

## ОТЗЫВ

официального оппонента к.ф.-м.н. Елениной Татьяны Георгиевны на диссертационную работу Гусева Андрея Олеговича «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе», представленную на соискание учебной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика»

Одним из распространенных способов получения современных полупроводниковых материалов является выращивание монокристаллов из жидкой фазы. Качество таких материалов зависит от множества взаимосвязанных факторов: интенсивности тепло- и массопереноса в жидкой фазе и кристалле, теплообмена в системе, скорости движения фронта кристаллизации, поверхностных процессов, протекающих на границе раздела фаз и т.д. Одним из инструментов, позволяющих исследовать рост кристаллов и оптимизировать технологические процессы, является математическое моделирование. Основу математических моделей процесса кристаллизации многокомпонентного соединения составляют уравнения Навье — Стокса, уравнения тепло-массопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на межфазной границе. Численное исследование таких моделей представляет значительные трудности и требует разработки специальных алгоритмов. Отличительными особенностями задач указанного класса являются наличие внутренних подвижных межфазных границ, зависимость температуры кристаллизации от составов твердой и жидкой фаз, значительная длительность процесса, наличие нескольких временных масштабов, обусловленных диссипативными процессами, протекающими в системе, и движением фронта кристаллизации. К настоящему моменту накоплен обширный опыт численного решения задач кристаллизации. Однако в силу того, что полупроводниковые технологии являются быстроразвивающейся отраслью промышленности, к качеству используемых материалов появляются новые все более высокие требования. Существующие методы выращивания монокристаллов необходимо постоянно совершенствовать. Данное обстоятельство усложняет постановку задач и стимулирует развитие вычислительных алгоритмов. Для описания современных технологических режимов классические модели кристаллизации необходимо дополнять для учета новых физических эффектов. Увеличение доступных исследователю вычислительных мощностей приводит к тому, что возникает потребность в надежных алгоритмах, которые позволяли бы проводить многопараметрические исследования новых режимов выращивания для широкого круга материалов за время существенно меньшее длительности реального физического процесса. Диссертация Гусева А.О. посвящена

разработке и исследованию таких методов, что обуславливает **актуальность** настоящей работы.

**Общая характеристика диссертационной работы.** Диссертация Гусева А.О. изложена на 160 страницах и состоит из введения, четырех глав и заключения, списка литературы, включающего 120 наименований, и трех приложений.

Во *введении* обсуждается степень разработанности соответствующей научной проблемы, обоснована актуальность темы диссертации, определены цели и задачи работы, кратко изложено ее содержание.

В *первой главе* рассмотрен метод численного решения задачи о кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической области в осесимметричном приближении. Математическая модель процесса учитывает движение межфазной границы, процессы тепло- и массопереноса в кристалле и растворе, условия фазового равновесия и балансные соотношения для внутренней энергии и массы на фронте кристаллизации. Для отслеживания положения внутренней подвижной границы использован метод выпрямления фронта. Консервативная разностная схема для рассмотренной задачи построена с помощью метода конечных объемов в специальной системе координат, в которой фронт кристаллизации неподвижен. Автором доказаны утверждения, согласно которым предложенная разностная схема наследует основные свойства, присущие исходной дифференциальной задаче:

- конвективные члены в уравнении переноса завихренности не вносят вклад в производство кинетической энергии;
- конвективные члены в уравнениях тепло- и массообмена не влияют на балансы теплоты и массы, а также на средние по области значения квадратов температуры и концентрации;
- оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях движения жидкости и тепломассопереноса в расчетной системе координат, самосопряжён и отрицательно определён;
- выполнены законы сохранения массы, внутренней и кинетической энергии, завихренности, балансные соотношения для квадратов температуры и концентрации.

Во *второй главе* изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Для этого рассмотрена упрощенная модель процесса кристаллизации, отражающая характерные особенности задачи и поддающаяся исследованию аналитическими методами. Получены условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей

температуры и концентрации. Показано, что несмотря на большую, по сравнению с последовательными методами, вычислительную сложность, совместный алгоритм, в основе которого лежит метод Ньютона, является более надежным и гибким инструментом исследования процессов кристаллизации. Возможности предложенного вычислительного алгоритма продемонстрированы на примере модельной задачи о кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. Показано, что разностные аналоги законов сохранения выполняются с высокой точностью. Достоверность полученных результатов подтверждена расчетами, проведенными на последовательности сгущающихся пространственных сеток.

В *третьей главе* для задачи о фазовом переходе в прямоугольной области построена консервативная разностная схема на движущейся сетке, согласованной с формой границы раздела фаз. Указан закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность разностных схем, построенных на подвижной и фиксированной сетках. Доказано, что преобразование одной схемы в другую осуществляется с помощью дискретного аналога замены переменных, которая используется в методе выпрямления фронта.

В *четвертой главе* продемонстрирована эффективность применения методов, построенных на основе изложенных в работе принципов, для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы. Проведено полномасштабное моделирование всех стадий процесса выращивания двухкомпонентного соединения методом вертикальной направленной кристаллизации: растворения материала-загрузки, смены растворения ростом, кристаллизации соединения. Изучено влияние поверхностных процессов на межфазной границе на ход кристаллизации.

