

Научная статья

Влияние бегущего магнитного поля на теплообмен при выращивании полупроводниковых кристаллов методом погруженного нагревателя

О.А. Хлыбов¹, Т.П. Любимова^{1,2}

¹ Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Российская Федерация

² Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Российская Федерация

Проведено численное исследование влияния бегущего магнитного поля на тепло- и массообмен при выращивании монокристалла диаметром 4 дюйма полупроводника германия, легированного галлием (Ga:Ge), методом осевого теплового потока на фронте кристаллизации. Рассмотрены процессы тепло- и массообмена в составной многофазной системе кристалл–расплав–тигель–погруженный нагреватель в осесимметричной нестационарной постановке. Текущее положение и форма фронта кристаллизации являются неизвестными и находятся в процессе моделирования. При электроизолированных границах влияние бегущего магнитного поля учитывается как аналитически заданная сила Лоренца. Получены структуры течения и распределение примеси в расплаве и кристалле при различных температурных профилях на погруженном нагревателе и аксиальных температурных градиентах, а также при разных направлениях приложенного бегущего магнитного поля и величинах его индукции. Установлено, что температурные граничные условия на погруженном нагревателе оказывают значительное влияние на массообмен в расплаве и, как следствие, на сегрегацию примеси в выращенном кристалле. Бегущее вниз магнитное поле оказалось благоприятно влияющим как на аксиальную, так и на радиальную однородность примеси кристалле. В определенном диапазоне интенсивности магнитного поля наблюдался эффект уменьшения интенсивности течения, вызванного радиальным градиентом температуры на погруженном нагревателе и искривлением фронта кристаллизации. Более того, положительный эффект от бегущего магнитного поля усиливался с увеличением скорости кристаллизации. В жестких условиях кристаллизации в исследуемой конфигурации за счет бегущего магнитного поля, вызывающего расширение зоны конвективного переноса примеси, получено четырехкратное уменьшение радиальной сегрегации примеси в направлении оси симметрии и устранено ее накопление в этой области.

Ключевые слова: погруженный нагреватель, метод Бриджмена, бегущее магнитное поле, численное моделирование

Получение: 17.09.2025 / *Публикация онлайн:* 10.12.2025

УДК 537.36; 538.93; 544.6.076.342

1. Введение

Требования современной развивающейся промышленности, особенно таких отраслей как электроника, телекоммуникации, медицина, энергетика и другие, обуславливают повышенный интерес к производству высококачественных полупроводниковых кристаллов с заданными физико-химическими свойствами, так как разным устройствам требуются полупроводниковые материалы с существенно различающимися характеристиками. Известно несколько методов выращивания полупроводниковых кристаллов, таких как эпитаксиальное наращивание, химическое осаждение из газовой фазы, метод Чохральского, метод зонной плавки, метод Бриджмена [1] и другие. Основным критерием качества выращенного полупроводникового кристалла служит однородность распределения легирующей примеси, на которую влияет термогравитационный, термоконцентрационный и термокапиллярный конвективные механизмы массопереноса. Высокая электропроводность расплавов полупроводников определяет эффективность воздействия нестационарных магнитных полей на конвективное течение в расплаве и, как следствие, на распределение примеси в выращиваемом кристалле. Данная статья посвящена численному исследованию совместного влияния бегущего магнитного поля (БМП) и погруженного нагревателя на тепло- и массообмен в процессе направленной кристаллизации.

Метод осевого теплового потока на фронте кристаллизации (ОТФ) [2, 3], как метод направленной кристаллизации, является модификацией вертикального метода Бриджмена и развитием метода погруженного нагревателя [4]. Кристаллизация происходит в тигле с нагреваемой перегородкой (погруженным нагревателем), расположенной в расплаве над границей раздела твердой и жидкой фаз. Между краем нагревателя и внутренней поверхностью тигля имеется зазор, позволяющий расплаву перетекать между двумя камерами — под нагревателем и над ним. В процессе кристаллизации погруженный нагреватель перемещается таким образом, что расстояние между его нижней поверхностью и фронтом кристаллизации остается постоянным. Преимущество методов с погруженным нагревателем, по сравнению с обычным вертикальным методом Бриджмена, заключается в возможности точного контроля распределения температуры вблизи границы раздела фаз, а также в устранении краевых эффектов, свойственных методу Бриджмена и связанных с уменьшением высоты расплава в процессе роста кристалла, что положительно влияет на аксиальную однородность примесей в готовом кристалле.

Наиболее широко используемые методы управления тепло- и массообменом в процессах кристаллизации включают в себя вибрации [5–9], стационарное и ускоренное вращение тигля [10–12], статические и динамические (бегущие, вращающиеся) магнитные поля [13–16]. Динамические магнитные поля (в частности, БМП), известны как эффективное средство управления течением электропроводящей жидкости. Основное воздействие БМП в контексте метода направленной кристаллизации [15] заключается в создании в объеме расплава меридионального течения, которое может подавлять или усиливать меридиональные течения, вызываемые другими механизмами [17].

2. Постановка задачи

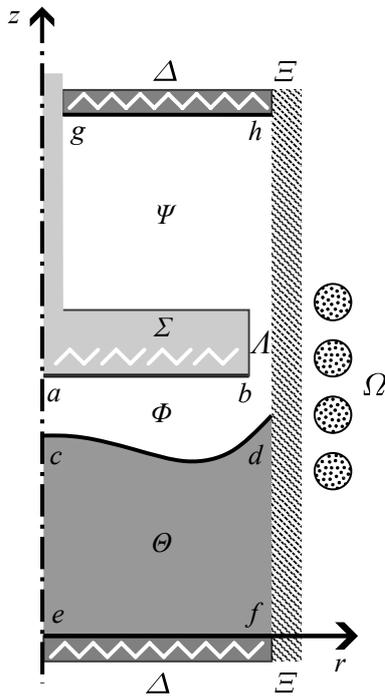


Рис. 1. Схематическое изображение процесса ОТФ с бегущим магнитным полем: Θ – кристалл, $\Phi \cup \Lambda \cup \Psi$ – расплав, Ξ – боковая стенка тигля, Σ – погруженный нагреватель, Δ – вспомогательные выравнивающие нагреватели, Ω – магнитные катушки

расчетов толщина стенки тигля принимается равной нулю. БМП предполагается пространственно однородным и коаксиальным по отношению к тиглю. Кристалл, тигель и погруженный нагреватель считаются электрически непроводящими средами.

Задача совместного тепло- и массообмена рассматривается как двумерная осесимметричная и нестационарная. Управляющие уравнения в лабораторной системе отсчета имеют вид:

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

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T = \chi \Delta T, \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) C = D \Delta C. \quad (4)$$

В систему уравнений входят: (1) — уравнение Навье–Стокса в приближении Буссинеска, (2) — уравнение неразрывности, (3) — уравнение теплопереноса, (4) — уравнение переноса примеси, в которых обозначено: t — время; \mathbf{V} — вектор скорости; T — температура; C — концентрация примеси; ρ — плотность жидкости; p — давление; ν — кинематическая вязкость жидкости; χ — коэффициент температуропроводности; D — коэффициент диффузии примеси; β_T — коэффициент теплового расширения; β_C — коэффициент концентрационного расширения; g — вектор силы тяжести; \mathbf{F}_L — вектор объемной силы Лоренца; ∇ и Δ — соответственно, векторный и скалярный дифференциальные операторы. Согласно [18], внешнее осесимметричное БМП, используемое в данной работе, задается аналитически в виде одночастотной магнитной волны, распространяющейся в аксиальном направлении:

$$\mathbf{A} = e_\phi A(r) e^{i(\omega t - az)}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A},$$

где \mathbf{A} — векторный потенциал электромагнитного поля, \mathbf{B} — магнитная индукция, ω — частота перемещения БМП, a — волновое число, e_ϕ — азимутальный орт лабораторной системы координат. В представленной формулировке усредненная по времени объемная сила Лоренца $\langle \mathbf{F}_L \rangle$ для однородного осесимметричного БМП, полученная в приближении низкой частоты (то есть из рассмотрения исключено наведенное магнитное поле), принимает вид [17–19]:

$$\langle \mathbf{F}_L \rangle = \pm \frac{1}{2a} \sigma \omega B^2 J_1^2(ar) e_z, \quad (5)$$

