$	0.17	$\frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}$
Теплопроводность расплава	$\kappa_m$	0.39	$\frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}$
Теплоемкость кристалла, расплава	$C_{\rho,c,m}$	0.39	$\frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{К}}$
Удельная теплота плавления	$\Delta H$	460	$\frac{\text{Дж}}{\text{г}}$
Коэффициент теплового расширения	$\beta_T$	$5 \cdot 10^{-4}$	$\text{К}^{-1}$
Коэффициент концентрационного расширения	$\beta_C$	0	$\text{К}^{-1}$
Динамическая вязкость	$\mu$	$7.15 \cdot 10^{-3}$	$\frac{\text{г}}{\text{см} \cdot \text{с}}$
Электропроводность расплава	$\sigma$	$2.27 \cdot 10^6$	$\frac{\text{См}}{\text{м}}$
Равновесный коэффициент сегрегации	$K$	0.087	1
Коэффициент диффузии галлия в германии	$D$	$2.1 \cdot 10^{-4}$	$\frac{\text{см}^2}{\text{с}}$
<b>Графит</b>			

Плотность	$\rho_a$	1.8	$\frac{г}{см^3}$
Теплоемкость	$C_{p_a}$	1.8	$\frac{Дж}{г \cdot К}$
Теплопроводность	$\kappa_a$	3.26	$\frac{Вт}{см \cdot К}$
Коэффициент теплоотдачи	$h_a$	46.6	$\frac{Вт}{см^2 \cdot К}$
<b>Вращающееся магнитное поле</b>			
Частота вращения	$\Omega$	50	$Гц$
Индукция магнитного поля	$B$	0 ÷ 0.5	$мТл$

#### 1.4.1 Бесконвективный режим роста

Рассмотрим гипотетический бесконвективный режим роста кристалла, положив  $\vec{g} = 0$  и  $B = 0$ . В этом случае перенос тепла и примеси происходит диффузионным образом. Несмотря на отсутствие конвективного теплопереноса, фронт кристаллизации не является плоским из-за скачка коэффициента теплопроводности на границе раздела фаз, а в процессе роста при движении нагревателя еще и по причине высвобождения теплоты фазового перехода.

В зависимости от физических параметров применяемых материалов фронт может быть как вогнутым, так и выпуклым. Для рассматриваемого случая Ga:Ge во всех исследованных конфигурациях фронт получался вогнутым (Рис. 1.4), величина прогиба фронта сравнима с радиусом ампулы, форма же практически не меняется с течением времени; осевой градиент температуры внутри ампулы максимален на высоте движущегося нагревателя и быстро уменьшается при смещении к верхнему и нижнему концам ампулы.

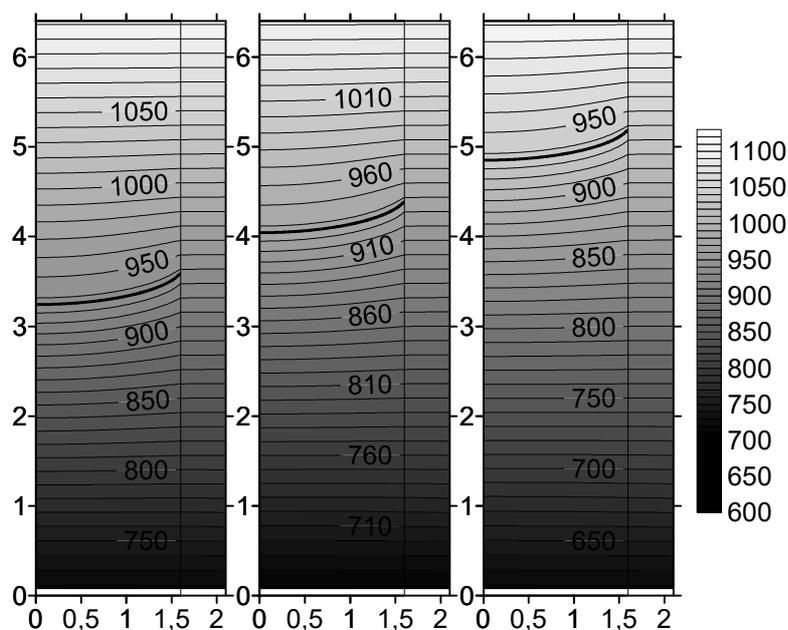


Рис. 1.4 Поля температуры  $T$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в отсутствие конвективных течений

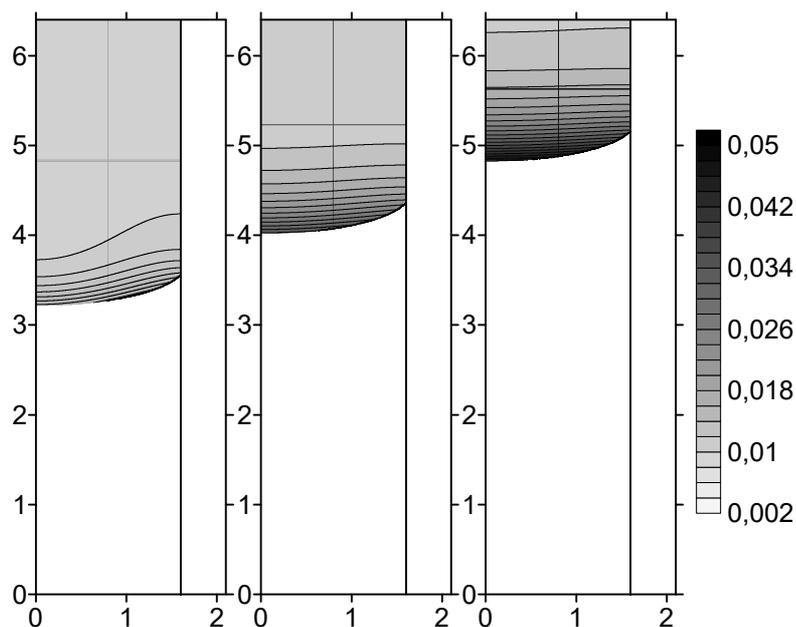


Рис. 1.5 Поля концентрации примеси  $C$  в расплаве в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в отсутствие конвективного массопереноса

На Рис. 1.5 представлены поля концентрации примеси в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. от начала процесса роста. Как можно видеть, распределение примеси в расплаве в течение всего процесса неоднородно как в

осевом, так и в радиальном направлениях. Радиальная неоднородность примеси в расплаве связана с искривлением фронта кристаллизации, она максимальна в начале процесса кристаллизации и уменьшается с течением времени. Осевая неоднородность примеси является следствием собственно процесса кристаллизации: в силу малости коэффициента сегрегации для Ga:Ge в процессе роста происходит накопление примеси в области над фронтом кристаллизации. Во всей области расплава концентрация примеси не меньше первоначально заданной концентрации  $C \geq C_0$  и максимальна на фронте кристаллизации; средняя концентрация примеси на фронте кристаллизации повышается с течением времени. Осевой градиент концентрации также максимален на фронте кристаллизации и уменьшается при продвижении к верхней границе ампулы.

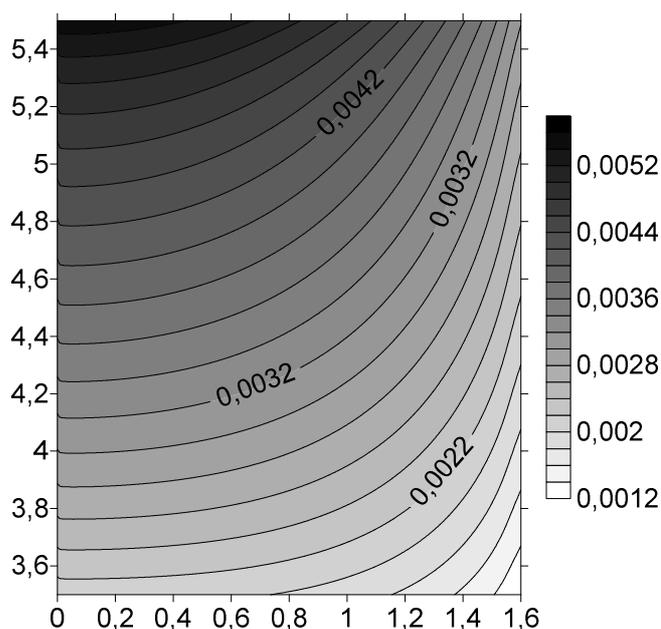


Рис. 1.6 Распределение примеси  $C$  в кристалле в отсутствие конвективного массопереноса

На Рис. 1.6 приведено распределение концентрации примеси в выращенном кристалле. В силу малости коэффициента сегрегации большая часть примеси остается в расплаве; средняя концентрация примеси в кристалле

значительно ниже первоначально заданной. Можно видеть, что полученный кристалл не является оптимальным с точки зрения однородности содержания примеси: наблюдаются как осевая, так и радиальная неоднородности распределения примеси.

Рассматриваемая система характеризуется числом Шмидта, большим единицы  $Sc = \frac{V}{D} \approx 6$ , что означает преобладание конвективного механизма массопереноса над диффузионным. Таким образом, конвективные течения оказывают принципиальное влияние на распределение примеси в расплаве и, как следствие, в выращенном кристалле. Далее рассматриваются течения и тепломассоперенос в расплаве при выращивании кристаллов вертикальным методом Бриджмена в земных условиях.

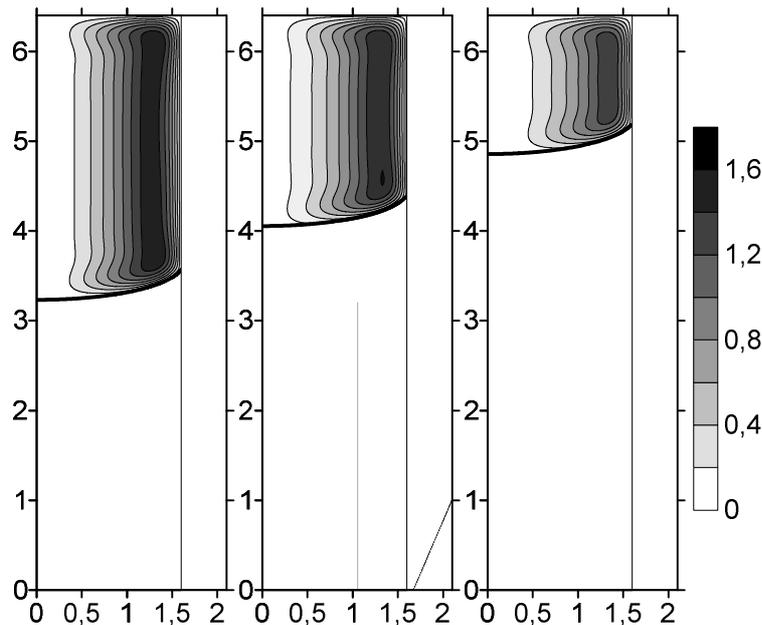


Рис. 1.7 Поля азимутального момента скорости  $M$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. для поля  $B = 0.3 \text{ мТл}$  в отсутствие тепловой конвекции

#### 1.4.2 Влияние вращающегося магнитного поля

Рассмотрим обособленное влияние вращающегося магнитного поля на массоперенос и распределение примеси в отсутствие тепловой конвекции  $\vec{g} = 0$

.Несмотря на гипотетичность ситуации (тепловая конвекция существует даже в условиях микрогравитации, что подтверждается лабораторными экспериментами), она помогает наглядно проиллюстрировать механизм генерации конвективного течения под действием вращающегося магнитного поля.

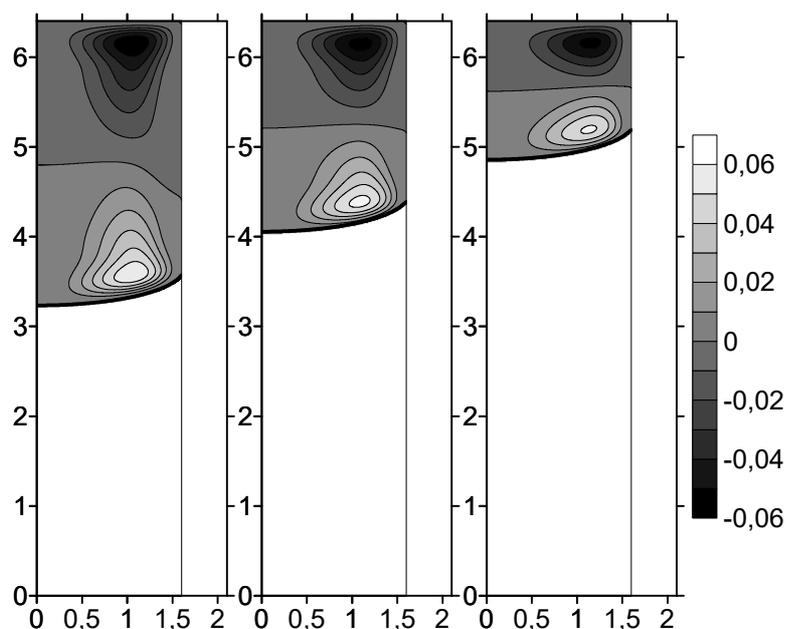


Рис. 1.8 Поля функции тока  $\varphi$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. для поля  $B = 0.3 \text{ мТл}$  в отсутствие тепловой конвекции

В рассматриваемой постановке действие вращающегося магнитного поля на полупроводниковый расплав заключается в генерации азимутального рециркуляционного течения посредством силы Лоренца. На Рис. 1.7 представлена эволюция поля азимутального момента скорости  $M = \rho_m r V_\phi$  для случая интенсивности ВМП  $B = 0.3 \text{ мТл}$ . Как видно из представленных рисунков, генерируемое ВМП азимутальное течение охватывает весь объем расплава с максимумом скорости, смещенным к стенке ампулы. Соответственно, максимальные градиенты азимутальной скорости наблюдаются вблизи твердых границ расплава, включая фронт кристаллизации. Интенсивность азимутального течения имеет тенденцию к незначительному

уменьшению в ходе процесса роста, что связано с уменьшением свободного объема расплава и соответствующим увеличением влияния граничных условий прилипания для скорости течения.

Рис. 1.8 иллюстрирует известный факт генерации меридионального течения при наличии азимутального: даже в отсутствие иных генерирующих механизмов ВМП способно запустить и поддерживать меридиональную конвекцию [80]. Основную роль в механизме взаимодействия играет наличие твердых границ, на которых поставлено условие прилипания, являющихся генераторами завихренности (эффект Экмана [2]). Из сопоставления Рис. 1.7 с Рис. 1.8 можно увидеть, что ВМП генерирует два тороидальных вихря с противоположным направлением циркуляции в меридиональной плоскости. Форма и интенсивность данных двух вихрей близки; их различие зависит от степени отклонения формы фронта кристаллизации от плоской. При малых интенсивностях магнитного поля максимумы функции тока находятся в глубине расплава; увеличение интенсивности магнитного поля приводит к смещению центров вихрей к верхней крышке и фронту кристаллизации. В случае большого отношения высоты расплава к его радиусу  $\frac{H}{R} \gg 1$  вихри занимают область размера порядка радиуса расплава; в пространстве между вихрями остается область, не затронутая течением. В процессе роста происходит уменьшение высоты расплава и сближение вихрей с уменьшением разделяющей их области, в которой течение отсутствует, взаимное влияние вихрей начинает фиксироваться с  $H \geq 2R$  и проявляется в уменьшении интенсивности течения вследствие взаимодействия как между собственно вихрями, так и между вихрями и твердыми границами. Максимальное значение модуля функции тока  $|\varphi|_{\max}$  составляло 0.08 г/с в моменты времени 1000 сек и 3000 сек. и 0.07 г/с в момент времени 5000 сек.

Известно [101], что азимутальное течение, генерируемое ВМП, теряет устойчивость при превышении интенсивностью ВМП некоторого критического

значения (неустойчивость Тейлора-Куэтта). Интенсивность воздействия вращающегося магнитного поля на вещество характеризуется безразмерным критерием подобия – магнитным числом Тейлора:

$$Ta_m = \frac{\sigma \omega R^2 B_0^4}{2 \rho \nu^2}. \quad (1.65)$$

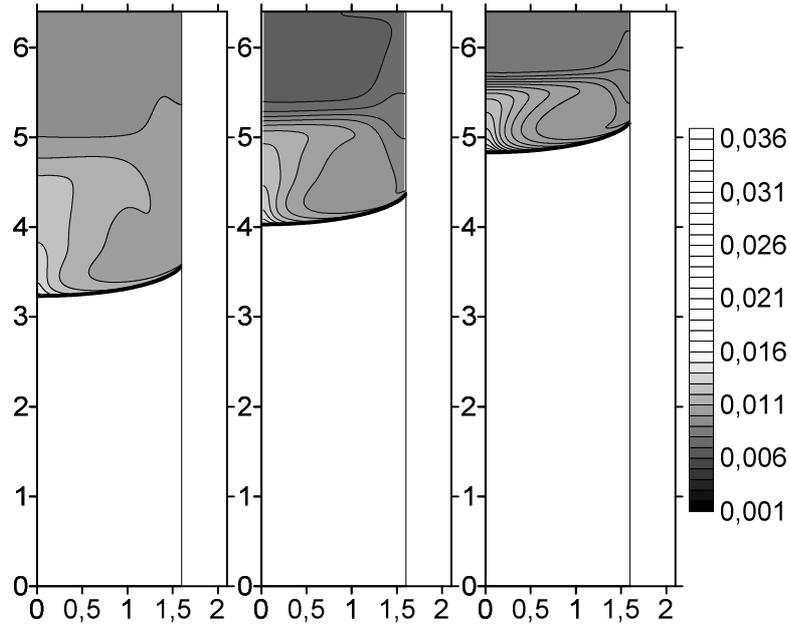


Рис. 1.9 Поля концентрации примеси  $C$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. для поля  $B = 0.3 \text{ мТл}$  в отсутствие тепловой конвекции

Опубликованные экспериментальные и численные данные по определению границ устойчивости течения изотермической жидкости в цилиндре кругового сечения, генерируемого вращающимся магнитным полем [56, 57, 80] показывают быстрое падение критического значения  $Ta_m$  с увеличением отношения высоты столба жидкости к его радиусу  $\frac{L}{R}$ . Согласно приведенной в

[80] диаграмме устойчивости, для  $\frac{L}{R} \approx 2.5$ , критическое значение  $Ta_m \approx 8 \cdot 10^4$ .

Проведенные расчеты показывают, что в рассматриваемой кристаллизационной задаче для такого же отношения  $\frac{L}{R} \approx 2.5$ , соответствующего началу процесса роста, потеря устойчивости азимутального течения происходит в пределах диапазона значений магнитной индукции  $B = 0.4 \dots 0.5 \text{ мТл}$ , соответствующим значениям магнитного числа Тейлора  $(4 \dots 6.3) \cdot 10^4$ . Понижение порога устойчивости по сравнению с случаем идеальной цилиндрической области может быть связано с искривлением нижней границы области и, как следствие, нарушением симметрии течения [115].

Поскольку нестационарность течения в расплаве отрицательно сказывается на распределении примеси в выращенных кристаллах [52], дальнейшие численные эксперименты имеет смысл проводить с интенсивностями магнитного поля, не превышающими критических значений.

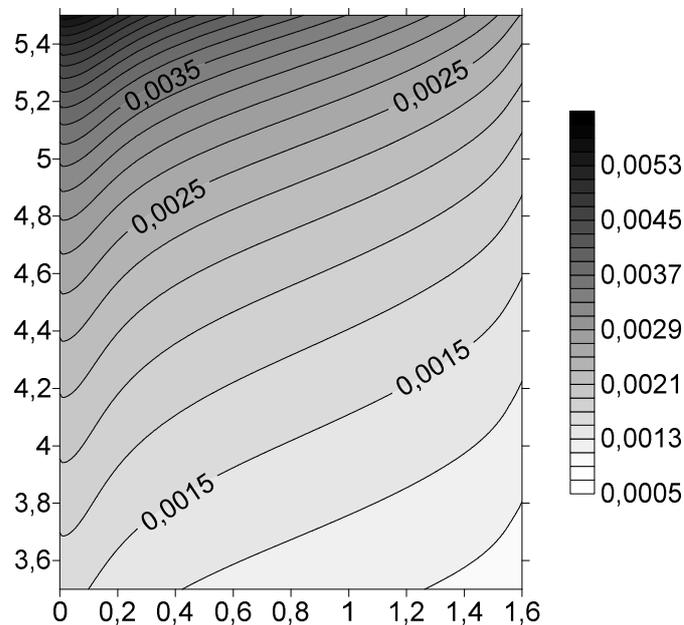


Рис. 1.10 Распределение примеси  $C$  в выращенном кристалле для поля  $B = 0.3 \text{ мТл}$  в отсутствие тепловой конвекции

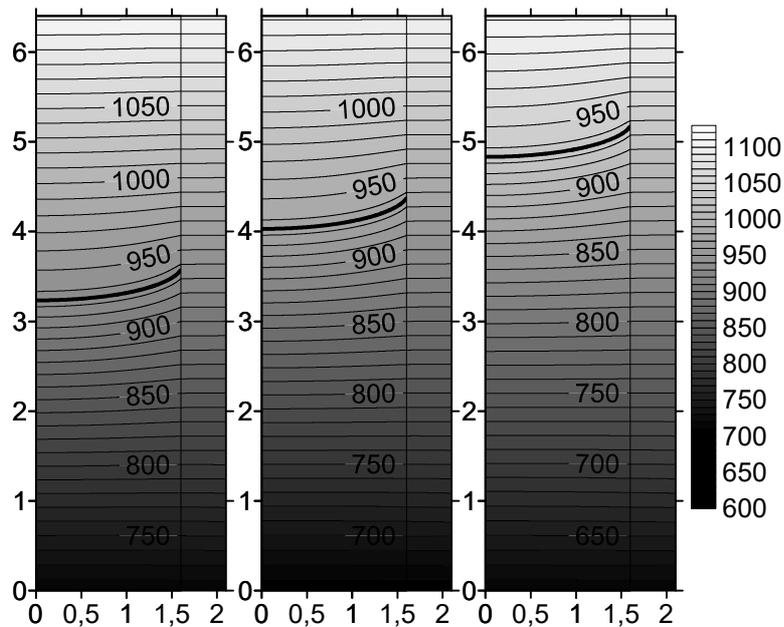


Рис. 1.11 Поля температуры  $T$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в отсутствие тепловой конвекции

Поля концентрации в различные моменты времени процесса роста показаны на Рис. 1.9. Как можно видеть, меридиональное течение действительно оказывает принципиальное влияние на поле концентрации примеси в расплаве: изолинии концентрации сильно искривлены, максимальные градиенты концентрации наблюдаются в области между вихрями и вблизи фронта кристаллизации.

На Рис. 1.10 приведено распределение концентрации примеси в выращенном кристалле. Можно видеть, что приложение вращающегося магнитного поля в отсутствие иных механизмов генерации течения не приводит к уменьшению радиальной неоднородности распределения примеси в кристалле. Также из сравнения Рис. 1.6Рис. и Рис. 1.10 видно, что, несмотря на количественное изменение радиального распределения примеси в кристалле, применение ВМП не дает качественного улучшения.

На Рис. 1.11 представлены поля температуры в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. от начала процесса роста. В отличие от числа Шмидта, число

Прандтля для рассматриваемой конфигурации  $Pr = \frac{\mu C_p}{\kappa} \approx 2 \cdot 10^{-2}$  значительно меньше единицы, что означает преобладание диффузионного механизма теплопереноса над конвективным; данный факт подтверждается сравнением полей температуры на Рис. 1.4 и Рис. 1.11: несмотря на наличие меридионального конвективного течения, поля температуры можно считать идентичными.

### 1.4.3 Влияние тепловой конвекции

Рассмотрим процесс роста полупроводникового кристалла Ga:Ge методом Бриджмена в земных условиях в отсутствие вращающегося магнитного поля.

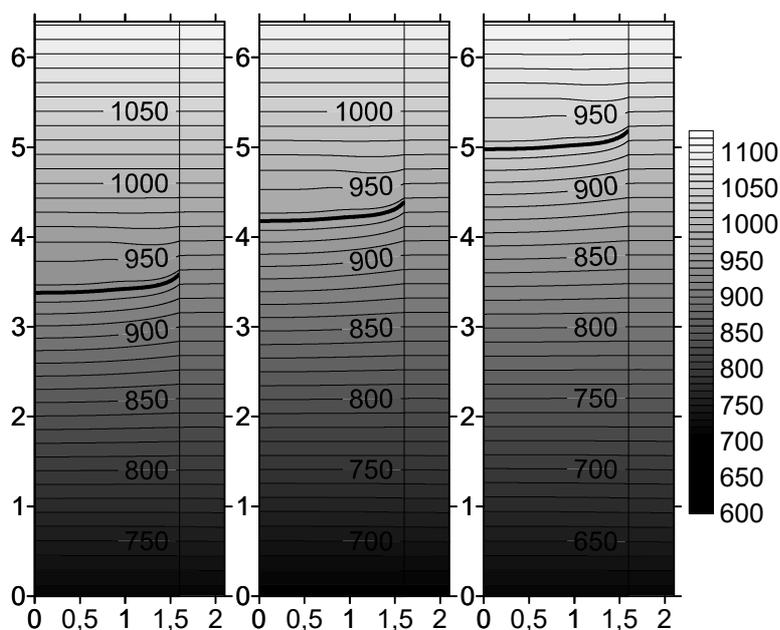


Рис. 1.12 Поля температуры  $T$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в земных условиях в отсутствие ВМП

На Рис. 1.12 представлены поля температуры в процессе роста в различные моменты времени. Можно видеть, что в данном случае картина не имеет принципиальных отличий от случаев чисто диффузионного процесса (Рис. 1.4) и случая обособленного влияния ВМП (Рис. 1.11). Поле температуры оказывается возмущенным относительно исходного распределения с

постоянным вертикальным градиентом температуры только в непосредственной близости от фронта кристаллизации, вблизи верхней и нижней границ ампулы поле температуры остается невозмущенным. Тем не менее, изгиб изолиний температуры на Рис. 1.12 несколько сильнее, чем на Рис. 1.11, а прогиб фронта кристаллизации меньше, что свидетельствует о большей интенсивности меридионального течения, генерируемого тепловым механизмом, по сравнению с течением, индуцированным ВМП.

