

## ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н. Бердникова В.С. на диссертацию Хлыбова Олега Анатольевича “Влияние вращающегося магнитного поля на тепломассообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методами направленной кристаллизации”, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы»

В диссертации Хлыбова О.А. представлены результаты разработки пакета программ для решения систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами. Работоспособность пакета была проверена при решении 6 задач, по мере повышения их сложности. Результаты решения двух наиболее сложных задач представлены в двух главах диссертации как основной защищаемый материал по специальности 01.02.05. Численно исследовано влияние вращающегося магнитного поля на гидродинамику и тепло-массообмен при выращивании кристалла германия из расплава с примесью галлия методами вертикальной направленной кристаллизации (ВНК – вариант метода Бриджмена) и осевого теплопотока на фронте кристаллизации (ОТФ).

**Актуальность** темы работы определяется тем, что в рамках теории воздействий на гидродинамические системы осталось слабо исследованным поведение электропроводных жидкостей в электромагнитных полях. В технологических процессах важнейшим классом жидкостей, обладающих свойствами электропроводности, являются расплавы. Теоретические основы гидродинамики и тепломассообмена в проводящих жидкостях при наличии ЭМ полей все еще находятся в стадии разработки. Исследование течений расплавов (чистых и содержащих примеси - активаторы) необходимо для создания фундаментальных основ технологий получения монокристаллов многовариантными методами направленной кристаллизации. Актуальным является поиск способов управления движением неизотермических расплавов, находящихся в поле тяжести и в условиях неизбежного развития плохо управляемой термогравитационной конвекции. Одним из способов управления конвективными течениями и конвективным тепло-массообменом является использование магнитных полей. Воздействие внешних стационарных и нестационарных магнитных полей на проводящие жидкости применяется при выращивании совершенных монокристаллов методами Чохральского, Бриджмена-Стокбаргера, бестигельной зонной плавки, в процессах индукционной и зонной плавки при глубокой очистке полупроводников. Постоянные и вращающиеся магнитные поля используются при выращивании кристаллов для управления гид-

родинамикой расплавов и процессами ламинарно-турбулентного перехода. Актуальность темы сохраняется потому что каждый из способов выращивания монокристаллов имеет много вариантов по геометриям и размерам ростовых узлов, кроме того обладают особенностями в зависимости от теплофизических свойств материалов, которые необходимо получить в виде монокристаллов различных размеров, но высокого качества. Суть проблем заключается в управлении процессами тепло-и массообменном на фронте кристаллизации и поиск диапазонов внешних параметров управления для обеспечения наиболее равномерного вхождения примесей в кристалл и получения кристаллов с максимально однородным распределением кристаллографических характеристик в их объеме.

**Новизна результатов** работы обусловлена в первую очередь тем, что впервые с использованием оригинального пакета программ, разработанного лично О.А. Хлыбовым, исследованы течения расплава германия легированного галлием в термогидродинамических системах, подобных промежуточным стадиям получения монокристаллов вертикальным методом Бриджмена и методом осевого теплотока на фронте кристаллизации, в постановке задачи, приближенной к полной сопряженной. Последовательно исследованы режимы теплопроводности, термогравитационной конвекции и конвективные течения, возникающие при наложении вращающегося магнитного поля. Получены и представлены в работе поля изолиний функции тока, изотерм и изолиний концентрации примеси в расплаве и кристалле. Вариант вертикального метода Бриджмена исследован с учетом различий коэффициентов теплопроводности материала ампулы (графитового тигля с заданной толщиной стенки), расплава и кристалла в сопряженной нестационарной постановке. Расчеты проведены с учетом теплообмена внешней стороны стенки тигля с равномерно поднимающимся вверх нагревателем, имеющим линейное распределение температуры по вертикали. Вторая задача решена также в нестационарной сопряженной постановке, но с более простыми идеализированными условиями на боковой стенке тигля – с заданными распределениями температуры по высоте стенки.