В *заключение* приведены основные результаты исследования.

**Научная новизна.** Результаты, полученные в диссертационной работе, являются новыми. С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены консервативные разностные схемы, наследующие основные свойства исходной дифференциальной задачи. Выделен класс схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, согласованных с формой границы раздела, алгебраически эквивалентны. Доказаны утверждения о свойствах схем, принадлежащих данному классу. Исследована сходимость методов решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости и тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом. Предложена вычислительная стратегия, являющаяся

гибким инструментом исследования фазовых переходов. На примере моделирования реального технологического режима в работе показано, что расширение математической модели процесса кристаллизации для учета новых физических эффектов не влияет на надежность и эффективность построенного вычислительного метода. На основе изложенных в работе алгоритмов автором разработан эффективный параллельный программный комплекс: для процесса, длительность которого в натурном эксперименте составляет 140 часов, результаты расчетов были получены на компьютере за 3.5 часа.

#### **Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы.**

Построен и исследован вычислительный метод, позволяющий проводить исследования промышленных режимов выращивания монокристаллов. Результаты расчетов, полученные в работе, согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными, и отражают качественные особенности рассмотренных методов выращивания полупроводниковых материалов из жидкой фазы. Экспериментальный подбор оптимальных параметров технологического режима является крайне дорогостоящим. Длительность эксперимента может достигать нескольких недель, при этом отсутствует возможность следить за ходом процесса, так как рост кристалла протекает в непрозрачном тигле, температура в котором высока. О характере процессов внутри ростовой камеры можно судить лишь косвенно, проанализировав распределения состава в различных сечениях монокристалла по окончании эксперимента. Предложенный вычислительный алгоритм позволяет проводить многопараметрические исследования технологических режимов и получать детальную информацию о физико-химических процессах, сопровождающих рост кристалла.

**Обоснованность** научных положений и выводов диссертации подтверждается использованием классического математического аппарата теории численных методов. Все утверждения о свойствах вычислительных алгоритмов, предложенных автором в диссертационной работе, строго доказаны и иллюстрируются результатами расчетов.

**Достоверность.** Основные результаты работы докладывались на ряде всероссийских и международных конференций. По теме диссертации опубликованы 12 работ. Из них 10 опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК, 6 – в журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

В ходе ознакомления с текстом диссертации возникли следующие **вопросы и замечания:**

1. Во второй главе получены условия сходимости итерационных методов решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения тепломассопереноса в среде с фазовым переходом. В расчетах показано влияние величины коэффициента диффузии в жидкой фазе на сходимость соответствующих алгоритмов, при этом влияние других параметров соединения, таких как коэффициент сегрегации и угол наклона фазовой диаграммы не рассмотрено.
2. В тексте работы отсутствует сравнение результатов расчетов с аналитическими решениями. При этом соответствующее сопоставление приведено в статье автора «Сравнение трех математических моделей процесса направленной кристаллизации многокомпонентного раствора». Представляется, что включение соответствующего материала в текст диссертационной работы обогатило бы ее содержание.
3. Диссертантом разработан параллельный программный комплекс, реализующий предложенные им математические модели и вычислительные алгоритмы. Описание комплекса в работе, прежде всего с точки зрения особенностей его параллельной реализации, сделало бы изложение более полным. Также существенный интерес, с учетом высокой сложности и практической значимости решаемой задачи, представляет информация о практической параллельной масштабируемости использованных автором алгоритмов и разработанной им программной реализации.
4. Работа не лишена опечаток, однако они не мешают пониманию изложенного материала. Иногда специальные термины даны в тексте без определения, например, «жидкофазная эпитаксия», «метод подвижного нагревателя» и др.

Указанные недостатки не снижают общей положительной оценки работы. Диссертационная работа Гусева Андрея Олеговича выполнена на высоком научном уровне и содержит решение сложной и актуальной задачи, связанной с разработкой методов численного изучения процессов тепломассопереноса в среде с фазовым переходом.

**Заключение.** Диссертация Гусева Андрея Олеговича является законченным научным исследованием, содержание и результаты работы соответствует паспорту научной специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика» и требованиям п. 9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, А.О. Гусев, заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук физико-математических наук по специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика».

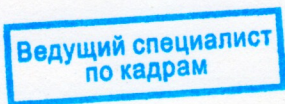
Официальный оппонент,

кандидат физико-математических наук,  
научный сотрудник  
кафедры математического моделирования  
и информатики Физического факультета  
МГУ имени М.В. Ломоносова

**Еленина Татьяна Георгиевна**  
Дата 05.04.2023

Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова  
Адрес: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, д. 1, стр. 2,  
Физический факультет  
Официальный сайт организации: <https://www.phys.msu.ru>  
Телефон: +7 495 939-16-82  
E-mail: : [info@physics.msu.ru](mailto:info@physics.msu.ru)

Подпись Елениной Татьяны Георгиевны удостоверяю:



*Горюховская Р.Ш.*

Дата

05.04.2023

Гербовая печать