Исследуется процесс выращивания полупроводникового кристалла методом ОТФ в земных условиях. Принципиальная схема установки представлена на рисунке 1. Цилиндрический тигель с теплоизолированной боковой стенкой Ξ заполнен материалом в твердой и жидкой фазах. Распределение температуры внутри тигля устанавливается основным многосекционным погруженным нагревателем Σ , определяющим динамику процесса кристаллизации. Внешнее тепловое поле T^∞ , окружающее расчетную область, формируют вспомогательные (выравнивающие) нагреватели Δ . БМП создается набором электромагнитных катушек Ω , находящимися за пределами тигля. Погруженный нагреватель делит объем расплава в тигле на две части, которые соединены между собой благодаря узкому кольцевому зазору Λ между боковыми поверхностями нагревателя и тигля. В нижнем объеме зона Φ , называемая камерой роста, имеет тенденцию к сохранению среднего расстояния между поверхностью погруженного нагревателя (ab) и границей раздела фаз (фронтом кристаллизации) (cd). Высота же верхнего объема расплава Ψ уменьшается в процессе кристаллизации вследствие смещения вверх погруженного нагревателя и следующего за ним фронта кристаллизации. Отметим, что конвективные процессы в верхнем объеме не влияют на течение в камере роста вблизи фронта кристаллизации, поскольку зазор Λ мал, но не настолько, чтобы препятствовать массопереносу между объемами Φ и Ψ . Граница раздела твердой и жидкой фаз (cd) в общем случае искривлена, ее форма и положение априори неизвестны и определяются в процессе расчетов. Расплав рассматривается как ньютоновская жидкость. Для упрощения

где σ — электропроводность расплава, B — величина индукции БМП, I_1 — модифицированная функция Бесселя 1-го порядка, e_z — аксиальный орт лабораторной системы координат.

Управляющие уравнения (1)–(5) решаются в объемах расплава ниже и выше погруженного нагревателя, а также в зазоре между боковыми поверхностями нагревателя и тигля ($\Phi \cup \Lambda \cup \Psi$, см. Рис. 1). Уравнение для температуры (3) решается в твердых объемах (в погруженном нагревателе Σ и кристалле Θ). Система (1)–(5) дополняется граничными условиями, в которых нижние индексы c, m, h указывают на отношение величины, соответственно, к кристаллу Θ , расплаву $\Phi \cup \Lambda \cup \Psi$ и погруженному нагревателю Σ .

2.1. Тепловые граничные условия

В процессе кристаллизации погруженный нагреватель перемещается по вертикали вверх с постоянной скоростью, положение его нижней поверхности (ab) определяется по формуле:

$$z_h(t) = z_h(0) + Ut,$$

где U — скорость движения нагревателя, $z_h(0)$ — начальная позиция погруженного нагревателя. Внешнее тепловое поле T^∞ задается посредством установки граничных условий на выравнивающих нагревателях Δ :

$$T^\infty(z, t) = T_* + [z - z_h(t)] \nabla_z T, \quad (6)$$

где $z_h(t)$ — зависящее от времени положение погруженного нагревателя, T_* — температура плавления, $\nabla_z T$ — приложенный аксиальный температурный градиент. Температура $T|_{z=H} = T^\infty(H, t)$ на верхней (gh) и $T|_{z=H} = T^\infty(H, t)$ на нижней (ef) границах выравнивающих нагревателей Δ задается в соответствии с (6). Введенный таким образом тепловой фон обеспечивает:

– согласующееся с погруженным нагревателем изменение распределения температуры в расчетной области со временем;

– сохранение в течение всего процесса роста кристалла заданного аксиального градиента температуры $\nabla_z T$.

Градиент определяет среднее расстояние от погруженного нагревателя (ab) до фронта кристаллизации (cd): при его увеличении объем камеры роста уменьшается и наоборот. Боковая стенка тигля (fh) теплоизолирована: $(\partial T / \partial \mathbf{n})|_{c, m} = 0$. На нижней поверхности погруженного нагревателя (ab) устанавливается линейный температурный профиль:

$$T(r) = T^a + (T^b - T^a)r/R_h. \quad (7)$$

Здесь R_h — радиус нагревателя, T^a — температура в его точке $r = 0$, T^b — температура в точке $r = R_h$ его боковой поверхности. Радиальный перепад температуры на нижней поверхности погруженного нагревателя Σ обозначается далее как $\Delta_h T = T^b - T^a$; на его остальных поверхностях соблюдается баланс температуры и теплового потока:

$$T|_h = T|_m, \quad (\kappa_h \partial T / \partial \mathbf{n})|_h = (\kappa_m \partial T / \partial \mathbf{n})|_m,$$

где κ_m и κ_h — коэффициенты теплопроводности расплава и погруженного нагревателя соответственно. На границе раздела фаз (cd) выполняется условие Стефана, учитывающее межфазный теплообмен и теплоту фазового перехода [20]:

$$\left(\kappa_c \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \Big|_c - \left(\kappa_m \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \Big|_m + \rho_c P V_z (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) = 0,$$

где V_z — вертикальная скорость границы раздела, ρ_c — плотность кристалла, P — теплота фазового перехода. С помощью выравнивающих нагревателей Δ в расчетной области создается фиксированный аксиальный перепад температуры за счет разной температуры на нижней (ef) и верхней (gh) границах расчетной области, вычисляемой по формуле (6).

В момент времени $t = 0$ распределение температуры в расчетной области задается в соответствии с уравнением (6) с учетом начального положения погруженного нагревателя $z_h(0)$ и аксиального градиента температуры $\nabla_z T$. Граница раздела фаз, плоская в начальном состоянии, располагается на уровне нижней поверхности погруженного нагревателя.

2.2. Граничные условия для скорости

Тигель считается неподвижным, на его границах имеет место прилипание: $\mathbf{V}|_\Gamma = 0$. Условия на верхней границе расчетной области (gh), на которой отсутствуют нормальная компонента скорости и касательные напряжения, имеют вид:

$$V_n|_\Gamma = 0, \quad \left(\frac{\partial V_\tau}{\partial \mathbf{n}} \right) \Big|_\Gamma = 0. \quad (8)$$

Поскольку погруженный нагреватель движется с постоянной скоростью $\mathbf{V}|_h = U \mathbf{e}_z$, то зависящая от времени локальная скорость поверхности (ab), разделяющей твердую и жидкую фазы — V_z , получается вычислением вертикального смещения изотермы, соответствующей температуре затвердевания T_* . Начальные скорости расплава и фронта кристаллизации принимаются равными нулю: $\mathbf{V}|_{t=0} = 0$.

2.3. Граничные условия для концентрации примеси

На границу раздела твердой и жидкой фаз (cd) налагается граничное условие баланса масс, учитывающее процесс сегрегации [20]:

$$\left(D \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \right) \Big|_m + \frac{\rho_c}{\rho_m} C(1-k) V_z (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) = 0,$$

где k — коэффициент сегрегации (то есть доля массы k захватывается растущим кристаллом, а доля массы $(1-k)$ остается в расплаве). На остальных твердых границах, в том числе на (gh) поток массы отсутствует: $(\partial C / \partial \mathbf{n}) \Big|_r = 0$. Начальное распределение примеси является однородным с концентрациями: $C \Big|_{t=0} = C_0$ в расплаве и $C \Big|_{t=0} = 0$ в кристалле.

3. Учет осесимметричности задачи

Далее рассмотрение ограничивается осесимметричным случаем. Вводятся функция тока ψ и завихренность ϕ :

$$V_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad V_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad (9)$$

$$\phi = \frac{\partial V_z}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial z}, \quad (10)$$

что позволяет переписать управляющие уравнения (1)–(5) в терминах (ψ, ϕ, T, C) [11, 20]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nu \left[\Delta - \frac{1}{r^2} \right] \phi + \frac{\phi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{1}{r} \left[\frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} \right] \phi - g \left[\beta_T \frac{\partial T}{\partial r} - \beta_C \frac{\partial C}{\partial r} \right] - \frac{\partial}{\partial r} \left[\pm \frac{\sigma \omega B^2 I_1^2(ar)}{2a\rho} \right], \quad (11)$$

$$\frac{\partial \psi^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial \psi^2}{\partial z^2} = r\phi, \quad (12)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \left[V_r \frac{\partial}{\partial r} + V_z \frac{\partial}{\partial z} \right] T = \chi \Delta T, \quad (13)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left[V_r \frac{\partial}{\partial r} + V_z \frac{\partial}{\partial z} \right] C = D \Delta C. \quad (14)$$

Консервативная форма конвективно-диффузионного уравнения переноса скалярной величины Q в декартовых координатах (x, y) записывается так [21]:

$$r \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \psi}{\partial y} Q \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} Q \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\alpha}{J} \left(g_{22} \frac{\partial Q}{\partial x} - g_{12} \frac{\partial Q}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\alpha}{J} \left(g_{11} \frac{\partial Q}{\partial y} - g_{12} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) \right] = 0, \quad (15)$$

со следующим преобразованием к физическим криволинейным координатам (r, z) :

$$J = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial y}{\partial z} - \frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial y}{\partial r}, \quad g_{11} = \left(\frac{\partial x}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial r} \right)^2, \quad g_{22} = \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial z} \right)^2, \quad g_{12} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial x}{\partial z} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial y}{\partial z},$$

где производные $\partial(x, y) / \partial(r, z)$ получаются обращением матрицы

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

Консервативные формы уравнений теплопереноса (13) и переноса примеси (14) выводятся из (15) при $Q = T$, $\alpha = \chi$ и $Q = C$, $\alpha = D$ соответственно.