**Достоверность результатов** и обоснованность научных положений и выводов представленных в диссертации обеспечивается применением апробированных теоретических подходов и численных методов; исследованием сходимости конечно-разностных схем при уменьшении пространственного шага сетки; согласием результатов в предельных случаях с имеющимися в литературе; тестированием применяе-

мых алгоритмов и программ путем сопоставления с известными результатами. Математические модели разрабатывались на основе классических методов механики сплошных сред. На качественном уровне результаты численных исследований совпадают с данными физического эксперимента по выращиванию кристалла арсенида галлия с примесью кремния, в проведении которого участвовал автор диссертации.

**Научная и практическая значимость результатов** работы заключается в том, что результаты диссертации важны с общетеоретической точки зрения для развития знаний в области гидродинамики и тепломассообмена расплавов при воздействии на них магнитных полей. Применение результатов возможно при изучении нестационарных и неизотермических течений электропроводных жидкостей. Результаты, полученные при изучении влияния вращающихся магнитных полей, могут быть применены при решении задач оптимизации технологических процессов роста кристаллов с использованием вертикальных вариантов метода Бриджмена-Стокбаргера. Все технологические процессы получения монокристаллов из расплавов происходят в условиях неоднородных распределений температуры. Неустраняемыми в этих ситуациях являются термогравитационная или при наличии свободных поверхностей расплавов тепловая гравитационно-капиллярная конвекция. Поиск и лабораторное апробирование эффективных методов управления гидродинамикой неизотермических расплавов имеет важное и научное и практическое значение - а это и было целью данной работы. Магнитные поля с различными пространственно-временными характеристиками играют важную роль в технологических процессах выращивания кристаллов различными вариантами методов направленной кристаллизации. Ключевой проблемой при создании технологий роста кристаллов является решение проблемы равномерного вхождения примесей в кристалл. Полученные в работе результаты дают новые сведения о распределении примеси в расплаве и в кристалле германия в различных режимах течения. Но наиболее практически важным является разработка пакета программ, использование которого позволит решать широкий класс технологических задач.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав основной части, заключения, списка литературы (146 наименований) и двух приложений. Общий объем диссертации 147 страниц; работа содержит 41 рисунок и 4 таблицы.

Во Введении представлено краткое обоснование выбора темы исследований и краткая характеристика выполненной работы. Достоинство содержания этой главы состоит в том, что дан достаточно полный и содержательный перечень литературы по

гидродинамике и теплообмену в проводящих расплавах, находящихся в магнитных полях. В результате обоснована постановка задач и актуальность исследований.

Замечания по Введению и списку литературы:

1. Нет обзора отечественных работ по применению вращающихся магнитных полей, которые были первыми в 80-90е годы. Обзор литературы слишком англоязычный и имеет характер простого перечисления. Нет элементов аналитического подхода и нет четко сформулированных выводов, позволяющих более ясно обосновать постановку решаемых задач. Создается впечатление не достаточно глубокого проникновения в физическую суть технологических проблем. Следствие этого – не достаточно ясное изложение сути процесса сопряженного теплообмена в ампулах (тиглях) с коническим и плоским дном (стр.7). В результате символична описка на стр. 5: “Исходным материалом для получения монокристаллов служит *поликристаллическая* затравка”. Всегда во всех методах направленной кристаллизации используется *монокристаллическая* затравка или в ампульных вариантах и создаются условия для выживания одного затравочного монокристалла. Путаются понятия рабочая камера и ампула (стр. 6) и т.д. На стр.7: “В работе рассматривается вариант плоскодонной ампулы”. Реально рассматривается промежуточный этап технологического процесса с уже имеющимся кристаллом и задается начальная плоская форма фронта кристаллизации. Начало процесса кристаллизации в плоскодонном тигле особая задача (см., например, Антонов П.В., Бердников В.С. Известия ВУЗов. Материалы электронной техники. 2011 №4. С. 21-28; ПМТФ, 2012, т.53, №6, с.65-77). Интерпретация связи формы фронта кристаллизации и его влияния на конвективное течение, например, на стр.9 и в главе 1 по сути не корректна, потому что необходимо анализировать влияние разности коэффициентов теплопроводности расплава, кристалла и стенки тигля, соответствующие перетечки тепла и возникновение радиальных градиентов температуры.

