

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕСС ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ ВЕРТИКАЛЬНЫМ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

Т.П. Любимова, И.С. Файзрахманова

*Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, 614013, Россия*

В работе исследовано влияние однородного высокочастотного осевого магнитного поля на процесс выращивания полупроводникового монокристалла. Описан алгоритм моделирования нестационарного процесса выращивания кристалла вертикальным методом Бриджмена в условиях земной гравитации. В качестве примера рассмотрен полупроводниковый материал германий, легированный галлием, выращиваемый в графитной ампуле конечной толщины, имеющей плоское дно. Распределение температуры вблизи внешней стенки ампулы задавалось тангенциальной функцией. Моделировалось влияние осевого высокочастотного магнитного поля на течение и тепло-, массоперенос в расплаве, а также на распределение примеси в выращенном кристалле. Расчеты показали, что осевое высокочастотное магнитное поле подавляет конвективные течения, прогиб фронта увеличивается с увеличением интенсивности магнитного поля, а перемешивание расплава ослабевает.

## NUMERICAL MODELING OF MAGNETIC FIELD INFLUENCE ON VERTICAL BRIDGMAN CRYSTAL GROWTH

T.P. Lyubimova and I.S. Fayzrakhmanova

*Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, 614013, Russia*

This paper is concerned with the influence of a homogeneous high frequency magnetic field on the growth of semiconductor monocrystals. An algorithm for modeling the unsteady process of crystal growth by the vertical Bridgman method under terrestrial conditions is presented. As an example, a germanium doped gallium semiconductor material growing in a graphite ampoule with a flat bottom and of finite thickness is considered. Thermal distribution near the outer lateral wall of the ampoule is specified as a tangent function. The influence of the axial high frequency magnetic field on the flow and heat/mass transfer in the melt and on the solute distribution in the grown crystal is modeled. Calculations show that the high frequency magnetic field suppresses convective flows, the flexure of the crystallization front increases with increasing magnetic field intensity, and the melt mixing becomes weaker.

### 1. Введение

Работа посвящена численному исследованию влияния однородного осевого высокочастотного магнитного поля на течение и тепло-, массообмен при выращивании кристаллов. Моделировался нестационарный процесс выращивания полупроводникового монокристалла вертикальным методом Бриджмена в земных условиях. Задача решалась в сопряженной постановке, с учетом теплообмена в твердой фазе и материале ампулы. В качестве примера рассмотрена задача о выращивании монокристалла германия, легированного галлием.

### 2. Постановка задачи

Имеется цилиндрическая область (Рис. 1), которая полностью заполнена материалом, находящимся в двух фазах: расплав — в верхней части,

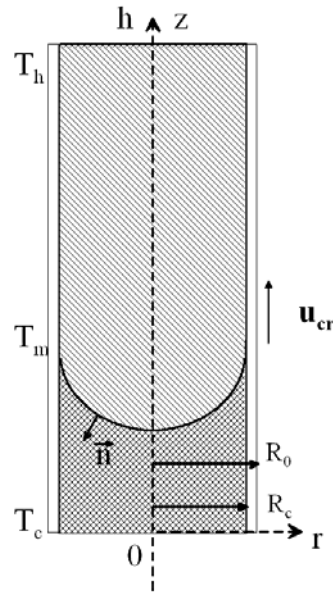


Рис. 1. Схема метода Бриджмена

кристалл — в нижней части. Высота ампулы —  $h$ , внешний и внутренний радиусы —  $R_0$ ,  $R_c$ . Температура на крышке ампулы —  $T_h$ , на дне —  $T_c$ ; температура на поверхности раздела расплав — кристалл равна температуре плавления  $T_m$ .

Выращивание кристаллов методом Бриджмена — принципиально динамический процесс: движется нагреватель относительно ампулы со скоростью  $u_{cr}$ , перемещается и искривляется граница раздела расплав — кристалл (фронт кристаллизации). Поэтому адекватное моделирование такого процесса может быть проведено только в рамках нестационарного подхода.

Кристаллизующий расплав содержит примесь, и основной интерес представляет ее распределение в выращенном монокристалле. Начальное распределение примеси в поликристаллической заготовке считается однородным, затем, в процессе роста монокристалла, примесь переносится течением. Кроме того, из-за сегрегации на фронте кристаллизации может происходить как обеднение, так и обогащение расплава примесью (в зависимости от величины коэффициента сегрегации) [1]. В результате в выращенном кристалле примесь распределяется неоднородным образом.