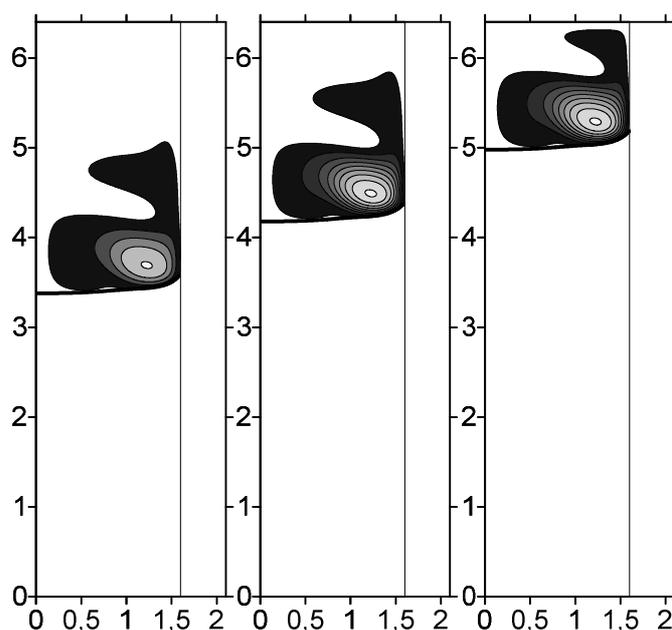


Рис. 1.13 Поля функции тока  $\varphi$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в земных условиях в отсутствие ВМП

На Рис. 1.13 представлены поля функции тока в различные моменты времени для случая тепловой конвекции. Как можно заметить, в отличие от случая с вращающимся магнитным полем, практически все течение сосредоточено в области над фронтом кристаллизации в области высотой  $\approx \frac{R_1}{2}$ . Структура течения одновихревая, с центром вихря, смещенным к фронту кристаллизации; течение направлено вблизи фронта от боковой стенки ампулы к оси симметрии. Интенсивность течения, вызванного тепловой конвекцией, выше, чем в случае течения, индуцированного ВМП, при этом направления

течений, вызываемых обоими механизмами, совпадают, что позволяет сделать предположение об усилении интенсивности результирующего течения вблизи фронта кристаллизации в случае их комбинированного воздействия.

В процессе роста форма вихря и его интенсивность не претерпевают видимых изменений, что позволяет говорить о квазистационарности исследуемого процесса в данном случае. По результатам измерений максимальное значение функции тока  $\varphi_{\max}$  составило  $0.82 \text{ г/с}$  в диапазоне времени  $1000 \leq t \leq 5000$  сек.

Поля концентрации примеси в расплаве приведены на Рис. 1.14. Как и в случае с ВМП, течение оказывает значительное влияние на распределение примеси в кристалле: наибольшие градиенты концентрации.

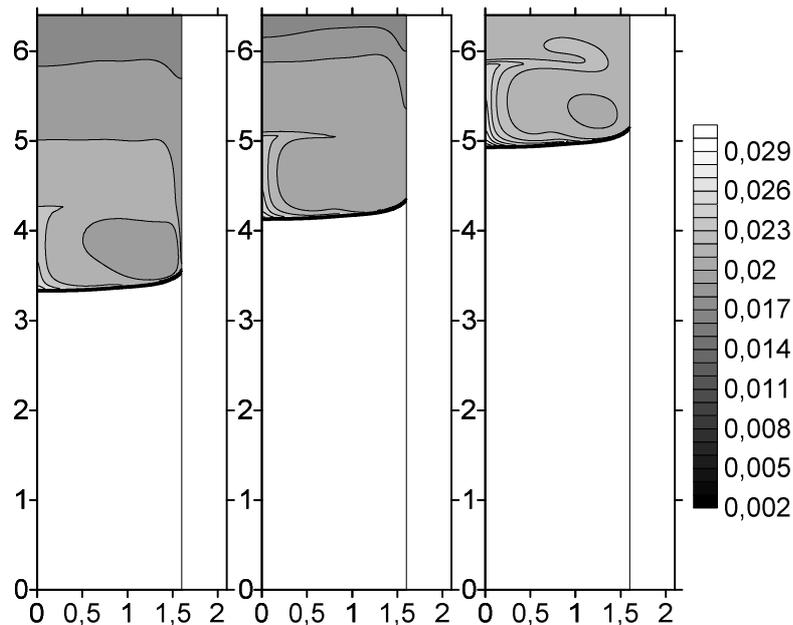


Рис. 1.14 Поля концентрации примеси  $C$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в земных условиях в отсутствие ВМП

Средняя концентрация в расплаве, как и ранее, растет с течением времени вследствие отторжения примеси в расплав и уменьшения объема последнего.

Распределение примеси в кристалле представлено на Рис. 1.15. Аналогично случаю с обособленным влиянием вращающегося магнитного

поля, появление меридионального течения усложняет радиальное распределение примеси и увеличивает неоднородность ее распределения.

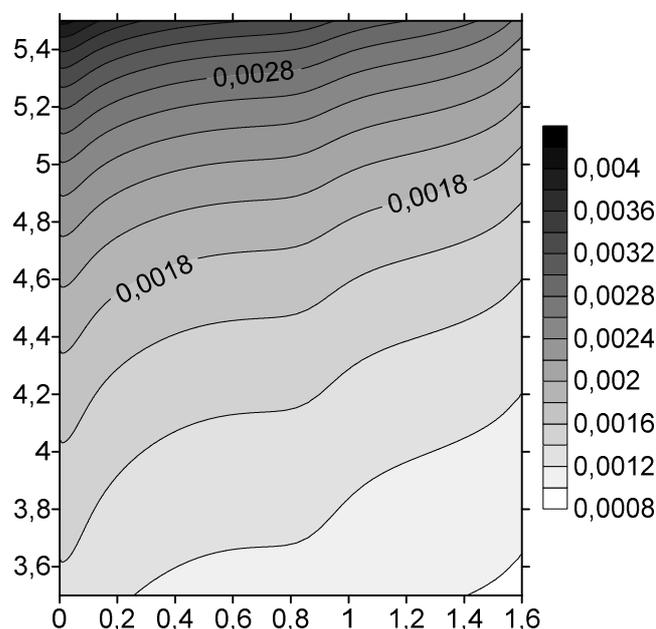


Рис. 1.15 Распределение примеси в выращенном кристалле в земных условиях в отсутствие ВМП

Временная эволюция концентрации примеси на фронте кристаллизации в отсутствие ВМП представлена на Рис.1.16. Как можно видеть, осевая концентрация примеси демонстрирует тенденцию к увеличению в течение всего процесса роста, за исключением начального периода времени  $t \leq 500$  сек., в течение которого происходит установление процесса. Данный факт является следствием процесса сегрегации, в результате которого большая часть примеси отторгается кристаллом и формирует область повышенной концентрации в области расплава, примыкающей к фронту кристаллизации.

Кроме этого можно заметить, что рост средней концентрации примеси происходит нелинейно; осевой градиент концентрации увеличивается при приближении процесса роста к концу, когда начинает сказываться конечность высоты расплава. Таким образом, можно заключить, что требование минимальной осевой неоднородности примеси в выращенном кристалле может

быть выполнено на небольшом временном интервале процесса роста и при условии использования достаточно длинной ампулы, для которой снижено влияние концевых эффектов.

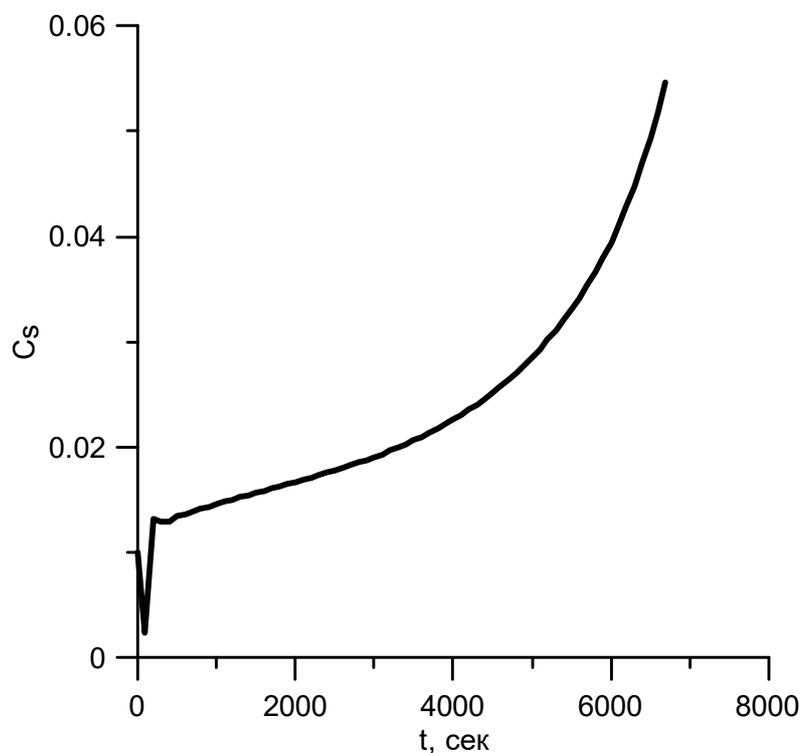


Рис. 1.16 Временная эволюция концентрации примеси на фронте кристаллизации на оси симметрии ( $r = 0$ ) для случая отсутствия ВМП

#### 1.4.4 Совместное действие тепловой конвекции и ВМП

Рассмотрим теперь полную задачу о влиянии вращающегося магнитного поля на процесс выращивания полупроводникового кристалла Ga:Ge методом Бриджмена.

На Рис. 1.17 представлены поля функции тока в различные моменты времени для случая тепловой конвекции. Можно заметить, что основное течение по-прежнему сосредоточено вблизи фронта кристаллизации, но теперь, помимо основного вихря, появляются также множественные слабые вихри, расположенные один над другим вблизи боковой стенки ампулы. Они возникают вследствие зарождающейся неустойчивости азимутального течения.

Максимальное значение функции тока  $\varphi_{\max}$  несколько увеличилось по сравнению со случаем отсутствия ВМП и составило  $0.84 \text{ г/с}$  в диапазоне времени  $1000 \leq t \leq 5000$  сек. Из сравнения Рис. 1.13 и Рис. 1.17 можно увидеть, что в последнем случае охваченная течением область непосредственно над фронтом кристаллизации простирается дальше к оси симметрии ампулы, что позволяет сделать предположение о большей эффективности конвективного массопереноса в ней. Другим следствием увеличения общей интенсивности течения вблизи фронта кристаллизации является некоторое уменьшение прогиба последнего вследствие увеличенного конвективного отвода тепла в объем расплава над фронтом кристаллизации.

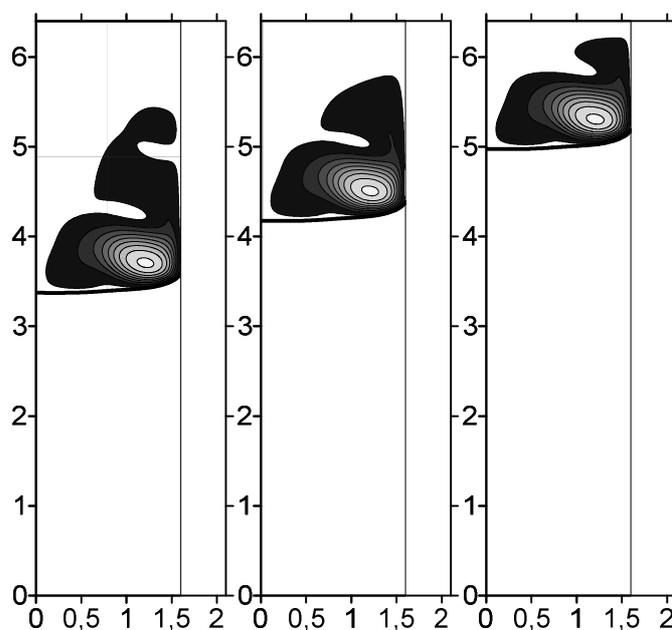


Рис. 1.17 Поля функции тока  $\varphi$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в земных условиях при интенсивности ВМП  $B = 0.3 \text{ мТл}$

На Рис. 1.18 представлены изолинии азимутального момента скорости  $M$  в различные моменты времени для поля интенсивностью  $B = 0.3 \text{ мТл}$ . Из сравнения Рис. 1.7 и Рис. 1.18 можно заметить, что меридиональное течение оказывает заметное влияние на структуру азимутального течения. Поле  $M$  теперь разделено на две области с приблизительно равными локальными

максимумами  $M_{\max}^{1,2}$ , граница между областями условно проходит по границе основного меридионального вихря вблизи фронта кристаллизации (Рис. 1.17Рис. ), при этом наибольшее значение максимума азимутального момента скорости оказывается несколько ниже, чем в случае течения, вызванного обособленным действием ВМП.

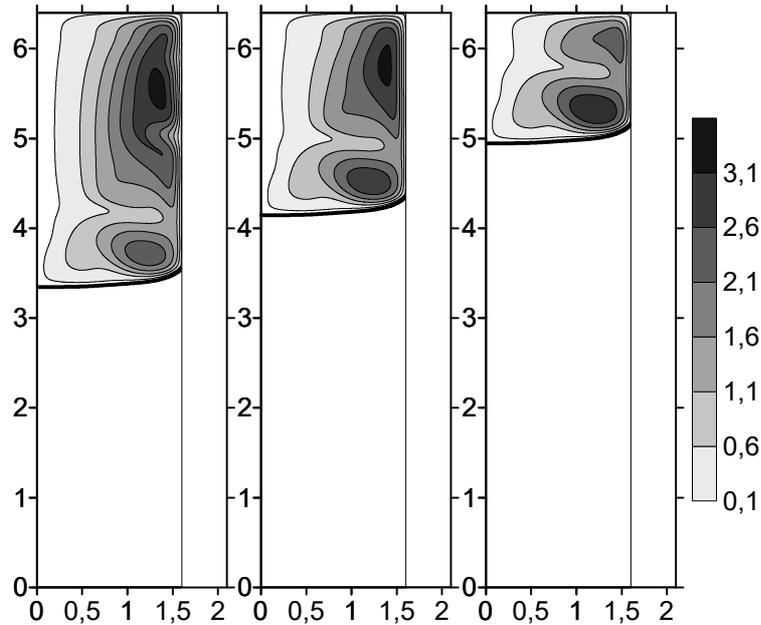


Рис. 1.18 Поля азимутального момента скорости  $M$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. для поля  $B = 0.3 \text{ мТл}$  в земных условиях

Усложнение структуры течения неизбежно сказывается на распределении примеси в расплаве (Рис. 1.19): действительно, в силу чувствительности поля концентрации к изменению поля скорости, картина значительно отличается от случая отсутствия ВМП (Рис. ) – по искривлению изолиний концентрации заметно действие нескольких слабых вихрей, расположенных вертикально один над другим выше основного сильного вихря при фронте кристаллизации.

Как уже было отмечено для случая течения, вызванного обособленным действием ВМП, при повышении интенсивности вращающегося магнитного поля течение становится нестационарным [56, 77, 80, 101], что находит свое

отражение в появлении характерной полосчатой неоднородности концентрации примеси в кристалле (т.н. *striations*) [88, 99].

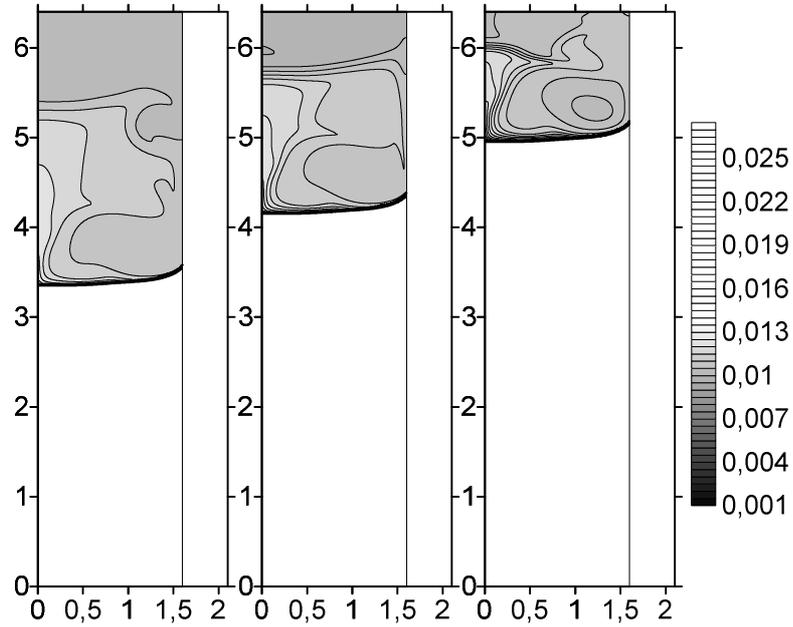


Рис. 1.19 Поля концентрации примеси  $C$  в моменты времени 1000, 3000 и 5000 сек. в земных условиях при интенсивности ВМП  $B = 0.3 \text{ мТл}$

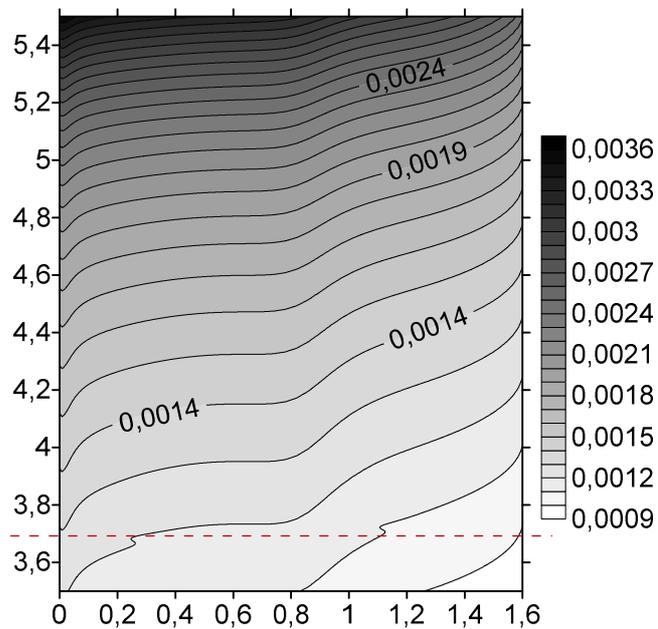


Рис. 1.20 Распределение примеси в выращенном кристалле в земных условиях при интенсивности ВМП  $B = 0.3 \text{ мТл}$ . Штриховой линией промаркирован излом изолинии концентрации

На Рис. 1.20 показано распределение примеси в кристалле в случае комбинированного действия тепловой конвекции и вращающегося магнитного поля. Из сравнения Рис. 1.15 и Рис. 1.20 Рис. можно заметить отсутствие качественного влияния ВМП на структуру распределения примеси в результирующем кристалле. Тем не менее, визуально можно определить некоторое уменьшение радиальной неоднородности распределения примеси по сравнению с случаем отсутствия ВМП.

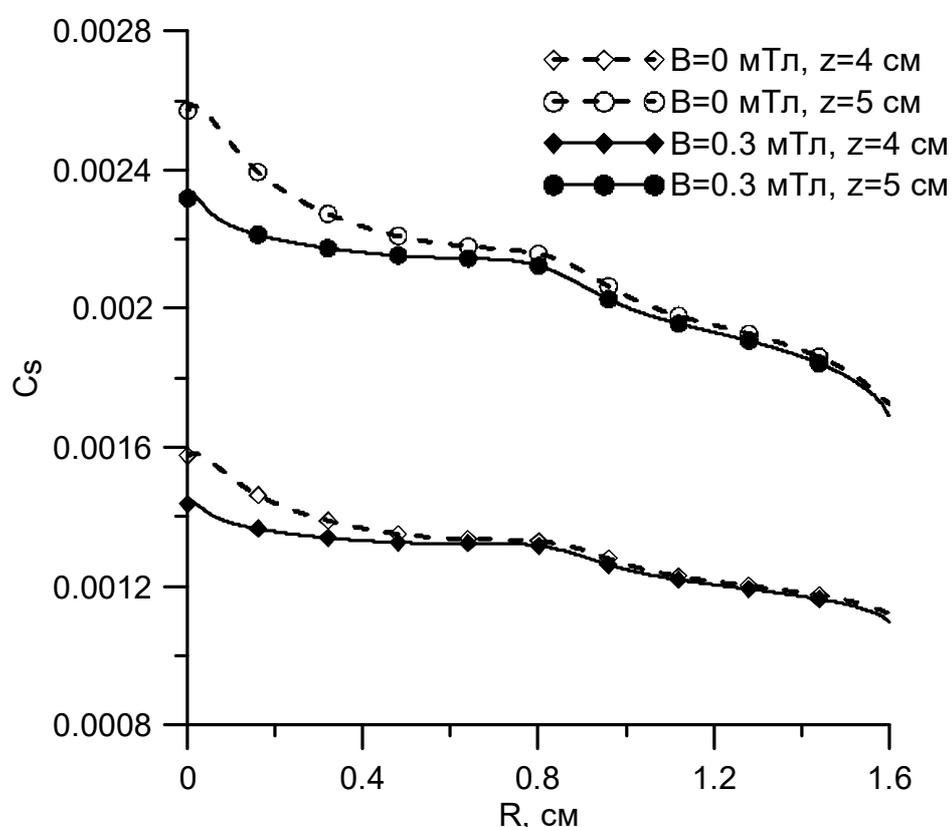


Рис. 1.21 Радиальное распределение примеси на фронте кристаллизации в зависимости от приложенного ВМП на высоте кристалла  $z$

Как показано в [80, 91], пороговое значение интенсивности вращающегося магнитного поля, при которой происходит потеря устойчивости течения, вызванного действием ВМП, находится в обратной связи с соотношением  $\frac{L}{R}$ , где  $R$  - радиус столба жидкости, а  $L$  - его высота. Таким образом, при

фиксированной интенсивности ВМП, нестационарность течения может проявляться в начале процесса роста, пока  $L$  еще велико, и исчезнуть его снижении до некоторого критического значения. Действительно, в рассматриваемой задаче наблюдается стабилизация течения по мере уменьшения высоты расплава: на Рис. видны характерные изломы изолиний концентрации в кристалле на высоте  $z \approx 3.7$  см, как признаки зарождающейся полосчатой неоднородности распределения примеси, отсутствующие на больших высотах.

Отсутствие признаков неустойчивости течения для случая обособленного влияния ВМП на течение в расплаве, рассмотренного в параграфе 1.4.2, может быть объяснено влиянием меридионального термогравитационного течения на азимутальное течение: структура течения на Рис. 1.7 существенно отличается от приведенной на Рис. 1.18.. Факт понижения порога устойчивости в задаче кристаллизации с искривленным фронтом относительно идеализированной конфигурации цилиндрической области с плоскими горизонтальными границами был подтвержден экспериментально [115].

Радиальное распределение примеси в разрезе кристалла на различных высотах для случаев  $B = 0$  и  $B = 0.3$  мТл, полученных из Рис. 1.10 и Рис. 1.20, представлено на Рис. 1.21. В целом можно заметить отсутствие качественного влияния вращающегося магнитного поля на радиальное распределение примеси в кристалле; при этом заметно количественное уменьшение неоднородности распределения примеси, связанное, прежде всего, с улучшением конвективного массопереноса в расплаве в области вблизи оси симметрии. Принимая мерой радиальной неоднородности распределения примеси в кристалле

$$\Delta_C = \max \left[ \left[ C(r, z^*) \right] \right] - \min \left[ \left[ C(r, z^*) \right] \right], \quad (1.66)$$

оцениваемой как разброс значений концентрации примеси на заданной высоте кристалла, в рассматриваемом случае общее уменьшение радиальной

неоднородности распределения примеси в кристалле при воздействии вращающегося магнитного поля, составило 25%.

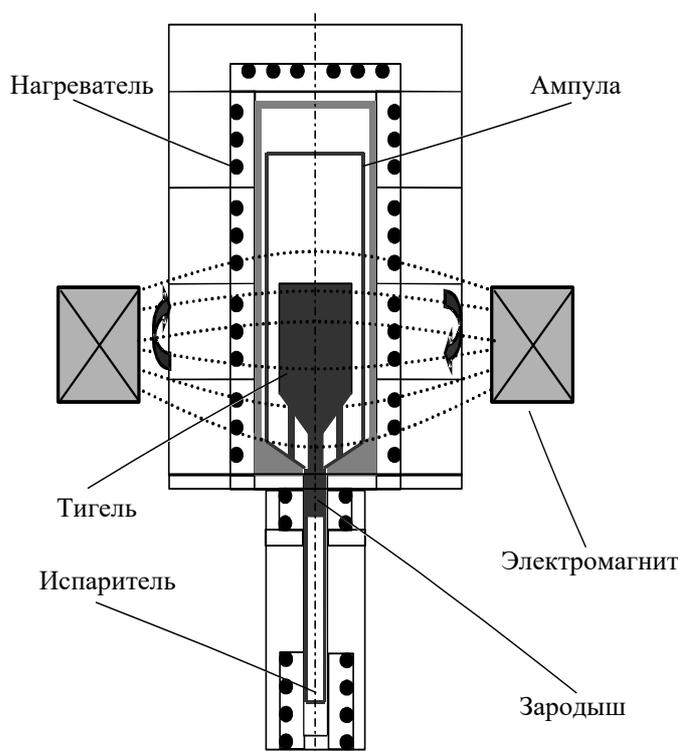


Рис. 1.22 Схематическое изображение печи *VGF* с ВМП

## 1.5 Лабораторный эксперимент

В рамках выполнения диссертационной работы был проведен ряд лабораторных экспериментов по выращиванию кристаллов арсенида галлия, легированных кремнием  $\text{Si:GaAs}$  и арсенидом кремния  $\text{SiAs:GaAs}$ , методом ВНК в присутствии вращающегося магнитного поля. Целью экспериментов являлось исследование возможности управления теплопереносом с помощью ВМП. Основное внимание уделялось форме фронта кристаллизации, напрямую зависящей от локальных градиентов температуры. Эксперименты проводились в 2001-2002 годах в Техническом университете Горной Академии г. Фрайберга, Германия (Institut für Wärmetechnik und Thermodynamik, Institut für NE-Metallurgie und Reinststoffe der TU Bergakademie Freiberg).