3.1. Граничные условия для функций тока и завихренности

Решаемая задача содержит движущиеся границы, поэтому граничные условия для завихренности ϕ и функции тока ψ должны учитываться соответствующим образом. Рассматриваемая область расплава $M = \Phi \cup L \cup \Psi$ имеет границу $M \Big|_r$ (см. Рис. 1), которая является твердой и включает: границу раздела фаз (cd), боковую стенку тигля (dh), верхнюю границу (gh), всю поверхность G погруженного нагревателя Σ . На границе $M \Big|_r$ скорость $\mathbf{V} \Big|_r$ либо задается, либо вычисляется. В таком случае становится удобнее оперировать компонентами скорости (V_r, V_z) , а не (ψ, ϕ) . Граница раздела фаз (cd) испытывает неоднородное смещение со скоростью $V_z(r, t)$ в аксиальном направлении, которое определяется по смещению изотермы $T = T_*$, а ее радиальное смещение отсутствует ($V_r = 0$). В случае равенства плотностей жидкости и твердого тела, $\rho_c = \rho_m$, скорость потока жидкости совпадает со скоростью границы раздела. В результате функция тока ψ на (cd) может быть вычислена интегрированием соответствующего выражения из (9):

$$\psi|_{(cd)} = - \int_c^d V_z r dr. \quad (16)$$

Применение процедуры (16) к неподвижной боковой стенке тигля (dh) дает $\psi|_{\Gamma} = \text{const}$, где произвольная постоянная выбирается в соответствии с (16), взятой в точке d (см. Рис. 1), а интегрирование (8) — функцию тока на верхней границе (gh): $\psi|_{\Gamma} = \text{const}$. Погруженный нагреватель Σ движется в аксиальном направлении с постоянной скоростью $V_z = U$. Интегрирование второго выражения из (9) по его горизонтальным границам приводит к выражению для функции тока:

$$\psi|_{\Gamma} = -\frac{1}{2}Ur^2, \quad (17)$$

причем $\psi|_{\Gamma}$ на боковой стенке нагревателя вычисляется также в соответствии с (17), поскольку функция тока должна быть непрерывной вдоль всей его границы. Далее по известному полному полю скорости (V_r, V_z) во всей области $M \cup M|_{\Gamma}$ завихренность на границе $\phi|_{\Gamma}$ получается непосредственно из выражения (10), которое справедливо как для самой области M , так и для ее границы $M|_{\Gamma}$.

4. Численная процедура

Сформулированная выше задача решается с помощью авторского программного пакета для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных на многомерных сетках [22]. Согласно разработанному подходу реализации задачи уравнение (11) дискретизируется методом конечных разностей по схеме центральных разностей, а граничные условия из подраздела 3.1 — по схеме направленных разностей. Уравнения переноса тепла (T) (13) и концентрации (C) (14), используются в форме (15), которая дискретизируется методом конечных объемов 1-го порядка. Применение схем дискретизации низкого порядка позволяет обойти трудности, связанные с построением неортогональных и неоднородных сеток [23]. Система нелинейных алгебраических уравнений, к которой сводится рассматриваемая задача, решается численно, методом Ньютона, с использованием полностью неявной схемы [23], а соответствующая система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) — параллельно с помощью программного пакета MUMPS.

4.1. Итерационная процедура решения уравнения для завихренности

С предыдущего временного слоя $n-1$ известно поле функции тока ψ^{n-1} во всей области $M \cup M|_{\Gamma}$. Тогда численное решение уравнения (11) будет включать следующие шаги:

- на текущем временном слое n функция тока $\psi^n|_{\Gamma}$ на границе $M|_{\Gamma}$ получается интегрированием скорости $V^n|_{\Gamma}$ на границе $M|_{\Gamma}$ (см. подраздел 3.1);
- скорость V^n в области M находится из (9), при этом $V^n|_{\Gamma}$ на границе $M|_{\Gamma}$ известна по определению;
- завихренность $\phi^n|_{\Gamma}$ на границе $M|_{\Gamma}$ рассчитывается по уже найденным значениям скорости V^n на $M \cup M|_{\Gamma}$ согласно формуле (10);
- значения ϕ^n и ψ^n в области M вычисляются по (11) и (12) соответственно.

Описанная процедура позволяет обойти вопрос явного задания граничного условия для завихренности на искривленной движущейся границе $\phi|_{\Gamma}$ в условиях, когда движение границы выражается в терминах компонент скорости (V_r, V_z).

4.2. Вычислительная сетка

Для учета деформации сетки, связанной в ходе процесса с движением погруженного нагревателя и фронта кристаллизации, производная по времени преобразуется следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial z},$$

где $\tau \equiv t$ — текущее время, $\partial z / \partial t$ — вертикальная скорость смещения узла сетки с координатой z .

Отображение физических подобластей с криволинейными границами на квадратную вычислительную сетку с единичным пространственным шагом выполняется при помощи аналитического преобразования координат [20, 21], которое позволяет учитывать искривленность границ в расчетной области (например, границы раздела фаз), а также обеспечивает сгущение сетки в зонах с большими градиентами для лучшего пространственного разрешения физических свойств. Для отображения непрерывной области длиной S с диапазоном физической координаты $p \in [0, S]$ на однородную вычислительную сетку $i \in [1, N]$ с числом узлов N применяется преобразование координат:

$$p(i) = S \frac{\xi}{\gamma + (1-\gamma)\xi}, \quad \xi = \frac{1 + \text{th}((i/N - 0.5)\delta)}{2 \cdot \text{th}(0.5\delta)}, \quad (18)$$

где i — индекс узла, (δ, γ) — эмпирически подобранные коэффициенты (δ задает необходимую степень сгущения узлов вблизи границ области за счет узлов, находящихся в ее середине, а γ указывает зону преимущественного сгущения узлов в области S).

В численной процедуре решения задачи о влиянии БМП на процесс кристаллизации (Рис. 1) применяется блочно-составная квадратная сетка с единичным пространственным шагом для подобластей кристалла Θ , камеры роста Φ и составной области над камерой роста $\Sigma \cup \Lambda \cup \Psi$. Каждая из подобластей имеет собственное преобразование координат вида (18) с соответствующими коэффициентами.

5. Анализ результатов вычислительных экспериментов

Осуществлены расчеты для оценки влияния БМП на рост монокристалла полупроводника германия, легированного галлием (Ga:Ge), получаемого методом ОТФ. Вычисления проведены на двух равномерных сетках, содержащих 50×100 и 75×150 узлов, при наборе шагов во времени для оценки устойчивости и сходимости решения. Проверка кода выполнена путем сравнения с данными из [18–20].

Рассмотрен тигель высотой 10 см и диаметром 10.2 см (4"). При вычислениях использованы два аксиальных температурных градиента: $\nabla_z T = 20$ К/см и $\nabla_z T = 30$ К/см, и три профиля (7) температуры на погруженном нагревателе: постоянная температура $T^a = T^b = 945$ К ($\Delta_h T = 0$ К); положительный градиент $T^a = 942$ К, $T^b = 945$ К ($\Delta_h T = +3$ К); отрицательный градиент $T^a = 945$ К, $T^b = 942$ К ($\Delta_h T = -3$ К). Теплофизические свойства Ga:Ge взяты из [20]. Магнитное поле имеет частоту 20 Гц и индукцию 35 мТл. Выбранная частота является достаточно низкой для обеспечения его полного проникновения в область расплава. Значение индукции кодирует направление БМП: положительная B соответствует полю, бегущему вверх, а отрицательная B — полю, бегущему вниз. Эти и другие параметры задачи и физические свойства материала представлены в таблице.