Полагается, что расплав ведет себя как ньютоновская изотермически несжимаемая жидкость. Это позволяет использовать для описания его движения уравнения свободной конвекции в приближении Буссинеска с дополнительным слагаемым, описывающим влияние внешнего магнитного поля.

Для типичных материалов-полупроводников, выращиваемых методом плавающей зоны, магнитное число Рейнольдса  $Re_m = \mu_0 \sigma_{el} u_{cr} R$  не превышает  $10^{-3}$ , поэтому индуцированные магнитные поля не принимаются во внимание, а индуцированные электрические поля выражаются через градиент потенциала электрического поля. Сила Лоренца в уравнении движения записывается следующим образом  $[\vec{j} \times \vec{H}](\rho c)^{-1}$ , а

плотность тока имеет вид  $\vec{j} = -\frac{\sigma}{2c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \times \vec{r} + \frac{\sigma}{c} \vec{v} \times \vec{H} + \nabla \Phi$ . В результате выделения из

силы Лоренца градиентной части и включения её в выражение для давления получается

$\vec{F}_L = -\frac{\sigma H^2}{\rho c^2} \vec{v}_\perp - \frac{H}{\rho c} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \vec{e}_\varphi$ . Здесь  $\vec{v}_\perp$  — поперечная скорость, то есть радиальная и

азимутальная компоненты скорости. Пусть интенсивность переменного магнитного поля изменяется по гармоническому закону. В задачах о влиянии переменного магнитного поля рассматриваются частоты порядка 1 кГц. В такой ситуации разумно произвести осреднение. Следует отметить также, что в данной работе не учитывается джоулев разогрев, так как в работе [5] показано, что даже для частот 10 кГц он не существен. Окончательно, после осреднения, сила Лоренца в проекциях на оси координат приводится к виду:

$$F_z = 0, \quad F_r = -\frac{\sigma H_0^2}{2\rho c^2} v_r,$$

где  $H_0$  — амплитуда поля;  $\sigma_f$  — электропроводность расплава;  $c$  — скорость света. Далее, решается осесимметричная задача, то есть азимутальное течение не рассматривается. В этом случае для потенциала получается уравнение Лапласа с граничными условиями Неймана; решением его является константа, которую, без потери общности, можно положить равной нулю.

Для температуры рассматривается сопряженная задача, включающая решение уравнения теплопроводности в трех областях: расплаве, кристалле и ампуле. Уравнение концентрации распространяется только на область расплава, поскольку коэффициент диффузии примеси в твердой фазе для типичных выращиваемых монокристаллов полупроводников пренебрежимо мал, то есть диффузия примеси в монокристалле практически отсутствует. Концентрационная конвекция также не учитывается, так как материалы слабо легированы примесью.

Задача записывается в цилиндрических координатах и решается в осесимметричной постановке в терминах функции тока  $\psi$ , завихренности  $\varphi$ , температуры  $T$  и концентрации  $C$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \frac{1}{r\rho_m} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \nu \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} - \frac{\varphi}{r^2} \right) - \\ &- g_0 \beta_T \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\sigma_f H_0^2}{\rho_f^2 c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} &= \rho_f r \varphi, \\ \frac{\partial T_f}{\partial t} &= \frac{1}{r\rho_f} \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial T_f}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial T_f}{\partial z} \right) + \chi_f \left( \frac{\partial^2 T_f}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_f}{\partial r} \right), \\ \frac{\partial T_i}{\partial t} &= \chi_i \left( \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) \quad (i = s, a), \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= \frac{1}{r\rho_f} \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial C}{\partial z} \right) + D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right), \end{aligned}$$

где для функции тока и завихренности используются выражения:

$$v_r = \frac{1}{r\rho_m} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{1}{r\rho_m} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad \varphi = \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r}.$$

## 2.1. Граничные условия для скорости

Граничные условия для скорости на фронте кристаллизации  $z = \zeta(r, t)$  записываются в виде:

$$\vec{v} \cdot \vec{\tau} = 0, \quad (\vec{v} \cdot \vec{n}) = \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} \zeta_t (\vec{e}_z \cdot \vec{n}),$$

где  $(\vec{e}_z \cdot \vec{n}) = 1 / \sqrt{1 + (\nabla \zeta)^2}$ .

Для рассматриваемого материала GeGa плотности кристалла  $\rho_s$  и расплава  $\rho_f$  практически совпадают [3], и условие для нормальной компоненты скорости на фронте кристаллизации упрощается:  $\vec{v} \cdot \vec{n} = 0$ .