### 1.5.1 Установка ВНК с вращающимся магнитным полем

На данной установке проводились эксперименты по выращиванию кристаллов Si:GaAs. Схема установки ВНК в конструктиве *VGF* представлена на Рис. 1.22. Используемая в экспериментах печь (Рис. 1.23, Рис. 1.24) была специально сконструирована для работы с герметичными ампулами с испарительными камерами, в которых поддерживается избыточное давление (*vapor pressure technique*) [92].

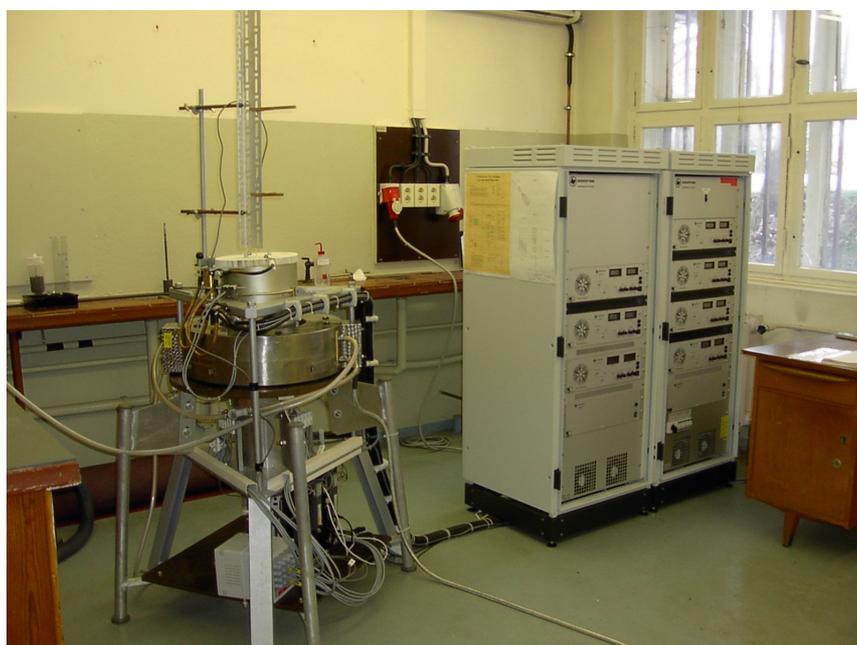


Рис. 1.23 Общий вид установки *VGF*. Печь (слева) и блоки питания нагревателей (справа)

Это необходимо для предотвращения потери летучих компонент соединения (в данном случае мышьяка). В запаянной ампуле находится количество летучего вещества, достаточного для создания избыточного давления пара, препятствующего эвакуации вещества из расплава в течение процесса. Давление летучей компоненты создается испарением вещества в камере, расположенной на дне ампулы. Альтернативой данному методу является использование жидкого изолятора (*liquid encapsulant*) [90], в качестве

которого чаще всего выступает оксид бора  $B_2O_3$ . Имея плотность, меньшую, чем плотность расплава, высокую температуру кипения и обладая инертностью по отношению к компонентам рабочего вещества, он препятствует испарению примеси из расплава.

Сама печь не является герметичной. Возможность визуального контроля процесса не предусмотрена в силу высоких рабочих температур (до  $1300\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) и небольших размеров установки. Диаметр 2-дюймовой печи составляет 250 мм, высота - 660 мм. Внешняя оболочка печи – нержавеющая сталь. Внутренняя поверхность выложена пористой огнеупорной керамикой (99.7%  $Al_2O_3$ ), сглаживающей температурные флуктуации и предохраняющей ампулу от прямого контакта с нагревательными элементами.



Рис. 1.24 Общий вид 2-дюймовой печи *VGF*

Внутри печи (Рис. 1.22) расположены семь кольцевых нагревателей (снизу вверх): нагреватель испарительной камеры, нагреватель зародышевой камеры, четыре боковых нагревателя, формирующих температурный режим в рабочей камере, и верхний нагреватель, выравнивающий горизонтальные градиенты температуры в верхней части камеры. Нагреватели производства Kanthal Corp. изготовлены из материала марки KVS 164. Для контроля температуры и обратной связи с блоком управления используются платино-родиевые термопарные измерители температуры, установленные между нагревателями и стенкой рабочей камеры в массиве керамического изолятора, по два на каждый нагреватель – измерительный и резервный. С помощью отдельной подвижной термопары, размещенной сверху печи на ее оси симметрии, можно контролировать вертикальный профиль температуры в областях от верхней крышки до испарительной камеры.

Система питания состоит из семи стабилизированных по току блоков питания (по одному на каждый нагреватель) Statron 7407 производства Statron Gerätetechnik GmbH номинальной мощностью 1 кВт, допускающих как ручное, так и компьютерное управление с помощью ПО Testpoint от Keithley Instruments, Inc. Соединение контрольно-измерительной системы и блоков питания с компьютером осуществляется посредством интерфейса RS-485.

Максимальная потребляемая мощность для обеих печей составляет 1800 Вт, номинальная - 1200 Вт. Максимальная установившаяся температура 1260 °С; максимальная скорость нагрева 200К/час. Точность регулировки и измерения температуры  $\pm 0.1\text{К}$  и  $\pm 0.01\text{К}$ , соответственно.

Индуктор магнитного поля состоит из трех парных электромагнитов, установленных под углом 120° друг к другу в диаметральной плоскости на высоте на высоте тигля. Блоки питания и управления электромагнитами независимы от основной системы; интенсивность магнитного поля и частота вращения могут изменяться в диапазонах 0-10 мТл и 30-400 Гц, соответственно.



Рис. 1.25 Тестовая 2-дюймовая ампула в сборе. Виден осевой канал, через который посредством подвижной термопары производится измерение температуры

Ампула (Рис. 1.25) представляет собой герметичную конструкцию из двух цилиндров разного диаметра с коническим переходом между ними, изготовленную из кварцевого стекла с толщиной стенок 2 мм. В верхнем цилиндре диаметром 100 мм и высотой 300 мм, на фиксирующем кольце из кварцевого стекла помещен тигель из пиролитического нитрида бора рVN с диаметром 2 дюйма, высотой 100 мм. и толщиной стенок 2 мм. Как и ампула, тигель двухобъемный с переходом между объемами в форме усеченного конуса, что требуется для получения монокристаллов с определенной ориентацией осей [33]. В процессе подготовки эксперимента в нижний объем помещается монокристаллический зародыш с требуемой ориентацией, а остальной объем заполняется поликристаллической шихтой.

В нижнем объеме диаметром 15 мм. и высотой 195 мм. находится медный тигель, в который помещается примесь. Тигель установлен на уровне испарительного нагревателя первой зоны печи. Разнесение испарительной камеры и зоны роста продиктовано значительным различием температур фазового перехода основного материала и примеси, которое может превышать 500 °С.

### 1.5.2 Подготовка ампулы

Для экспериментов по выращиванию полупроводниковых кристаллов чистота исходных материалов и установки имеет решающее значение, так как даже незначительное содержание посторонних примесей может кардинально повлиять на физико-химические свойства выращенного кристалла – в подавляющем большинстве случаев в худшую сторону.

В проведенных экспериментах подготовка ампулы включала в себя следующие этапы:

1. Механическая очистка и обезжиривание поверхности ампулы;
2. Заполнение и установка тигля;
3. Дегазация/заполнение нейтральным газом;
4. Вакуумизация с последующей запайкой.

На первом этапе производилась механическая очистка поверхности ампулы и кольца-держателя с помощью щетки и обезжиривание не смачивающей кварцевое стекло и не содержащей спирта очистительной жидкостью (Tensid Elma clean 65). Затем следовала промывка смесью соляной и азотной кислот (37% HCl + 63% HNO<sub>3</sub>) до удаления следов очистительной жидкости. Следующим этапом была деионизация и промывка дистиллированной водой в промывочной установке Serapur AP 30, сначала водой однократной дистилляции, а затем деионизированной водой трехкратной дистилляции. Последним этапом в подготовке ампулы был процесс предварительной обсушки в герметичной сушилке при 90<sup>0</sup>С с последующей окончательной сушкой в вакуумной сушилке при 900<sup>0</sup>С в течение 1 часа.

В экспериментах применялись исходные материалы Si и GaAs производства Freiburger Compound Materials GmbH (FCM). Дополнительная химическая очистка не производилась. Тигли заполнялись отдельно, до установки в ампуле. Все операции проводились при нормальном давлении в закрытых боксах. Кремний поставлялся в гранулах размером 1-3 мм, покрытых защитной оболочкой. Непосредственно перед загрузкой оболочка протравливалась смесью жидкостей с химическим составом  $\text{HNO}_3 : \text{HF} : \text{CH}_3\text{COOH} : \text{H}_2\text{O}$ , объемное соотношение 5 : 3 : 3 : 3.

Поликристаллический арсенид галлия, полученный методом синтеза под давлением, поставлялся в форме кусков размером 10-30 мм. Куски измельчались до размеров 3-5 мм в закрытой мельнице, после чего следовала протравка смесью соляной и азотной кислот (37%  $\text{HCl}$  + 63%  $\text{HNO}_3$ ) в течение 10 минут с последующей промывкой дистиллированной водой и сушкой в шкафу.

Тигель вместе с входящей в комплект закрывающей крышкой производства The Shin-Etsu Group изготовлены из пиролитического нитрида бора pBN. Подготовка тигля включала в себя ультразвуковую очистку поверхности в метаноловой ванне при  $50^\circ\text{C}$  для удаления остатков технологического покрытия из оксида бора  $\text{B}_2\text{O}_3$ , одночасовой выдержкой в смеси соляной и азотной кислот (37%  $\text{HCl}$  + 63%  $\text{HNO}_3$ ) с последующей промывкой деионизированной дистиллированной водой с прокачкой кислорода. Следующим этапом была продувка азотом в сушильном шкафу при  $70^\circ\text{C}$  для удаления механических остатков. Завершающим этапом подготовки тигля был прокаливание в сушильном шкафу при  $1000^\circ\text{C}$  с прокачкой кислородо-азотной смеси в течение 3 часов.

Монокристаллическая затравка производства FCM с ориентацией  $\langle 100 \rangle$  перед установкой очищалась составом из дистиллированной воды, концентрированной серной кислоты и 35% пероксида водорода в объемном соотношении 1 : 3 : 1 при  $70^\circ\text{C}$  в течение 5 минут с последующей промывкой

деионизированной дистиллированной водой с прокачкой кислорода и завершающей обсушкой в сушильном шкафу при 70 °С.

Оксид бора  $B_2O_3$  производства Alfa Aesar, A Johnson Matthey Company применялся в качестве жидкого изолятора для предотвращения испарения мышьяка из расплава и отрыва кристалла от тигля. Заливка  $B_2O_3$  производилась после установки затравки и засыпки поликристаллической шихты.

После установки тиглей в ампуле производилось заваривание последней, при этом оставлялся открытый отросток, через который производилась откачка газов до давления 0.1 мБар в течение 20 минут, после чего отросток заваривался. Готовая ампула обезжиривалась этанолом и покрывалась эмульсией  $Si_3N_4$  для предохранения кварца от агрессивного воздействия натрия, входящего в состав керамики, которой выложена внутренняя поверхность печи.

### 1.5.3 Проведение экспериментов по выращиванию кристаллов GaAs

На описанной установке проводилось несколько серий экспериментов по выращиванию полупроводниковых кристаллов Si:GaAs, SiAs:GaAs, при различных интенсивностях магнитного поля, скоростях роста и температурных условиях. В силу особенностей конструкции печи для метода ВНК, непосредственный контроль процесса роста невозможен, вследствие чего особое значение имеет методика постановки эксперимента. Для получения воспроизводимых результатов выполнялись работы по калибровке печи, как без ампулы, так и со специальными тестовыми ампулами (Рис. 1.25) с открытым каналом на оси и термофизическими свойствами, возможно более близкими к используемому материалу. Для всех случаев производились замеры температурного профиля на оси для различных моментов времени, оценивались температурные флуктуации и градиенты температур в различных областях. Кроме того, выполнялись работы по глобальному численному моделированию диффузионного и радиационного теплопереноса в данной конкретной печи с

помощью коммерческого пакета CrysVUn++ [69], на основании результатов которых выдавались рекомендации по режимам роста.

Процесс выращивания кристалла включал следующие этапы:

1. Установка начального температурного режима. На этом этапе происходит прогрев печи и плавление исходного материала и части зародыша.
2. Этап гомогенизации, в течение которого происходит перемешивание расплава для создания однородной концентрации примеси. Длительность ~6 часов.
3. Этап роста длительностью 12-24 часов в зависимости от заданной скорости роста.
4. Этап контролируемого охлаждения длительностью до 24 часов, в течение которого температура кристалла постепенно уменьшается до комнатной. Длительность этапа подбирается достаточной для предотвращения растрескивания кристалла.

Общая длительность одного эксперимента составляла 2-4 суток.



Рис. 1.26 Выращенный 2-дюймовый кристалл Si:GaAs

### 1.5.4 Результаты экспериментов по выращиванию кристаллов Si:GaAs

Ниже представлены результаты серии экспериментов по влиянию вращающегося магнитного поля на рост кристалла арсенида галлия легированного кремнием Si:GaAs диаметром 2 дюйма (Рис. 1.26). Концентрация Si составляла  $\sim 10^{19}$  атом/см<sup>3</sup>, скорость роста – 2 мм/ч. 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  $Ta_m$  оставалось приблизительно постоянным и равным  $2.5 \cdot 10^5$ , что соответствовало начальной интенсивности поля 6.8 мТл. Частота вращения поля во всех экспериментах составляла 50 Гц.

Для исследования влияния ВМП на поведение расплава и форму фронта кристаллизации использовалась дискретная схема включения/выключения поля с возможно более резкими переходами. Использовались импульсы длительностью 0.5, 2 и 3 часа, период между импульсами - 3 часа. Длительность больших импульсов и промежутков между ними бралась из условия достижения квазистационарного течения как для случая вынужденной, так и для естественной конвекции, что дало возможность наглядно увидеть влияние ВМП на распределение примеси. Импульсы малой длительности использовались для маркировки фронта кристаллизации.

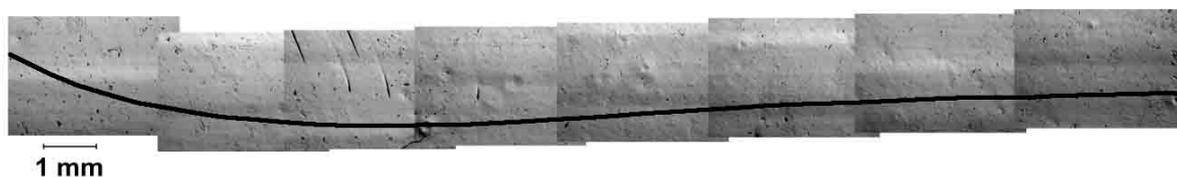


Рис. 1.27 Микрофотография продольного среза кристалла (левая половина).

Линией обозначен фронт кристаллизации, образовавшийся в момент отключения поля

Основное влияние ВМП на форму фронта кристаллизации заключается в уменьшении его прогиба: в данном случае замечено максимальное уменьшение на 27%. Кроме этого, при отношении области расплава  $H/R = 1.5$ , наблюдалась W-образная форма фронта (Рис. 1.27), характеризующаяся локальным поднятием фронта вблизи оси симметрии кристалла – явление, наблюдаемое также и в численных экспериментах [37, 98, 99]. В то же время, при уменьшении отношения  $H/R$  до 1 и менее, фронт становился чисто вогнутым, аналогично случаю отсутствия магнитного поля.

Детальное исследование срезов кристалла показало наличие участков микронеоднородности примеси (т.н. *striations* [52, 88, 99]) в областях, выкристаллизовавшихся в период действия ВМП. Это означает, что  $Ta_m = 2.5 \cdot 10^5$  находится в закритической области и меридиональное течение нестационарно, что согласуется с численными данными по определению порога устойчивости, который составляет  $Ta_m \approx 1.1 \cdot 10^5$  для  $H/R=1.5$ . В другой серии экспериментов с полем, соответствующим  $Ta_m \approx 10^5$ , т.е. в докритической области, в выращенных кристаллах не было обнаружено участков микронеоднородности примеси, однако эффект воздействия ВМП на фронт в этом случае был значительно меньше.

Таким образом, проведенные эксперименты подтвердили возможность управления распределением температуры и формой фронта кристаллизации с помощью вращающегося магнитного поля при выращивании полупроводниковых кристаллов вертикальным методом Бриджмена. В то же время, эти эксперименты показали, что при интенсивностях поля, способных оказывать влияние на поле температуры, азимутальное течение, вызванное ВМП, может оказаться неустойчиво, что, в свою очередь, ведет к дестабилизации меридионального течения, и негативно сказаться на распределении примеси в кристалле.

## 1.6 Выводы

- Впервые проведено численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля (ВМП) на течение и массоперенос в расплаве и распределение примеси в кристалле при выращивании полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации, с учетом искривления фронта кристаллизации.
- Показано, что ВМП приводит к повышению интенсивности меридионального конвективного течения вблизи фронта кристаллизации и уменьшению прогиба последнего.
- Показано, что применение вращающегося магнитного поля позволяет уменьшить неоднородность радиального распределения примеси в кристалле, вызванную термогравитационной конвекцией.
- Качественно подтверждены полученные ранее данные о кризисе устойчивости азимутального течения, вызванного вращающимся магнитным полем.
- Показано, что меридиональное течение понижает порог устойчивости азимутального течения, вызванного ВМП, что подтверждается независимыми лабораторными экспериментами.
- Проведены лабораторные эксперименты по ВМП на теплообмен и форму фронта кристаллизации при выращивании полупроводниковых кристаллов методом вертикальной направленной кристаллизации.
- Продемонстрирован эффект уменьшения прогиба фронта кристаллизации и формирование локального поднятия фронта кристаллизации вблизи оси симметрии (W-образная форма фронта) при действии ВМП.
- Показано, что индуцированное ВМП азимутальное течение при превышении некоторой критической интенсивности магнитного поля теряет устойчивость, что приводит к появлению нежелательных микронеоднородностей примеси в выращенном кристалле.

## **ГЛАВА 2. ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕССЫ ТЕПЛОМАССООБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ОСЕВОГО ТЕПЛОПОТОКА НА ФРОНТЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

Настоящая глава посвящена численному исследованию влияния вращающегося магнитного поля (ВМП) на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводниковых кристаллов методом осевого теплопотока на фронте кристаллизации (ОТФ).

Следует отметить, что данных по влиянию ВМП на процессы кристаллизации при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ОТФ в постановке с искривленным фронтом кристаллизации ранее опубликовано не было. В наиболее близкой работе [121] приведены результаты численного моделирования влияния вращающегося магнитного поля на процесс массопереноса в расплаве при выращивании кристалла GaSb методом погруженного нагревателя. В работе используется упрощенная постановка с плоским фронтом кристаллизации и с постоянной температурой на нагревателе. Продемонстрировано формирование двухвихревой структуры меридионального течения в области роста, ограниченной погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации. Показано достижение стационарного режима кристаллизации с формированием профиля концентрации на фронте кристаллизации, близкого к линейному.

Анализ комбинированного действия вращающегося и осевого постоянного магнитного полей на структуру течения и распределение примеси в кристалле при выращивании кристалла Se:GaSb методом погруженного нагревателя проведен в [122]. В работе приводятся результаты нестационарного численного моделирования ампулы малой длины с фиксированным плоским фронтом кристаллизации. Показано, что ВМП промышленной частоты с индукцией порядка  $10^1$  мТл способствует уменьшению радиальной неоднородности

примеси в кристалле. Дополнительное наложение постоянного магнитного поля с индукцией порядка  $10^{-1}$  Тл приводит к дальнейшему уменьшению радиальной неоднородности примеси со сменой направления градиента концентрации.

В серии работ [61, 119, 120] проведены численные исследования комбинированного влияния постоянного магнитного поля, постоянного электрического тока и вращения на процесс выращивания полупроводников методом погруженного нагревателя. Моделируется получение полупроводникового кристалла GaSb методом ВНК с неподвижным [119, 120] и вращающимся [61] погруженными нагревателями в двумерной нестационарной постановке с фиксированным плоским фронтом кристаллизации. Во всех работах используются постоянное осевое магнитное поле и постоянный радиальный электрический ток. Результаты моделирования свидетельствуют об уменьшении радиальной неоднородности примеси в кристалле и стабилизации процесса роста в результате комбинированного действия магнитного поля и электрического тока.

Другими способами воздействия на расплав в процессе кристаллизации полупроводников методом ОТФ являются осевые и вращательные вибрации [25], а также постоянные и ускоренные вращения тигля и погруженного нагревателя [26, 42].

В работах [26, 42] приведены результаты численного моделирования влияния постоянного вращения тигля и знакопеременного вращения нагревателя на процесс кристаллизации полупроводникового кристалла Ga:Ge методом погруженного нагревателя. Моделирование производилось в двумерной нестационарной постановке с фиксированным плоским фронтом кристаллизации в земных условиях. Показано влияние вращения составных частей печи на распределение примеси в кристалле. В частности, продемонстрирован эффект смены направления радиального градиента концентрации примеси и общее уменьшение величины неоднородности концентрации примеси в радиальном направлении под воздействием

вращательного движения. Отмечено, что случай отсутствия меридионального течения вблизи фронта кристаллизации для метода погруженного нагревателя не является оптимальным с точки зрения радиальной однородности распределения примеси в кристалле, поскольку, в отличие от метода Бриджмена, поле концентрации на удалении от фронта не является однородным в радиальном направлении, а формируется струей, вытекающей из кольцевого зазора между погруженным нагревателем и боковой стенкой ампулы. Продемонстрирована возможность установления колебательного режима течения как результата взаимодействия термогравитационного и вращательного механизмов генерации течения.

В работе [25] приведены результаты многопараметрического численного моделирования конвективного теплопереноса при осевом вибрационном воздействии на расплав для случая выращивания монокристаллов вертикальным методом ВНК. Вибрационное поле генерируется дисковым вибратором, погруженным в расплав и размещенным на небольшом расстоянии от фронта кристаллизации. Моделирование производилось в двумерной нестационарной постановке с фиксированным плоским фронтом кристаллизации для земных условий и для условий невесомости. Продемонстрирован эффект уменьшения толщины пограничных слоев вблизи погруженного нагревателя и фронта кристаллизации, что имеет принципиальное значение при выращивании монокристаллов. Показано влияние вибрационного воздействия на величину градиента температуры на фронте кристаллизации, а через него и на кинетику и скорость роста кристаллов.

В настоящей главе приведены результаты численного исследования влияния однородного вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводникового кристалла Ga:Ge методом ОТФ.

## 2.1 Постановка задачи

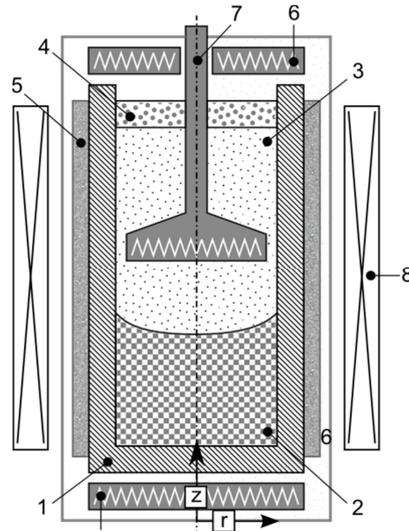


Рис. 2.1 Конструкция печи ОТФ с вращающимся магнитным полем

Печь ОТФ (Рис. 2.1) представляет собой цилиндрическую ампулу (1) с боковой стенкой конечной толщины, заполненный двумя фазами вещества — твердой (2) внизу и жидкой (3) вверху. Расплав покрыт слоем жидкого изолятора (4). Снаружи боковая граница ампулы теплоизолирована (5). Распределение температуры внутри ампулы управляется боковым (6) и погруженным (7) нагревателями. Вращающееся магнитное поле создается неподвижным кольцевым многополюсным магнитом (8). Схематическое изображение процесса, использовавшееся для выполнения численного моделирования, представлено на Рис. 2.2.

Погруженный нагреватель делит область расплава на две части, соединенные узким кольцевым каналом. Нижняя часть — камера роста, имеет практически постоянные геометрические размеры, а высота верхней области уменьшается с течением времени. При этом конвективные процессы, происходящие в верхней части, никак не влияют на течение вблизи фронта кристаллизации, хотя в процессе роста нижняя камера постоянно подпитывается через зазор расплавом из области над нагревателем. Граница раздела фаз — фронт кристаллизации — в общем случае искривлена. Ее форма и положение подлежат нахождению наряду с полями скорости, температуры и

концентрации примеси. Расплав считается вязкой несжимаемой ньютоновской жидкостью. В данной работе, в целях упрощения задачи, жидкий изолятор исключается из рассмотрения, и ампула представляет собой цилиндр с твердыми стенками нулевой толщины [41, 42]. Вращающееся магнитное поле предполагается пространственно-однородным, его ось вращения совпадает с осью симметрии ампулы. Электропроводности погруженного нагревателя, ампулы и кристалла приравниваются нулю.

