DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.2.20 УДК 532.5.[013.2+032]:519.635.8

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕСС ВЫРАЩИВАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО КРИСТАЛЛА МЕТОДОМ АНР

Т.П. Любимова, О.А. Хлыбов

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Россия

Проведено численное моделирование влияния аксиально симметричного вращающегося магнитного поля на процесс тепло- и массопереноса при выращивании полупроводникового кристалла Ga:Ge с использованием АНР – Axial Heating Process. Получены данные о структуре течения, распределении примеси в расплаве и ее сегрегации в кристалле в зависимости от температурных граничных условий и интенсивности приложенного магнитного поля. Показано, что температурные условия на погруженном нагревателе оказывают существенное влияние на массоперенос в расплаве и, как следствие, на сегрегацию примеси в выращенном кристалле. Продемонстрировано, что приложение вращающегося магнитного поля малой интенсивности способно уменьшить радиальную сегрегацию примеси в кристалле.

Ключевые слова: численное моделирование, направленная кристаллизация, массоперенос, вращающееся магнитное поле

# NUMERICAL SIMULATION OF THE EFFECT OF ROTATING MAGNETIC FIELD ON HEAT AND MASS TRANSFER DURING AHP SEMICONDUCTOR CRYSTAL GROWTH

#### T.P. Lyubimova and O.A. Khlybov

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia

Numerical simulations are performed to investigate the effect of an axially symmetric rotating magnetic field on heat and mass transfer during the 2" Ga:Ge semiconductor single crystal growth by the Axial Heating Processing (AHP) technique. The flow pattern and the results of dopant distribution in the melt and its segregation in the crystal are obtained in relation to temperature boundary conditions and intensity of the applied magnetic field. It has been found that the temperature conditions imposed on the submerged heater have significant effect on mass transfer in the melt and, as a consequence, on dopant segregation in the grown crystal. It is shown that the applied low-intensity rotating magnetic field can decrease the radial dopant segregation in the crystal.

Key words: numerical simulation, directional solidification, mass transfer, rotating magnetic field

## 1. Введение

Потребности бурно развивающейся полупроводниковой промышленности определяют повышенный интерес к проблеме получения высококачественных полупроводниковых кристаллов с заданными физико-химическими свойствами. Для производства разнообразных типов полупроводниковых устройств требуются кристаллы с существенно различающимися параметрами. Используются разные способы выращивания кристаллов: эпитаксия, химическое парофазное осаждение, метод Чохральского, метод плавающей зоны, метод подвижного нагревателя, метод Бриджмена и другие [1].

Axial Heating Process (AHP) [2] относится к семейству методов направленной кристаллизации и является дальнейшим развитием вертикального метода Бриджмена и усовершенствованием метода погруженного нагревателя (SHM). Согласно методу АНР в ампулу с расплавом над фронтом кристаллизации помещается дополнительный нагреватель таким образом, что между ним и внутренней стенкой ампулы остается зазор для обеспечения перетекания расплава из зоны над нагревателем в зону кристаллизации. В процессе роста кристалла погруженный нагреватель согласованно перемещается вместе с внешними нагревателями с целью обеспечения заданного расстояния между ним и фронтом кристаллизации. Преимуществом семейства методов погруженного нагревателя является возможность более точно управлять распределением температуры вблизи фронта кристаллизации, а также постоянство геометрии зоны роста, в частности, высоты расплава над границей раздела фаз, что способствует уменьшению аксиальной неоднородности получаемого кристалла.

В задачах кристаллизации для управления процессами тепло- и массопереноса применяются внешние воздействия на расплав, такие как осевые и вращательные вибрации [3], стационарные, бегущие и вращающиеся магнитные поля [4]. Одним из наиболее эффективных методов управления течением электропроводящей жидкости является магнитное поле. При этом на этапе управления кристаллизацией находят применение как постоянные, так и переменные (бегущее, вращающееся) магнитные поля [4–6]. В рассматриваемом случае вращающееся магнитное поле (ВМП) в процессе направленной кристаллизации [6] генерирует азимутальное течение в расплаве, являющееся движущей силой для пристеночного тороидального меридионального течения вблизи твердых горизонтальных

поверхностей (эффект Экмана). Вдобавок ВМП способно как подавить, так и интенсифицировать в разных областях расплава течение, вызванное иными причинами [7].