На верхней границе расплава  $z = h$  и на границе расплава с внутренней боковой стенкой ампулы  $r = R_c$  ставятся условия прилипания: равенство нулю радиальной и аксиальной компонент скорости. В терминах функции тока это условия вида:  $\psi|_{\Gamma} = 0$ ,

$\left. \frac{\partial \psi}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0$ . Для вычисления завихренности на этих границах используется формула

Тома [2]. На оси симметрии  $r = 0$  полагается  $v_r = \frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$ , или  $\psi = 0$ ,  $\varphi = 0$  (в терминах функции тока и завихренности).

## 2.2. Тепловые граничные условия

На внешней вертикальной стенке ампулы  $r = R_0$  считается выполненным линейный закон теплоотдачи:

$$\kappa_a \frac{\partial T_a}{\partial r} = -h_a (T_a - T_{out}(z, t)),$$

где  $h_a$  — коэффициент теплопередачи материала ампулы;  $\kappa_a$  — коэффициент теплопроводности ампулы;  $T_{out}(z, t)$  — зависящее от времени внешнее распределение температуры вблизи ампулы, создаваемое нагревателем.

Для вычисления распределения температуры используется выражение:

$$T_{out}(z, t) = T_m + \frac{\Delta T}{2} \frac{\text{th}(2(z - z_{int}(t)))}{\text{th} L}. \quad (1)$$

Здесь  $z_{int}(t)$  — линейно зависящая от времени осевая координата фронта кристаллизации на боковой стенке ампулы  $z_{int}(t) = z_{int0} + V_{g0}t$ ;  $z_{int0}$  — начальная осевая координата плоского фронта;  $\Delta T$  — разность температур крышки и дна ампулы  $\Delta T = T_h - T_c$ .

Для внутренней стенки ампулы  $r = R_c$  полагается, что кристаллизующее вещество и материал ампулы находятся в идеальном тепловом контакте, но потоки тепла через вертикальную границу вещества с ампулой непрерывны:

$$\kappa_f \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_f = \kappa_a \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_a; \quad T_f = T_a; \quad \kappa_s \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_s = \kappa_a \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_a; \quad T_s = T_a.$$

На фронте кристаллизации  $z = \zeta(r, t)$  ставится условие баланса потоков тепла, кроме того, считается, что температуры жидкой и твердой фаз на фронте совпадают и равны температуре плавления вещества:

$$\kappa_f \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_f - \kappa_s \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_s = \rho_s \Delta H \frac{\zeta_t}{\sqrt{1 + (\nabla \zeta)^2}}, \quad T_f = T_s = T_m,$$

где  $\kappa_s$  и  $\kappa_f$  — коэффициенты теплопроводности кристалла и расплава;  $\Delta H$  — удельная теплота плавления. Зависимость температуры плавления от концентрации примеси не учитывается, так как для рассматриваемого материала она практически отсутствует.

Температура на верхней границе расплава и на дне ампулы фиксируются и считаются равными  $T_f = T_h$  и  $T_s = T_c$  соответственно.

На оси симметрии  $r = 0$  предполагается отсутствие теплообмена:

$$\frac{\partial T_f}{\partial r} = 0; \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0.$$

## 2.2. Граничные условия для концентрации примеси

Для концентрации примеси на верхней границе расплава  $z = h$ , на оси симметрии  $r = 0$  и на границе расплава с внутренней боковой стенкой ампулы  $r = R_c$  ставится условие отсутствия потока вещества:

$$\frac{\partial C}{\partial n} = 0.$$

На фронте кристаллизации  $z = \zeta(r, t)$  считается выполненным условие баланса вещества:

$$\frac{\partial C}{\partial n} = \frac{(1 - k_0)}{D} \frac{\zeta_t}{\sqrt{1 + (\nabla \zeta)^2}} C,$$

где  $k_0$  — коэффициент сегрегации примеси;  $D$  — коэффициент диффузии примеси в расплаве.

## 3. Метод решения. Преобразование координат

Расчеты для рассматриваемой задачи осложняются наличием искривляющегося движущегося фронта. Ситуация упрощается преобразованием координат.