Таблица. Параметры задачи и физические свойства материала

Параметр	Обозначение	Значение	Размерность
Геометрические параметры			
Высота области	H	10	см
Радиус кристалла	R_c	5.08	см
Высота погруженного нагревателя	H_h	0.5	см
Ширина кольцевого зазора	δ	0.5	мм
Параметры процесса			
Начальная концентрация примеси в расплаве	C_0	1	масс %
Начальное положение нагревателя	$z_h(0)$	3.2	см
Внешний аксиальный градиент температуры	$\nabla_z T$	20,30	К/см
Изменение температуры на погруженном нагревателе	$\Delta_h T$	0, ± 3	К
Скорость движения нагревателя	U	$10^{-3}, 2 \cdot 10^{-3}$	см/с
Индукция БМП	B	± 35	мТл
Частота сдвига БМП	ω	20	Гц
Длина волны БМП	a	$1/R_c$	1/см
Физические свойства Ga:Ge			
Плотность	$\rho_{c,m}$	$5.5 \cdot 10^3$	кг/м ³
Температура плавления	T_*	1210	К
Теплопроводность кристалла	κ_c	17	Вт/(м·К)
Теплопроводность расплава	κ_m	39	Вт/(м·К)
Удельная теплота плавления	P	$4.6 \cdot 10^5$	Дж/кг
Теплоемкость	$C_{p,c,m}$	$3.9 \cdot 10^2$	Дж/(кг·К)
Коэффициент теплового расширения	β_T	$5 \cdot 10^{-4}$	1/К
Динамическая вязкость	μ	$7.15 \cdot 10^{-4}$	кг/(м·с)
Электропроводность расплава	σ	$2.27 \cdot 10^6$	См/м
Коэффициент сегрегации	k	0.087	–

5.1. Форма границы раздела фаз

Естественный прогиб фронта кристаллизации из расплава в кристалл определяется теплофизическими свойствами германия [14, 20]. При применении методов Бриджмена прогиб наблюдается даже в отсутствие собственно процесса кристаллизации вследствие различия теплопроводностей твердой и жидкой фаз. Движение погруженного нагревателя усиливает прогиб по причине высвобождения теплоты фазового перехода, сопровождающего процесс кристаллизации, причем данный эффект усиливается с увеличением скорости U .

Искривление фронта кристаллизации влечет за собой образование существенного радиального градиента температуры. Вблизи фронта в кристалле из-за различия коэффициентов теплового расширения материалов кристалла и тигля возникают тепловые напряжения и, как следствие, микродефекты, потенциально способные привести к его разрушению. В земных условиях в расплаве запускается механизм термогравитационной конвекции и связанный с ним массоперенос примеси вдоль фронта кристаллизации, что в конечном итоге приводит к нежелательной неоднородности распределения примеси в выращенном кристалле. Невозможность точного управления формой фронта кристаллизации является одним из основных недостатков метода Бриджмена и причиной внедрения технологии погруженного нагревателя.

На рисунках 2–4 представлены поля температуры T , функции тока ψ и концентрации примеси C для различных наборов управляющих параметров, снятые в момент времени $t = 10^3$ с после начала процесса кристаллизации. На рисунках показана интересующая часть тигля — камера роста (область между границей раздела фаз и

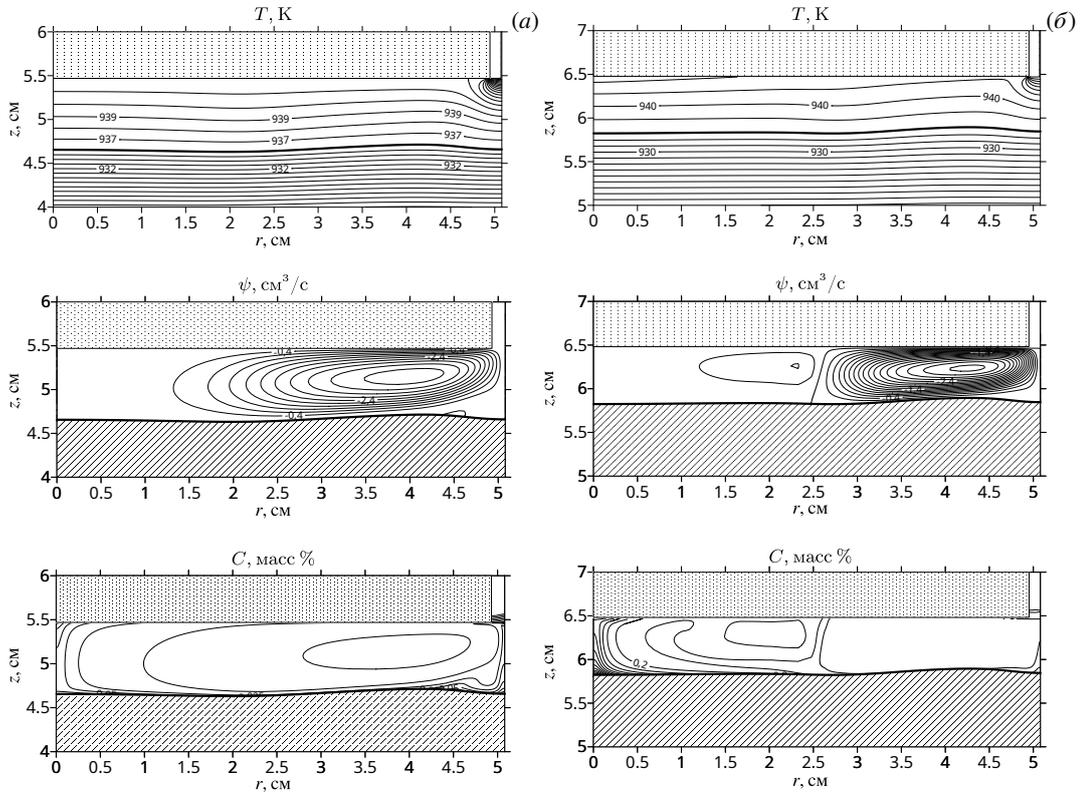


Рис. 2. Изолинии температуры, функции тока, концентрации примеси в отсутствие БМП при двух наборах параметров $U=10^{-3}$ см/с, $\nabla_z T=20$ К/см, $\Delta_h T=0$ К (а); $U=2 \cdot 10^{-3}$ см/с, $\nabla_z T=30$ К/см, $\Delta_h T=-3$ К (б)

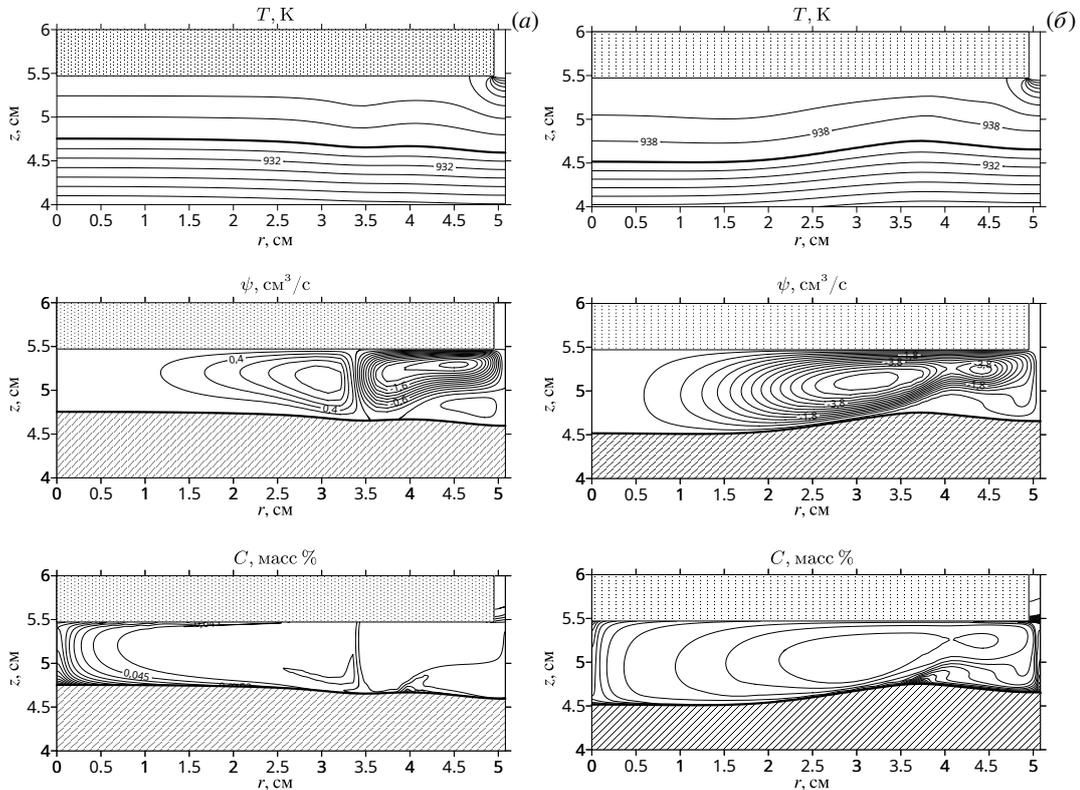


Рис. 3. Изолинии температуры, функции тока, концентрации примеси при параметрах $U=10^{-3}$ см/с, $\nabla_z T=20$ К/см, $\Delta_h T=0$ К, $|B|=35$ мТл для магнитного поля, бегущего вверх (а) и вниз (б)