Целью работы является изучение комбинированного действия ВМП и погруженного нагревателя на тепло-, массоперенос и сегрегацию примеси при выращивании полупроводниковых кристаллов с использованием АНР.

## 2. Постановка задачи. Определяющие уравнения и граничные условия

Изучается процесс роста кристалла полупроводника методом АНР в земных условиях. Модель печи (Рис. 1) представляет собой цилиндрическую ампулу *1* с боковой стенкой конечной толщины, заполненный двумя фазами вещества — твердой 2 внизу и жидкой *3* вверху. Ампула закрыта слоем жидкого



**Рис. 1.** Схематичное изображение установки АНР

изолятора 4. Снаружи поверхность боковая ампулы теплоизолирована 5. Тепловой фон внутри ампулы управляется внешними 6 и погруженным 7 нагревателями. Вращающееся магнитное поле создается неподвижным кольцевым многополюсным магнитом 8. Погруженный нагреватель делит область расплава на две части, соединенные узким кольцевым каналом. Нижняя часть — камера роста. имеет практически постоянные геометрические размеры, а высота верхней области уменьшается с течением времени. При этом конвективные процессы, происходящие в верхней части, никак не влияют на течение вблизи фронта кристаллизации, хотя в процессе роста нижняя камера постоянно подпитывается через зазор расплавом из области над нагревателем.

Граница раздела фаз — фронт кристаллизации — в общем случае искривлена. Ее форма и положение подлежат нахождению наряду с полями скорости, температуры и концентрации примеси. Расплав считается несжимаемой ньютоновской жидкостью. В данной работе, в целях упрощения задачи, жидкий изолятор исключается

из рассмотрения, и ампула представляет собой цилиндр с твердыми стенками нулевой толщины [8]. Вращающееся магнитное поле предполагается пространственно-однородным, его ось вращения совпадает с осью симметрии ампулы. Электропроводности погруженного нагревателя, ампулы и кристалла приравниваются нулю.

Задача тепло-, массопереноса и сегрегации примеси решается в цилиндрической системе координат  $\{r, z, \varphi\}$  в двумерной осесимметричной нестационарной постановке в пренебрежении зависимостью от азимутального угла  $\varphi$ ; ось z совпадает с осью симметрии рассматриваемой физической области. Исходная система уравнений магнитной гидродинамики, тепловой и концентрационной конвекции в приближении Буссинеска имеет следующий вид

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

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\mathbf{V}\nabla\right)T = \chi\Delta T , \qquad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left(\mathbf{V}\nabla\right)C = D\Delta C, \qquad (4)$$

где V — вектор скорости, T — температура, C — концентрация примеси,  $\rho$  — плотность, p — давление,  $\nu$  — кинематическая вязкость,  $\chi$  — температуропроводность, D — коэффициент диффузии примеси,  $\beta_T$  — коэффициент теплового расширения,  $\beta_c$  — коэффициент концентрационного расширения, **g** — вектор силы тяжести, **F**<sub>L</sub> — сила Лоренца.

Однородное аксиально-симметричное вращающееся с высокой частотой внешнее магнитное поле дает возможность осреднения силы Лоренца с введением скалярного магнитного потенциала *f* [7]:

$$\mathbf{F}_{L} = \frac{1}{2} \sigma B^{2} \left( 1 - \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial z} \right) \left[ \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r} \right], \tag{5}$$

$$\Delta f - \frac{f}{r^2} = 0 , \qquad (6)$$

где  $\sigma$  — электропроводность, B — индукция магнитного поля,  $\Omega$  — вектор скорости вращения магнитного поля. В записи выражений (5) и (6) влияние индуцированного течением магнитного поля не учитывается, так как скорость движения жидкости по сравнению со скоростью вращения магнитного поля  $\mu_0 \mu \sigma R |\mathbf{V}| \ll 1$ , где  $\mu$  — магнитная проницаемость,  $\mu_0$  – магнитная постоянная, R — характерный размер (радиус ампулы), полагается малой. Число полюсов магнита принимается равным единице [7].