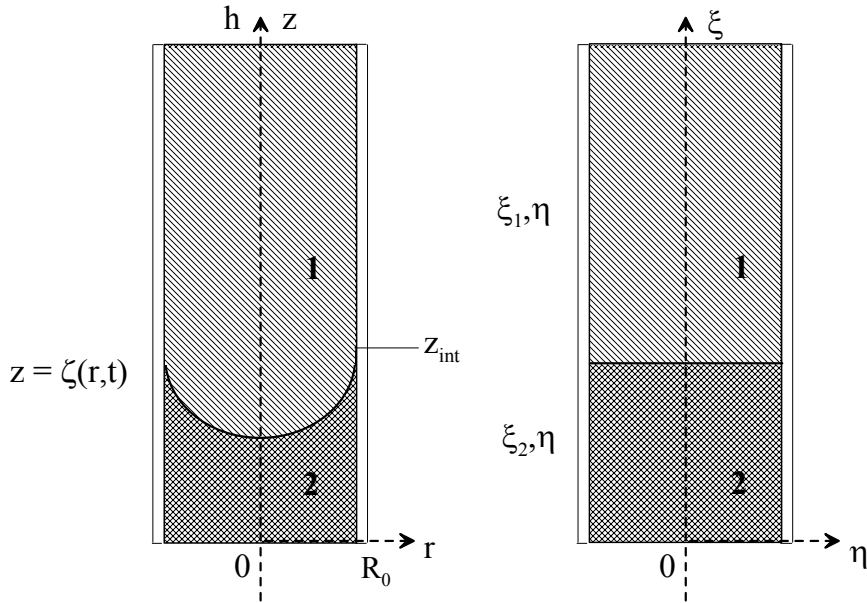


Рис. 2. Преобразование координат. 1 — область расплава; 2 — область кристалла

На рисунке 2 приводится схема преобразования координат:  $r, z$  — физические координаты;  $\xi_1, \xi_2, \eta$  вычислительные прямоугольные ортогональные координаты ( $\xi_1$  — вертикальная координата в расплаве,  $\xi_2$  — вертикальная координата в кристалле).

Физические и вычислительные координаты связываются аналитически следующими формулами:  $\xi_1 = h + a(z - h)$ , где  $a = (z_{\text{int}} - h) / (\zeta - h)$ ;  $\xi_2 = z_{\text{int}} z / \zeta$ ;  $\eta = r$ . В результате криволинейная область с кривым фронтом  $\zeta(r, t)$ ,  $0 \leq r \leq R_0$ ,  $0 \leq z \leq \zeta(r, t)$ ,  $\zeta(r, t) \leq z \leq h$  переходит в прямоугольную область с неподвижным плоским фронтом  $0 \leq \eta \leq R_0$ ,  $z_{\text{int}} \leq \xi_1 \leq h$ ,  $0 \leq \xi_2 < z_{\text{int}}$ . При этом производные по координатам и времени преобразуются следующим образом в кристалле и расплаве:

в кристалле

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)_s &= \frac{z_{\text{int}}}{\zeta} \frac{\partial}{\partial \xi_2}; \\ \left( \frac{\partial}{\partial r} \right)_s &= \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{1}{\zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial r} \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2}; \\ \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_s &= \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{\zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial t} \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2}; \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)_s &= \frac{z_{\text{int}}^2}{\zeta^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2}; \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right)_s &= \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - 2 \frac{1}{\zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial r} \xi_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_2 \partial \eta} - \frac{1}{\zeta} \frac{\partial^2 \zeta}{\partial r^2} \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2} + \frac{1}{\zeta^2} \left( \frac{\partial \zeta}{\partial r} \right)^2 \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2} + \\ &+ \frac{1}{\zeta^2} \left( \frac{\partial \zeta}{\partial r} \right)^2 \xi_2^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + \frac{1}{\zeta^2} \left( \frac{\partial \zeta}{\partial r} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi_2}; \end{aligned}$$

в расплаве:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)_f &= a \frac{\partial}{\partial \xi_1}; \\ \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)_f &= \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{(\xi_1 - h)}{(\zeta - h)} \frac{\partial \zeta}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \xi_1}; \\ \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_f &= \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{(\xi_1 - h)}{(\zeta - h)} \frac{\partial \zeta}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi_1}; \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)_f &= a^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2}; \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)_f &= \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - 2 \frac{(\xi_1 - h)}{(\zeta - h)} \frac{\partial \zeta}{\partial r} \frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \eta} - \frac{(\xi_1 - h)}{(\zeta - h)} \frac{\partial^2 \zeta}{\partial r^2} \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \\ &+ \frac{(\xi_1 - h)}{(\zeta - h)^2} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \left(\frac{\xi_1 - h}{\zeta - h}\right)^2 \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{1}{(\zeta - h)^2} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial r}\right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi_1}; \\ \frac{\partial}{\partial n} &= \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \zeta}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r}\right) \frac{1}{\sqrt{1 + (\zeta_r)^2}} \end{aligned}$$

Уравнения и граничные условия, переписанные в новых координатах, здесь не приводятся в силу их громоздкости.