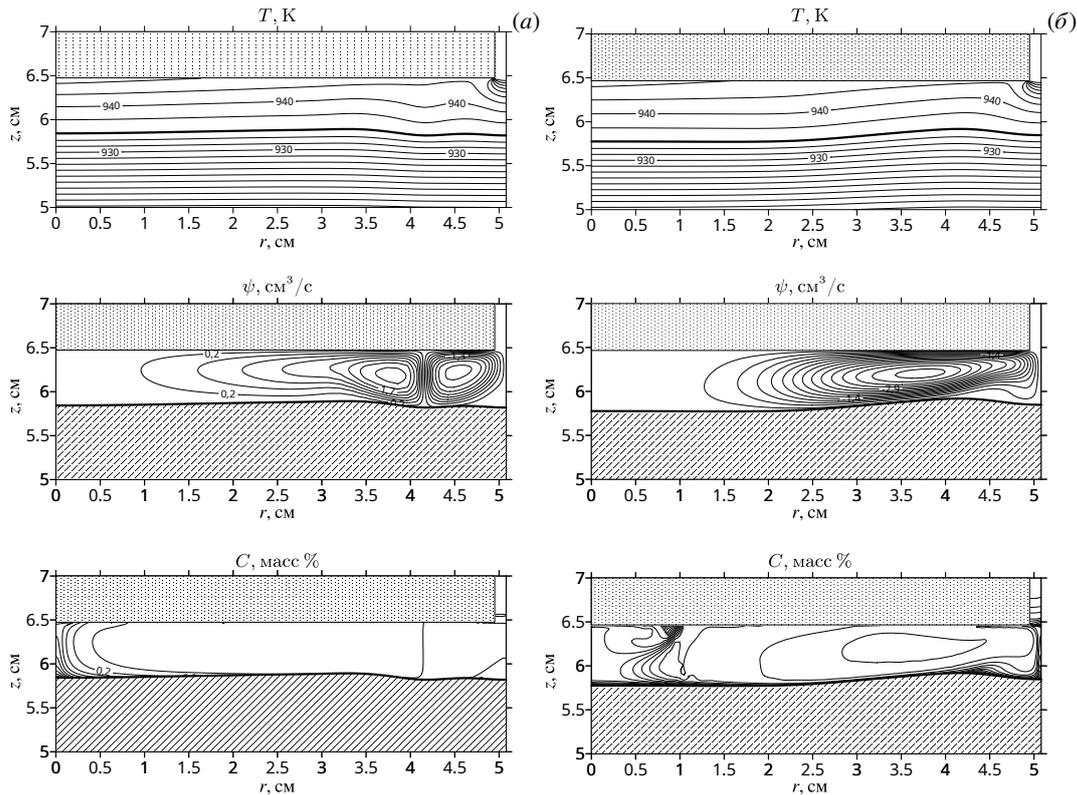


Рис. 4. Изолинии температуры, функции тока, концентрации примеси при параметрах $U = 2 \cdot 10^{-3}$ см/с, $\nabla_z T = 30$ К/см, $\Delta_h T = -3$ К для магнитного поля, бегущего вверх (а) и вниз (б)

нижней поверхностью погруженного нагревателя); остальные части (расплав над нагревателем и большая часть выращенного кристалла) на рисунках опущены.

Результаты моделирования показывают, что применение погруженного нагревателя во всех случаях позволяет достигнуть значительного уменьшения прогиба фронта, однако его форма существенно зависит не только от тепловых условий, но и от свойств приложенного БМП: граница становится S-образной (см. Рис. 3б) или даже выпуклой (Рис. 3а). Как видно из сравнения рисунков 3 и 4, средняя высота расплава (расстояние между фронтом кристаллизации и погруженным нагревателем) уменьшается с увеличением аксиального температурного градиента $\nabla_z T$ независимо от других факторов. Из-за высокой теплопроводности χ расплава форма границы раздела обуславливается не конвективным, а преимущественно диффузионным переносом, который и определяет эффективность использования погруженного нагревателя.

5.2. Картины течения

Без воздействия БМП течение расплава в камере роста является термогравитационным. Присутствие погруженного нагревателя приводит, в отличие от обычного метода Бриджмена, к значительному уменьшению радиального температурного градиента и высоты расплава. Течение в целом становится менее интенсивным, что в свою очередь ослабляет массоперенос. Независимо от аксиального температурного градиента картина течения определяется в основном профилем температуры ΔT_h на погруженном нагревателе. Наблюдаются два вида картин течения: преимущественно одиночный вихрь (см. Рис. 2а) и горизонтальная двухвихревая структура (см. Рис. 2б). Структура первого вида получается при равномерно нагретом погруженном нагревателе ($\Delta T_h = 0$ К) и нагревателе с боковым прогревом ($\Delta T_h = +3$ К), тогда как вторая характерна для нагревателя с центральным подогревом ($\Delta T_h = -3$ К). С точки зрения сегрегации примеси структура с одиночным вихрем более предпочтительна, поскольку в двухвихревой структуре внутренний вихрь (ближний к оси симметрии задачи) слабее внешнего (см. Рис. 2б).

При воздействии БМП в расплаве возникает течение с направлением, обусловленным направлением движения магнитного поля (Рис. 3): в вихрях, смещенных вправо, бегущее вверх поле вызывает течение по часовой стрелке, а бегущее вниз — течение против часовой стрелки. Интенсивность течения, порожденного БМП с индукцией 35 мТл, превышает интенсивность естественного термогравитационного течения, что делает магнитное поле эффективным инструментом управления результирующим течением расплава и, как следствие, переносом примеси. Как видно на рисунках 3а и 4а, одновихревое термогравитационное течение подавляется двухвихревым, вызванным бегущим вверх магнитным полем. Напротив, течение, которое создает бегущее вниз магнитное поле, действует согласованно с термогравитационным, вследствие чего результирующее течение существенно усиливается (см. рисунки 3б и 4б).

5.3. Распределение примеси в расплаве

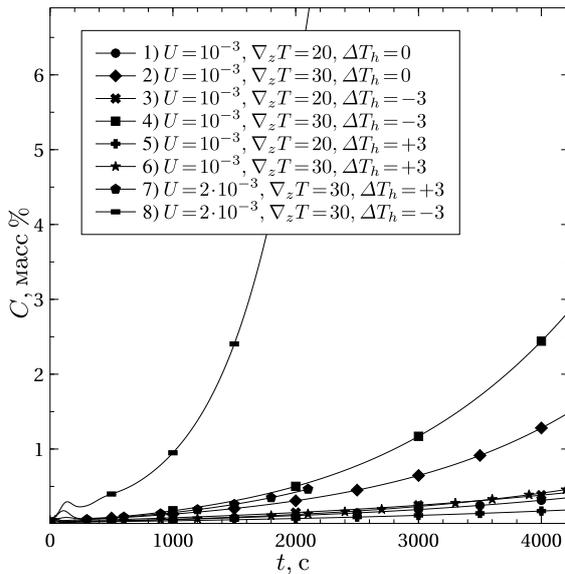


Рис. 5. Концентрация примеси на оси симметрии в зависимости от времени процесса в отсутствие БМП

температурном градиенте $\Delta T_h = +3$ К на погруженном нагревателе (кривая (6)) сегрегация меньше. Наконец, сегрегация зависит от скорости кристаллизации: увеличение скорости значительно усиливает ее, о чем свидетельствует попарное сравнение кривых на рисунке 5: (6)-й с (7)-й и (4)-й с (8)-й.

Наравне с названными выше параметрами (скоростью кристаллизации и тепловыми условиями) заметное влияние на аксиальную сегрегацию примеси оказывает БМП. Бегущее вниз магнитное поле улучшает аксиальную сегрегацию примеси по сравнению со случаем без БМП при постоянной температуре на погруженном нагревателе (см. Рис. 6а, кривая (3)), но ухудшает ее по сравнению с наилучшей ситуацией при отсутствии БМП и нагреве $\Delta T_h = +3$ К (Рис. 6а, кривая (2)). Бегущее вверх магнитное поле заметно увеличивает сегрегацию примеси по сравнению с обоими описанными случаями. При усиленном режиме (Рис. 6б) и воздействии БМП, вне зависимости от его направления, аксиальная сегрегация примеси в расплаве уменьшается.