Полная система уравнений (1)–(6) решается в областях выше и ниже нагревателя и в зазоре между нагревателем и стенкой ампулы; в твердых областях (кристалл, погруженный нагреватель) реализуется упрощенная задача (3):  $\partial T/\partial t = \chi \Delta T$ .

Система уравнений (1)–(6) дополняется граничными условиями (индексы *c*, *m*, *a*, *h* указывают, соответственно, на характеристики кристалла, расплава, ампулы и погруженного нагревателя).

#### 2.1. Температурные граничные условия

Боковая стенка ампулы теплоизолирована:  $(\partial T/\partial \mathbf{n})|_{c,m} = 0$ . На нижнем (z = 0) и верхнем (z = H) торцах ампулы температура зависит от времени по закону

$$T(z,t) = T_* - \left[ z_h(t) - z \right] \Delta T, \tag{7}$$

где  $z_h(t)$  — текущее положение погруженного нагревателя,  $T_*$  — температура фазового перехода,  $\Delta T$  — заданный аксиальный перепад температуры.

На нижней поверхности нагревателя задается фиксированный линейный профиль температуры

$$T(r) = T_h^1 + \left(T_h^2 - T_h^1\right) r / R_h , \qquad (8)$$

где  $R_h$  — радиус погруженного нагревателя,  $T_h^1$  — температура нижней поверхности погруженного нагревателя на оси симметрии,  $T_h^2$  — температура нижней поверхности погруженного нагревателя на расстоянии  $R_h$  от оси симметрии. На остальных поверхностях нагревателя выполняются условия равенства температуры и теплового потока:  $T|_h = T|_m$ ,  $\kappa_h (\partial T/\partial \mathbf{n})|_h = \kappa_m (\partial T/\partial \mathbf{n})|_m$ , где  $\kappa_m$  и  $\kappa_h$  — теплопроводности расплава и нагревателя соответственно.

На фронте кристаллизации реализуется условие Стефана, учитывающее теплоперенос через границу и тепловыделение при фазовом переходе расплав – кристалл [9]:  $\kappa_c \left( \partial T / \partial \mathbf{n} \right) \Big|_c - \kappa_m \left( \partial T / \partial \mathbf{n} \right) \Big|_m + \rho_c \Delta H V_f (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) = 0$ , где  $V_f$  — вертикальная компонента скорости смещения фронта кристаллизации,  $\Delta H$  — удельная теплота плавления.

Начальное распределение температуры задается в соответствии с (7); начальное положение фронта кристаллизации  $z_f$  находится по положению изотермы  $T_*$  из уравнения:  $T(z_f, 0) = T_*$ .

#### 2.2. Граничные условия для скоростей

Ампула считается неподвижной относительно лабораторной системы координат. На ее твердых поверхностях ставится условие прилипания  $\mathbf{V}|_{\Gamma} = 0$ .

Погруженный нагреватель перемещается вверх с постоянной скоростью  $U: \mathbf{V}|_{h} = (U \cdot \mathbf{e}_{z})$ .

На фронте кристаллизации скорость вычисляется исходя из скорости смещения изотермы  $T_*$ .

В начальный момент времени скорости жидкости и фронта кристаллизации принимаются равными нулю:  $\mathbf{V} = 0$ ,  $V_f = 0$ .

#### 2.3. Граничные условия для примеси

На фронте кристаллизации выполняется условие баланса примеси, учитывающее захват примеси кристаллом [10]:  $D(\partial C/\partial \mathbf{n})\Big|_m + C(1-k)(\rho_c/\rho_m)V_f(\mathbf{n}\cdot\mathbf{e}_z) = 0$ , где k — коэффициент сегрегации (k-я часть примеси по массе захватывается растущим кристаллом, тогда как (1-k)-я часть остается в расплаве).

На остальных границах ампулы, расплава и погруженного нагревателя поток массы отсутствует:  $\partial C / \partial \mathbf{n} \Big|_{b,a} = 0$ .