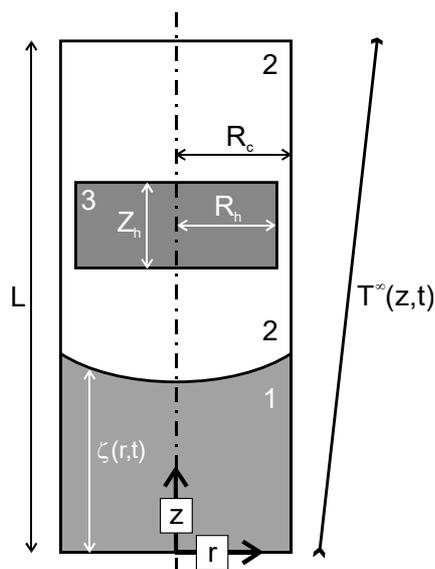


Рис. 2.2 Схематическое изображение модели процесса ОТФ

Рассмотрим цилиндрическую ампулу (Рис. 2.2) с боковой стенкой нулевой толщины, заполненную материалом, находящимся в твердой (кристалл) (1) и жидкой (расплав) (2) фазах. Полная высота ампулы -  $L$ , радиус -  $R_c$ . В расплав помещен твердый нагреватель (3) цилиндрической формы. Между боковой поверхностью нагревателя и внутренней стенкой ампулы оставлен малый зазор шириной  $\delta = R_c - R_h$ . Граница раздела фаз  $\zeta = z(r, t)$  (фронт кристаллизации) в общем случае искривлена; ее форма и положение зависят от времени. Толщина границы раздела фаз предполагается равной нулю, а ее положение соответствует изотерме со значением температуры фазового перехода расплав/кристалл  $T_*$ . Ампула и кристалл считаются покоящимися в

лабораторной системе отсчета. Управление процессом кристаллизации осуществляется продвижением бокового нагревателя вверх вдоль ампулы с постоянной скоростью  $W$ , моделируемым зависящим от времени распределением температуры  $T^\infty(z,t)$ , и скоординированного с ним перемещения погруженного нагревателя, также движущегося вверх со скоростью  $W$ . Температуры нижнего и верхнего концов ампулы принимаются равными  $T^\infty(0,t)$  и  $T^\infty(L,t)$ , соответственно. Распределение температуры на нижней границе нагревателя зафиксировано.

Течение и тепломассоперенос в расплаве полупроводника будем описывать системой уравнений термоконцентрационной конвекции в приближении Буссинеска [13]. В лабораторной системе отсчета, в которой ампула и кристалл покоятся, эти уравнения имеют вид:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho_m} \nabla p + \nu \Delta \vec{V} - \vec{g}(\beta_T T - \beta_C C) + \frac{1}{\rho_m} \vec{F}_L, \quad (2.1)$$

$$\nabla \vec{V} = 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) C = D \Delta C, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) T = \chi_{m,h} \Delta T, \quad (2.4)$$

где вклад вращающегося магнитного поля представлен добавочным слагаемым  $\vec{F}_L$  (силой Лоренца) в уравнении движения (1.17),  $\vec{V}$  – скорость течения в расплаве,  $T$  – температура,  $C$  – концентрация примеси,  $\rho_m$  – плотность расплава,  $p$  – давление,  $\nu$  – кинематическая вязкость,  $\chi_i$  – температуропроводность материала  $i$ ,  $D$  – коэффициент диффузии примеси в расплаве,  $\beta_T$  – коэффициент теплового расширения расплава,  $\beta_C$  – коэффициент концентрационного расширения расплава,  $\vec{g}$  – сила тяжести,.

индекс  $i$  принимает значения  $m$ ,  $c$  и  $h$  для расплава, кристалла и погруженного нагревателя, соответственно.

Уравнения (2.1)-(2.4) записаны для области, занятой расплавом. Для области, занятой кристаллом, записывается уравнение переноса тепла

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_c \Delta T, \quad (2.5)$$

диффузия примеси в кристалле не учитывается.

Уравнения (2.1)-(2.5) должны быть дополнены уравнением для магнитного поля (1.15).

Ограничимся рассмотрением осесимметричного случая. Вывод осредненной силы Лоренца для случая однородного магнитного поля, вращающегося с постоянной скоростью, приведен в параграфе 1.1 настоящей диссертации.

### 2.1.1 Граничные условия для скорости течения

Вывод граничных условий для скорости течения на фронте кристаллизации приведен в параграфе 1.1 настоящей диссертации. Окончательный вид нормальной компоненты скорости течения на фронте кристаллизации:

$$V_n = \frac{\rho_c - \rho_m}{\rho_m} \frac{U}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2}}. \quad (2.6)$$

Касательная компонента скорости течения равна нулю в силу условия прилипания:

$$V_\tau = 0. \quad (2.7)$$

Боковая стенка ампулы и верхняя крышка покоятся относительно лабораторной системы отсчета; в силу условия прилипания скорость жидкости на этих границах равна нулю:

$$\vec{V} = V_r = V_z = 0. \quad (2.8)$$

Погруженный нагреватель движется вверх с постоянной скоростью  $W$ :

$$V_r = 0, V_z = W. \quad (2.9)$$

На оси симметрии ставятся следующие условия:

$$V_r = \frac{\partial V_z}{\partial r} = 0. \quad (2.10)$$

### 2.1.2 Граничные условия для температуры

На боковой границе ампулы температура равна температуре бокового нагревателя:

$$T|_{\Gamma} = T^{\infty}. \quad (2.11)$$

В рассматриваемой задаче используется линейный профиль распределения температуры  $T^{\infty} = T(z, t)$ :

$$T^{\infty}(z, t) = T_* + \nabla T(z - Z_*(t)), \quad (2.12)$$

где  $T_*$  - температура фазового перехода расплав/кристалл,  $\nabla T$  - осевой градиент температуры,  $Z_*$  - высота точки профиля температуры  $T^{\infty}(z, t)$  относительно дна ампулы, на которой температура  $T^{\infty}$  равна температуре фазового перехода  $T^{\infty}(Z_*) = T_*$ . Поскольку в работе предполагается постоянство скорости смещения нагревателя  $W$ , положение точки  $Z_*$  в момент времени  $t$  есть

$$Z_*(t) = Z_*(0) + Wt. \quad (2.13)$$

На нижней границе нагревателя задается фиксированный линейный профиль температуры

$$T(r) = T_h^1 + \frac{r(T_h^2 - T_h^1)}{R_h}, \quad (2.14)$$

где  $R_h$  — радиус погруженного нагревателя,  $T_h^1$  — температура нижней границы погруженного нагревателя на оси симметрии,  $T_h^2$  — температура нижней границы погруженного нагревателя на расстоянии  $R_h$  от оси симметрии.

На остальных границах погруженного нагревателя ставятся условия непрерывности температуры и теплового потока

$$\kappa_h \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_h = \kappa_m \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_m, T \Big|_h = T \Big|_m \quad (2.15)$$

для пар  $\{i, j\} = \{c, a\}$  и  $\{i, j\} = \{m, a\}$ , соответственно.

На фронте кристаллизации ставится условие непрерывности температуры и теплового потока с учетом высвобождения теплоты фазового перехода

$$\kappa_m \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_m = \kappa_c \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \Big|_c + \rho_c \Delta H \frac{\frac{\partial \zeta}{\partial t}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2}}, \quad (2.16)$$

где  $\Delta H$  - удельная теплота фазового перехода,  $\zeta = \zeta(r, t)$  - зависящее от времени положение фронта кристаллизации.

Температура на верхнем и нижнем торцах ампулы задается распределением температуры  $T^\infty$ :

$$T \Big|_{z=0} = T^\infty(0, t), T \Big|_{z=L} = T^\infty(L, t). \quad (2.17)$$

На оси симметрии ставится условие

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0. \quad (2.18)$$

### 2.1.3 Граничные условия для концентрации примеси

На фронте кристаллизации ставится условие баланса массы примеси [24, 73, 111, 131]

$$D \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} \Big|_m = C(1-K) \frac{\rho_c}{\rho_m} \frac{\frac{\partial \zeta}{\partial t}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2}}, \quad (2.19)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии примеси в расплаве,  $K$  - коэффициент сегрегации примеси.

На остальных границах – внутренней стенке ампулы, верхнем торце ампулы, всей поверхности погруженного нагревателя и оси симметрии ставится условие отсутствия потока примеси:

$$\frac{\partial C}{\partial \vec{n}} \Big|_{\Gamma} = 0. \quad (2.20)$$

### 2.1.4 Граничные условия для магнитного поля

Граничные условия для магнитного поля ставятся на скалярный магнитный потенциал  $f$ . На боковых границах погруженного нагревателя и ампулы

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} \Big|_m = 0, \quad (2.21)$$

на фронте кристаллизации, горизонтальных границах погруженного нагревателя и верхней крышке ампулы

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} \Big|_m = r, \quad (2.22)$$

на оси симметрии

$$f \Big|_{r=0} = 0. \quad (2.23)$$

При выводе граничных условий использовано условие обращения в нуль нормальной компоненты плотности электрического тока  $\vec{j}$  на границе  $(\vec{j} \cdot \vec{n})|_{\Gamma} = 0$ , что соответствует случаю диэлектрических массивов, окружающих расплав.

## 2.2 Численный метод

Метод получения дискретных аналогов уравнений, формирования вычислительной сетки и численного решения алгебраических уравнений аналогичен приведенному в параграфе 1.3.

## 2.3 Результаты численного моделирования

Численное моделирование тепло- и массопереноса при выращивании полупроводниковых кристаллов методом ОТФ выполнялось для германия, легированного галлием Ga:Ge. Основные параметры задачи приведены в Таблице 1. Вычисления осуществлены для двух значений осевого градиента температуры:  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$  и  $\nabla T = 30 \text{ K/cm}$  и трех режимов работы погруженного нагревателя (3): фиксированная температура —  $T_h^1 = T_h^2 = 945 \text{ }^\circ\text{C}$ ; постоянный положительный градиент —  $T_h^1 = 942 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_h^2 = 945 \text{ }^\circ\text{C}$ ; постоянный отрицательный градиент —  $T_h^1 = 945 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_h^2 = 942 \text{ }^\circ\text{C}$ . Температура фазового перехода  $T_*$  принималась равной  $937.4 \text{ }^\circ\text{C}$ . Интенсивность вращающегося магнитного поля варьировалась путем изменения магнитной индукции в диапазоне  $0 \div 0.4 \text{ мТл}$ . Параметры выбирались близкими к задаче ВНК (см. параграф 1.4). Теплофизические свойства погруженного нагревателя принимались равными таковым для боковой стенки ампулы (графит).

Таблица 1. Параметры задачи

Печь ОТФ			
Высота ампулы	$L$	6.4	см

Радиус ампулы	$R_c$	1.6	см
Высота погруженного нагревателя	$Z_h$	0.8	см
Радиус погруженного нагревателя	$R_h$	1.55	см
Начальное положение профиля температуры	$Z_*(0)$	3.2	см
Скорость смещения нагревателя	$W$	$4 \cdot 10^{-4}$	$\frac{см}{с}$
Исходная концентрация примеси	$C_0$	$10^{-2}$	% <sub>вес</sub>
Осевой градиент температуры	$\nabla T$	20,30	$\frac{К}{см}$
<b>Германий, легированный галлием Ga:Ge</b>			
Плотность кристалла, расплава	$\rho_{c,m}$	5.5	$\frac{г}{см^3}$
Температура фазового перехода	$T_*$	937.4	$^{\circ}C$
Теплопроводность кристалла	$\kappa_c$	0.17	$\frac{Вт}{см \cdot К}$
Теплопроводность расплава	$\kappa_m$	0.39	$\frac{Вт}{см \cdot К}$
Теплоемкость кристалла, расплава	$C_{p_{c,m}}$	0.39	$\frac{Дж}{г \cdot К}$
Удельная теплота плавления	$\Delta H$	460	$\frac{Дж}{г}$
Коэффициент теплового расширения	$\beta_T$	$5 \cdot 10^{-4}$	$К^{-1}$
Коэффициент концентрационного расширения	$\beta_C$	0	$К^{-1}$
Динамическая вязкость	$\mu$	$7.15 \cdot 10^{-3}$	$\frac{г}{см \cdot с}$
Электропроводность расплава	$\sigma$	$2.27 \cdot 10^6$	$\frac{См}{м}$
Равновесный коэффициент сегрегации	$K$	0.087	1

Коэффициент диффузии галлия в германии	$D$	$2.1 \cdot 10^{-4}$	$\frac{\text{см}^2}{\text{с}}$
<b>Графит</b>			
Плотность	$\rho_h$	1.8	$\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$
Теплоемкость	$C_{p_h}$	1.8	$\frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{К}}$
Теплопроводность	$\kappa_h$	3.26	$\frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}$
<b>Вращающееся магнитное поле</b>			
Частота вращения	$\Omega$	50	$\text{Гц}$
Индукция магнитного поля	$B_0$	$0 \div 0.4$	$\text{мТл}$

Следует отметить наличие зазора  $\delta = R_c - R_h$  между погруженным нагревателем и боковой стенкой ампулы. Его наличие обусловлено необходимостью подпитки нижней камеры, в которой происходит процесс кристаллизации, расплавом из верхней камеры. При этом величина зазора выбрана достаточно малой для предотвращения обратного перетекания расплава из нижней камеры в верхнюю.

Навязанные в задаче тепловые условия предопределили форму фронта кристаллизации: она получилась выпуклой при отсутствии конвективного движения и М-образной, с локальным опущением фронта кристаллизации вблизи оси симметрии, при его наличии. Величина прогиба фронта зависит от тепловых условий на погруженном нагревателе. В то же время результаты моделирования показывают, что форма фронта кристаллизации и среднее расстояние от фронта до погруженного нагревателя остаются практически постоянными в течение всего процесса роста. Данный результат кардинально отличается от результата, полученного в случае кристаллизации по вертикальному методу Бриджмена: при этом способе для того же материала

формируется вогнутый фронт кристаллизации, а его форма меняется с течением времени [74, 77]. Увеличение осевого градиента температуры  $\nabla T$  приводит, без внесения качественных изменений, к уменьшению расстояния от нагревателя до фронта кристаллизации с одновременным уменьшением прогиба последнего.

Следует отметить, что в области над погруженным нагревателем возможно существование развитого конвективного течения, вызванного как тепловым и термоконцентрационным механизмами, так и ВМП-механизмом. Однако расчеты показывают, что в исследованной задаче области над нагревателем и под ним оказываются практически независимыми. Причин тому несколько:

- Выбранные тепловые граничные условия на нижней границе нагревателя в виде граничных условий первого рода практически исключают влияние температурного поля над погруженным нагревателем и внутри него на процессы, происходящие под ним. Тепловая связь между областями происходит в боковом зазоре между погруженным нагревателем и боковой стенкой ампулы, и в самой стенке. Малость величины зазора и толщины боковой стенки вкупе с достаточно жесткими граничными условиями на внешней стенке ампулы позволяет говорить о малости взаимного влияния тепловых полей в двух объемах;
- Несмотря на развитое конвективное течение в области над погруженным нагревателем, гидродинамическая связь между ней и областью роста осуществляется посредством узкого кольцевого зазора, течение в котором фактически является течением Куэтта вне зависимости от процессов, происходящих в объеме расплава над нагревателем;
- Наличие гидродинамической связи между объемами обуславливает возможность свободного переноса примеси между ними. Течение жидкости в зазоре в системе отсчета, связанной с погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации оказывается направленным из области над нагревателем в область под ним, что исключает обратный конвективный

перенос примеси. Учет диффузионного механизма массопереноса позволяет предположить ситуацию распространения возмущений концентрации примеси в область над погруженным нагревателем. Однако результаты численного моделирования показали, что в исследованной задаче скорость роста и, как следствие, скорость течения в зазоре значительно превышает характерную скорость распространения неоднородностей концентрации примеси за счет диффузионного механизма. Таким образом, неоднородность примеси оказывается значительной лишь в объеме под нагревателем и кольцевом зазоре; распределение примеси в области над нагревателем остается постоянным и равным начальному заданному распределению примеси в течение всего процесса роста.

Резюмируя вышесказанное, в исследуемой задаче оказывается возможным исключить из обсуждения результатов область над погруженным нагревателем, а также зазор между нагревателем и боковой стенкой ампулы, и сосредоточиться на области между погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации.

### **2.3.1 Обособленное влияние вращающегося магнитного поля**

Обособленное действие вращающегося магнитного поля на конвективное течение в расплаве было подробно рассмотрено в параграфе 1.4.2. В применении к исследуемой задаче, его действие состоит в генерации двух практически симметричных вихрей, расположенных один над другим, независимо в областях над погруженным нагревателем и под ним, аналогично процессу Бриджмена. Течение же в зазоре остается чисто азимутальным течением Куэтта, при этом его интенсивность оказывается весьма малой в силу малости величины зазора и, как следствие, значительного влияния граничных условий прилипания.

### **2.3.2 Влияние тепловой конвекции**

Рассмотрим обособленное влияние тепловой конвекции на процессы тепло- и массопереноса при выращивании кристалла Ga:Ge методом ОТФ. В

исследуемой постановке задачи в отсутствие вращающегося магнитного поля основными управляющими параметрами являются аксиальный градиент температуры  $\nabla T$  и радиальный перепад температуры на погруженном нагревателе  $T_h^{1,2}$ . В методе ОТФ средняя температура на погруженном нагревателе устанавливается выше температуры фазового перехода расплав-кристалл; как правило, превышение составляет несколько градусов.

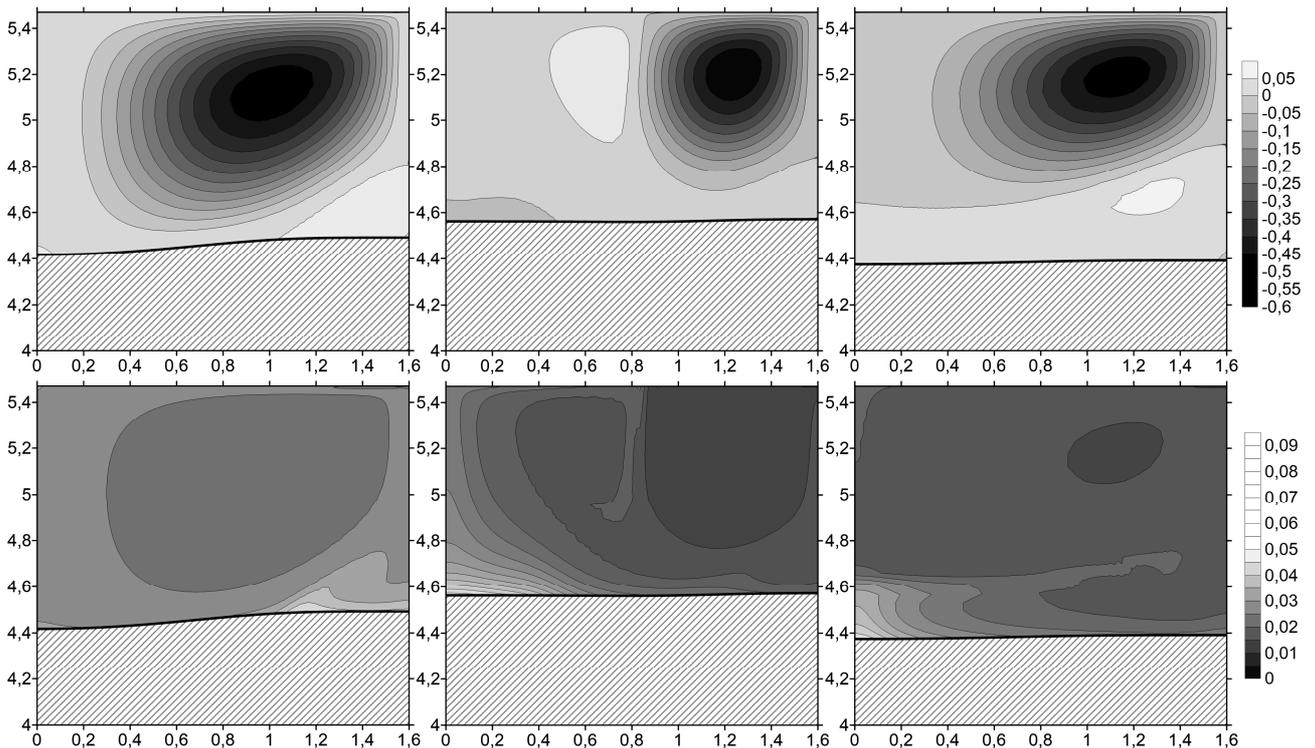


Рис. 2.3 Поля функции тока  $\varphi$  (вверху) и концентрации примеси в расплаве (внизу) в момент времени 1000 сек. для случая  $B=0$  мТл,  $\nabla T = 20$  К / см и

режимов погруженного нагревателя (слева направо)  $T_h^{1,2} = 942,945$  °С ,

$$T_h^{1,2} = 945,942$$
 °С ,  $T_h^{1,2} = 945$  °С

Аналогично задаче ВНК, рассмотренной в главе 1 настоящей диссертации, диффузионный механизм теплопереноса в расплаве доминирует над конвективным, что определяет слабое влияние конвективных течений на поле температуры в расплаве и позволяет исключить последнее из рассмотрения.

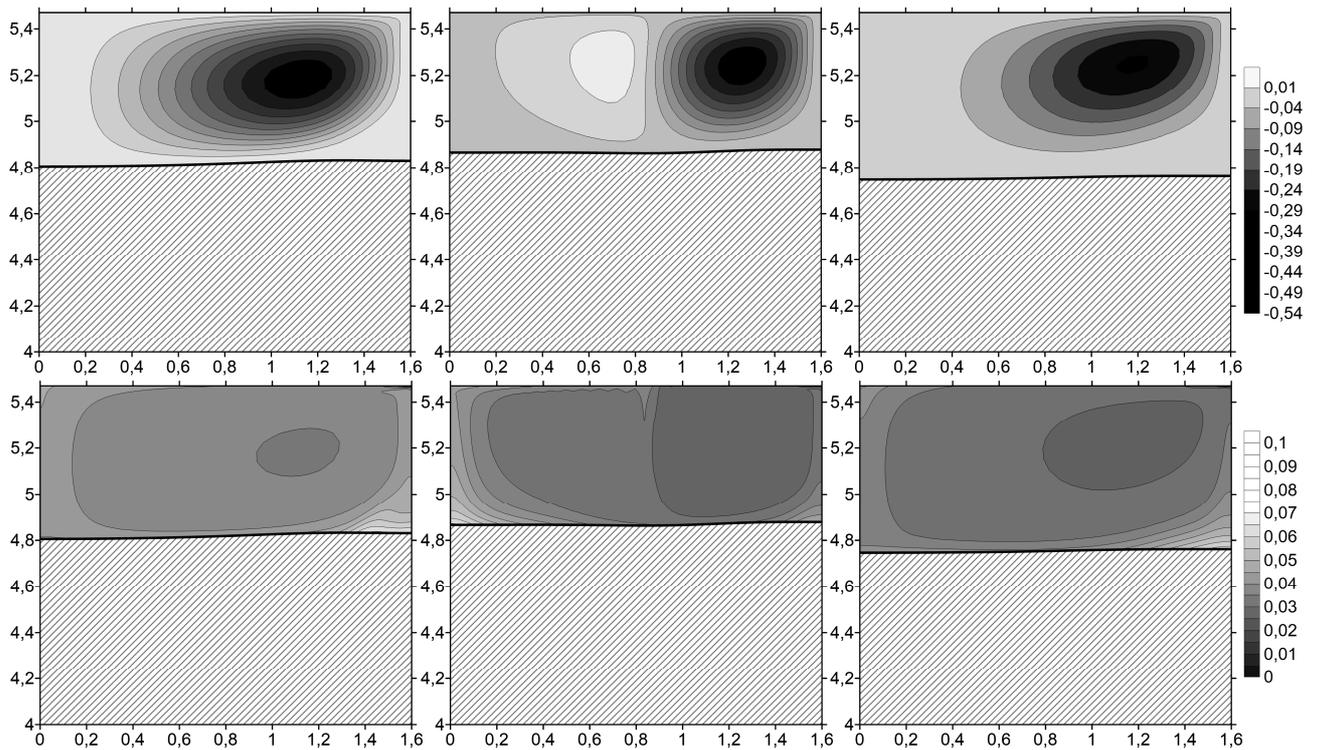


Рис. 2.4 Поля функции тока  $\varphi$  (вверху) и концентрации примеси в расплаве (внизу) в момент времени 1000 сек. для случая  $B=0$  мТл,  $\nabla T=30$  К/см и режимов погруженного нагревателя (слева направо)  $T_h^{1,2} = 942,945$  °С ,

$$T_h^{1,2} = 945,942$$
 °С ,  $T_h^{1,2} = 945$  °С

На Рис. 2.3 и Рис. 2.4 представлены изолинии полей функции тока и распределения примеси для различных условий нагрева. Здесь и далее показаны правые половины ампул, срезы по высоте от фронта кристаллизации до нижней границы погруженного нагревателя.

#### *Форма и положение фронта кристаллизации.*

Как можно видеть из представленных рисунков, распределение температуры вблизи фронта кристаллизации оказывают существенное влияние на его форму и положение: в исследованной постановке фронт кристаллизации имеет М-образную форму; величина прогиба фронта мала по сравнению с радиусом кристалла.