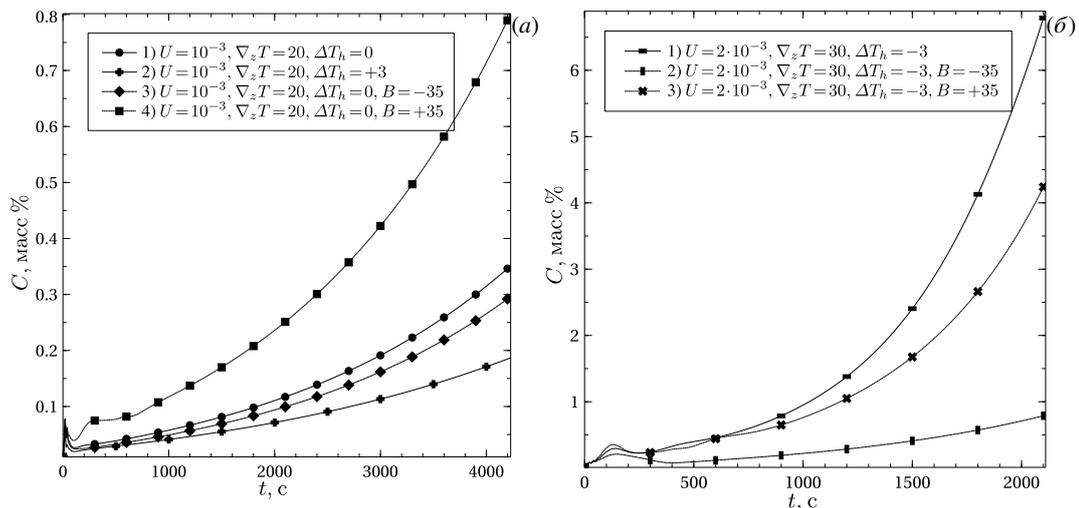


Рис. 6. Концентрация примеси на оси симметрии в зависимости от времени в присутствии БМП: ослабленный режим (малые скорость кристаллизации и аксиальный градиент температуры) (а); усиленный режим (увеличенные скорость кристаллизации – в 2 раза, и аксиальный градиент температуры – 1.5 раза) (б)

5.4. Распределение примеси в кристалле

Распределение примеси в выращенном кристалле в значительной степени определяется конвективным массопереносом в зоне расплава, прилегающей к границе раздела фаз. Радиальная сегрегация примеси, в равной степени с аксиальной, является нежелательным эффектом, который необходимо свести к минимуму. На рисунках 7–9 представлены радиальные распределения концентрации примеси, зафиксированные в выращенном кристалле на

Массоперенос примеси в расплаве, в отличие от теплопереноса, осуществляется преимущественно за счет конвекции. По рисунку 5 можно судить об аксиальной сегрегации — нежелательному, но неизбежному эффекту по причине требования однородности распределения примеси в выращенных кристаллах. Она оценивается как изменение концентрации во времени, при этом кривая (1) соответствует минимальной сегрегации, а кривая (8) — максимальной. Концентрация примеси между этими предельными случаями различается в 40 раз. Задание большего аксиального температурного градиента $\nabla_z T$ с 20 до 30 К/см негативно влияет на сегрегацию, что видно из попарного сравнения кривых: (1)-й со (2)-й и (3)-й с (4)-й.

Выше рассмотрена связь аксиальной сегрегации с приложенным аксиальным температурным градиентом. При моделировании обнаружено, что тепловые условия на погруженном нагревателе также вносят вклад в разброс результатов. Анализ кривых (2), (4) и (6) на рисунке 5 показывает, что постоянная температура на нагревателе (см. кривую (2)) не является благоприятным случаем с точки зрения сегрегации: при положительном

температурном градиенте $\Delta T_h = +3$ К на погруженном нагревателе (кривая (6)) сегрегация меньше. Наконец, сегрегация зависит от скорости кристаллизации: увеличение скорости значительно усиливает ее, о чем свидетельствует попарное сравнение кривых на рисунке 5: (6)-й с (7)-й и (4)-й с (8)-й.

Наравне с названными выше параметрами (скоростью кристаллизации и тепловыми условиями) заметное влияние на аксиальную сегрегацию примеси оказывает БМП. Бегущее вниз магнитное поле улучшает аксиальную сегрегацию примеси по сравнению со случаем без БМП при постоянной температуре на погруженном нагревателе (см. Рис. 6а, кривая (3)), но ухудшает ее по сравнению с наилучшей ситуацией при отсутствии БМП и нагреве $\Delta T_h = +3$ К (Рис. 6а, кривая (2)). Бегущее вверх магнитное поле заметно увеличивает сегрегацию примеси по сравнению с обоими описанными случаями. При усиленном режиме (Рис. 6б) и воздействии БМП, вне зависимости от его направления, аксиальная сегрегация примеси в расплаве уменьшается.

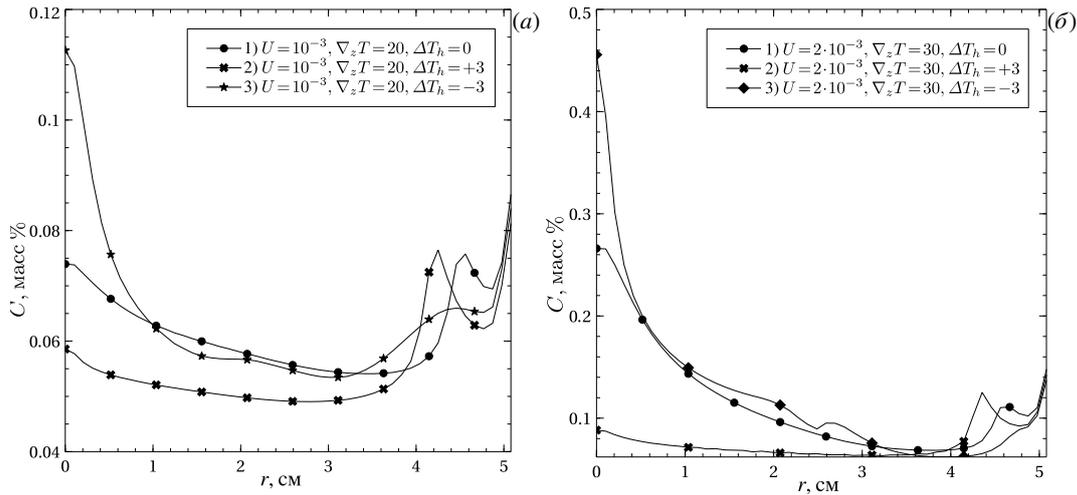


Рис. 7. Радиальное распределение примеси в выращенном кристалле для различных режимов погруженного нагревателя в отсутствие бегущего магнитного поля: ослабленный режим роста (а); усиленный режим роста (б)

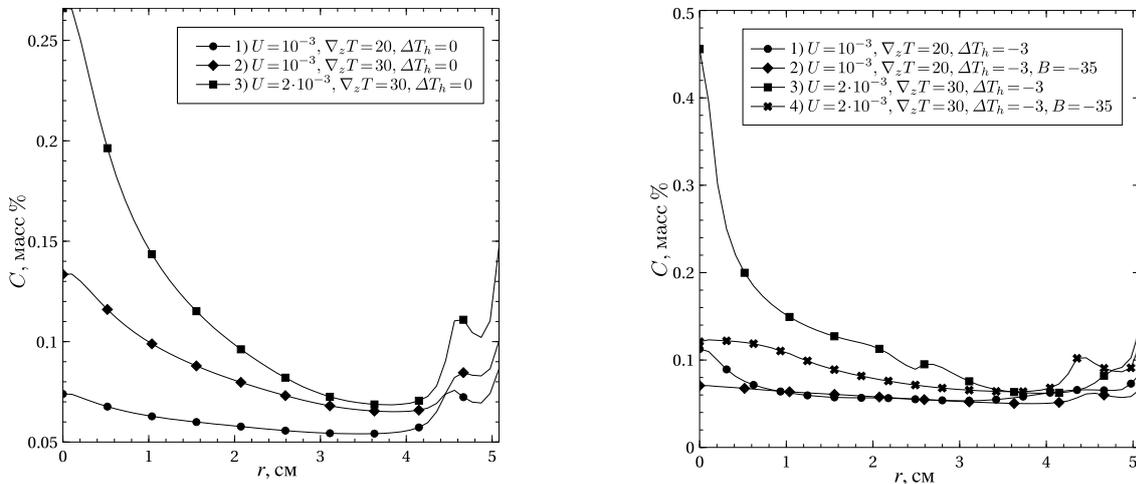


Рис. 8. Радиальная концентрация примеси в выращенном кристалле в отсутствие БМП при разных скоростях кристаллизации, аксиальных температурных градиентах и профиле на погруженном нагревателе в виде постоянной температуры $\Delta T_h = 0$