Начальное распределение примеси считается равномерным и равным  $C_0$  для расплава и нулевым для кристалла.

#### 2.4. Граничные условия для магнитного поля

На боковой поверхности ампулы и погруженного нагревателя ставится условие обращения в нуль нормальной компоненты скалярного магнитного потенциала f (6):  $(\partial f / \partial \mathbf{n})|_{m,h} = 0$ . На фронте кристаллизации, верхней крышке ампулы, верхней и нижней поверхностях погруженного нагревателя считается, что  $(\partial f / \partial \mathbf{n})|_{m,h} = r$ , на оси симметрии — f = 0 [7].

При выводе граничных условий использовано условие обращения в нуль нормальной компоненты плотности электрического тока **j** на границе  $(\partial j_n / \partial \mathbf{n})|_{\Gamma} = 0$ , что соответствует случаю электроизолированной границы.

# 3. Численная процедура

Численное решение задачи осуществлялось с помощью программного пакета [10]. Отображение физической области задачи  $\{r, z\}$  с искривленными границами на прямоугольную однородную вычислительную сетку  $\{x, y\}$  с единичным пространственным шагом производилось с помощью аналитического преобразования координат вида [9]:

$$r = \Delta_R(x, y) \frac{\xi}{A + (1 - A)\xi}, \qquad z = \Delta_Z(x, y) \left( 1 - \frac{B^{Y - y} - 1}{B^Y - 1} \right), \qquad \xi = \frac{1}{2} \left( 1 + th \left( \frac{x}{X} - \frac{1}{2} \right) \delta \right) / th \left( \frac{1}{2} \delta \right), \tag{10}$$

где X и Y — число узлов вычислительной сетки по направлениям x и y соответственно;  $\Delta_R$  и  $\Delta_Z$  — ширина и высота расчетной области в узле сетки (x, y); A, B и  $\delta$  — управляющие параметры преобразования координат, обеспечивающие сгущение сетки вблизи границ.

Вычислительная сетка разбивалась на подсетки для областей кристалла, расплава, погруженного нагревателя и области над нагревателем. На каждой из подсеток задавалось преобразование координат вида (10) с собственным набором управляющих параметров  $\{A, B, \delta\}$ .

Наличие осевой симметрии и полученный осредненный вид силы Лоренца (5) позволили переопределить конвективную задачу (1)–(6) в терминах завихренности  $\varphi$ , функции тока  $\psi$  и азимутальной скорости  $V_{\varphi}$  [7]. Дискретизация данной системы уравнений, дополненной соответствующими граничными условиями, производилась следующим образом: пространственные производные уравнения для концентрации заменялись разностными аналогами согласно методу конечных объемов (МКО), автоматически удовлетворяющему свойству консервативности схемы; пространственные производные уравнений для температуры, завихренности, функции тока, азимутальной скорости и скалярного магнитного потенциала — согласно методу конечных разностей (МКР). Производные по времени представлялись в дискретном виде также по методу конечных разностей.

Применение МКО для вычисления поля концентрации позволило автоматически выполнить требование глобального баланса примеси в расчетной области, недостижимое при использовании МКР [9].

Для численного решения получившейся в результате дискретизации системы неоднородных нелинейных алгебраических уравнений для неизвестных  $\{\phi, \psi, V_{\phi}, T, C, f\}$  в совокупности с краевыми и начальными условиями применялся метод простой итерации Ньютона [11]. Системы соответствующих неоднородных линейных алгебраических уравнений решались матричным методом с явным вычислением разреженной матрицы Якоби при помощи пакета MUMPS на вычислительной системе с распределенной памятью.

Процедура решения на каждом временном шаге состояла в последовательном вычислении положения и формы фронта кристаллизации на основе текущего распределения температуры, коэффициентов преобразования координат с учетом нового положения фронта кристаллизации и значений физических полей в узлах сетки. Выход из итерационной процедуры происходил по достижению погруженным нагревателем заданной высоты. Положение и форма фронта кристаллизации на каждом временном шаге

устанавливались по изотерме, соответствующей температуре фазового перехода  $T_*$ . Шаг по времени был фиксированным.