Данный результат существенно отличается от результата, полученного для задачи Бриджмена, рассмотренной в параграфе 1.4.3, где для того же материала

и близких значений геометрических параметров и условий нагрева фронт кристаллизации получался вогнутым, а величина его прогиба была значительно больше. Таким образом, применение погруженного нагревателя предоставляет дополнительный механизм управления фронтом кристаллизации относительно метода Бриджмена, позволяющий, эффективно изменять форму и положение фронта кристаллизации, навязываемые теплофизическими характеристиками применяемого материала. Уменьшение прогиба фронта кристаллизации положительно сказывается на остаточных термических напряжениях в выращенном кристалле [98, 99].

Можно заметить, что на положение фронта кристаллизации относительно погруженного нагревателя влияют как режим работы последнего, так и приложенный аксиальный градиент температуры  $\nabla T$ . Увеличение  $\nabla T$  предсказуемо приводит к уменьшению просвета между фронтом и нагревателем и соответствующего уменьшения объема кристаллизационной камеры. Направление градиента температуры на нагревателе также оказывает некоторое воздействие на величину просвета между фронтом и нагревателем: наибольшее значение наблюдается при постоянной температуре нагревателя, а наименьшее – при отрицательном градиенте температуры; положительный градиент температуры приводит к установлению промежуточного значения просвета. Разброс величины просвета вследствие изменения температурных условий на нагревателе уменьшается по мере роста  $\nabla T$ .

#### *Конвективное течение.*

Из сравнения Рис. 2.3 и Рис. 2.4 можно увидеть, что тепловые условия оказывают значительное воздействие на течение в расплаве вблизи фронта кристаллизации. В отличие от задачи Бриджмена, течение является двухвихревым даже в отсутствие вращающегося магнитного поля. В зависимости от взаимного расположения вихрей все рассмотренные случаи можно разделить на две группы: приложенный положительный градиент температуры на погруженном нагревателе  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ } ^\circ\text{C}$  и фиксированная

температура на погруженном нагревателе  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$  приводят к преимущественно вертикальному расположению вихрей, тогда как отрицательный градиент температуры  $T_h^{1,2} = 945,942 \text{ }^\circ\text{C}$  дает горизонтальное расположение вихрей. Несмотря на малую величину прогиба фронта кристаллизации, получающегося радиального градиента температуры оказывается достаточно для формирования дополнительных вихрей вблизи фронта. Для меньшего аксиального градиента температуры  $\nabla T = 20 \text{ K / см}$  в случае положительного градиента температуры  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ }^\circ\text{C}$  дополнительный вихрь локализован вблизи стенки ампулы, тогда как в случае постоянной температуры  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$  дополнительный вихрь сильно вытянут по горизонтали и занимает всю область непосредственно над фронтом кристаллизации. Вариант нагрева  $T_h^{1,2} = 945,942 \text{ }^\circ\text{C}$  приводит к горизонтальному расположению вихрей, занимающих все пространство от погруженного нагревателя до фронта кристаллизации. Во всех трех случаях основной вихрь имеет большую интенсивность, чем дополнительный.

Как видно из Рис. 2.4 увеличение  $\nabla T$  негативно сказывается на формировании дополнительного вихря в случае двухвихревой структуры с вертикальным расположением вихрей: в варианте нагрева  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ }^\circ\text{C}$  дополнительный вихрь имеет заметно меньшие размеры и интенсивность, по сравнению с аналогичным на Рис. 2.3, а вариант  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$  демонстрирует переход к одновихревой структуре течения. В случае  $T_h^{1,2} = 945,942 \text{ }^\circ\text{C}$  двухвихревая структура течения сохраняется, с аналогичной тенденцией к подавлению интенсивности дополнительного вихря.

Продемонстрированный результат имеет качественное расхождение с [26], в которой приводятся результаты численного моделирования задачи в близкой постановке, но с фиксированным плоским фронтом кристаллизации,- в указанной работе течение сохраняло одновихревую структуру вне зависимости от условий нагрева. Таким образом, можно заключить, что приближение

плоского фронта кристаллизации слабо применимо к задачам кристаллизации методом погруженного нагревателя.

### Распределение примеси.

В рассматриваемой задаче основным механизмом массопереноса является конвективный массоперенос, что определяет сильную зависимость распределения концентрации примеси в расплаве от структуры и интенсивности течения. На Рис. 2.3 и Рис. 2.4 представлены поля концентрации примеси в расплаве для различных тепловых условий в отсутствие ВМП.

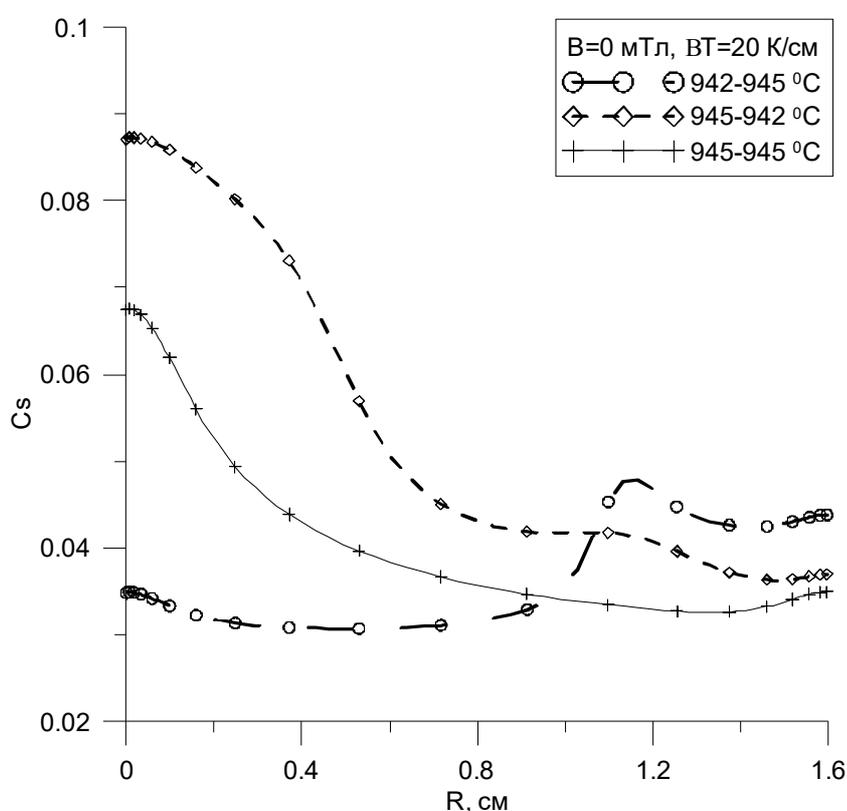


Рис. 2.5 Распределение примеси на фронте концентрации в момент времени 1000 сек. для случая  $B=0$ ,  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$  и различных температурных условий на погруженном нагревателе

Вследствие малости скорости протяжки  $W$  по сравнению с характерными скоростями течения расплава  $\tilde{V}$  искривление изолиний концентрации вблизи зазора между погруженным нагревателем и стенкой ампулы на приведенных

рисунках практически незаметно. Анализ полей концентрации во всем объеме расплава подтвердили наличие градиента концентрации в зазоре и однородность концентрации примеси в объеме над погруженным нагревателем.

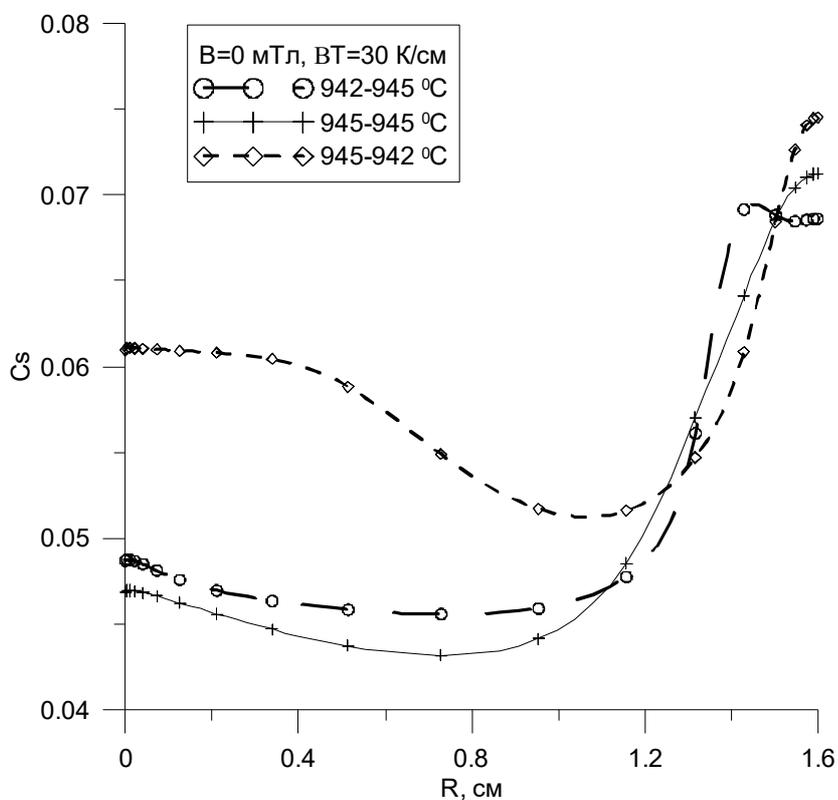


Рис. 2.6 Распределение примеси на фронте концентрации в момент времени 1000 сек. для случая  $B=0$ ,  $\nabla T=30 K/cm$  и различных температурных условий на погруженном нагревателе

Как можно видеть, аналогично задаче ВНК, максимальные значения как самой концентрации, так и ее градиента во всех случаях наблюдаются вблизи фронта кристаллизации, однако видно, что расположение областей с максимальным значением концентрации примеси на фронте зависит от заданных тепловых условий. На Рис. 2.5 и Рис. 2.6 представлено распределение концентрации примеси на фронте кристаллизации для различных условий нагрева. Во всех случаях наблюдается значительная радиальная неоднородность распределения примеси, но на направление градиента большее

влияние оказывает аксиальный градиент температуры: для  $\nabla T = 20 \text{ K} / \text{см}$  максимум концентрации примеси наблюдается на оси симметрии, тогда как для  $\nabla T = 30 \text{ K} / \text{см}$  ситуация становится обратной – максимум концентрации примеси перемещается к стенке ампулы. В первом случае минимальная неоднородность распределения примеси наблюдается в случае  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ }^\circ\text{C}$ , тогда как во втором – в случае градиента противоположного направления  $T_h^{1,2} = 945,942 \text{ }^\circ\text{C}$ . Вариант постоянной температуры на нагревателе  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$  занимает промежуточную позицию.

Следует также отметить, что в исследованной конфигурации существенного влияния температурных условий на аксиальную неоднородность распределения примеси обнаружено не было – аналогично задаче ВНК, средняя концентрация примеси в кристалле увеличивается по мере его роста, что является следствием малости коэффициента сегрегации  $K$  для рассматриваемого материала Ga:Ge.

### 2.3.3 Совместное действие тепловой конвекции и ВМП

Рассмотрим теперь полную задачу о влиянии вращающегося магнитного поля на процесс выращивания полупроводникового кристалла Ga:Ge методом ОТФ. На Рис. 2.7 и Рис. 2.8 представлены поля функции тока и распределения примеси для различных условий нагрева в случае вращающегося магнитного поля  $B = 0.4 \text{ мТл}$ .

#### *Форма и положение фронта кристаллизации.*

В исследованном случае приложение вращающегося магнитного поля не оказывает заметного влияния на фронт кристаллизации.

#### *Конвективное течение.*

Как показано в параграфе 1.4.2, создаваемое вращающимся магнитным полем течение в азимутальной плоскости порождает, благодаря эффекту Экмана, течение в меридиональной плоскости вблизи горизонтальных границ расплава [56, 80, 123]. Данное индуцированное течение состоит из двух вихрей,

расположенных один над другим и вращающихся в противоположные стороны. В силу малости расстояния между погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации по сравнению с радиусом ампулы индуцированные вихри оказываются вытянутыми в радиальном направлении и плотно прижатыми друг к другу. Данное течение накладывается на течения, генерируемые термогравитационным и концентрационным механизмами с формированием результирующего конвективного механизма тепло- и массопереноса в расплаве.

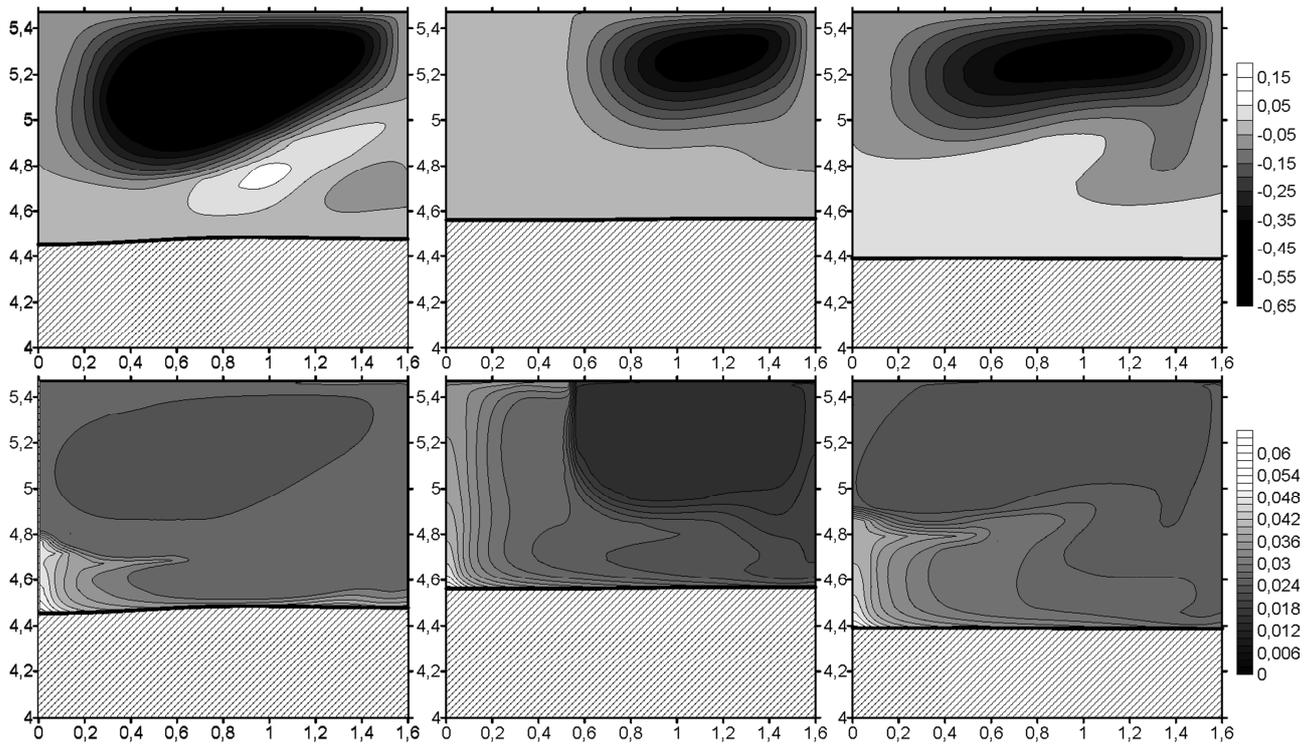


Рис. 2.7 Поля функции тока  $\varphi$  (вверху) и концентрации примеси в расплаве (внизу) в момент времени 1000 сек. для случая  $B=0.4$  мТл,  $\nabla T = 20$  К/см и режимов погруженного нагревателя (слева направо)  $T_h^{1,2} = 942,945$  °С,

$$T_h^{1,2} = 945,942$$
 °С,  $T_h^{1,2} = 945$  °С

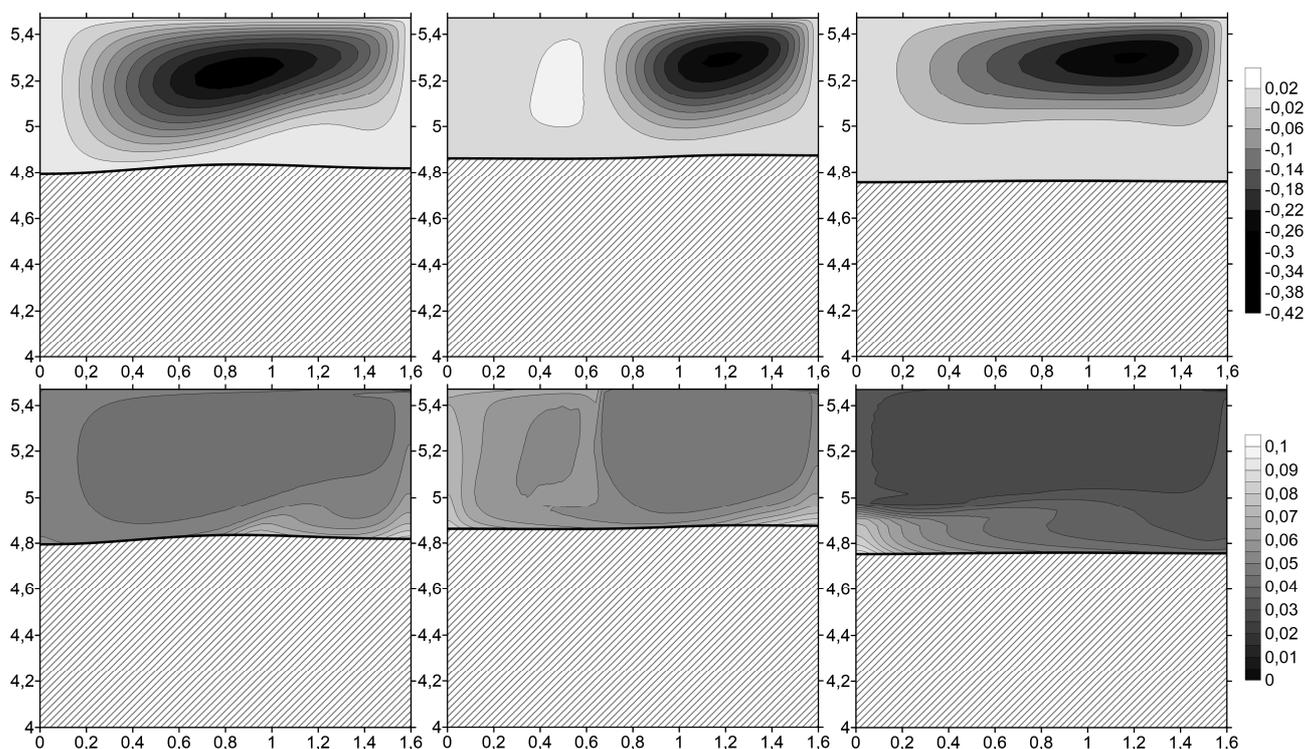


Рис. 2.8 Поля функции тока  $\varphi$  (вверху) и концентрации примеси в расплаве (внизу) в момент времени 1000 сек. для случая  $B=0.4$  мТл,  $\nabla T=30$  К/см и

режимов погруженного нагревателя (слева направо)  $T_h^{1,2} = 942,945$  °С,

$$T_h^{1,2} = 945,942$$
 °С,  $T_h^{1,2} = 945$  °С

Как можно заметить из попарного сравнения Рис. 2.3 с Рис. 2.7 и Рис. 2.4 с Рис. 2.8, приложение даже малого по интенсивности вращающегося магнитного поля способно качественно повлиять на структуру течения в расплаве вблизи фронта кристаллизации. В целом, наибольшее влияние ВМП на течение в расплаве наблюдается при меньшем осевом градиенте температуры  $\nabla T$ , что можно объяснить более слабым влиянием твердых границ, окружающих расплав. Соответственно, увеличение аксиального градиента температуры приводит к усилению влияния граничных условий и увеличению жесткости системы.

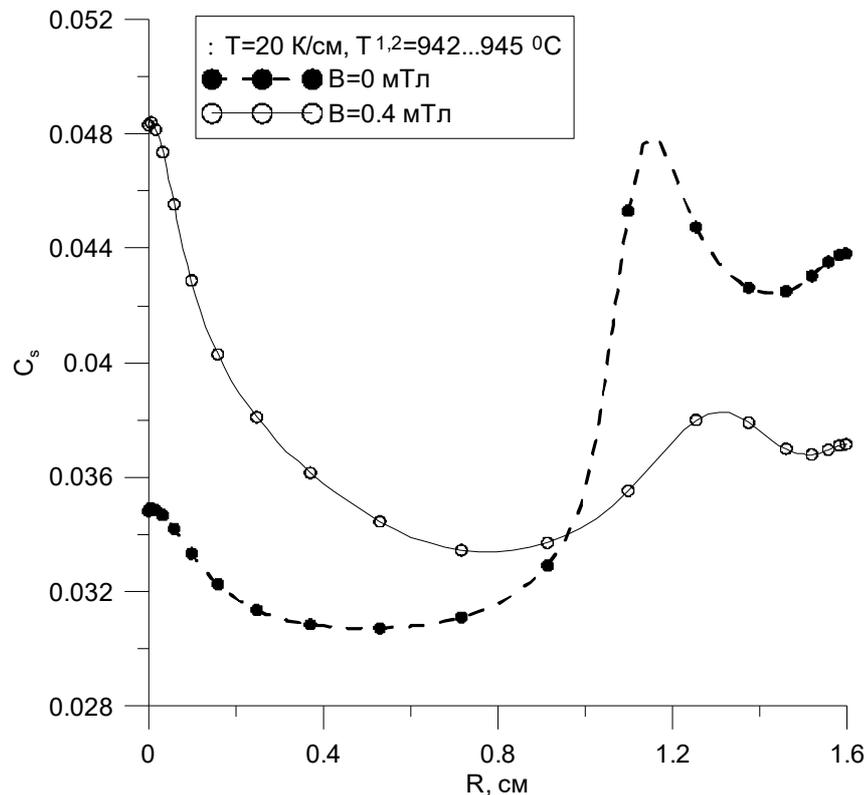


Рис. 2.9 Распределение концентрации примеси на фронте кристаллизации для случая  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ }^\circ\text{C}$

В случае  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ }^\circ\text{C}$  приложение ВМП формирует трехвихревую структуру течения вместо двухвихревой, имевшей место в отсутствие ВМП. Два дополнительных вихря возникают на месте одного старого над фронтом кристаллизации вблизи боковой стенки. В случае  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 945,942 \text{ }^\circ\text{C}$  также формируется трехвихревая структура течения – в дополнение к двум имевшимся горизонтально расположенным вихрям формируется третий, вытянутый в горизонтальной плоскости и занимающий область над фронтом кристаллизации. Наконец, в случае постоянной температуры на нагревателе  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$  сохраняется двухвихревая структура течения, но дополнительный вихрь смещается к оси симметрии.

Увеличение аксиального градиента температуры до  $\nabla T = 30 \text{ K/cm}$  приводит к уменьшению числа дополнительных вихрей: для случая

постоянного градиента обоих направлений  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ } ^\circ\text{C}$  и  $T_h^{1,2} = 945,942 \text{ } ^\circ\text{C}$  сохраняется двухвихревая структура течения с вертикальным и горизонтальным расположением вихрей, соответственно. В то же время, в случае постоянной температуры на нагревателе  $T_h^{1,2} = 945 \text{ } ^\circ\text{C}$ , вращающееся магнитное поле вызывает появление дополнительного вихря, сильно вытянутого по горизонтали и занимающего область над фронтом кристаллизации.

#### *Распределение примеси.*

Изменение структуры течения под действием ВМП неизбежно сказывается на распределении примеси в расплаве и, соответственно, в выращенном кристалле. На Рис. 2.7 и Рис. 2.8 представлены поля концентрации примеси в расплаве для различных тепловых условий в случае  $B = 0.4 \text{ мТл}$ . Сравнение с соответствующими полями на Рис. 2.3 и Рис. 2.4 демонстрирует заметное изменение структуры распределения примеси в расплаве.

Сравнение распределения примеси на фронте кристаллизации для случая  $\nabla T = 20 \text{ К / см}$ ,  $T_h^{1,2} = 942,945 \text{ } ^\circ\text{C}$  при отсутствии и наличии ВМП приведено на Рис. 2.9. Как можно видеть, применение ВМП приводит к уменьшению неоднородности распределения примеси на 12%, однако примечательным здесь является смена направления градиента концентрации на фронте кристаллизации, что свидетельствует о смене направления течения вблизи фронта под действием ВМП.