Задача решается методом конечных разностей. Применяется явная схема с аппроксимацией пространственных производных конечными разностями второго порядка точности.

Расчеты проводятся в два этапа.

На первом этапе скорость движения нагревателя полагается равной нулю и производится интегрирование по времени до тех пор, пока с некоторой заданной точностью не установятся форма фронта и поля скорости, температуры и концентрации. В качестве начального состояния гидродинамических полей задаются нулевые начальные значения функции тока и завихренности, линейное распределение температуры во всей области  $T_{i,j} = T_m + \Delta T(z - z_{\text{int}0})/h$ , равномерное распределение примеси во всей области  $C_{i,j} = C_0$ . Начальная форма фронта принимается плоской. Полученные форма фронта и поля используются в качестве начального состояния для второго этапа расчетов.

На втором этапе интегрируются те же уравнения, что и на первом, и по тому же алгоритму, однако скорость движения нагревателя отличается от нуля. Теперь на каждом шаге по времени пересчитывается новое положение нагревателя, новая форма фронта кристаллизации и соответствующие коэффициенты преобразования координат.

Основная часть расчетов проводится для сетки  $67 \times 251$ , так как с дальнейшим увеличением числа узлов, как для поля, так и для интегральных характеристик изменения составляют не более 1%. Значения заложенных в расчеты физических параметров приводятся в таблице.

В результате расчетов определяются поля функции тока, концентрации и температуры, а также интегральные характеристики для разных значений амплитуды магнитного поля  $H_0$ .

Таблица. Параметры задачи

Параметр	Обозначение	Значение	Размерность
Размеры и другие параметры модели установки			
Высота	$h$	6,8	см
Длина, на которой задается неоднородное распределение температуры (1)	$L$	10	см
Внешний радиус ампулы	$R_0$	1,37	см
Внутренний радиус ампулы	$R_c$	1,27	см
Начальное положение фронта (нагревателя)	$z_{int0}$	2,0	см
Скорость движения нагревателя	$V_{g0}$	$5 \cdot 10^{-4}$	см/с
Начальное значение концентрации галлия (Ga)	$C_0$	0,02	Весовые %
Теплофизические свойства материала ампулы (графит)			
Теплопроводность ампулы	$\kappa_a$	3,26	Вт/(см °С)
Удельная теплоемкость материала ампулы	$C_{pa}$	1,814	Дж/(г °С)
Плотность материала ампулы	$\rho_a$	1,8	г/см <sup>3</sup>
Коэффициент теплоотдачи материала ампулы	$h_a$	46,571	Вт/(см <sup>2</sup> °С)
Теплофизические свойства выращиваемого материала (германия)			
Температура плавления	$T_m$	937,4	°С
Характерная разность температур	$\Delta T$	100	°С
Плотность кристалла	$\rho_s$	5,5	г/см <sup>3</sup>
Плотность расплава	$\rho_f$	5,5	г/см <sup>3</sup>
Теплопроводность кристалла	$\kappa_s$	0,17	Вт/(см °С)
Теплопроводность расплава	$\kappa_f$	0,39	Вт/(см °С)
Удельная теплоемкость кристалла	$C_{ps}$	0,39	Дж/(г °С)
Удельная теплоемкость расплава	$C_{pf}$	0,39	Дж/(г °С)
Теплота плавления	$\Delta H$	460	Дж/г
Коэффициент теплового расширения	$\beta_T$	$5,0 \cdot 10^{-4}$	К <sup>-1</sup>
Динамическая вязкость	$\eta$	$1,97 \cdot 10^{-2}$	г/(см с)
Кинематическая вязкость	$\nu$	0,0013	см <sup>2</sup> /с
Удельная электропроводность расплава	$\sigma_f$	$2,37 \cdot 10^6$	1/(Ом м)
Равновесный коэффициент сегрегации галлия (Ga)	$k_0$	0,087	
Коэффициент диффузии галлия (Ga) в германий (Ge)	$D$	$2,1 \cdot 10^{-4}$	см <sup>2</sup> /с

Для проверки корректности полученных данных проведено их сопоставление с опубликованными результатами. Результаты тестирования алгоритма и программы расчетов показали, что значения характеристик отличаются от данных, приведенных в работах [3, 4], не более чем на 5% для тех же физических значений параметров.