Основные расчеты производились на сетке размерностью 50×100. Дополнительно проведенные исследования отдельных конфигураций на сетке размерностью 75×150 показали достаточность основной сетки. В зависимости от ее размера количество задействованных процессоров составляло от 8 до 16.

## 4. Результаты моделирования

Численное моделирование тепло- и массопереноса при выращивании полупроводниковых кристаллов методом АНР выполнены для германия с примесью галлия Ga:Ge [12]. Высота ампулы составляла 10 см, внутренний радиус — 2,54 см. Погруженный нагреватель имел высоту 0,5 см, зазор между ним и внутренней стенкой ампулы равнялся 0,5 мм. Скорость роста кристалла U во всех исследованных конфигурациях принималась равной  $10^{-4}$  см/с. Начальное распределение примеси в расплаве полагалось однородным с концентрацией 1%. Вычисления осуществлены для двух значений аксиального перепада температуры:  $\Delta T = 20$  K и 30 K и трех режимов работы погруженного нагревателя (3): фиксированная температуры —  $T_h^1 = T_h^2 = 945$  K; положительный градиент —  $T_h^1 = 942$  K  $T_h^2 = 945$  K; отрицательный градиент —  $T_h^1 = 945$  K,  $T_h^2 = 942$  K. Температура фазового перехода  $T_*$  принималась равной 936 K. Интенсивность вращающегося магнитного поля варьировалась путем изменения магнитной индукции в диапазоне 0÷0,4 мТл.

Навязанные в задаче тепловые условия предопределили форму фронта кристаллизации: она получилась выпуклой при отсутствии конвективного движения и *S*-образной при его наличии. Величина прогиба фронта зависит от тепловых условий на погруженном нагревателе. В то же время результаты моделирования показывают, что форма фронта кристаллизации и среднее расстояние от фронта до погруженного нагревателя остаются практически постоянными в течение всего процесса роста. Данный результат кардинально отличается от результата, полученного в случае кристаллизации по вертикальному методу Бриджмена. При этом способе для того же материала формируется вогнутый фронт кристаллизации, а его форма меняется с течением времени [4, 9]; увеличение аксиального перепада температуры  $\Delta T$  приводит, без внесения качественных изменений, к уменьшению расстояния от нагревателя до фронта кристаллизации с одновременным уменьшением прогиба последнего.

Численные данные, характеризующие структуру течения, свидетельствуют о существенной зависимости конвективного течения от тепловых условий на погруженном нагревателе. На рисунках 2–4 показаны изолинии функции тока и изолинии концентрации для аксиального перепада температуры  $\Delta T = 20$  К на момент времени  $t = 10^3$  с в отсутствие вращающегося магнитного поля. На рисунках приведена правая половина области расплава от погруженного нагревателя до фронта кристаллизации; часть, занятая кристаллом, заштрихована.

При фиксированной температуре на погруженном нагревателе (Рис. 2) структура течения двухвихревая с вертикальным расположением вихрей, при этом верхний вихрь значительно интенсивнее нижнего. В случае приложенного положительного градиента температуры (Рис. 3) двухвихревая структура сохраняется, но теперь верхний вихрь занимает практически всю область, прижимая нижний вихрь к стенке ампулы. При создании погруженным нагревателем отрицательного градиента температуры (Рис. 4) сохраняется двухвихревая структура течения со сменой взаимного расположения вихрей на горизонтальное, при этом вихрь, находящийся у стенки ампулы, интенсивнее внутреннего. Следует отметить, что прогиб фронта, несмотря на небольшую величину, вносит качественное изменение



**Рис. 2.** Поле концентрации (*a*) и функция тока (б) для случая  $T_h^1 = T_h^2 = 945$  К



**Рис. 3.** Поле концентрации (*a*) и функция тока (б) для случая  $T_h^1 = 942$  K,  $T_h^2 = 945$  K





в структуру течения — численное моделирование похожих систем с зафиксированным плоским фронтом кристаллизации показывает одновихревую структуру течения [8].

С увеличением аксиального перепада температуры с 20 К до 30 К происходит уменьшение расстояния между погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации и снижение общей интенсивности течения, однако структура течения не претерпевает изменений.