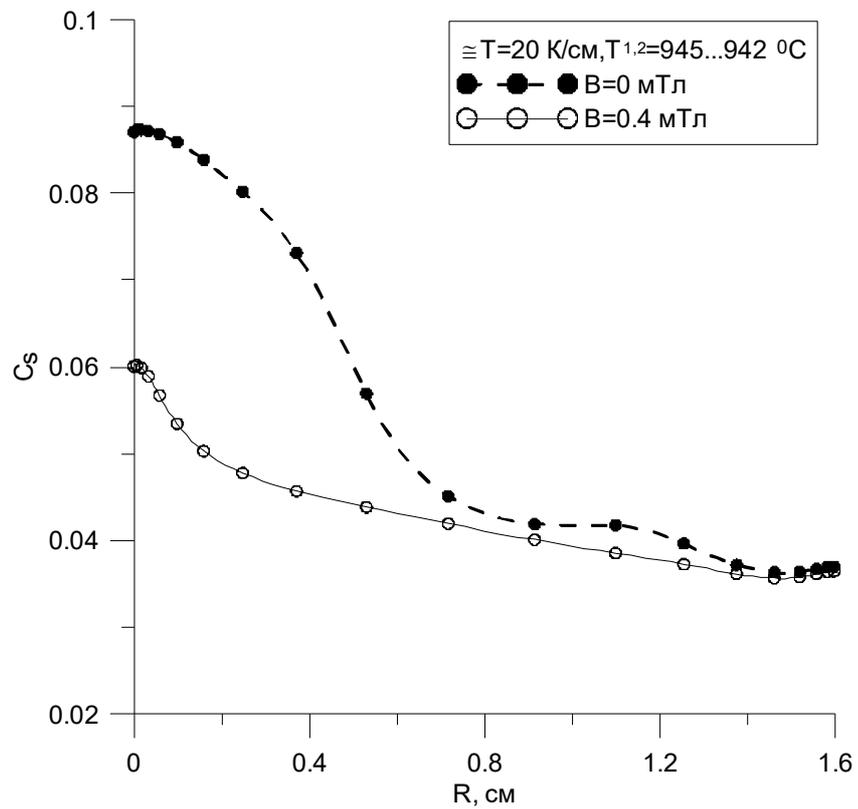


Рис. 2.10 Распределение концентрации примеси на фронте кристаллизации для случая  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 945, 942 \text{ }^\circ\text{C}$

На Рис. 2.10 приведено распределение примеси на фронте кристаллизации для случая  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 945, 942 \text{ }^\circ\text{C}$  при отсутствии и наличии ВМП. В данном случае можно заметить существенное положительное влияние вращающегося магнитного поля на радиальную неоднородность распределения примеси в кристалле: приложение ВМП интенсивностью  $B = 0.4 \text{ мТл}$  уменьшает радиальную неоднородность распределения примеси в кристалле (1.66) на 54%. Основное уменьшение неоднородности в данном случае происходит за счет увеличившегося конвективного переноса избыточной массы примеси, скапливающейся над фронтом кристаллизации вблизи оси симметрии.

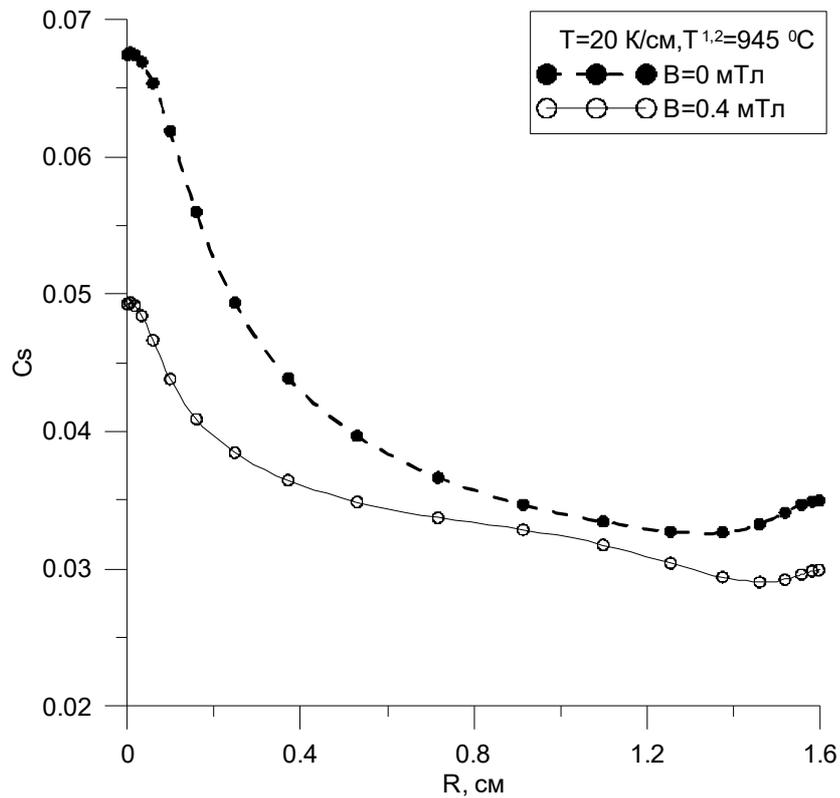


Рис. 2.11 Распределение концентрации примеси на фронте кристаллизации для случая  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$

На Рис. 2.11 приведено распределение примеси на фронте кристаллизации для случая  $\nabla T = 20 \text{ K/cm}$ ,  $T_h^{1,2} = 945 \text{ }^\circ\text{C}$  при отсутствии и наличии ВМП. Аналогично предыдущему случаю, применение вращающегося магнитного поля интенсифицирует общий конвективный массоперенос непосредственно над фронтом кристаллизации и ускоряет отведение избыточной массы примеси с оси симметрии. Применение вращающегося магнитного поля интенсивностью  $B = 0.4 \text{ мТл}$  в данном случае позволяет уменьшить радиальную неоднородность распределения примеси в кристалле (1.66) на 39%.

Таким образом, представляется перспективным применение вращающегося магнитного поля как средства управления массопереносом в расплаве и распределением примеси в кристалле при выращивании полупроводникового кристалла Ga:Ge методом ОТФ.

## 2.4 Выводы

- Впервые выполнено численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля (ВМП) на процессы тепло- и массопереноса при выращивании полупроводникового кристалла методом осевого теплопотока на фронте кристаллизации (ОТФ) в рамках нестационарного осесимметричного подхода с учетом движения и искривления фронта кристаллизации.
- Обнаружено, что добавление в систему погруженного нагревателя приводит к усложнению структуры течения относительно задачи вертикальной направленной кристаллизации (ВНК). Продемонстрирован эффект смены направления течения жидкости вблизи фронта кристаллизации под действием ВМП.
- Показано, что температурный режим на погруженном нагревателе и аксиальный градиент температуры оказывают принципиальное влияние на течение и массообмен в расплаве, а также на распределение примеси на фронте и в выращенном кристалле.
- Проведенные расчеты продемонстрировали положительное влияние ВМП на радиальное распределение примеси в кристалле. При определенных значениях параметров наблюдалось уменьшение неоднородности радиального распределения примеси на 54%, что значительно превышает результат, полученный при исследовании влияния ВМП на рост кристалла методом ВНК.
- В исследованном диапазоне параметров задачи влияние тепловых условий и ВМП на аксиальную неоднородность распределения примеси в кристалле выражено слабо.

### **ГЛАВА 3. ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ СЕТОЧНЫМИ МЕТОДАМИ**

Разработан пакет Finita [134], предназначенный для последовательного и параллельного численного решения систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами, который обеспечивает повышенную гибкость по сравнению с распространенными коммерческими пакетами численного моделирования. Пакет ориентирован на решение задач гидродинамики, однако он способен решать любые другие задачи, которые можно описать в терминах систем дифференциальных уравнений. Отличительной особенностью представленного пакета является использование технологии автоматической генерации исходного текста программ по заданному описанию задачи вместо непосредственного проведения вычислений, что ослабляет зависимость численного кода от программного окружения, в котором он исполняется, тем самым значительно улучшая его переносимость.

Современные коммерческие пакеты численного моделирования общего назначения, такие как система численного моделирования механики твердого деформируемого тела ANSYS [133] и системы численного моделирования механики жидкостей FIDAP [54], Fluent [136], LS-DYNA [137], ведут свою историю с 70х годов XX века и являются сложными программными комплексами, в которые вложено значительное количество ресурсов. Они построены по принципу “швейцарского ножа” и обеспечивают возможности решения широкого спектра физических проблем с полным циклом решения от постановки задачи до представления результатов в графическом виде. При этом разработчиками постулируется отсутствие необходимости программирования в традиционном понимании этого слова, то есть написания программного кода на

традиционном языке программирования – постановка задачи происходит интерактивно, с использованием графических оболочек. Аналогичным образом устроены специализированные пакеты численного моделирования, ориентированные на решение конкретного набора задач, такие как CrysVUN++ [69] - система глобального численного моделирования процессов направленной кристаллизации.

Тем не менее, несмотря на широкую область применимости таких пакетов, последняя имеет четкие границы, выход за которые значительно усложняет ситуацию для конечного пользователя. Например, для решения задачи может потребоваться написание дополнительного программного кода на традиционном языке программирования. Кроме того, в силу своих архитектурных особенностей, эти пакеты часто неспособны предоставить достаточный уровень гибкости, требуемый пользователем. Перечисленные выше пакеты оперируют модельным представлением задачи, при котором решаемая проблема описывается в терминах высокоуровневых примитивов, выбираемых пользователем из числа предоставляемых пакетом - например, модель несжимаемой жидкости для моделирования течений. Пользователю дается возможность задания параметров моделей, однако сами эти модели жестко зафиксированы и не могут быть изменены. Это может привести к невозможности решения проблемы, которая отличается (пусть и незначительно) от той, которую предусмотрели разработчики пакета,- подобная ситуация вполне может возникнуть при решении собственно научной задачи. Например, в пакете Fluent отсутствует возможность постановки граничного условия для конвективного теплообмена на границе, форма которой неизвестна и подлежит нахождению в процессе решения задачи.

Описанного выше недостатка лишен класс программных пакетов, предназначенных для численного решения систем дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами [107]. Из входящих в этот класс пакетов можно отметить коммерческую систему FlexPDE [138] и

свободные системы FreeFEM++ [139], FEniCS [140], PDELabs [141]. Подход, применяемый в данных пакетах, является «низкоуровневым» в том смысле, что описание решаемой проблемы происходит не в терминах высокоуровневых моделей, но непосредственно в терминах дифференциальных уравнений и соответствующих граничных и начальных условий. Стоящая особняком система OpenFOAM [142] комбинирует оба подхода; она способна оперировать как на модельном уровне, так и на уровне дифференциальных уравнений.

Аналогично описанным выше системам решения дифференциальных уравнений, в представленном в настоящем разделе пакете Finita упор сделан на расширяемость: пользователю предоставляется набор примитивов, которые могут быть использованы непосредственно либо модифицированы или расширены соответственно решаемой проблеме. Кроме того, в отличие от универсальных систем класса ANSYS, пользователь не изолирован от программного кода – напротив, само описание проблемы представляет собой комбинацию исходного текста на двух языках: специального проблемно-ориентированного языка (аналогично пакетам символьной алгебры и инженерным пакетам класса Matlab/Matcad) и традиционного языка программирования. Распределение ролей между этими языками осуществляется таким образом, чтобы максимально использовать преимущества, предоставляемые каждым из них.

Проблемно-ориентированный подход к решению проблем заключается в использовании существующего языка программирования общего назначения, достаточно простого, но вместе с тем гибкого, который позволяет задавать описание проблемы в виде, естественном для проблемной области [46, 48, 49, 76, 129]. Данный подход является противоположным традиционному подходу, при котором задача описания проблемной области возлагается на специально созданный для этих целей язык.

В нашем подходе используется предположение, что численный код теоретически может быть написан вручную,- даже если это не может быть

реализовано на практике в силу его громоздкости и избыточности. При этом наш подход состоит в ручном написании кода, использующего программные модули, автоматически сгенерированные на основе входного задания, написанного на проблемно-ориентированном языке программирования. Эти модули включают в себя наиболее громоздкие части алгоритма, которые, тем не менее, хорошо поддаются формализации и могут быть получены из компактного описания на проблемно-ориентированном языке. Основная же часть кода, вызывающая данные модули и реализуемая на традиционном языке программирования, берет на себя плохо формализуемую часть работы, специфичную для решаемой проблемы (инициализация, общий алгоритм проведения вычислений, вывод результатов). Данный подход обеспечивает большую гибкость и расширяемость по сравнению с традиционным, а также значительно уменьшает сложность самого пакета и, соответственно, ресурсы, необходимые для его создания.

Символьная математика, традиционно считавшаяся отличительной особенностью систем символьных вычислений, таких как Maple, Mathematica, Maxima и др., постепенно начинает использоваться и в задачах собственно численного моделирования [31, 32, 55, 130].

Аналогично существующим системам решения дифференциальных уравнений, нам представляется важным решать проблему аналитическими методами до тех пор, пока это возможно, и переход к собственно численному решению должен осуществляться только тогда, когда аналитические методы становятся неприменимы. Это также означает, что символьное представление проблемы должно быть явно доступно пользователю, который может вмешиваться в процесс обработки на всех уровнях: На модельном уровне, на уровне систем дифференциальных уравнений, на уровне алгебраических уравнений. Например, возможно явное задание дискретного аналога нестандартного уравнения, которое не способен обработать встроенный дискретизатор (при этом остальные уравнения обрабатываются как

обычно) - подобная ситуация легко может возникнуть в случае применения сложных методов дискретизации, таких, как метод конечных объемов. Кроме этого, использование символьных методов открывает дорогу для различных алгоритмов оптимизации, способных ускорить процесс численного решения.

Автоматическая генерация кода, или метапрограммирование, [8, 39, 45, 59] – подход к решению проблем, в основе которого лежит технология написания программ, результатом работы которых, вместо непосредственного решения задачи, является исходный код специализированной программы, предназначенной для ее решения. В представленном в настоящем диссертационном исследовании пакете *Finita* автоматическая генерация кода используется для получения исходного текста численных программ. В настоящее время технология метапрограммирования находит все большее применение в задачах численного моделирования и высокопроизводительных параллельных вычислений [47, 53, 106, 129, 141, 143].

Традиционный подход состоит в использовании скомпилированных библиотек, предназначенных для ускорения процесса разработки за счет многократного использования кода. Данный подход хорошо себя зарекомендовал для решения широкого круга низкоуровневых задач - от базовых операций над векторами и матрицами до численного решения алгебраических уравнений. Однако он слабо применим для оперирования абстракциями более высокого уровня. Причиной тому большое разнообразие применяемых алгоритмов, что значительно затрудняет написание обобщенного кода: даже алгоритмы, похожие в общих чертах, но имеющие небольшие различия в частностях, могут давать значительно различающийся программный код, требующий отладки и сопровождения.

Помимо собственно увеличения объема кода, данный подход также влечет за собой потерю гибкости и адаптивности, поскольку каждая новая проблема, решение которой обеспечивает программный код, требует внимания разработчиков.

В нашем подходе в деле автоматической генерации кода используется набор базовых строительных блоков (примитивов), представленных в виде написанных вручную модулей, либо в виде генерирующего кода на проблемно-ориентированном языке, результатом работы которого исходный текст модуля, реализующий требуемую функциональность. Полученный таким образом исходный текст функционально эквивалентен тексту, написанному вручную, и состоит из набора модулей, вызываемых из пользовательского кода. Подобная комбинация автоматически сгенерированного и написанного вручную кода составляет полный набор исходных текстов для численного решения поставленной проблемы.

Ориентация на исходный программный код дает еще одно важное свойство, отличающее описываемый пакет от всех существующих аналогов — переносимость, поскольку полученный таким образом код можно компилировать и запускать не модифицированным на всем спектре вычислительных систем - от персональных компьютеров и рабочих станций до кластеров и суперкомпьютеров. Описанные выше системы ориентированы на непосредственное решение задачи и, следовательно, требуют установки в системах, на которых будет производиться численное решение. От целевой платформы требуется наличие транслятора целевого языка программирования и используемых низкоуровневых библиотек, таких как библиотеки численного решения СЛАУ, библиотеки организации параллельного выполнения (MPI, OpenMP), стандартная библиотека поддержки используемого целевого языка — все эти компоненты имеются в наличии на подавляющем большинстве вычислительных комплексов, предназначенных для проведения численных расчетов. Таким образом, представленный подход является более предпочтительным по сравнению с традиционным подходом, в котором требуется наличие предварительно скомпилированного кода под целевую платформу вместе со всеми необходимыми зависимостями.

С использованием пакета было проведено численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массопереноса при выращивании полупроводниковых кристаллов методами ВНК и ОТФ, представленных в главах 1 и 2 настоящей диссертации и опубликованных в работах [17, 18, 65], а также численное исследование нестационарного виброконвективного массопереноса в жидкости в зазоре между коаксиальными цилиндрами, результаты которого опубликованы в работе [15].

### **3.1 Описание программного пакета**

Программный пакет Finita [29, 134] предназначен для численного решения систем линейных и нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами. Отличительной особенностью пакета является его ориентация на автоматическую генерацию программного кода вместо непосредственного проведения вычислений, что обеспечивает повышенную гибкость и переносимость при удаленном проведении численных расчетов на системах высокопроизводительных параллельных вычислений.

#### **3.1.1 Используемые языки программирования**

В пакете задействованы два языка программирования:

- Руби [28] – Основной язык пакета, динамический интерпретируемый объектно-ориентированный язык высокого уровня, который используется как в качестве проблемно-ориентированного языка для описания входного задания, так и для реализации собственно пакета: в модулях символьных вычислений, дискретизации дифференциальных уравнений и автоматической генерации кода.
- Си [10] – компилируемый статически-типизируемый язык низкого уровня, используемый в качестве целевого языка для автоматической генерации кода и написания пользовательского управляющего модуля, специфичного для решаемой проблемы.

### 3.1.2 Дискретизация дифференциальных уравнений

Пакет способен решать стационарные и нестационарные задачи на регулярной сетке с использованием полуавтоматической и автоматической дискретизации дифференциальных уравнений [82] методами конечных разностей (МКР) [21] и конечных объемов (МКО) [21, 23, 113]. Под автоматической дискретизацией в данном случае понимается получение разностных аналогов дифференциальных уравнений, записанных во входном задании в естественном виде с использованием стандартных дифференциальных операторов, аналогично системам символьных вычислений Maple, Mathematica, Maxima и др. При полуавтоматической дискретизации пакету (в случае МКО) требуются подсказки относительно вида интегрирования (либо по собственно контрольному объему, либо по его поверхности) отдельных слагаемых, составляющих дифференциальное уравнение.

В процессе дискретизации происходит преобразование исходных дифференциально-алгебраических уравнений в эквивалентные разностные аналоги. Дискретизация производится на прямоугольной сетке с единичным межузловым шагом; отображение физической расчетной области на вычислительную сетку осуществляется с помощью преобразования координат, которое задается пользователем аналитически либо является результатом работы внешнего генератора сеток.

### 3.1.3 Решение систем алгебраических уравнений

Дискретизированные системы алгебраических уравнений решаются итерационным методом Ньютона-Рафсона [21, 71, 73] с привлечением сторонних решателей систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которые допускают выбор между последовательным и параллельным методами решения. В последнем случае возможно использование параллельных вычислительных систем с общей либо распределенной памятью.

Дискретизированные системы алгебраических уравнений разбиваются на подсистемы для получения различных схем решения — от полностью неявной, в которой все неизвестные поля решаются совместно, до сегрегированной, при которой неизвестным последовательно считается каждое поле и для него формируется своя процедура решения; на время работы этой процедуры все остальные поля считаются заданными. При этом каждая полученная таким образом подсистема может иметь свои отдельные параметры и метод решения СЛАУ. Например, при решении гидродинамической задачи в силу значительного различия тепловых и гидродинамических времен может оказаться выгодным разделить систему определяющих уравнений на две части — совместную систему «скорость+давление» и отдельную систему «температура», и достигать решения последовательным итерированием этих двух подсистем.

### 3.2 Входное задание для пакета

В качестве примера рассмотрим классическую задачу свободной конвекции жидкости в двумерной квадратной полости, подогреваемой сбоку [23]. Полные тексты входного задания для пакета и управляющего модуля приведены в Приложениях 1 и 2 настоящей диссертации. Результат работы кода, сгенерированного пакетом по данному заданию, представлен на Рис. 3.1.

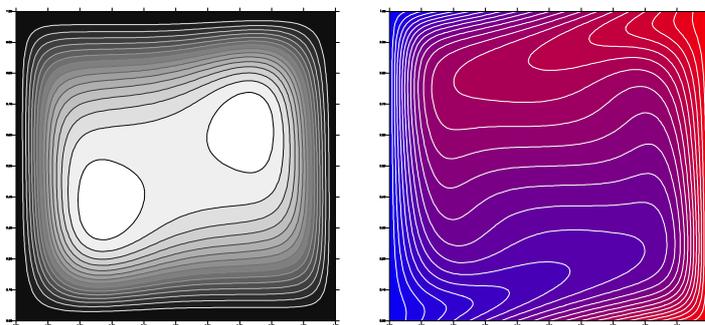


Рис. 3.1 Изолинии функции тока (слева) и температуры (справа) для случая

$$Gr = 2 \cdot 10^5, Pr = 1$$

В соответствии с используемым проблемно-ориентированным подходом [93], входное задание представляет собой программный код на языке Руби, выполняемый в специально сформированном программном окружении и состоящий из нескольких блоков.

### 3.2.1 Скалярные константы и переменные

Определения констант и переменных, имеющих отношение к решаемой задаче.

Для всех элементов задается используемый тип: целочисленный (Integer), действительный (Float) или комплексный (Complex). Для констант задается обязательное значение, которое остается неизменным на всем протяжении выполнения кода. Для переменных начальное значение устанавливается до выполнения пользовательского кода и может быть изменено пользователем в любой момент; переменные, не инициализированные явно, получают нулевое значение. Все описанные элементы будут доступны из пользовательского кода под указанными именами. Определенные таким образом переменные подлежат инициализации в управляющем модуле перед вызовом любых автоматически сгенерированных функций.

Пример определения скалярной переменной:

```
Gr = Variable.new(:Gr, Float)
```

### 3.2.2 Расчетные области

Определения областей, задающих геометрию задачи и размерности полей. Расчетная сетка для задачи представляется в виде множества областей. Каждая область состоит из множества узлов, индексируемых одно-, двух- или трехмерных координат узлов.

Размерности областей могут задаваться в виде числовых литералов либо констант или переменных из числа определенных ранее. В последнем случае

действительная размерность области устанавливается на этапе инициализации автогенерированного кода.

В задаче допускается совместное использование областей с разной размерностью. В настоящее время реализованы подобласти трех типов: открытая, закрытая и граничная. Разделение обусловлено различием дискретных аналогов дифференциальных операторов в зависимости от того, является ли конкретный узел граничным или внутренним. На двумерной сетке с толщиной границы в один узел можно выделить девять участков, в пределах которых дискретный аналог дифференциального оператора остается неизменным. При дискретизации дифференциального выражения на закрытой подобласти дискретному аналогу не позволено ссылаться на узлы, находящиеся вне ее. В применении к конечно-разностной дискретизации это может означать, например, использование направленных разностей вместо центральных в граничных узлах. Таким образом, в случае закрытой подобласти с толщиной границы в один узел, дифференциальное выражение может иметь не более девяти дискретных аналогов. Открытая подобласть, напротив, не имеет такого ограничения (то есть дискретизация могут захватывать узлы, лежащие за пределами этой подобласти), поэтому то же самое выражение будет иметь всего один дискретный аналог. В дифференциальных выражениях на подобных подобластях можно использовать операторы дифференцирования по координатным осям.

Граничная подобласть является расширением открытой подобласти и применяется для задания граничных условий. В двумерном случае она представляет собой вертикальный или горизонтальный ряд узлов, для которых определены направления нормалей и касательных. Поэтому, помимо операторов дифференцирования по координатным осям, в них определены также и операторы дифференцирования по нормали и касательной. В случае использования конечно-разностной дискретизации такие операторы всегда аппроксимируются направленными разностями.

Пример определения закрытого двумерного прямоугольного поля размерностью  $NX \times NY$  узлов:

```
Cavity = Domain::Rectangular::Domain.new(NX, NY)
```

### 3.2.3 Скалярные поля

Определения скалярных полей. Аналогично другим скалярным элементам, для поля задается используемый тип: целочисленный (Integer), действительный (Float) или комплексный (Complex). Дополнительно указывается область, на которой определено поле. Индексация элементов поля из входного задания и управляющего модуля осуществляется интуитивно понятным образом.

Пример определения действительного поля, определенного на области *Cavity*:

```
T = Field.new(:T, Float, Cavity)
```

### 3.2.4 Системы уравнений

Полная система уравнений и граничных условий, описывающих задачу, представляется в виде набора упорядоченных именованных блоков, каждый из которых составляет систему уравнений, решаемую отдельно. На этапе генерации кода каждый такой блок превращается в систему нелинейных алгебраических уравнений. Блок устанавливает название функции, видимой из управляющего модуля, которая и запускает процедуру решения. Уравнение/граничное условие представляется в виде абстрактного синтаксического дерева для аналитического выражения вида  $f=0$ ; в  $f$  могут входить константы, переменные и поля, определенные ранее; нулевая правая

часть опускается. В выражении используются как predefined дифференциальные операторы, так и ссылки на узлы поля с использованием относительной (вида  $T[:x+1,:y-1]$ ) либо абсолютной адресации узлов ( $T[:x=>NX-1,:y=>0]$ ), что дает возможность задавать пользовательские дискретные аналоги дифференциальных выражений без переопределения уже существующих дифференциальных операторов. В настоящее время реализованы конечно-разностные и конечно-объемные операторы на прямоугольной однородной сетке с единичным шагом. В случае конечно-разностных операторов определены операторы дифференцирования первого и второго порядка по координатам, а также касательным и нормальным направлениям (в случае задания выражения на граничной подобласти). В случае конечно-объемных операторов реализованы операторы дифференцирования первого порядка по координатам (формирование операторов второго порядка производится рекурсивным вызовом, например  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x}$ ). Описание граничных условий в этом случае производится с помощью конечно-разностных операторов дифференцирования по нормали и касательной. Допускается смешивание различных методов дискретизации в разных уравнениях в пределах одной системы.

Пример определения задачи:

```

Problem.new(:Problem) do |p|
  System.new(:System1) do |s|
    ...
  end
  System.new(:System2) do |s|
    ...
  end
end

```

Система уравнений содержит одно или несколько уравнений, решаемых совместно. Для каждой системы уравнений задается метод дискретизации и метод решения алгебраической системы. Пример определения системы уравнений:

```
System.new(:System) do |s|
  s.discretizer = Discretizer::FiniteDifference.new
  s.solver = Solver::MUMPS.new(
    Mapper::Naive.new,
    Decomposer::Naive.new,
    Environment::MPI.new,
    Jacobian::Numeric.new
  )
  Equation.new(...)
  Equation.new(...)
  ...
end
```

В приведенном шаблоне для получения дискретных аналогов будет использоваться метод конечных разностей. Решение системы алгебраических уравнений будет осуществляться матричным методом с использованием параллельной версии решателя СЛАУ MUMPS; аппроксимация Якобиана для решения нелинейной системы алгебраических уравнений будет осуществляться численно, методом конечных разностей.