#### 4. Численные результаты

Проанализируем результаты моделирования нестационарного процесса выращивания полупроводникового монокристалла германия, легированного галлием в ампуле из графита с плоским дном. Приведенные в таблице значения параметров полагаются постоянными, не зависящими ни от температуры, ни от концентрации. В рассматриваемых диапазонах перепадов температур и концентраций (характерная разность температур  $\Delta T$  составляет не более 100°С вблизи температуры плавления) такое предположение справедливо. Значение начальной концентрации примеси



принимается равным  $C_0 = 0,05\%$ , то есть рассматриваются материалы с низким содержанием примеси. Значение коэффициента концентрационного расширения для примеси Ga в Ge пренебрежимо мало, и потому концентрационная конвекция не учитывается.

На рисунке 3, *a* приведены поля функции тока (сплошные линии) и температуры (пунктирные линии) для указанных моментов времени при отсутствии внешнего магнитного поля ( $H_0 = 0$  мТ). Видно, что в расплаве устанавливается двухвихревое течение. В нижнем вихре расплав циркулирует по часовой стрелке, в верхнем — против часовой стрелки. Формирование вихрей обусловлено наличием горизонтальных градиентов температур, направленных в разные стороны. Двухвихревая структура течения сохраняется в течение всего процесса кристаллизации. Под влиянием возникающих конвективных течений изолинии температуры значительно искривляются.

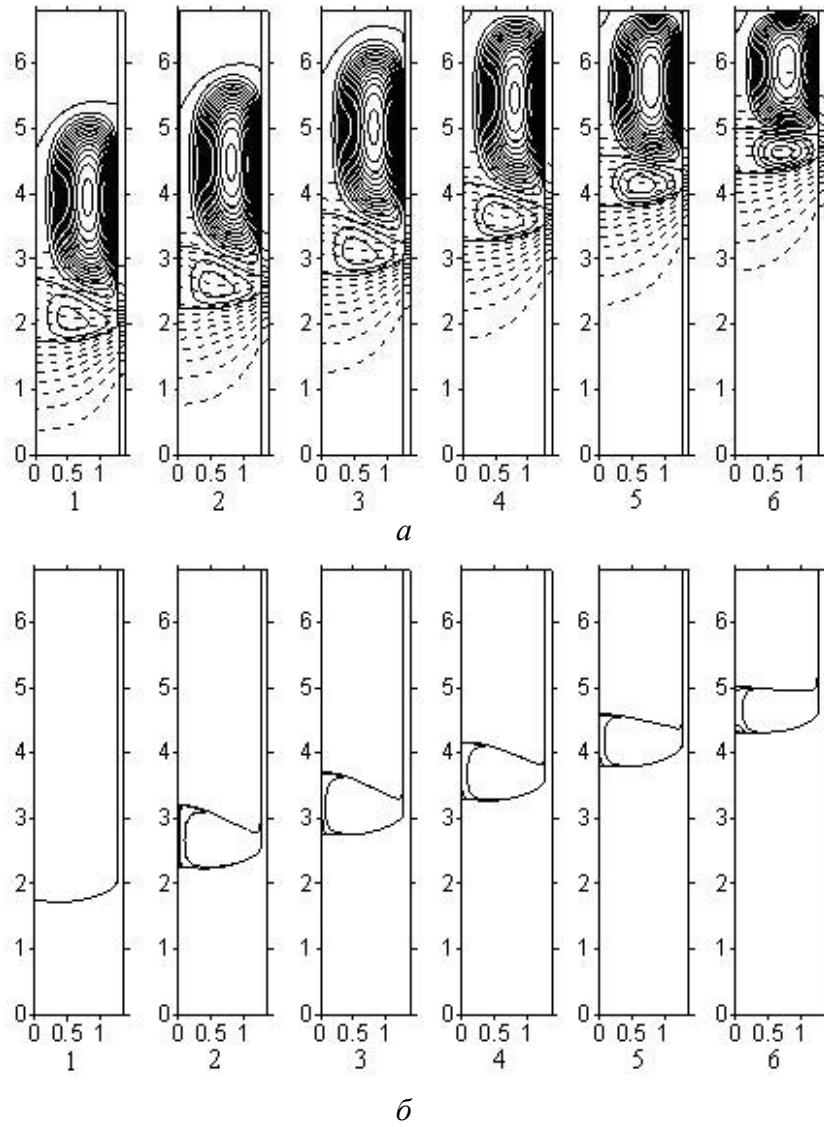
На рисунке 3, *б* представлены изолинии поля концентрации в разные моменты времени от момента начала движения нагревателя. Начальное распределение примеси имеет однородную концентрацию. Распределение примеси практически не изменяется, пока отсутствует движение нагревателя. С включением движения нагревателя изолинии концентрации в значительной степени повторяют структуру течения. Нижний вихрь переносит примесь от стенки ампулы к оси, значительно влияя на распределение примеси в выращиваемом кристалле; верхний вихрь создает дополнительное перемешивание примеси. Коэффициент сегрегации меньше единицы, поэтому на фронте происходит обогащение расплава примесью.