В отличие от теплопереноса, в котором, в силу высокой теплопроводности расплавов полупроводников, диффузионный механизм переноса является доминирующим, массоперенос в значительной мере имеет конвективный характер. Малый коэффициент сегрегации для рассматриваемого сплава Ga:Ge означает, что основная часть примеси будет отторгаться кристаллом и выталкиваться обратно в расплав, что повлечет повышение средней концентрации примеси вблизи фронта кристаллизации в процессе роста и появление аксиальной сегрегации примеси в кристалле. Проведенное численное моделирование показало, что увеличение аксиального перепада температуры  $\Delta T$  приводит к увеличению сегрегации примеси, что в общем случае является нежелательным эффектом.

Основным механизмом управления радиальной сегрегацией примеси в рассматриваемой конфигурации являются температурные условия на погруженном нагревателе; сменой направления градиента температуры можно добиться смены направления радиального градиента сегрегации примеси, однако в исследованном диапазоне параметров задачи нельзя существенно повлиять на саму величину сегрегации.

В рассматриваемой задаче создаваемое вращающимся магнитным полем течение в азимутальной плоскости порождает, благодаря эффекту Экмана, течение в меридиональной плоскости вблизи горизонтальных границ расплава [4, 6–7]. Это структурно наведенное течение состоит из двух вихрей, расположенных один над другим и вращающихся в противоположные стороны. В силу малости расстояния между погруженным нагревателем и фронтом кристаллизации по сравнению с радиусом ампулы наведенные вихри оказываются вытянутыми в радиальном направлении и плотно прижатыми друг к другу. Данное течение накладывается на течение, генерируемое термогравитационным и концентрационным механизмами, с формированием результирующего конвективного механизма тепло- и массопереноса в расплаве.

При интенсивности магнитного поля, превышающей 0,5 мТл, течение, генерируемое ВМП, начинает доминировать над течениями, порождаемыми остальными механизмами. При этом данные моделирования свидетельствуют, что навязываемая ВМП структура течения, в отсутствие иных генерирующих течение механизмов, не является оптимальной с точки зрения получения минимальной сегрегации примеси.

Результаты моделирования показывают, что влияние ВМП на радиальную сегрегацию примеси в результирующем кристалле существенно зависит от распределения температуры на погруженном



Рис. 5. Поле концентрации (*a*) и функция тока (б) для случая  $\Delta T = 20$ К, B = 0,4 мТл,  $T_h^1 = 945$  К,  $T_h^2 = 942$  К



**Рис. 6.** Распределение примеси в кристалле по фронту кристаллизации в зависимости от интенсивности ВМП и аксиального перепада температуры для случая  $T_h^1 = 945$  K,  $T_k^2 = 942$  K

положительный эффект от применения ВМП до 37% (Рис. 6).

Численное моделирование показало, что в рассматриваемой задаче основным параметром, определяющим аксиальную сегрегацию примеси, является аксиальный перепад температуры. Влияния ВМП на аксиальную сегрегацию примеси в исследованном диапазоне параметров не наблюдалось.

# 5. Заключение

Проведено численное исследование влияния вращающегося магнитного поля на процесс выращивания полупроводникового кристалла методом Axial Heating Process. Результаты свидетельствуют о значительном влиянии температурных условий на погруженном нагревателе и интенсивности ВМП на структуру течения расплава вблизи фронта кристаллизации. Так, приложение температурного градиента к погруженному нагревателю, в зависимости от его направления, позволяет получить двухвихревую структуру течения с вертикальным либо горизонтальным расположением вихрей. ВМП навязывает свою структуру течения с вертикальным расположением вихрей, что приводит к увеличению общей интенсивности течения расплава в первом случае и ее уменьшению во втором.

Выявлено, что применение вращающегося магнитного поля как механизма управления массопереносом и сегрегацией примеси в процессе выращивания полупроводникового кристалла методом АНР дает возможность уменьшить радиальную сегрегацию примеси в результирующем кристалле. В исследованном диапазоне параметров достигнуто уменьшение сегрегации примеси на 47% и 37% при аксиальном перепаде температуры в ампуле 30 К и 20 К соответственно.