Уравнения задаются в аналитическом виде с использованием ранее определенных констант, переменных, полей и предопределенных либо заданных пользователем функций. Для каждого уравнения указывается поле, относительно которого оно решается и область его определения. Пример

задания уравнения  $\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{Pr} \Delta T = 0$  на внутренних узлах области

*Cavity*:

Equation.new(dx(T)\*dy(Psi) - dy(T)\*dx(Psi) - laplace(T)/Pr, T, Cavity.interior)

Граничные условия задаются аналогично уравнениям.

### 3.3 Решение систем алгебраических уравнений

В настоящее время в пакете Finita задача численного решения систем нелинейных алгебраических уравнений решается матричными методами с использованием одного из четырех решателей СЛАУ: SuperLU [144], UMFPACK [145], PETSc [146], MUMPS [135]. Вся логика взаимодействия с выбранным решателем локализована в автоматически генерируемом модуле; пользовательский код полностью изолирован от деталей реализации алгоритма решения задачи. Тем не менее, при смене решателя происходит регенерация как заголовочного файла, так и модуля реализации, вследствие чего требуется перетрансляция всех исходных файлов, составляющих программу, с последующей пересборкой исполняемой программы.

Три поддерживаемые решателя СЛАУ (SuperLU, UMFPACK, MUMPS) реализуют прямые методы решения СЛАУ с возможностью уточнения результата итеративными методами. PETSc объединяет под общим интерфейсом множество различных алгоритмов решения систем алгебраических уравнений, как прямых, так и итеративных. Более того, он позволяет комбинировать различные методы «на ходу», выстраивая цепочки «предобуславливатель-решатель» для получения наиболее эффективной схемы решения задачи.

Пакеты SuperLU, MUMPS и PETSc имеют как последовательную, так и параллельную версии для систем с распределенной памятью (кластерах); задача межпроцессного обмена в них решается с применением стандартного протокола передачи сообщений MPI. Пакет UMFPACK в настоящее время имеет только последовательную версию.

### 3.4 Процедура использования пакета

Процесс численного решения поставленной задачи с использованием пакета состоит из нескольких этапов (Рис. 3.2):

1. Подготовка входного задания для пакета (*problem.rb*) и управляющего модуля (*problem.c*). В наиболее простом случае пользователем подготавливается два исходных файла — входное задание, в которой описывается часть проблемы, подлежащая обработке пакетом, и исходный текст управляющего модуля на языке Си, содержащий части кода, специфичные для решаемой задачи, такие как задание входных параметров, вызов генерированных решателей и вывод результатов расчетов.
2. Вызов пакета командой *finitac* с передачей ему сформированного входного задания. При успешном завершении работы создается два исходных текста на языке Си: интерфейсный файл заголовка (*problem\_auto.h*), содержащий описания констант, переменных, полей и функций, видимых из пользовательского кода и файл реализации (*problem\_auto.c*).
3. Трансляция управляющего модуля (*problem.c*) и сгенерированного кода (*problem\_auto.c*) в объектные модули с помощью компилятора языка Си.
4. Сборка исполняемого кода из полученных объектных файлов (*problem.obj*, *problem\_auto.obj*) с помощью редактора связей. Последнему передаются все объектные файлы и библиотеки, необходимые для работы используемого решателя систем алгебраических уравнений.
5. Запуск собранной программы на выполнение.

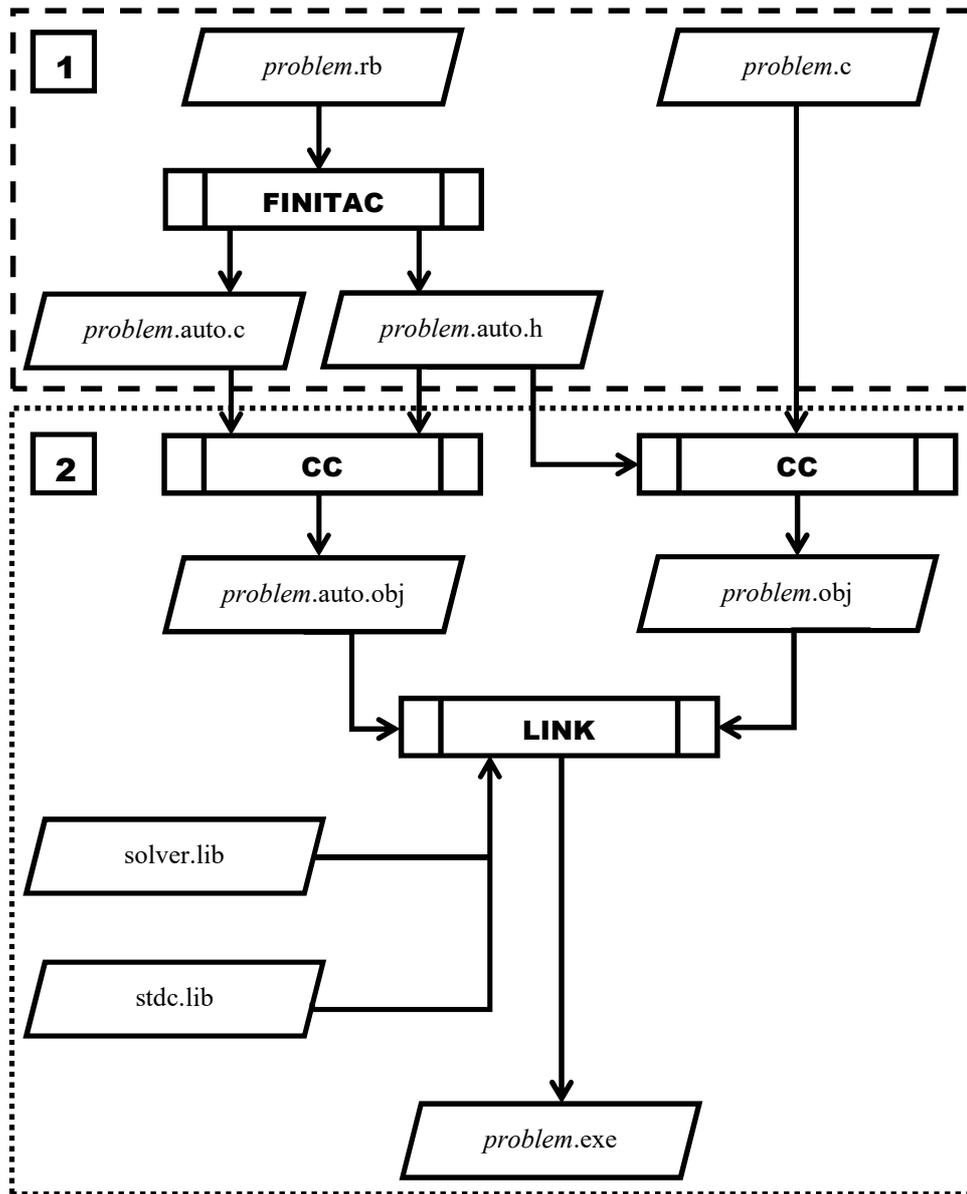


Рис. 3.2 Блок-схема алгоритма получения исполняемого кода с помощью пакета Finita

Используемая схема работы предоставляет пользователю большую гибкость в выборе программно-аппаратных средств, на которых осуществляется решение задачи. В частности, этапы 1 и 2 (блок 1 на Рис. 3.2) могут выполняться на локальной машине пользователя с мощностью, недостаточной для численного решения задачи, этапы 3-5 (блок 2 на Рис. 3.2) – на хорошо оснащенной локальной либо удаленной рабочей станции или кластере. В силу платформенной независимости получаемого кода первые два

этапа могут выполняться на компьютерах иной архитектуры или работающих под управлением другой операционной системы.

### 3.5 Оценка эффективности работы пакета

В качестве формального количественного критерия оценки эффективности пакета примем коэффициент размножения  $\Theta$ , определяющий отношение общего объема исходного кода  $\Lambda_{\Sigma}$ , составляющего численную программу, к объему исходного кода, написанного вручную  $\Lambda_{+}$ :

$$\Theta = \frac{\Lambda_{\Sigma}}{\Lambda_{+}}. \quad (3.1)$$

Пусть  $\Lambda_{\odot}$  - объем автогенерированного кода. Очевидно, что  $\Lambda_{\Sigma} = \Lambda_{\odot} + \Lambda_{+}$ .

Тогда

$$\Theta = \frac{\Lambda_{\odot} + \Lambda_{+}}{\Lambda_{+}} = \frac{\Lambda_{\odot}}{\Lambda_{+}} + 1. \quad (3.2)$$

Использование коэффициента размножения в качестве критерия оценки можно оправдать тем, что пакет предназначается для автоматизации кодирования программ, то есть автогенерированный код занимает место кода, который в противном случае пришлось бы написать вручную. В этом случае увеличение коэффициента размножения отражает рост эффективности применения пакета. Для примера, показанного на Рис. 3.2, получим

$$\Theta = \frac{\Lambda(\text{problem.auto.c}) + \Lambda(\text{problem.auto.h}) + \Lambda(\text{problem.c})}{\Lambda(\text{problem.rb}) + \Lambda(\text{problem.c})} + 1. \quad (3.3)$$

Примем в качестве метрики  $\Lambda$  число строк кода. Следует отметить, что данная метрика является одной из самых распространенных в индустрии производства программного обеспечения. В подобном подходе существует определенная формальность, поскольку число строк кода в каждом конкретном случае варьируется, например, в зависимости от стиля форматирования исходного текста, насыщенности комментариями и так далее, и не учитывает

другие параметры кода, такие как алгоритмическую и синтаксическую сложность, зависимость от языка реализации и т.п. Тем не менее, он позволяет наглядно продемонстрировать практически достижимую пользу от применения описываемого пакета к численному решению задач.

Помимо собственно коэффициента размножения, интерес также представляет и размер входного задания, который показывает объем работы, непосредственно выполняемой пользователем в случае использования пакета.

Для оценки эффективности пакета рассмотрим ряд задач, от тривиальных до весьма сложных в кодировании:

1. Тривиальное уравнение  $f = 0$  на открытой области.
2. Задача, аналогичная задаче 1, но на закрытой области.
3. Уравнение Лапласа  $\Delta f = 0$  на двумерной сетке с граничными условиями первого рода, дискретизированное методом конечных разностей.
4. Стационарная двумерная задача о свободной тепловой конвекции в прямоугольной области, подогреваемой сбоку (Рис. 3.1). Дискретизация методом конечных разностей равномерной сетке, совместное решение уравнений для температуры, завихренности и функции тока.
5. Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводникового кристалла методом ОТФ с использованием полного нестационарного подхода, представленное в главе 2 настоящей диссертации.
6. Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании полупроводникового кристалла методом ВНК с объединением квазистационарного и полного нестационарного подходов в одном численном коде, представленное в главе 1 настоящей диссертации.

В Таблице 1 представлены рассчитанные коэффициенты размножения и размеры входных заданий для задач 1-6, перечисленных выше.

Таблица 1. Коэффициенты размножения и размеры входных заданий для рассмотренных тестовых задач

Задача	Коэффициент размножения $\Theta$	Размер входного задания, строк
1	20	44
2	21	44
3	19	50
4	14	77
5	23	719
6	35	782

Все задачи сгенерированы с использованием библиотеки MUMPS в качестве решателя СЛАУ; использование других решателей не внесло каких-либо серьезных качественных или количественных изменений в приведенные результаты.

Задачи 1 и 2 не представляют самостоятельной научной ценности, однако они наглядно демонстрируют объем кода на входе и на выходе пакета. В задаче 1 автогенерированный код состоит из двух исходных файлов и имеет суммарный объем 896 строк или 21 Кб текста на языке Си. С учетом практически нулевого полезного действия такого кода, последний целиком представлен «обязочным» кодом, необходимым для нормального функционирования неявной схемы решения. Даже не смотря на не оптимальность автогенерированного кода (превосходящего по объему код аналогичной функциональности, но написанного вручную), выгода в применении пакета состоит в несравненно меньших трудозатратах на этапе кодирования задачи. Что же касается входного задания, то из 44 строк кода, непустых строк всего 20, а обязательных и того меньше – 11. Большая разница между общим числом строк и обязательным числом строк во входном задании объясняется выбранным «разреженным» стилем кодирования и наличием дополнительного кода, не принципиального с точки зрения результата; подобный стиль кодирования применялся и во всех остальных рассмотренных

задачах. Таким образом, применение пакета позволяет двадцатикратно уменьшить объем ручной работы даже в подобном тривиальном случае.

При переходе от задачи 1 к задаче 2 происходит разбиение области на девять подобластей, с постановкой в каждой из них своей дискретизации исходного уравнения (одинаковых в данном конкретном случае в силу тривиальности рассматриваемой задачи). Незначительное изменение во входном задании, - однако, приводит к увеличению объема автогенерированного кода до 926 строк, что находит свое отражение в соответствующем увеличении  $\Theta$ .

Задача 3 моделирует реальную, хотя и простую ситуацию – решение уравнения Лапласа, дискретизированное методом конечных разностей и решаемое неявно. Несмотря на линейность системы «уравнение+граничные условия», решается она методом Ньютона. В целом, получаемый код аналогичен таковому же из задачи 2: вычислительная сетка также разбивается на 9 подобластей, но только в данном случае каждой подобласти ставятся в соответствие различные алгебраические уравнения, что приводит к увеличению размера автогенерированного кода до 975 строк. Тем не менее, увеличение размера входного задания до 50 строк приводит к некоторому уменьшению  $\Theta$ .

Задача 4 представляет решение классической проблемы, описываемой нелинейной системой дифференциальных уравнений для трех неизвестных. Два дополнительных неизвестных и новые уравнения и граничные условия, добавленные к задаче 2, приводят к заметному увеличению размера входного задания до 77 строк и уменьшению  $\Theta$  до 14. Но даже и в этом случае автогенерация кода вполне оправдывает себя.

Задача 5 значительно сложнее предыдущих. Она включает в себя 37 скалярных параметра и 64 неизвестных поля. Основным осложняющим фактором является комплексная геометрия задачи: расчетная область представляет собой цилиндр с твердой боковой стенкой конечной толщины, заполненный материалом в двухфазном состоянии: снизу – твердая фаза

(кристалл), сверху – жидкая (расплав). Внутри цилиндра расположен погруженный нагреватель. По вертикали вся сетка разбивается на три блока: кристалл, расплав до погруженного нагревателя, погруженный нагреватель и область над ним. Вследствие использования неоднородной не ортогональной четырехугольной сетки стенка цилиндра также разбивается на три подобласти. При этом уравнения, описывающие поведение системы, на всех шести подобластях зависят от четырех геометрических факторов каждый, что в сумме дает 24 поля, описывающих геометрию расчетной области. Использование для каждой из подобластей собственных полей геометрических факторов обусловлено не гладкостью функций преобразования координат на границах подобластей и, как следствие, появлением скачков коэффициентов преобразований на них, поскольку в использованной схеме разбиения пространства на элементарные объемы граница между подобластями проходит по узлам вычислительной сетки.

Усложнение задачи отразилось на размере входного задания, но разрастание размера автогенерированного кода до внушительных 24840 строк обеспечило значительный рост  $\Theta$  по отношению к предыдущей задаче и выявило один немаловажный факт: применение ручного кодирования для совместного решения сложных систем дифференциальных уравнений нецелесообразно в силу быстрого роста размера исходного текста программ и, как следствие, трудозатрат на кодирование, отладку и поддержку такого кода. В то же время, применение пакета позволяет эффективно решать подобные и даже более сложные задачи.

Задача 6 проще предыдущей в части геометрии ввиду отсутствия погруженного нагревателя и соответствующего уменьшения числа подобластей до четырех. Однако в ней объединены два численных кода – квазистационарный, используемый для получения начального состояния, и нестационарный, используемый непосредственно для численного моделирования процесса кристаллизации. В результате при незначительном

росте объема входного задания происходит практически двукратное увеличение объема автогенерированного кода до 39732 строк кода, при этом коэффициент размножения  $\Theta$  достигает значения 35.

### 3.6 Скорость работы численного кода

Время, затрачиваемое численным кодом, полученным с помощью пакета Finita, на решение задачи, складывается из времени инициализации автогенерированного кода, времени получения численных значений матрицы Якобиана и вектора невязок и времени решения матричной системы нелинейных алгебраических уравнений. Для рассмотренных выше задач время работы собственно автогенерированного кода, вычисляющего значения Якобиана и вектора невязок, находится в пределах  $0,5 \div 5\%$  от общего времени счета задачи. Помимо этого, вычисление структуры Якобиана также происходит во время работы исполняемого кода, в фазе инициализации. Время, затраченное на эту работу, также не превышает  $1\%$  от общего времени счета и находится в диапазоне  $0.1 \div 2$  сек. для задач с общим временем счета порядка часа.

При решении задач матричными методами большая часть машинного времени затрачивается на решение СЛАУ и основной прирост скорости достигается путем выбора подходящего решателя и его настройки. В частности, применение оптимизированной под конкретное аппаратное обеспечение библиотеки Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS) может обеспечить  $1,5 \div 3$  - кратный прирост производительности при прочих равных условиях. Соответственно, при параллельном решении задач основное внимание уделяется эффективности решения матричных задач. Поддерживаемые пакетом Finita решатели PETSc и MUMPS обеспечивают эффективное распараллеливание решаемых задач, что подтверждается практикой использования пакета. В частности, при решении задачи [15] на сетке  $50 \times 50$  при шести неизвестных скалярных полях было получено 10.5-кратное

ускорение численного счета на 12 процессорах на системе UM64 Института математики и механики УрО РАН.

### 3.7 Объем потребляемой памяти

Основным недостатком полностью неявных схем решения сеточных задач с привлечением матричных методов является большое потребление памяти, что является одним из факторов, сдерживающих применение совместных методов решения сложных задач, в частности, трехмерных. При этом большое значение имеет выбор типа решателя СЛАУ. Как показывает практика, потребность в памяти у решателей, реализующих прямые методы, в 1.5-3 раза выше, чем у решателей, реализующих итерационные методы. Тем не менее, пиковое потребление памяти остается высоким вне зависимости от применяемого метода и конкретного решателя СЛАУ. К примеру, пиковое потребление памяти для задач, представленных в главах 1 и 2 настоящего диссертационного исследования, составляло 500-600 Мб на сетках  $75 \times 150$ . Решение же трехмерного уравнения Лапласа  $\Delta f = 0$  на кубической сетке  $100^3$  в случае применения решателя MUMPS требует уже более 8 Гб оперативной памяти.

Основным способом уменьшения потребления памяти является разбиение систем уравнений на несколько меньших вплоть до предельного случая последовательного нахождения каждого неизвестного поля по отдельности. Применение представленного пакета Finita позволяет выполнить эту работу с наименьшими усилиями.

### 3.8 Выводы

- Разработан пакет прикладных программ для численного решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами.
- Пакет позволяет значительно упростить процесс разработки программ, реализующих численные алгоритмы решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами.

Ориентация пакета на использование элементов аналитических вычислений и автоматической генерации кода уменьшает объем ручного кодирования в десять и более раз, причем этот показатель демонстрирует тенденцию к увеличению с ростом сложности решаемой проблемы.

- Применение пакета позволяет удержать объем работы, выполняемой пользователем на этапе кодирования задачи, в приемлемых рамках и переложить большую ее часть на сам пакет.
- Продемонстрирована возможность автоматического получения эффективного параллельного кода для ряда задач механики жидкостей.
- Разработанный пакет прикладных программ является открытым программным обеспечением [134].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

### Итоги выполненного исследования

В работе представлены результаты численного и экспериментального исследования влияния однородного вращающегося магнитного поля (ВМП) на процессы выращивания полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации вертикальной направленной кристаллизации (ВНК) и осевого теплопотока на фронте кристаллизации (ОТФ).

Получены следующие результаты:

- Применение ВМП в методах направленной кристаллизации ВНК и ОТФ приводит к генерации в расплаве двух тороидальных вихрей, расположенных один над другим. Индуцированное ВМП течение накладывается на течения, вызванные тепловым и гравитационно-концентрационным механизмами. Форма и интенсивность нижнего вихря, находящегося вблизи фронта кристаллизации, оказывает принципиальное влияние на форму фронта кристаллизации, массоперенос в расплаве и распределение примеси в получаемом кристалле.
- Проведенные численные эксперименты подтвердили существование порога устойчивости азимутального течения, индуцированного ВМП. Неустойчивость азимутального течения приводит к потере устойчивости меридионального течения и появлению нежелательной пространственной неоднородности примеси в получаемом кристалле. Использование погруженного нагревателя в методе ОТФ, уменьшающего эффективную высоту расплава, позволяет повысить устойчивость азимутального течения.
- Нарушение симметрии формы вихрей, индуцированных ВМП, являющееся следствием искривления формы фронта кристаллизации и наличия течения, вызванного тепловым и концентрационно-гравитационным механизмами, приводит к значительному уменьшению порога устойчивости

азимутального течения, что было позднее подтверждено лабораторными экспериментами других авторов.

- Задаваемые тепловые условия существенным образом влияют на структуру и интенсивность течения в расплаве и распределение примеси в кристалле. Благодаря наличию погруженного нагревателя, метод ОТФ обеспечивает более эффективное управление распределением температуры в расплаве, по сравнению с методом ВНК.
- Использование ВМП докритической интенсивности в процессах направленной кристаллизации ВНК и ОТФ позволяет управлять распределением примеси в расплаве и кристалле. Метод ОТФ, при определенных тепловых условиях, позволяет существенно уменьшить радиальную неоднородность распределения примеси в кристалле.
- Проведенные лабораторные эксперименты по выращиванию полупроводниковых кристаллов методом ВНК в присутствии ВМП продемонстрировали эффект смены вогнутого фронта кристаллизации на W-образный с локальным поднятием на оси симметрии под действием ВМП. Анализ микросегрегации примеси в выращенных кристаллах показал наличие неустойчивости течения в расплаве в момент наличия ВМП.
- Разработанный и примененный в рамках диссертационного исследования пакет для численного решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами позволил значительно уменьшить трудозатраты на написание и отладку численного кода.

### **Рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы**

В продолжение темы, разработанной в настоящей диссертации, представляется перспективным проведение трехмерного численного моделирования процессов тепло- и массопереноса при выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации в коротких тиглях с коническим дном в присутствии ВМП.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Быкова С.В. [и др.]. Способ выращивания монокристаллов германия методом отф. Патент № 2330127. Заявка № 2006119535/15 (021235). 1999.
2. Бэтчелор Д. Введение в динамику жидкостей / Д. Бэтчелор, Москва: Мир, 1973. 760 с.
3. Гельперин Н.И., Носов Г.А. Основы техники кристаллизации расплавов / Н.И. Гельперин, Г.А. Носов, Москва: Химия, 1975. 352 с.
4. Гельфгат Ю.М. [и др.]. Численное моделирование влияния внешних температурных и магнитных воздействий на форму границы раздела фаз при вертикальной направленной кристаллизации // Математическое моделирование. 1992. № 2 (4). С. 21–35.
5. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости / Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий, Москва: Наука, 1973. 392 с.
6. Горелик С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов / С.С. Горелик, Москва: Металлургия, 1967. 403 с.
7. Ежовский Ю.К., Денисова О.В. Физико-химические основы технологии полупроводниковых материалов: Учебное пособие / Ю.К. Ежовский, О.В. Денисова, Санкт-Петербург: СЗТУ, 2005. 80 с.
8. Канжелев С.Ю., Шалыто А.А. Автоматическая генерация кода с явным выделением состояний Russia:, 2006. 60–63 с.
9. Капуста А.Б., Зибольд А.Ф. О стационарной неустойчивости осесимметричного течения жидкости во вращающемся магнитном поле // Магнитная гидродинамика. 1977. № 3. С. 67–76.

10. Керниган Б., Ричи Д. Язык программирования С / Б. Керниган, Д. Ричи, Москва: Вильямс, 2009. 292 с.
11. Кролл А. [и др.]. Рост кристалла GaAs по методу VGF в присутствии вращающегося магнитного поля // Гидродинамика. 2004. № 14. С. 130–139.
12. Лан Ч.В. [и др.]. Влияние высокочастотных вибраций на морфологическую неустойчивость фронта при направленной кристаллизации бинарных сплавов // Механика жидкости и газа. 2008. № 4. С. 16–27.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Москва: Наука, 1987. 783 с.
14. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов / Р. Лодиз, Р. Паркер, Москва: Мир, 1974. 540 с.
15. Любимов Д.В. [и др.]. Численное моделирование нестационарного поведения стратифицированной жидкости с помещенным в нее твердым телом в высокочастотном вибрационном поле // Вычислительная Механика Сплошных Сред. 2013. № 3 (6). С. 269–276.
16. Любимова Т.П., Паршакова Я.Н. Влияние вращательных вибраций на течения и теплообмен при выращивании кристаллов германия вертикальным методом Бриджмена // Вычислительная Механика Сплошных Сред. 2008. № 1 (1). С. 57–67.
17. Любимова Т.П., Хлыбов О.А. Численное моделирование процесса выращивания полупроводникового кристалла методом АНР // Вестник Пермского Университета. 2012. № 22 (4). С. 130–134.
18. Любимова Т.П., Хлыбов О.А. Численное моделирование влияния вращающегося магнитного поля на процесс выращивания полупроводникового

кристалла методом АНР // Вычислительная Механика Сплошных Сред. 2013. № 2 (6). С. 168–175.