При наличии магнитного поля структура полей течения, температуры и концентрации сохраняет прежний вид, однако интенсивность течения снижается. Это ведет к увеличению прогиба фронта кристаллизации. Вообще, снижение интенсивности конвективных течений может оказать как положительное, так и отрицательное влияние на качество получаемого кристалла. Задача численного моделирования состоит в том, чтобы для заданного набора параметров определить при какой интенсивности магнитного поля распределение примеси в выращенном кристалле будет наиболее однородным.

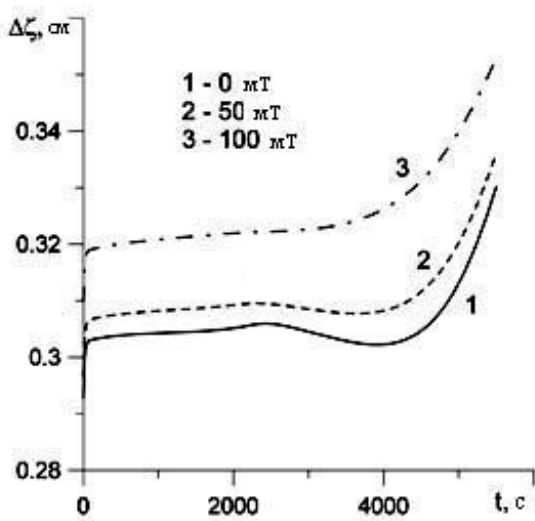
Рисунок 4 иллюстрируют эволюцию максимального значения функции тока для разных значений амплитуды магнитного поля  $H_0$ . Видно, что с усилением поля интенсивность течения снижается. На рисунке 5 представлена эволюция прогиба фронта кристаллизации для различных значений амплитуды магнитного поля  $H_0$ . Видно, что чем выше значение  $H_0$ , тем больше прогиб фронта. Это объясняется ухудшением конвективного отвода тепла. Таким образом, однородное осевое высокочастотное магнитное поле подавляет конвективные течения и его действие качественно сходно с эффектом постоянного осевого магнитного поля [6].

Применение нестационарного подхода позволяет найти распределение примеси в выращенном монокристалле, представляющее наибольший интерес с точки зрения приложений.

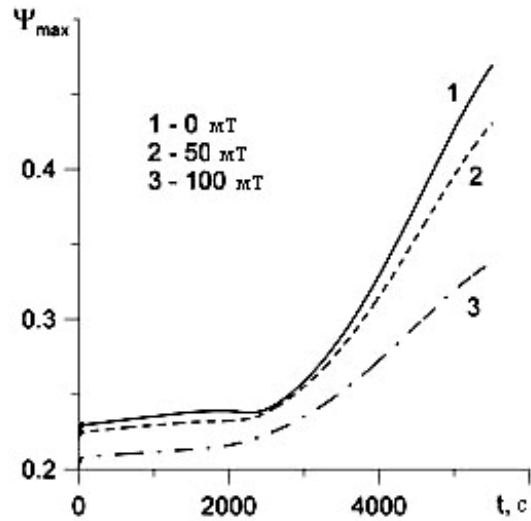
На рисунке 6 представлены распределения концентрации примеси в выращенном кристалле при воздействии магнитных полей разной интенсивности. В соответствии с распределением примеси в расплаве распределение примеси в выращенном кристалле характеризуется наличием вертикального градиента распределения примеси, направленного вверх по оси симметрии, и горизонтального градиента, направленного перпендикулярно к оси. Как видно из рисунка 6, *a*, влияние осевого переменного магнитного поля небольшой интенсивности на структуру выращенного монокристалла является слабым; для достижения заметного эффекта следует применять более сильные