Установлено, что основным параметром, определяющим аксиальную сегрегацию примеси в кристалле, является аксиальный перепад температуры; влияния ВМП и температурных условий на погруженном нагревателе зафиксировано не было.

нагревателе. При отрицательном градиенте температуры на нем ВМП изменяет не только структуру течения, но и расположение вихрей с горизонтального (Рис. 4) на вертикальное (Рис. 5).

В случаях положительного градиента температуры и фиксированной температуры ВМП не вносит качественных изменений в структуру течений, но влияет на интенсивности уже существующих вихрей. В целом эффект применения ВМП неоднозначен И может, в зависимости от остальных параметров задачи, приводить как к увеличению общей радиальной сегрегации, так и к ее уменьшению.

Из всего диапазона исследованных параметров наилучший результат наблюдался при  $\Delta T = 30$  К  $T_h^1 = 945$  К,  $T_h^2 = 942$  К: применение ВМП интенсивностью 0,4 мТл привело к падению радиальной сегрегации на 47%; понижение аксиального перепада температуры  $\Delta T$  до 20 К с сохранением остальных параметров уменьшило

# Литература

- 1. Lan C.W. Recent progress of crystal growth modeling and growth control // Chem. Eng. Sci. 2004. V. 59, N. 7. -P. 1437-1457. DO
- 2. Ostrogorsky A.G. Single-crystal growth by the submerged heater method // Meas. Sci. Technol. 1990. V. 1, N. 5. -P. 463-464. DOI
- 3. Любимова Т.П., Паршакова Я.Н. Влияние вращательных вибраций на течения и тепломассообмен при выращивании кристаллов германия вертикальным методом Бриджмена // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 1. – С. 57-67. DOI
- 4. Lyubimova T.P., Croell A., Dold P., Khlybov O.A., Fayzrakhmanova I.S. Time-dependent magnetic field influence on GaAs crystal growth by vertical Brigdman method // J. Crys. Growth. - 2004. - V. 266, N. 1-3. - P. 404-410. DOI
- 5. Любимова Т.П., Файзрахманова И.С. Численное моделирование влияния магнитного поля на процесс выращивания кристаллов вертикальным методом Бриджмена // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 3. – С. 85-95. DOI
- 6. Dold P., Benz K.W. Rotating magnetic fields: Fluid flow and crystal growth applications // Prog. Cryst. Growth Ch. 1999. -V. 38, N. 1-4. – P. 39-58. DOI
- 7. Marty Ph., Witkowski L.M., Trombetta P., Tomasino T., Garandet J.P. On the stability of rotating MHD flows // Fluid Mechanics and Its Applications. - 1999. - V. 51. - P. 327-343. DOI
- Bourago N.G., Fedyushkin A.I. Impurity distribution in submerged heating method with and without rotation // Proc. of Int. Conf. on Computational Heat and Mass Transfer. N. Cyprus, Turkey, 1999. - P. 207-215.
- 9. Lan C.W., Ting C.C. Numerical investigation on the batch characteristics of liquid encapsulated vertical Bridgman crystal growth // J. Cryst. Growth. - 1995. - V 149, N. 3-4. - P. 175-186. DOI
- 10. Хлыбов О.А. Комбинирование символьной алгебры и генерации кода для решения сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 2. – С. 90-99. DOI
- 11. Lan C.W. Newton's method for solving heat transfer, fluid flow and interface shapes in a floating molten zone // Int. J. Numer. Meth. Fl. - 1994. - V. 19, N. 1. - P. 41-65. DOI
- 12. Adornato P.M., Brown R.A. Convection and segregation in directional solidification of dilute and non-dilute binary alloys: Effects of ampoule and furnace design // J. Cryst. Growth. - 1987. - V. 80, N. 1. - P. 155-190. DOI

Поступила в редакцию 07.02.13; опубликована в электронном виде 15.07.13

Сведения об авторах

Любимова Татьяна Петровна, дфмн, проф. зав.лаб., Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614013, Пермь, ул. Академика Королева, д. 1; E-mail: lubimova@psu.ru