19. Ормонт Б.Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. Учебное пособие / Б.Ф. Ормонт, 3–е-е изд., Москва: Высшая школа, 1982. 528 с.

20. Пасынков В.В., Сорокин В.С. Материалы электронной техники: Учебник / В.В. Пасынков, В.С. Сорокин, Санкт-Петербург: Лань, 2001. 368 с.

21. Самарский А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский, Москва: Наука, 1989. 616 с.

22. Таиров Ю.М., Цветков В.Ф. Технология полупроводниковых и диэлектрических материалов: Учебник для вузов / Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков, Москва: Высшая школа, 1990. 423 с.

23. Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции / Е.Л. Тарунин, Иркутск: Издательство Иркутского Университета, 1990. 228 с.

24. Файзрахманова И.С. Влияние магнитных полей на течения и тепломассоперенос при выращивании кристаллов из расплава 2007.

25. Федюшкин А.И. [и др.]. Влияние вибраций на гидродинамику и тепло-массообмен в расплаве при выращивании кристаллов методом Бриджмена Москва:, 2001. 365–392 с.

26. Федюшкин А.И., Бураго Н.Г. Численное исследование распределения примеси при выращивании монокристаллов методом Бриджмена с погруженным нагревателем Turkey:, 1999. 207–215 с.

27. Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела: Учебник для вузов / В.И. Фистуль, Metallurgia-e изд., Москва:, 1995. 480 с.

28. Фланаган Д., Мацумото Ю. Язык программирования Ruby / Д. Фланаган, Ю. Мацумото, Санкт-Петербург: Питер, 2011. 494 с.
29. Хлыбов О.А. Комбинирование символьной алгебры и генерации кода для решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений // Вычислительная Механика Сплошных Сред. 2008. № 2 (1). С. 90–99.
30. Шашков Ю.М. Выращивание монокристаллов методом вытягивания / Ю.М. Шашков, Москва: Металлургия, 1982. 213 с.
31. Alnæs M.S., Mardal K.-A. A form compiler based on symbolic computations [Электронный ресурс]. URL: [https://www.cct.lsu.edu/uploads/fenics\\_08\\_sfc.pdf](https://www.cct.lsu.edu/uploads/fenics_08_sfc.pdf) (дата обращения: 11.11.2013).
32. Alnæs M.S., Mardal K.-A. On the efficiency of symbolic computations combined with code generation for finite element methods // ACM Transactions on Mathematical Software. 2010. № 1 (37). С. 1–26.
33. Amon J., Dumke F., Müller G. Influence of the crucible shape on the formation of facets and twins in the growth of GaAs by the vertical gradient freeze technique // Journal of Crystal Growth. 1998. № 1 (187). С. 1–8.
34. Asahi T., Arakawa A., Sato K. Growth of large-diameter ZnTe single crystals by the vertical gradient freezing method // Journal of Crystal Growth. 2001. № 1–4 (229). С. 74–78.
35. Beck A., Phillips K., Perry A.J. A horizontal bridgman method for growing batches of oriented copper single crystals // Journal of Crystal Growth. 1972. № 2 (15). С. 148–149.
36. Bellmann M. [и др.]. Axial macrosegregation in Ga-doped germanium grown by the vertical gradient freeze technique with a rotating magnetic field // Crystal Research and Technology. 2004. № 3 (39). С. 195–199.

37. Bellmann M.P. [и др.]. Time-dependent numerical simulation of the VGF process with a rotating magnetic field // *Journal of Crystal Growth*. 2007. № 1 (303). С. 250–252.
38. Benz K.W., Croell A. Semiconductor crystal growth under microgravity: Results of Float-zone technique // *Advances in Space Research*. 1999. № 10 (24). С. 1189–1194.
39. Böhm I. Automatic code generation using dynamic programming techniques 2007.
40. Boiton P. [и др.]. Experimental determination and numerical modelling of solid–liquid interface shapes for vertical Bridgman grown GaSb crystals // *Journal of Crystal Growth*. 1998. № 1 (194). С. 43–52.
41. Bourago N.G., Fedyushkin A.I. Impurity distribution in submerged heater method with and without rotation N.Cyprus, Turkey:, 1999. 207–215 с.
42. Bourago N.G., Fedyushkin A.I., Polezhaev V.I. Dopant distribution in crystals grown by the submerged heater method under steady and oscillatory rotation // *Advances in Space Research*. 1999. № 10 (24). С. 1245–1250.
43. Buhrig E. [и др.]. Growth and properties of semi-insulating VGF-GaAs // *Materials Science and Engineering: B*. 1997. № 1–3 (44). С. 248–251.
44. Bykova S.V. [и др.]. Features of mass transfer for the laminar melt flow along the interface // *Journal of Crystal Growth*. 2002. (237–239). С. 1886–1891.
45. Cattel R. Formalization and automatic derivation of code generators / R. Cattel, UMI Research Press, 1978. 144 с.
46. Chafi H. [и др.]. A domain-specific approach to heterogeneous parallelism // *ACM SIGPLAN Notices*. 2011. № 8 (46). С. 35.

47. Christen M., Schenk O., Burkhart H. PATUS: A Code Generation and Autotuning Framework for Parallel Iterative Stencil Computations on Modern Microarchitectures IEEE, 2011. 676–687 с.
48. Deursen A. van, Klint P., Visser J. Domain-specific languages: an annotated bibliography // ACM SIGPLAN Notices. 2000. № 6 (35). С. 26–36.
49. DeVito Z. [и др.]. Liszt: a domain specific language for building portable mesh-based PDE solvers ACM Press, 2011. 1 с.
50. Dhanaraj G. Springer handbook of crystal growth / G. Dhanaraj, Heidelberg: Springer, 2010. 1818 с.
51. Dold P. [и др.]. Floating zone growth of silicon in magnetic fields:IV. Rotating magnetic fields // Journal of Crystal Growth. 2001. № 1–2 (231). С. 95–106.
52. Dold P., Benz K.W. Rotating magnetic fields: Fluid flow and crystal growth applications // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. 1999. № 1–4 (38). С. 39–58.
53. Engelen R. van, Wolters L., Cats G. Automatic code generation for high performance computing in environmental modeling Netherlands:, 1996. 412–428 с.
54. Engelman M.S. FIDAP (A Fluid Dynamics Analysis Program) // Advances in Engineering Software (1978). 1982. № 4 (4). С. 163–166.
55. Fateman R.J. Problem Solving Environments and Symbolic Computing под ред. E.N. Houstis [и др.], Boston, MA: Springer US, 2000. 91–102 с.
56. Gelfgat Y.M., Gelfgat A.Y. Experimental and numerical study of rotating magnetic field driven flow in cylindrical enclosures with different aspect ratios // Magnetohydrodynamics. 2004. № 2 (40). С. 147–160.

57. Gelfgat Y.M., Gorbunov L.A., Kolevzon V. Liquid metal flow in a finite-length cylinder with a rotating magnetic field // *Experiments in Fluids*. 1993. № 6 (15).
58. Golyshev V. [и др.]. Single crystal growth with the axial heat processing (AHP) method American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2001.
59. Herrington J. Code generation in action / J. Herrington, Greenwich, CT: Manning, 2003. 342 с.
60. Hirtz J., Ma N. Dopant transport during semiconductor crystal growth: axial versus transverse magnetic fields // *Journal of Crystal Growth*. 2000. № 4 (210). С. 554–572.
61. Holmes A.M. [и др.]. Vertical gradient freezing using submerged heater growth with rotation and with weak magnetic and electric fields // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2005. № 5 (26). С. 792–800.
62. Hoshikawa K. [и др.]. Liquid encapsulated, vertical bridgman growth of large diameter, low dislocation density, semi-insulating GaAs // *Journal of Crystal Growth*. 1989. № 3 (94). С. 643–650.
63. Hurle D.T.J. Crystal pulling from the melt / D.T.J. Hurle, Berlin ; New York: Springer-Verlag, 1993. 148 с.
64. Jaeger R.C. Introduction to microelectronic fabrication / R.C. Jaeger, 2nd ed-e изд., Upper Saddle River, N.J: Prentice Hall, 2002. 316 с.
65. Khlybov O.A., Lyubimova T.P. Effect of rotating magnetic field on mass transfer during directional solidification of semiconductors // *Magnetohydrodynamics*. 2016. № 1 (52). С. 61–69.
66. Kim D.H., Adornato P.M., Brown R.A. Effect of vertical magnetic field on convection and segregation in vertical Bridgman crystal growth // *Journal of Crystal Growth*. 1988. № 2–3 (89). С. 339–356.

67. Kim K.M. Morphological instability under constitutional supercooling during the crystal growth of InSb from the melt under stabilizing thermal gradient // Journal of Crystal Growth. 1978. № 4 (44). C. 403–413.
68. Kim K.M. Suppression of Thermal Convection by Transverse Magnetic Field // Journal of The Electrochemical Society. 1982. № 2 (129). C. 427.
69. Kurz M., Pusztai A., Müller G. Development of a new powerful computer code CrysVUN++ especially designed for fast simulation of bulk crystal growth processes // Journal of Crystal Growth. 1999. (198–199). C. 101–106.
70. Lan C., Tu C.. Morphological instability due to double diffusive convection in directional solidification: the pit formation // Journal of Crystal Growth. 2000. № 4 (220). C. 619–630.
71. Lan C.W. Newton's method for solving heat transfer, fluid flow and interface shapes in a floating molten zone // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 1994. № 1 (19). C. 41–65.
72. Lan C.W. Recent progress of crystal growth modeling and growth control // Chemical Engineering Science. 2004. № 7 (59). C. 1437–1457.
73. Lan C.W., Chen F.C. A finite volume method for solute segregation in directional solidification and comparison with a finite element method // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1996. № 1–2 (131). C. 191–207.
74. Lan C.W., Ting C.C. Numerical investigation on the batch characteristics of liquid encapsulated vertical Bridgman crystal growth // Journal of Crystal Growth. 1995. № 3–4 (149). C. 175–186.
75. Lantzsich R. [и др.]. Fluid flow analysis and vertical gradient freeze crystal growth in a travelling magnetic field // Magnetohydrodynamics. 2006. № 4 (42). C. 445–449.

76. Lee H. [и др.]. Implementing Domain-Specific Languages for Heterogeneous Parallel Computing // IEEE Micro. 2011. № 5 (31). С. 42–53.
77. Lyubimova T.P. [и др.]. Time-dependent magnetic field influence on GaAs crystal growth by vertical Bridgman method // Journal of Crystal Growth. 2004. № 1–3 (266). С. 404–410.
78. Marchenko M.P., Golyshev V.D., Bykova S.V. Investigation of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te composition inhomogeneity at crystal growth by AHP-method // Journal of Crystal Growth. 2007. № 1 (303). С. 193–198.
79. Martinez-Tomas C., Muñoz V., Triboulet R. Heat transfer simulation in a vertical Bridgman CdTe growth configuration // Journal of Crystal Growth. 1999. № 3 (197). С. 435–442.
80. Marty P. [и др.]. On the Stability of Rotating MHD Flows под ред. A. Alemany, P. Marty, J.P. Thibault, Dordrecht: Springer Netherlands, 1999. 327–343 с.
81. Matthiesen D.H. [и др.]. Dopant segregation during vertical Bridgman-Stockbarger growth with melt stabilization by strong axial magnetic fields // Journal of Crystal Growth. 1987. № 3 (85). С. 557–560.
82. Mattiussi C. A reference discretization strategy for the numerical solution of physical field problems Elsevier, 2002. 143–279 с.
83. Mazuruk K. [и др.]. Frequency effects of a rotating magnetic field on fluid flow in vertical cylinders под ред. N. Ramachandran, 1997. 262–271 с.
84. Mazuruk K., Ramachandran N., Volz M. Traveling magnetic field induced flow for crystal growth applications American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1999.

85. Meyer S., Ostrogorsky A.G. Interface shape in the vertical Bridgman configuration with and without the submerged heater // *Journal of Crystal Growth*. 1996. № 1–4 (166). C. 700–707.
86. Meyer S., Ostrogorsky A.G. Forced convection in vertical Bridgman configuration with the submerged heater // *Journal of Crystal Growth*. 1997. № 3–4 (171). C. 566–576.
87. Moffat H. On fluid flow induced by a rotating magnetic field // *Journal of Fluid Mechanics*. 1965. № 3 (22). C. 521–528.
88. Müller G. Experimental analysis and modeling of melt growth processes // *Journal of Crystal Growth*. 2002. (237–239). C. 1628–1637.
89. Müller G., Birkmann B. Optimization of VGF-growth of GaAs crystals by the aid of numerical modelling // *Journal of Crystal Growth*. 2002. (237–239). C. 1745–1751.
90. Nakanishi H., Kohda H. Liquid encapsulated, vertical Bridgman growth of GaAs crystal with uniform EL2 concentration // *Journal of Crystal Growth*. 1995. № 3–4 (155). C. 171–178.
91. Nikrityuk P.A., Eckert K., Grundmann R. Numerical study of a laminar melt flow driven by a rotating magnetic field in enclosed cylinders with different aspect ratios // *Acta Mechanica*. 2006. № 1–4 (186). C. 17–35.
92. Nugraha . [и др.]. Growth and crystal properties of Tl-doped PbTe crystals grown by Bridgman method under Pb and Te vapor pressure // *Journal of Crystal Growth*. 2001. № 1–2 (222). C. 38–43.
93. Ortin F., Cueva J.M. Dynamic adaptation of application aspects // *Journal of Systems and Software*. 2004. № 3 (71). C. 229–243.

94. Ostrogorsky A.G. Single-crystal growth by the submerged heater method // Measurement Science and Technology. 1990. № 5 (1). С. 463–464.
95. Ostrogorsky A.G. Numerical simulation of single crystal growth by submerged heater method // Journal of Crystal Growth. 1990. № 2 (104). С. 233–238.
96. Ostrogorsky A.G., Müller G. Normal and zone solidification using the submerged heater method // Journal of Crystal Growth. 1994. № 1–2 (137). С. 64–71.
97. Ozoe H. Melt stirring effect of a weak magnetic field on crystal growth // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. 1999. № 1–4 (38). С. 239–259.
98. Pätzold O. [и др.]. Vertical gradient freeze growth of GaAs with a rotating magnetic field // Journal of Crystal Growth. 2002. № 3–4 (245). С. 237–246.
99. Pätzold O. [и др.]. The use of magnetic fields in vertical Bridgman/Gradient Freeze-type crystal growth // The European Physical Journal Special Topics. 2013. № 1 (220). С. 243–257.
100. Pätzold O., Fischer B., Cröll A. Melt flow and species transport in  $\mu\text{g}$ -gradient-freeze growth of Germanium // Crystal Research and Technology. 2002. № 10 (37). С. 1058–1065.
101. Richardson A.T. On the stability of a magnetically driven rotating fluid flow // Journal of Fluid Mechanics. 2006. № 3 (63). С. 593.
102. Rudolph P. Travelling magnetic fields applied to bulk crystal growth from the melt: The step from basic research to industrial scale // Journal of Crystal Growth. 2008. № 7–9 (310). С. 1298–1306.
103. Rudolph P., Jurisch M. Bulk growth of GaAs An overview // Journal of Crystal Growth. 1999. (198–199). С. 325–335.

104. Rudolph P., Kiessling F.-M. The horizontal bridgman method // *Crystal Research and Technology*. 1988. № 10–11 (23). С. 1207–1224.
105. Rudolph P., Matsumoto F., Fukuda T. Studies on interface curvature during vertical Bridgman growth of InP in a flat-bottom container // *Journal of Crystal Growth*. 1996. № 1–2 (158). С. 43–48.
106. Russell F.P., Kelly P.H.J. Optimized code generation for finite element local assembly using symbolic manipulation // *ACM Transactions on Mathematical Software*. 2013. № 4 (39). С. 1–29.
107. Schönauer W. Numerical engineering: design of PDE black-box solvers // *Mathematics and Computers in Simulation*. 2000. № 4–5 (54). С. 269–277.
108. Schwesig P. [и др.]. Comparative numerical study of the effects of rotating and travelling magnetic fields on the interface shape and thermal stress in the VGF growth of InP crystals // *Journal of Crystal Growth*. 2004. № 1–3 (266). С. 224–228.
109. Smith R.A. *Semiconductors* / R.A. Smith, Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1978. 540 с.
110. Sonnenberg K., Küssel E. Developments in vertical Bridgman growth of large diameter GaAs // *III-Vs Review*. 1997. № 5 (10). С. 30–34.
111. Stelian C., Duffar T., Nicoara I. Comparison between numerical simulation and experimental measurement of solute segregation during directional solidification // *Journal of Crystal Growth*. 2003. № 1–2 (255). С. 40–51.
112. Stenzenberger J. [и др.]. Growth and characterization of 200mm SI GaAs crystals grown by the VGF method // *Journal of Crystal Growth*. 2003. № 1–2 (250). С. 57–61.

113. Versteeg H.K. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method / H.K. Versteeg, 2nd ed-e изд., Harlow, England; New York: Pearson Education Ltd, 2007. 503 с.
114. Volz M.P. Semiconductor crystal growth in static and rotating magnetic fields World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2005. 178–194 с.
115. Volz M.P. [и др.]. Bridgman growth of germanium crystals in a rotating magnetic field // Journal of Crystal Growth. 2005. № 3–4 (282). С. 305–312.
116. Walker J.S. Models of melt motion, heat transfer and mass transport during crystal growth with strong magnetic fields // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. 1999. № 1–4 (38). С. 195–213.
117. Walker J.S., Volz M.P., Mazuruk K. Rayleigh–Bénard instability in a vertical cylinder with a rotating magnetic field // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2004. № 8–9 (47). С. 1877–1887.
118. Walker J.S., Witkowski L.M., Houchens B.C. Effects of a rotating magnetic field on the thermocapillary instability in the floating zone process // Journal of Crystal Growth. 2003. № 1–3 (252). С. 413–423.
119. Wang X. [и др.]. Semiconductor crystal growth by modified vertical gradient freezing with electromagnetic stirring // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. 2005. № 1 (19). С. 95–100.
120. Wang X. [и др.]. A numerical investigation of dopant segregation by modified vertical gradient freezing with moderate magnetic and weak electric fields // International Journal of Engineering Science. 2005. № 11–12 (43). С. 908–924.
121. Wang X. [и др.]. Comparing modified vertical gradient freezing with rotating magnetic fields or with steady magnetic and electric fields // Journal of Crystal Growth. 2006. № 2 (287). С. 270–274.

122. Wang X. [и др.]. Combining Static and Rotating Magnetic Fields During Modified Vertical Bridgman Crystal Growth // *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 2007. № 4 (21). С. 736–743.
123. Witkowski L.M., Marty P. Effect of a rotating magnetic field of arbitrary frequency on a liquid metal column // *European Journal of Mechanics - B/Fluids*. 1998. № 2 (17). С. 239–254.
124. Witt A.F. Crystal Growth and Steady-State Segregation under Zero Gravity: InSb // *Journal of The Electrochemical Society*. 1975. № 2 (122). С. 276.
125. Yao M. [и др.]. Magnetically damped convection and segregation in Bridgman growth of PbSnTe // *Journal of Crystal Growth*. 1997. № 3–4 (173). С. 467–480.
126. Yesilyurt S. [и др.]. The effect of the traveling magnetic field (TMF) on the buoyancy-induced convection in the vertical Bridgman growth of semiconductors // *Journal of Crystal Growth*. 2004. № 1–4 (263). С. 80–89.
127. Yu W.C. [и др.]. Reversing radial segregation and suppressing morphological instability during Bridgman crystal growth by angular vibration // *Journal of Crystal Growth*. 2004. № 3–4 (271). С. 474–480.
128. Zawilski K.T. [и др.]. Vibroconvective mixing applied to vertical Bridgman growth // *Journal of Crystal Growth*. 2003. № 1–2 (258). С. 211–222.
129. Zeng J. Partial evaluation for code generation from Domain-Specific Languages [Электронный ресурс]. URL: <http://hdl.handle.net/10022/AC:P:29553> (дата обращения: 11.11.2013).
130. Zhou W., Jeffrey D.J., Reid G.J. Symbolic Computation Sequences and Numerical Analytic Geometry Applied to Multibody Dynamical Systems под ред. D. Wang, L. Zhi, Basel: Birkhäuser Basel, 335–347 с.

131. Segregation Weinheim, FRG: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005. 129–142 с.
132. Introduction to Chemical Vapour Deposition London: Springer London, 2010. 1–28 с.
133. ANSYS Fluent [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics/Fluid+Dynamics+Products/ANSYS+Fluent>.
134. Finita project home page [Электронный ресурс]. URL: <http://finita.sourceforge.net> (дата обращения: 11.11.2013).
135. MUMPS: a MULTifrontal Massively Parallel sparse direct Solver [Электронный ресурс]. URL: <http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/>.
136. ANSYS FLUENT flow modeling simulation software [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics/Fluid+Dynamics+Products/ANSYS+Fluent>.
137. LS-DYNA: a general-purpose finite element program capable of simulating complex real world problems [Электронный ресурс]. URL: <http://www.lstc.com/products/ls-dyna>.
138. FlexPDE finite element model builder for Partial Differential Equations [Электронный ресурс]. URL: <http://www.pdesolutions.com/>.
139. FreeFem++ a partial differential equation solver [Электронный ресурс]. URL: <http://www.freefem.org/ff++/>.
140. FEniCS: a collection of free software with an extensive list of features for automated, efficient solution of differential equations [Электронный ресурс]. URL: <http://fenicsproject.org/>.

141. Distributed and unified numerics environment [Электронный ресурс]. URL: <http://www.dune-project.org/pdelab> (дата обращения: 11.11.2013).
142. OpenFOAM: the open source CFD toolbox [Электронный ресурс]. URL: <http://www.openfoam.com/>.
143. Annotated bibliography of scientific code automation [Электронный ресурс]. URL: <http://people.cs.uchicago.edu/~ridg/softauto/drivannobib.pdf> (дата обращения: 11.11.2013).
144. Supernodal LU SLAE solver [Электронный ресурс]. URL: <http://crd-legacy.lbl.gov/~xiaoye/SuperLU/> (дата обращения: 11.11.2013).
145. UMFPACK: unsymmetric multifrontal sparse LU factorization package [Электронный ресурс]. URL: <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/umfpack/>.
146. PETSc, a suite of data structures and routines for the scalable (parallel) solution of scientific applications modeled by partial differential equations [Электронный ресурс]. URL: <http://www.mcs.anl.gov/petsc/>.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1.

**Входное задание для задачи о свободной конвекции в квадратной  
полости, подогреваемой сбоку**

```

NX = Variable.new(:NX, Integer)
NY = Variable.new(:NY, Integer)

A = Variable.new(:A, Float)
B = Variable.new(:B, Float)

Gr = Variable.new(:Gr, Float)
Pr = Variable.new(:Pr, Float)

def dx(f); D.new(f, :x)*A end
def dy(f); D.new(f, :y)*B end
def laplace(f); dx(dx(f)) + dy(dy(f)) end

Cavity = Domain::Rectangular::Domain.new(NX, NY)

T = Field.new(:T, Float, Cavity)
Psi = Field.new(:Psi, Float, Cavity)
Phi = Field.new(:Phi, Float, Cavity)

Problem.new(:Cavity) do |p|
  System.new(:System) do |s|
    s.discretizer = Discretizer::FiniteDifference.new
    s.solver = Solver::MUMPS.new(
      Mapper::Naive.new, Decomposer::Naive.new,
      Environment::MPI.new, Jacobian::Numeric.new
    )
    Equation.new(T-0, T, Cavity.left)
    Equation.new(T-1, T, Cavity.right)
    Equation.new(dy(T), T, Cavity.top)
    Equation.new(dy(T), T, Cavity.bottom)
    Equation.new(Phi + 2*Psi[:x+1]*A**2, Phi, Cavity.left.area)
    Equation.new(Phi + 2*Psi[:x-1]*A**2, Phi, Cavity.right.area)
    Equation.new(Phi + 2*Psi[:y-1]*B**2, Phi, Cavity.top.area)
    Equation.new(Phi + 2*Psi[:y+1]*B**2, Phi, Cavity.bottom.area)
    Equation.new(dx(T)*dy(Psi) - dy(T)*dx(Psi) - laplace(T)/Pr, T, Cavity.interior)
    Equation.new(Phi + laplace(Psi), Psi, Cavity.interior)
    Equation.new(
      dx(Phi)*dy(Psi) - dy(Phi)*dx(Psi) - laplace(Phi) - Gr*dx(T), Phi, Cavity.interior
    )
  end
end
end

```

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

**Управляющий модуль для задачи о свободной конвекции в  
квадратной полости, подогреваемой сбоку**

```
#include "cavity_auto.h"
#include <stdio.h>

#define WRITE_FIELD(file_name, f) \
FINITA_HEAD { \
    int x, y; \
    FILE* file = fopen(file_name, "wt"); \
    for(x = 0; x < NX; ++x) \
    for(y = 0; y < NY; ++y) \
        { \
            fprintf(file, "%d\t%d\t%e\n", x, y, f(x, y, 0)); \
        } \
    fclose(file); \
}

int main(int argc, char** argv) {
    NX = NY = 51;
    A = (NX-1)/1.0;
    B = (NY-1)/1.0;
    Pr = 1;
    double _[] = {1, 1e4, 1e5, 2e5, -1}, *p = _;
    CavitySetup(argc, argv);
    while((Gr = *p++) >= 0) CavitySystemSolve();
    WRITE_FIELD("T.dat", T);
    WRITE_FIELD("Psi.dat", Psi);
    WRITE_FIELD("Phi.dat", Phi);
    CavityCleanup();
    return 0;
}
```