В списке литературы во многих случаях нет выходных данных (например, №№ 24, 26, 39, 41, 53, 55, 58, 80, 82,...).

В первой главе представлены результаты численных исследований влияния однородного вращающегося магнитного поля на процессы тепло- и массообмена при выращивании кристалла германия легированного галлием методом ВНК в наземных условиях. По существу рассматривается фрагмент цилиндрической ампулы большой длины с боковой стенкой конечной толщины. Задача нестационарного сопряженного

теплообмена решается в осесимметричной постановке. В начальный момент времени половина выделенного объема ампулы занята кристаллом с плоским фронтом кристаллизации. После включается боковой подогрев от внешнего нагревателя с линейным распределением температуры по высоте и решается задача на установление фронта с кривизной, соответствующей падающему на внешнюю сторону тепловому потоку и его распределению в выделенном фрагменте. Это достаточно полная постановка задачи с расчетом подогрева внешней стенки тигля при заданном значении коэффициента теплообмена. На следующих этапах нагреватель перемещается вверх с заданной скоростью. Представлены поля изолиний функции тока, изотерм и изолинии концентрации примеси в расплаве и в кристалле в три момента времени. Результаты получены в режимах теплопроводности (при отсутствии конвекции), в режимах конвекции, возбуждаемой вращающимся магнитным полем, и в режиме термогравитационной конвекции, затем при совместном действии сил плавучести и магнитного поля. Изучена зависимость неоднородности распределения примеси в выращенном кристалле от режима тепло- и массообмена.

#### Замечания по главе 1:

1. Для адекватного анализа зависимости формы фронта кристаллизации, пространственной формы и интенсивности конвективного течения необходимо было построить профили радиальной компоненты скорости в характерных сечениях по радиусу, профили локальных осевых и радиальных тепловых потоков, потоков примеси. Это позволило бы сделать более содержательные и обоснованные выводы о сути протекающих процессов в режимах сопряженного теплообмена между расплавом, кристаллом и стенками тигля (ампулы). В данных условиях из-за разницы коэффициентов теплопроводности возникают радиальные градиенты температуры, вследствие чего возникает конвективное течение, в зависимости от направления и интенсивности которого меняются локальные тепловые потоки и форма фронта кристаллизации. А последующее влияние формы фронта на пространственную форму течения является следствием. Анализ полей скорости и обусловленных особенностями гидродинамики расплава локальных потоков тепла и примеси необходим для обоснования целесообразности применения данного способа управления гидродинамикой, которая может или создавать и усиливать неоднородность радиальных распределений потоков тепла и примеси или наоборот их сглаживать. Переход к нестационарным режимам течения, обнаруженным в работе, так же может играть двоякую роль: или при высоких частоте-

тах пульсаций скорости как механизм перемешивания и уноса примеси от фронта кристаллизации или наоборот при низких частотах и больших амплитудах пульсаций скорости и температуры к полосчатой неоднородности (концентрационное переохлаждение – захват примеси). Поэтому необходим анализ характеристик нестационарных полей скорости, температуры и концентрации в режимах, когда меридиональное течение теряет устойчивость.

2. При постановке задачи (с.29 и дальше) не объясняется, что на торцах заданы равномерные распределения температуры по радиусу и что значения температуры меняются по мере перемещения нагревателя. Это важно, потому что при более глубоком анализе процессов теплообмена было бы видно, как меняются радиальные распределения осевых потоков тепла от фронта кристаллизации к нижнему торцу (особенно в промежуток времени  $0 \leq t \leq 1000$  сек).