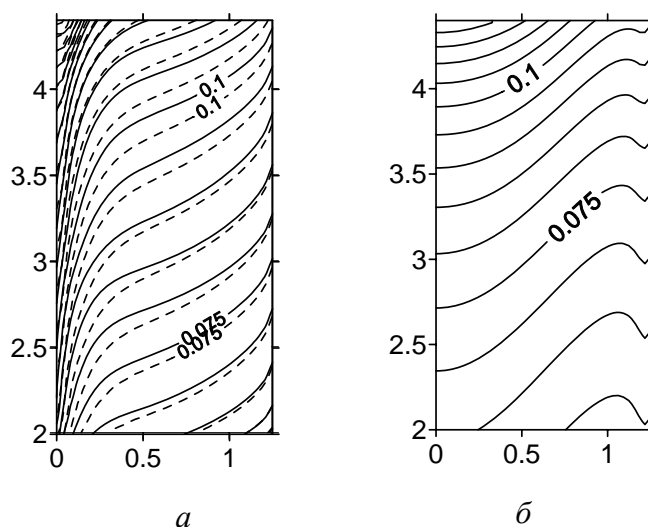
**Рис. 3.** Изолинии температуры и функции тока (а), концентрации примеси (б) в различные моменты времени  $t$  (с):  $t=0$  (цифра 1);  $t=1040$  (2);  $t=2081$  (3);  $t=3122$  (4);  $t=4163$  (5);  $t=5204$  (6) при отсутствии внешнего магнитного поля



**Рис. 4.** Эволюция максимального значения функции тока



**Рис. 5.** Эволюция прогиба фронта  $\Delta\zeta = |\zeta(R_c) - \zeta(0)|$



**Рис. 6.** Распределение примеси в выращенном кристалле под воздействием слабого (а) и сильного ( $H_0 = 1$  Т) магнитных полей (б)

магнитные поля. Расчеты, проведенные при  $H_0 = 1$  Т, показали, что сильное магнитное поле, как в этом случае, способно оказать значительное положительное воздействие: распределение примеси в выращенном кристалле становится более однородным; как горизонтальный, так и вертикальный градиенты концентрации примеси уменьшаются.

## 5. Заключение

Предложен и описан алгоритм численного моделирования нестационарных процессов выращивания кристаллов вертикальным методом Бриджмена с учетом перемещения и искривления фронта кристаллизации, а также теплообмена в твердой фазе и материале ампулы. В качестве примера рассмотрено выращивание монокристалла германия, легированного галлием, в ампуле из графита с плоским дном. Распределение температуры вблизи внешней стенки ампулы принято в виде тангенциальной функции.

Расчеты показали, что переменное осевое высокочастотное магнитное поле подавляет течения в расплаве: с увеличением интенсивности магнитного поля прогиб фронта увеличивается, а перемешивание расплава ослабевает. Применение достаточно сильных магнитных полей (с амплитудой  $>1$  Т) позволяет значительно улучшить однородность распределения примеси в выращенном монокристалле.

## Литература

1. Ежовский Ю.К., Денисова О.В. Физико-химические основы технологии полупроводниковых материалов: / Учеб. Пособие. – СПб.: СЗТУ, 2005. – 80с.
2. Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. – Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. – 228с.
3. Adornato P., Brown R. Convection and Segregation in Directional Solidification of Dilute and Non-Dilute Binary Alloys: Effects of Ampoule and Furnace Design // J. Crystal Growth. – 1987. – V. 80. – P. 155-190.
4. Lan C.W., Ting C.C. Numerical Investigation on the Batch Characteristics of Liquid Encapsulated Vertical Bridgman Crystal Growth // J. Crystal Growth. – 1995. – V. 149, 1995. – P.175-186.
5. Stelian C., Delannoy Y., Fautrelle Y., Duffar T. Solute Segregation in Directional Solidification of GaInSb Concentrated Alloys under Alternating Magnetic Field // J. Crystal Growth. – 2004. – V. 266. – P. 207-215.
6. Kim, D.H., Adornato, P.M., Brown, R.A. Effect of Vertical Magnetic Field on Convection and Segregation in Vertical Bridgman Crystal Growth // J. Crystal Growth. – 1988. – V. 89. – P. 339-356.