Рис. 9. Радиальная концентрация примеси в выращенном кристалле при воздействии БМП и разных аксиальных температурных градиентах и профилях температуры на погруженном нагревателе

высоте $z = 5$ см, при нескольких наборах параметров задачи. Из рисунка 8 видно, что увеличение как приложенного аксиального температурного градиента $\nabla_z T$, так и скорости движения нагревателя U оказывает заметное негативное влияние на радиальную сегрегацию. При этом основным источником проблем служит накопление примеси в области, прилежащей к оси симметрии задачи, вследствие недостаточного перераспределения примеси в расплаве, вытесняемой в него растущим кристаллом. Ослабленный режим роста, характеризуемый $\nabla_z T = 20$ К/см и $U = 10^{-3}$ см/с, показывает, что постоянная температура на погруженном нагревателе в целом способствует однородности радиального распределения примеси (Рис. 7а, кривая (1)). Однако усиление режима роста до $\nabla_z T = 30$ К/см и $U = 2 \cdot 10^{-3}$ см/с меняет ситуацию: делает боковой нагрев погруженного нагревателя $\Delta T_h = +3$ К существенно более выгодным (Рис. 7а, кривая (2)). Как и в случае аксиальной сегрегации примеси, бегущее вниз магнитное поле, с точки зрения радиальной однородности примеси, оказывается более благоприятным по сравнению с полем, бегущим вверх. Влияние последнего негативно во всех рассмотренных случаях. Степень влияния бегущего вниз магнитного поля с индукцией 35 мТл варьируется в зависимости от условий роста от незначительной при ослабленном режиме роста (см. Рис. 9 (1,2)) до существенной в случае усиленного режима (см. Рис. 9 (3,4)). Положительный эффект БМП на радиальную сегрегацию можно объяснить интенсификацией течения расплава вблизи оси симметрии и последующей усиленной эвакуацией избыточного количества примеси, вытесняемой фронтом кристаллизации в силу эффекта сегрегации в процессе роста.

6. Заключение

Представлены результаты численного моделирования процесса роста монокристалла германия, легированного галлием, методом осевого теплового потока на фронте кристаллизации при воздействии однородного БМП для различных скоростей кристаллизации и условий нагрева, создаваемых нагревателями: погруженным в расплав и внешними (выравнивающими). Особое внимание уделено вопросам однородности распределения примеси как одного из наиболее важных факторов, определяющих качество получаемых кристаллов. Введение в процесс направленной кристаллизации погруженного нагревателя ставило своей целью более точное, по сравнению с методом Бриджмена, управление тепло- и массообменом.

В присутствии погруженного нагревателя меняется тепловой фон, а следовательно, форма и величина прогиба фронта кристаллизации, структура и интенсивность терморавитационного течения расплава. Наблюдаются две картины течения — одно- и двухвихревая. С точки зрения однородности распределения примеси предпочтительна структура течения с одним вихрем. С введением в рассмотрение БМП термогравитационное течение преобразуется в результирующее течение, учитывающее вклад, генерируемый полем. При определенной интенсивности БМП генерируемое им течение становится преобладающим. Направление БМП однозначно определяет направление создаваемого им течения. Бегущее вниз магнитное поле оказывает благоприятное влияние как на аксиальную, так и на радиальную однородность примеси в кристаллах; в рассмотренной задаче достигнуто четырехкратное уменьшение радиальной сегрегации примеси в усиленном режиме роста кристалла за счет расширения зоны конвективного переноса вблизи оси симметрии и устранению в ней накопления примеси. Более того, положительный эффект от БМП усиливается с увеличением скорости кристаллизации.

Результаты выполненного численного моделирования демонстрируют эффективность БМП как инструмента управления течением расплава в методе погруженного нагревателя. БМП позволяет уменьшать аксиальную и радиальную неоднородность примеси в процессе выращивания полупроводниковых кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 121031700169-1).

Литература

1. *Lan C.W.* Recent progress of crystal growth modeling and growth control // *Chemical Engineering Science*. 2004. Vol. 59. P. 1437–1457. DOI: 10.1016/j.ces.2004.01.010
2. *Golyshev V.D., Gonik M.A.* A temperature field investigation in case of crystal growth from the melt with a plane interface on exact determination thermal conditions // *Crystal Properties and Preparation*. 1991. Vol. 36–38. P. 623–630.
3. *Bykova S.V., Golyshev V.D., Gonik M.A., Tsvetovskiy V.B., Frjazinov I.V., Marchenko M.P.* Features of mass transfer for the laminar melt flow along the interface // *Journal of Crystal Growth*. 2002. Vol. 237–239. P. 1886–1891. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)02211-4
4. *Ostrogorsky A.G.* Single-crystal growth by the submerged heater method // *Measurement Science and Technology*. 1990. Vol. 1, no. 5. P. 463–464. DOI: 10.1088/0957-0233/1/5/017
5. *Zharikov E.V., Prihod'ko L.V., Storozhev N.R.* Fluid flow formation resulting from forced vibration of a growing crystal // *Journal of Crystal Growth*. 1990. Vol. 99. P. 910–914. DOI: 10.1016/S0022-0248(08)80051-6
6. *Lyubimov D., Lyubimova T., Roux B.* Mechanisms of vibrational control of heat transfer in a liquid bridge // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1997. Vol. 40, no. 17. P. 4031–4042. DOI: 10.1016/S0017-9310(97)00053-7
7. *Yu W.C., Chen Z.B., Hsu W.T., Roux B., Lyubimova T.P., Lan C.W.* Reversing radial segregation and suppressing morphological instability during Bridgman crystal growth by angular vibration // *Journal of Crystal Growth*. 2004. Vol. 271, no. 3/4. P. 474–480. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.07.080
8. *Любимов Д.В., Любимова Т.П., Иванцов А.О.* Влияние вибраций на гидродинамику расплава при выращивании кристаллов бесконтактным методом Бриджмена // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2011. Т. 4, № 4. С. 52–62. DOI: 10.7242/1999-6691/2011.4.4.39
9. *Lyubimova T.P., Lyubimov D.V., Ivantsov A.O.* The influence of vibrations on melt flows during detached Bridgman crystal growth // *Journal of Crystal Growth*. 2014. Vol. 385. P. 77–81. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.05.043
10. *Scheel H.J., Schulz-Dubois E.O.* Flux growth of large crystals by accelerated crucible-rotation technique // *Journal of Crystal Growth*. 1971. Vol. 8. P. 304–306. DOI: 10.1016/0022-0248(71)90078-9
11. *Liu Y.C., Roux B., Lan C.W.* Effects of cycle patterns of accelerated crucible rotation technique (ACRT) on the flows, interface, and segregation in vertical Bridgman crystal growth // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2007. Vol. 50. P. 5031–5040. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.09.005
12. *Wang L.C., Liu Y.C., Yu W.C., Roux B., Lyubimova T.P., Lan C.W.* Segregation control of vertical Bridgman growth of Ga-doped germanium crystals by accelerated crucible rotation: ACRT versus angular vibration // *Journal of Crystal Growth*. 2009. Vol. 311, no. 3. P. 684–687. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.09.087
13. *Dold P., Benz K.W.* Rotating magnetic fields: Fluid flow and crystal growth applications // *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 1999. Vol. 38, no. 1–4. P. 39–58. DOI: 10.1016/S0960-8974(99)00007-8

14. Lyubimova T.P., Croell A., Dold P., Khlybov O.A., Fayzrakhmanova I.S. Time-dependent magnetic field influence on GaAs crystal growth by vertical Bridgman method // Journal of Crystal Growth. 2004. Vol. 266, no. 1–3. P. 404–410. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.02.071
15. 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. Vol. 310. P. 1298–1306. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.11.036
16. Lyubimova T.P., Ivantsov A.O., Khlybov O., Gonik M.A., Zaidat K., Duffar T. Influence of submerged heating on vertical Bridgman crystal growth of silicon under travelling magnetic field // Journal of Crystal Growth. 2020. Vol. 531. P. 125340. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125340
17. Pätzold O., Niemiets K., Lantzsch R., Galindo V., Grants I., Bellmann M., Gerbeth G. The use of magnetic fields in vertical Bridgman/Gradient Freeze-type crystal growth // The European Physical Journal Special Topics. 2013. Vol. 220. P. 243–257. DOI: 10.1140/epjst/e2013-01811-6
18. Mazuruk K. Control of melt convection using traveling magnetic fields // Advances in Space Research. 2002. Vol. 29, no. 4. P. 541–548. DOI: 10.1016/S0273-1177(01)00663-9
19. Volz M.P., Mazuruk K. Lorenz body force induced by travelling magnetic fields // Magnetohydrodynamics. 2004. Vol. 40, no. 2. P. 117–126.
20. Lan C.W., Ting C.C. Numerical investigation on the batch characteristics of liquid encapsulated vertical Bridgman crystal growth // Journal of Crystal Growth. 1995. Vol. 149, no. 3/4. P. 175–186. DOI: 10.1016/0022-0248(95)00009-7
21. 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. Vol. 131. P. 191–207. DOI: 10.1016/0045-7825(95)00973-6
22. Khlybov O.A. Application of the automatic code generation and symbolic computation techniques to numerical solution of PDE problems // Journal of Physics: Conference Series. 2022. Vol. 2317. DOI: 10.1088/1742-6596/2317/1/012010
23. 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. Vol. 19, no. 1. P. 41–65. DOI: 10.1002/flid.1650190105