3. Не приводятся распределения температуры на внешней стороне стенки тигля, которая является результатом теплообмена с перемещающимся нагревателем, а от этого зависят особенности сопряженного теплообмена в остальных частях рассматриваемой расчетной области.

4. В постановке задачи не указаны источники и не обоснован выбор значений коэффициента теплообмена между нагревателем и стенкой тигля и коэффициента сегрегации примеси.

Во второй главе представлены результаты численных исследований влияния вращающегося магнитного поля на течения и тепло- и массообмен при выращивании кристалла германия, легированного галлием, методом ОТФ. Рассмотрен сопряженный конвективный теплообмен между слоем расплава германия и кристаллом, расположенными между плоским дном ампулы и нижним торцом нагревателя, помещенного в расплаве в верхней части ампулы. На боковой поверхности ампулы задается линейный профиль распределения температуры. На нижней поверхности погруженного нагревателя ставятся или линейные распределения температуры с градиентом, направленным от центра к периферии, или наоборот к центру нагревателя, или равномерное распределение температуры. Изучена зависимость формы фронта кристаллизации от режимов теплообмена, аналогичных рассмотренным в главе1. Показано, что объем кристалла и распределение примеси вдоль фронта существенно зависят от режима конвективного теплообмена.

Замечания по главе 2:

1. Как и в главе 1 отсутствует информация о локальных характеристиках поля скорости и температуры, локальных потоках тепла и примеси. Здесь отсутствуют даже поля изотерм в кристалле. Как и в главе 1 не сказано, из каких соображений выбраны моменты времени, при которых показаны результаты расчетов.

2. Дана слишком поверхностная физическая интерпретация результатов и не сделана оценка целесообразности применения данного метода в технологиях получения полупроводниковых материалов.

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

Сделанные выше замечания по главам и отдельные недостатки вовсе не исключают общую положительную оценку работы в целом. Замечания сделаны по тексту представленной диссертации. Но были получены дополнительные сведения о сути выполненной работы на семинаре в лаборатории свободноконвективного теплообмена Института теплофизики СО РАН и по представленным опубликованным материалам. В итоге можно сделать вывод, что в целом диссертация Хлыбова О.А. - завершённый этап научных исследований, выполненных на достаточно высоком методическом уровне. Работа хорошо оформлена (за исключением несущественных - иногда курьезных – опечаток и пропущенных слов во многих предложениях) с использованием современных средств, написана на достаточно высоком профессиональном уровне. Список публикаций по теме диссертации состоит из 11 различных печатных работ, в их числе, 4 статей, опубликованных в реферируемых журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий установленный Министерством образования и науки Российской Федерации для представления результатов кандидатских

диссертаций, в них достаточно полно отражены основные результаты диссертации. Содержание автореферата (кроме отсутствия раздела о личном вкладе, особенно в экспериментальной работе) соответствует содержанию диссертации.

Таким образом, диссертация Хлыбова О.А. является оригинальной, завершенной научно-квалификационной работой, в которой наиболее важными являются новые научные результаты исследований влияния вращающихся магнитных полей на характеристики течений неизотермических расплавов и их влияния на распределения примеси в двух вариантах метода направленной кристаллизации, совокупность которых можно квалифицировать как решение задачи, имеющей важное значение в области технологической гидродинамики.

Считаю, что диссертация Хлыбова О.А. по своей актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований и их научно-практической значимости удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в соответствии с п.9 "Положения о порядке присуждения ученых степеней", утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 года №842, а сам Хлыбов Олег Анатольевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы».

Заведующий лабораторией свободноконвективного теплообмена Института теплофизики СО РАН,  
доктор физико-математических наук



Бердников Владимир Степанович  
15 сентября 2016г

ФАНО РФ, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 1.  
Рабочий тел. 8(383) 3165332, e-mail: berdnikov@itp.nsc.ru

Я, Бердников Владимир Степанович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