Сведения об авторах:

Хлыбов Олег Анатольевич (корр.), кфмн, нс, Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614018, Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; e-mail: okhlybov@yandex.ru; ORCID: 0009-0007-3262-2938

Любимова Татьяна Петровна, дфмн, зав. лаб., ИМСС УрО РАН; e-mail: lyubimova@mail.ru; ORCID: 0000-0002-8212-2890

Research article

Effect of a traveling magnetic field on heat and mass transfer during submerged heater crystal growth

O.A. Khlybov¹, T.P. Lyubimova^{1,2}

¹ Institute of continuous media mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation

² Perm state university, Perm, Russian Federation

The effect of traveling magnetic field (TMF) on heat and mass transfer during the 4" Ga:Ge semiconductor single crystal growth by the Axial Heat Processing technique has been studied numerically. The heat and mass transfer processes in the composite multiphase system consisting of crystal, melt, crucible, and submerged heater were analyzed in an axisymmetric unsteady formulation, with the instantaneous position and shape of the crystallization front being unknown and determined during the simulation. The influence of the TMF is accounted for through an analytically defined Lorentz force applied for the case of electrically insulating boundaries. The flow patterns and dopant distribution in the melt and crystal were determined for various temperature profiles applied to the submerged heater, axial temperature gradients, and at different directions and induction values of the applied TMF. It was found that the temperature boundary conditions applied to the submerged heater significantly affect mass transfer in the melt and, consequently, dopant segregation in the grown crystal. The downward TMF improves the axial and radial dopant homogeneity in the grown crystal. Within a certain range of intensities, the TMF reduced the intensity of flow driven by the radial temperature gradient at the submerged heater and the curvature of the crystallization front. Moreover, the positive effect of the TMF increased with higher growth rates. In the investigated configuration, a fourfold reduction in radial dopant segregation was achieved under stringent growth conditions by expanding the convective dopant transfer zone toward the symmetry axis through the TMF, thereby eliminating the accumulation of dopant concentration in this region.

Keywords: submerged heater, Bridgman method, traveling magnetic field, numerical simulation

Received: 17.09.2025 / **Published online:** 10.12.2025

References

1. *Lan C.W.* Recent progress of crystal growth modeling and growth control. *Chemical Engineering Science*. 2004. Vol. 59. P. 1437–1457. DOI: 10.1016/j.ces.2004.01.010
2. *Golyshev V.D., Gonik M.A.* A temperature field investigation in case of crystal growth from the melt with a plane interface on exact determination thermal conditions. *Crystal Properties and Preparation*. 1991. Vol. 36–38. P. 623–630.
3. *Bykova S.V., Golyshev V.D., Gonik M.A., Tsvetovsky V.B., Frjazinov I.V., Marchenko M.P.* Features of mass transfer for the laminar melt flow along the interface. *Journal of Crystal Growth*. 2002. Vol. 237–239. P. 1886–1891. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)02211-4
4. *Ostrogorsky A.G.* Single-crystal growth by the submerged heater method. *Measurement Science and Technology*. 1990. Vol. 1, no. 5. P. 463–464. DOI: 10.1088/0957-0233/1/5/017
5. *Zharikov E.V., Prihod'ko L.V., Storozhev N.R.* Fluid flow formation resulting from forced vibration of a growing crystal. *Journal of Crystal Growth*. 1990. Vol. 99. P. 910–914. DOI: 10.1016/S0022-0248(08)80051-6
6. *Lyubimov D., Lyubimova T., Roux B.* Mechanisms of vibrational control of heat transfer in a liquid bridge. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1997. Vol. 40, no. 17. P. 4031–4042. DOI: 10.1016/S0017-9310(97)00053-7
7. *Yu W.C., Chen Z.B., Hsu W.T., Roux B., Lyubimova T.P., Lan C.W.* Reversing radial segregation and suppressing morphological instability during Bridgman crystal growth by angular vibration. *Journal of Crystal Growth*. 2004. Vol. 271, no. 3/4. P. 474–480. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.07.080
8. *Lyubimov D.V., Lyubimova T.P., Ivantsov A.O.* Influence of vibrations on hydrodynamics of melt during Bridgman crystal growth. *Computational Continuum Mechanics*. 2011. Vol. 4, no. 4. P. 52–62. DOI: 10.7242/1999-6691/2011.4.4.39
9. *Lyubimova T.P., Lyubimov D.V., Ivantsov A.O.* The influence of vibrations on melt flows during detached Bridgman crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 2014. Vol. 385. P. 77–81. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.05.043
10. *Scheel H.J., Schulz-Dubois E.O.* Flux growth of large crystals by accelerated crucible-rotation technique. *Journal of Crystal Growth*. 1971. Vol. 8. P. 304–306. DOI: 10.1016/0022-0248(71)90078-9
11. *Liu Y.C., Roux B., Lan C.W.* Effects of cycle patterns of accelerated crucible rotation technique (ACRT) on the flows, interface, and segregation in vertical Bridgman crystal growth. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2007. Vol. 50. P. 5031–5040. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.09.005
12. *Wang L.C., Liu Y.C., Yu W.C., Roux B., Lyubimova T.P., Lan C.W.* Segregation control of vertical Bridgman growth of Ga-doped germanium crystals by accelerated crucible rotation: ACRT versus angular vibration. *Journal of Crystal Growth*. 2009. Vol. 311, no. 3. P. 684–687. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.09.087
13. *Dold P., Benz K.W.* Rotating magnetic fields: Fluid flow and crystal growth applications. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 1999. Vol. 38, no. 1–4. P. 39–58. DOI: 10.1016/S0960-8974(99)00007-8
14. *Lyubimova T.P., Croell A., Dold P., Khlybov O.A., Fayzrakhmanova I.S.* Time-dependent magnetic field influence on GaAs crystal growth by vertical Bridgman method. *Journal of Crystal Growth*. 2004. Vol. 266, no. 1–3. P. 404–410. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.02.071
15. *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. Vol. 310. P. 1298–1306. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.11.036
16. *Lyubimova T.P., Ivantsov A.O., Khlybov O., Gonik M.A., Zaidat K., Duffar T.* Influence of submerged heating on vertical Bridgman crystal growth of silicon under travelling magnetic field. *Journal of Crystal Growth*. 2020. Vol. 531. P. 125340. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125340
17. *Pätzold O., Niemietz K., Lantzsch R., Galindo V., Grants I., Bellmann M., Gerbeth G.* The use of magnetic fields in vertical Bridgman/Gradient Freeze-type crystal growth. *The European Physical Journal Special Topics*. 2013. Vol. 220. P. 243–257. DOI: 10.1140/epjst/e2013-01811-6
18. *Mazuruk K.* Control of melt convection using traveling magnetic fields. *Advances in Space Research*. 2002. Vol. 29, no. 4. P. 541–548. DOI: 10.1016/S0273-1177(01)00663-9
19. *Volz M.P., Mazuruk K.* Lorenz body force induced by travelling magnetic fields. *Magneto hydrodynamics*. 2004. Vol. 40, no. 2. P. 117–126.
20. *Lan C.W., Ting C.C.* Numerical investigation on the batch characteristics of liquid encapsulated vertical Bridgman crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 1995. Vol. 149, no. 3/4. P. 175–186. DOI: 10.1016/0022-0248(95)00009-7
21. *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. Vol. 131. P. 191–207. DOI: 10.1016/0045-7825(95)00973-6
22. *Khlybov O.A.* Application of the automatic code generation and symbolic computation techniques to numerical solution of PDE problems. *Journal of Physics: Conference Series*. 2022. Vol. 2317. DOI: 10.1088/1742-6596/2317/1/012010
23. *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. Vol. 19, no. 1. P. 41–65. DOI: 10.1002/flid.1650190105